

Tera 10 : 60 mille milliards d'opérations par seconde

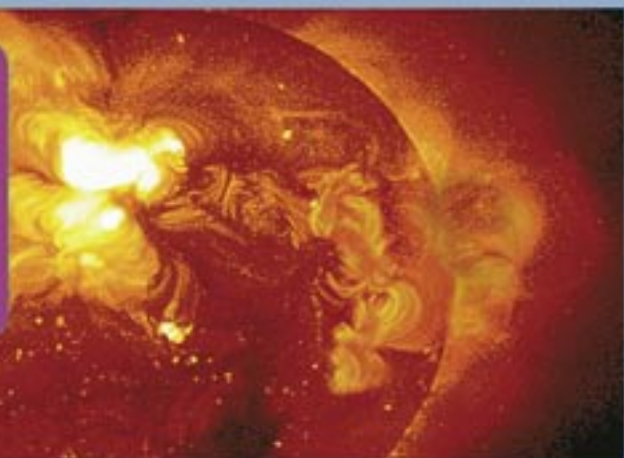
Le calcul haute performance

en partenariat avec



Énergie

Disposer d'énergies plus compétitives, non émettrices de gaz à effet de serre et respectueuses de l'environnement



Le CEA un acteur clef de la recherche technologique en Europe

Acteur majeur en matière de recherche, de développement et d'innovation, le Commissariat à l'énergie atomique intervient dans trois grands domaines : l'énergie, la défense et les technologies pour l'information et la santé, en s'appuyant sur une recherche fondamentale d'excellence.

Fort de ses 15 000 chercheurs et collaborateurs, aux compétences internationalement reconnues, il constitue une force de proposition pour les pouvoirs publics. Acteur moteur de l'innovation industrielle, le CEA développe des partenariats avec les industriels français et européens. Il est également garant de la pérennité de la dissuasion nucléaire.

Reconnu comme un expert dans ses domaines de compétences, le CEA est pleinement inséré dans l'Espace européen de la recherche avec une présence croissante au niveau international.

Défense et Sécurité

Garantir la pérennité de la dissuasion nucléaire et la sécurité



Technologies pour l'information et la santé

Valoriser l'industrie grâce à la recherche technologique



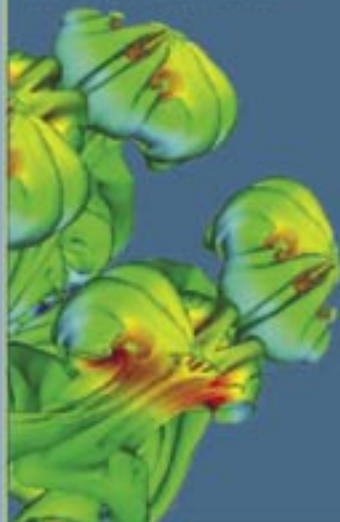
Recherche fondamentale

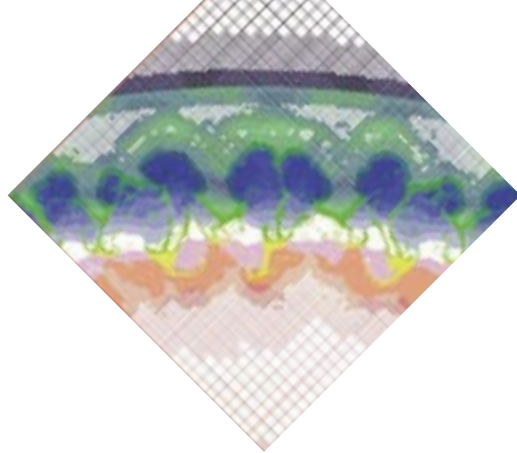
S'appuyer sur une recherche fondamentale d'excellence pour développer les programmes de recherche technologique



cea

www.cea.fr





Les fulgurants progrès du calcul intensif

Dans pratiquement tous les domaines, chercheurs, ingénieurs et entrepreneurs constatent que le calcul intensif numérique prend une place essentielle s'ils ambitionnent de demeurer dans la compétition mondiale de la recherche et de l'industrie. La recherche scientifique s'est développée grâce à l'association de travaux théoriques et expérimentaux. L'émergence des très grands calculateurs a ouvert une nouvelle approche, celle de la simulation numérique. Tout en traitant, sous un angle nouveau, une grande partie des questions de recherche et d'ingénierie classiques, la simulation permet d'approcher des phénomènes complexes. Entre les machines mécaniques de Pascal du XVII^e siècle (la pascaline), celle de Babbage au XIX^e siècle et les ordinateurs actuels fondés sur l'architecture de von Neumann (1945) et exploitant les possibilités des semi-conducteurs (1956), on a pu quantifier le coût d'une opération arithmétique typique de base. Ce coût a décri d'un facteur 10^{15} en passant de la première machine aux ordinateurs actuels qui ont des puissances intrinsèques exprimées en téraflop, soit 10^{12} opérations par seconde. Au milieu des années 1970, la société Cray développa une architecture permettant d'envisager un coût d'investissement de un million

de dollars pour un million d'opérations par seconde. Trente ans plus tard, avec les progrès technologiques des circuits électroniques et des sciences de la simulation, le nombre d'opérations a été multiplié par un million pour un coût équivalent. La plus puissante machine développe une puissance de calcul de 280 téraflops. Il existe des projets pour les prochaines années d'une machine de 1 pétaflop en Chine et de 5 pétaflops au Japon. Jusqu'où ce progrès peut-il nous porter? Les machines de niveau pétaflopique (10^{15}) sont pour demain, et tout conduit à penser que le calcul scientifique continuera à progresser à un rythme soutenu pendant encore quelques années ou décennies. Ainsi, les performances des algorithmes croissent à un rythme comparable et, pour certains algorithmes linéaires, le volume de calcul nécessaire a diminué d'un facteur 10^8 au cours des trente-cinq dernières années. Quel que soit le type de calculateur, le calcul intensif est un enjeu stratégique majeur, avec un triptyque industriel, technologique et scientifique. Selon les conclusions d'un récent colloque qui s'est tenu au Cerfacs*, un certain nombre de questions de premier plan restent ouvertes. Leur résolution nécessite, à l'horizon de dix à vingt ans, selon les thématiques, des puissances de calcul multipliées par un

facteur de 100 à 10 000 pour être abordées efficacement.

Dans cette course effrénée, il y a accord général pour constater que la France n'a pas avancé au rythme souhaitable au cours de ces dernières années. Pour être efficace et cohérent, il ne suffit pas de doter la communauté scientifique des calculateurs les plus puissants. Il faut aussi soutenir la recherche et la formation supérieure dans les domaines de l'algorithmique et de la science informatique associée. L'année 2005 a vu se concrétiser à la fois une réflexion largement partagée dans le cadre d'une consultation interministérielle et la consolidation de centres de calculs de dimension nationale, voire européenne. Ce numéro a pour objectif de faire le point sur ces faits nouveaux, sur les propositions des uns et des autres pour l'avenir, tout en rappelant les principales étapes qui ont conduit aux réalisations que nous connaissons. Puisse-t-il contribuer à mobiliser, de manière concertée, les énergies nécessaires pour atteindre les progrès attendus dans le domaine du calcul scientifique!

Nous sommes en 2006, au milieu de l'ère du téraflop. En 2015, aurons-nous déjà commencé à explorer celle de l'exaflop (10^{18})? Et quelles seront alors la place de la France et celle de l'Europe? C'est tout l'enjeu du débat.



Bernard Bigot

Haut-commissaire à l'énergie atomique.

* **Cerfacs:** Centre européen de recherche et de formation avancée en calcul scientifique



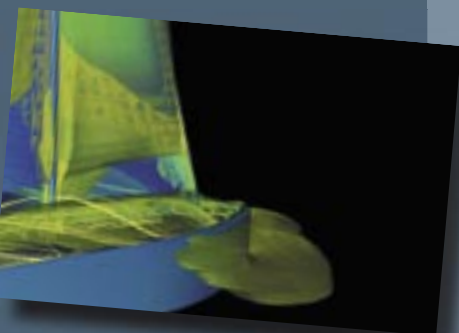
Le calcul haute performance



p. 8



p. 14



p. 20

3 **ÉDITORIAL**
PAR BERNARD BIGOT

7 ENJEUX

MICHEL SERRES
8 **La simulation, technique nouvelle, ancienne tradition**

JEAN-MICHEL GHIDAGLIA ET BENOÎT RITTAUD
14 **9 questions pour comprendre la simulation numérique**

PAUL CASEAU ET CHRISTIAN SAGUEZ
20 **La percée du calcul haute performance**

25 LES MOYENS

PORTFOLIO
PAR PIERRE VANDEGINSTE
26 **De Charles Babbage à Seymour Cray**

FABIENNE LEMARCHAND
36 **Le Top 500 des supercalculateurs**

ENTRETIEN
AVEC JEAN GONNORD
39 **« L'europe de retour sur la scène des supercalculateurs »**

BERNARD OURGHANLIAN
45 **Un flot ininterrompu de données**

JEAN GONNORD, PIERRE LECA ET FRANÇOIS ROBIN
48 **60 mille milliards d'opérations par seconde !**

Sommaire

- 53 FABIENNE LEMARCHAND
Ter@tec : 2 ans et un brillant avenir
- 54 CLAUDE CAMOZZI ET PIERRE LECA
Nom de code : FAME2
- 56 THIERRY PRIOL
Un superordinateur mondial à la demande
- 60 PIERRE VANDEGINSTE
Sur la route des pétaflops

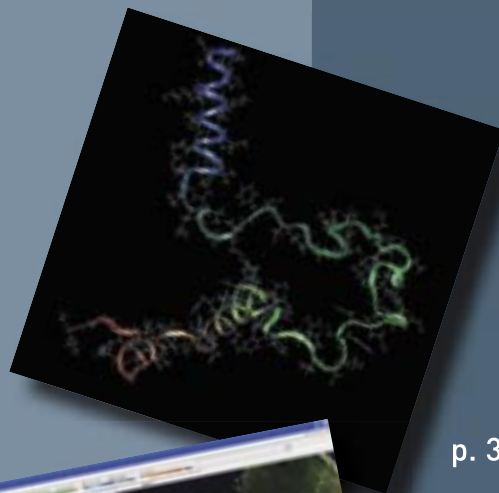
65 APPLICATIONS

- 66 Astres
70 Terre
73 Vie
76 Matériaux
80 Cryptographie
82 Sécurité
84 Aéronautique
86 Nucléaire
90 Défense
92 Gestion du risque

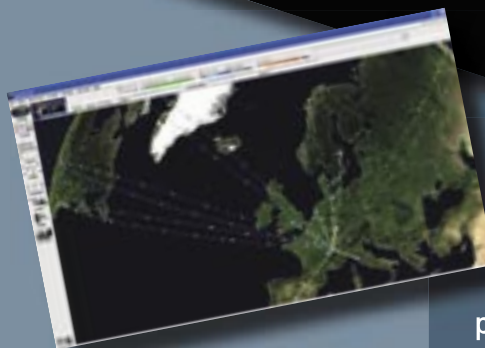
96 WEB



p. 26



p. 39



p. 45

La Recherche
L'ACTUALITÉ DES SCIENCES

Société d'Éditions Scientifiques

Stéphane Khémis, président du comité éditorial
Olivier Postel-Vinay, conseiller de la rédaction

4, rue du Texel 75014 Paris
Tél. : 01 40 47 44 00

Fax : 01 40 47 44 02

e-mail rédaction :

courrier@larecherche.fr

ABONNEMENTS/ANCIENS NUMÉROS/RELIURES

Tél. : 0825 003 690 (0,15 €/min)

Horaires : 9h-18h

Tél. étranger : (00) 33 3 44 62 52 17

Tél. administration : 03 44 62 52 17

Adresse e-mail : la_recherche@presse-info.fr

La Recherche Service Abonnement

B 604, 60732 Sainte-Geneviève Cedex

Tarif France : 1 an 11 n^{os}, 52,60 € ;

1 an 11 n^{os} + 4 dossiers, 72 €

Tarif international : nous contacter.

Suisse : Edigroup, Case postale 393, 1225 Chêne Bourg.

Belgique : Edigroup, Bastion Tower-Etage 20,

place du Champ-de-Mars, 5, 1050 Bruxelles

Canada : Express Mag, 8155, rue Larrey, Anjou

Québec H1J 2L5.

Directeur scientifique Jean-Michel Ghidaglia

Rédactrice en chef Aline Richard

Assistante Juliette Quenin (44 33)

Rédacteur en chef adjoint

Luc Allemand (44 23)

Secrétaire générale de la rédaction

Christine Pineau (44 31)

Coordinatrice du cahier 2

Fabienne Lemarchand

Conception graphique Michel Donnadiou

Iconographie Yannick Bricon

Secrétaire de rédaction Morvan Léon (44 26)

Ont collaboré à ce numéro

Isabelle Bellin, Anne Debroise, Didier Gout, Benoît

Rittaud, Laure Schalchli, Marie-Laure Théodule,

Pierre Vandeginste

Ont aussi participé au comité éditorial

Hélène Bringer (Bull), Philippe Devins (HP),

Marc Dollfus (Intel), Martine Gigandet (CEA),

Jean Gonnord (CEA), Thierry Priol (Inria)

Fabrication Christophe Perrusson (44 64)

Mission développement Grégory Luneau

(44 63)

Responsable des partenariats et des relations

extérieures Carole Rouaud (44 18)

Webmestre Lymédias (01 53 36 06 01)

Directeur délégué Frédéric Texier

Diffusion (diffuseurs/dépositaires)

Céline Balthazard (44 11)

n^o Vert : 0 800 30 76 02

Marketing direct et abonnements

Directrice : Virginie Marliac (44 16)

Assistante : Armelle Béhelo (44 62)

Responsable gestion : Isabelle Parez (44 95)

Comptabilité Marie-Françoise Chotard

(01 44 10 13 43)

Diffusion librairies

DIF'POP. Tél. : 01 40 24 21 31 Fax : 01 40 24 15 88

PUBLICITÉ : Le Point Communication (44 54)

Directrice commerciale Gaëlle Lemarchand (44 58)

Directeur de clientèle Raphaël Fitoussi (44 56)

Chief de publicité (marché scientifique)

Laurent Allègre (44 57)

Assistante commerciale et technique

Françoise Hullot (f.hullot@interdeco.fr)

Publicité littéraire :

Directeur commercial littéraire

Gilles Dupin de Lacoste (01 44 10 13 21)

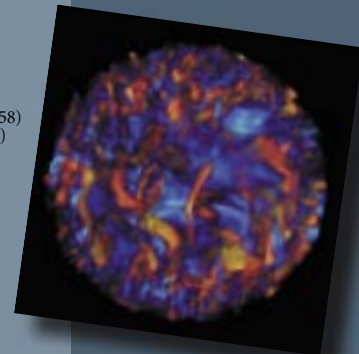
Directeur de clientèle Xavier Duplouy

(01 44 10 13 22)

Commission paritaire : 0909 K 85863 ISSN 00295671

Imprimerie Canale, Borgaro (Italie). Dépôt légal 4^e trimestre 2005.

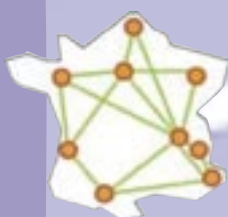
© 2005 Société d'éditions scientifiques IMPRIME EN ITALIE. PRINTED IN ITALY



p. 66

Grilles de calcul : la transparence pour maître mot

Pour l'INRIA, Institut national de recherche en informatique et automatique, le principal enjeu des recherches sur les grilles est d'aboutir à une transparence d'utilisation.



Les grilles informatiques représentent le prochain défi de l'Internet. En permettant de connecter dans un réseau informati-

que à la fois, des supercalculateurs, des capacités de stockage et des serveurs de visualisation, il devient possible de simuler des phénomènes complexes en étant le plus proche de la réalité, avec de multiples applications.

Les grilles de calcul sont des plates-formes idéales pour déployer des applications qui nécessitent le couplage de différents codes de calcul, comme par exemple la simulation numérique du comportement d'un avion dans son environnement. Il s'agit là de coupler des codes de calcul de la déformation de la structure de l'aéronef et des forces aérodynamiques. Le médical est un autre champ d'applications du couplage de codes de calcul. Exemple : la simulation numérique de l'écoulement sanguin pour mieux comprendre le développement de certaines pathologies du système cardiovasculaire. « La plupart des problèmes physiques qui font intervenir plusieurs disciplines ont longtemps été regardés séparément en raison du manque de puissance de calcul », explique Stéphane Lanteri, de l'INRIA Sophia-Antipolis.

Aujourd'hui la donne a changé avec GRID'5000 qui entend réunir en France d'ici 2007, 5 000 processeurs répartis sur 9 sites. On dispose d'un ensemble de supercalculateurs reliés entre eux par le réseau à haut débit de Renater, « avec les compétences pour traiter ce type d'applications, en informatique et en mathématiques appliquées », indique Thierry Priol, directeur de recherche à l'INRIA Rennes et responsable de l'ACI GRID, initiative du ministère délégué à l'Enseignement Supérieur et à la Recherche, qui est à l'origine de GRID'5000. L'objectif pour la recherche est de concevoir des environnements logiciels pour faciliter le déploiement d'applications sur une grille, qui sont ensuite expérimentées sur l'infrastructure GRID'5000. « Pour coupler des codes de calcul, on les encapsule dans des briques de base que sont les composants logiciels. On les connecte ensemble et on les exécute », précise Thierry Priol. Toutes ces opérations impliquent des problématiques de recherche en informatique.

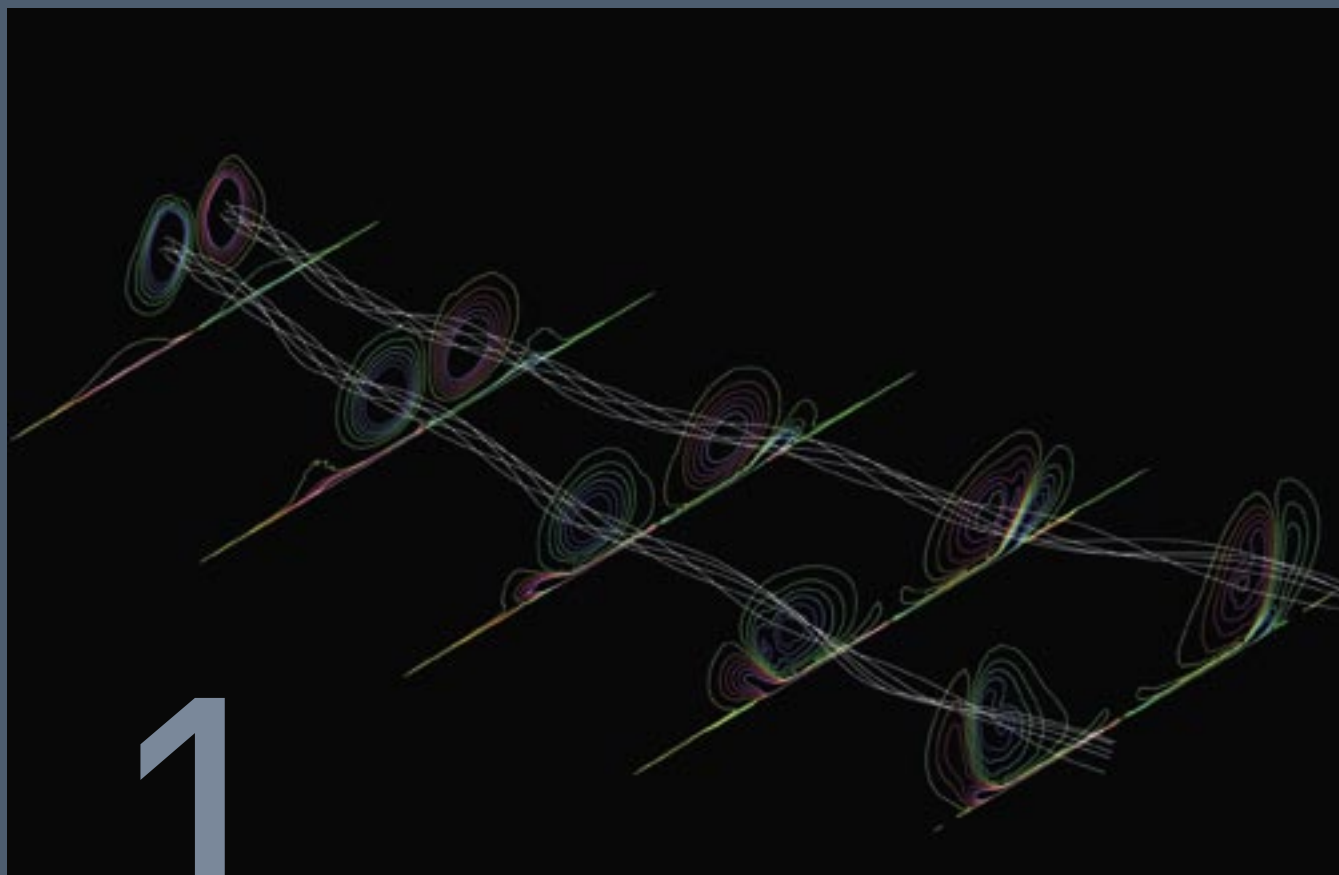
« Mais, le point le plus important est de rendre l'informatique invisible à l'utilisateur », insiste Michel Cosnard, directeur de l'INRIA Sophia-Antipolis. « Pour ceci nous concevons des intergiciels qui visent à cacher à l'utilisateur la réalité de plusieurs systèmes informatiques en fonctionnement dans des

lieux dédiés, un centre de calcul, un hôpital... », ajoute-t-il. Ainsi, dans une application médicale avec des images de RMN à traiter puis à visualiser, il y a à la fois des dispositifs techniques, la RMN..., des supercalculateurs et des dispositifs de visualisation, chacun avec leur propre système d'exploitation. L'intergiciel va rendre le système transparent. Plusieurs sont déjà réalisés comme DIET, XtremWeb, Proactive et Padico.

Une fois ces environnements validés et expérimentés, l'enjeu pour la recherche est le passage à l'échelle : faire fonctionner tout cela sur 5 000 processeurs pose de nouveaux problèmes liés à l'interconnexion de ressources hétérogènes et dispersées, et nécessite de concevoir des algorithmes plus efficaces.

La problématique des grilles de calcul, c'est encore d'être capable de stocker des données à grande échelle. « Nous avons aussi une activité qui concerne le traitement de grandes bases de données réparties », explique Thierry Priol. « Avec aussi une activité sur les systèmes pairs à pairs pour les utiliser dans les grilles de données. » L'objectif de toutes ces recherches est d'aboutir à une transparence totale pour accéder à la puissance informatique aussi simplement que l'on accède à l'électricité sans savoir où celle-ci est produite. ■

Le calcul haute performance



1

Enjeux

Michel Serres

La simulation, technique nouvelle, ancienne tradition

8

Jean-Michel Ghidaglia et Benoît Rittaud

Neuf questions pour comprendre la simulation numérique

14

Paul Caseau et Christian Saguez

La percée du calcul haute performance

20



La simulation, technique nouvelle, a

Aujourd'hui, la simulation s'effectue à l'aide de supercalculateurs. Mais, comme nous l'explique Michel Serres, cette pratique s'enracine dans le passé. En voulant imiter les sons émis par le forgeron frappant le fer chaud de l'enclume, Pythagore fait figure de pionnier.

Michel Serres,
de l'Académie française, est professeur à l'université Stanford (Californie)

Cet article a été publié dans les *Clefs CEA* n° 47.

Que les formes repliées de telle protéine tournent et se déploient lentement sur l'écran d'ordinateur, laissant voir des sites que nous ne pourrions pas observer directement; que des modèles à long terme miment l'évolution du climat ou le vieillissement des déchets nucléaires; qu'un autre, de taille inverse, montre le contact atomique d'une pointe suraiguë avec une surface... voilà des pratiques usuelles, dites de simulation, nécessitées par le fait que ces phénomènes excèdent les conditions ordinaires de l'expérience.

Comment manipuler, en effet, une molécule, voire un seul atome ou, au contraire, un grand nombre de contraintes sur des millénaires et l'ensemble du globe, continents,

mers et atmosphère? Rien de tout cela ne tombe sous la main; aucune de ces giga – ou nano – tailles d'espace et de temps ne peut se manipuler directement au laboratoire. Les dimensions elles-mêmes rendent donc nécessaire cette modélisation en images virtuelles. Par leur puissance numérique, seules les nouvelles technologies peuvent ainsi accélérer le temps, agrandir les espaces, multiplier dimensions, contraintes et connexions, bref contribuer à représenter l'irreprésentable.

Au-delà du possible

Ces techniques de simulation élargissent même la notion de phénomènes. Sur ses systèmes d'équations différentielles, Laplace avait démontré, par exemple, la stabilité





© P. DOLÉMEUX/EDITINGSERVEUR.COM

L'académicien
Michel Serres

ancienne tradition

du système solaire avec une assez bonne approximation. Un siècle plus tard, en des théorèmes célèbres, Poincaré nous avait amenés à en douter, quoi qu'avant Laplace déjà, le chevalier d'Arcy eût signalé, dès le XVIII^e siècle, qu'à trois corps, le problème se révélait inintégré. Mais assurément, nous ne doutions pas du statut épistémologique de cette stabilité ou de cette instabilité : il s'agissait d'un résultat mathématique, mécanique, probabiliste... En aucun cas, nous ne les aurions pensés comme des « phénomènes », ni n'aurions imaginé pouvoir les soumettre à « l'expérience », puisque leur test ou contrôle demandent des centaines de millions d'années.

Voilà l'un des meilleurs cas où nous comprenons le plus clairement du monde ce que signifie : sortir des conditions de l'expérience possible. Aucun laboratoire ne saurait la préparer ni la réaliser. Or une simulation numérique permet justement de décrire la conduite des petites planè-

tes, plus chaotiques, et de beaucoup, que les grandes, sur cet immense laps de temps. Un résultat purement mathématique ou de mécanique céleste devient alors une sorte de fait, un quasi-phénomène quasi expérimentable. La simulation enjambe les classifications épistémologiques usuelles et les rend poreuses.

Simuler par prudence

Mieux vaut, de plus, qu'un chirurgien s'exerce d'abord à opérer sur des images virtuelles, avant de tailler au scalpel dans la chair ou les os du patient, ou qu'une arme nucléaire explose sur l'écran plutôt que dans l'environnement ; mieux vaut qu'au risque de se tromper, de les détruire donc et devoir les reconstruire, un architecte teste en simulation la résistance sismique d'une tour, d'un viaduc ou l'étanchéité d'un tunnel.

Nous quittons alors les conditions de l'expérience pour ses buts, ses conséquences ou sa finalité, l'épistémologie

pour l'économie, le quantitatif pur pour la prévention d'un risque possible ou d'un danger réel... bref, nous entrons en éthique.

On simule par nécessité dans un cas, par prudence dans l'autre. Dans les deux, on élargit la notion même d'expérience.

Nous connaissons depuis longtemps la pratique des maquettes, modèles ou prototypes. Michel-Ange ne sculptait ni ne bâtissait avant d'avoir montré au pape Jules II, outre ses plans, des ébauches en réduction de leurs projets communs. Ainsi firent et feront mille autres envers leurs maîtres d'ouvrage. La construction navale ou les fabrications en série ne se décident qu'après avoir essayé, testé, vérifié... un exemplaire premier, un numéro zéro... qu'il s'agisse d'une nouvelle nef, d'un crayon à bille ou d'une résidence. Nous expérimentons toujours sur un témoin. Certes des risques demeurent : celui des effets d'échelle, car le navire enfin construit peut ne pas se comporter à la mer





▷ comme l'ébauche au bassin des carènes ; ou celui de l'exceptionnel, puisqu'à la limite aucun produit singulier ne ressemble à nul autre. Mais cet objet existe, l'artiste, le patron, l'ingénieur, le client... peuvent le toucher. Ainsi rassure l'essai.

Ici, au contraire, rien que des images. Ce que nous ne pouvons faire, nous le figurons. Ce que nous ne pouvons pas réaliser, ce dont nous avons peur, nous le représentons. Ainsi le virtuel sort de la réalité... Devons-nous juger ainsi des techniques de simulation ? Ce mot n'avoue-t-il pas une dissimulation dont l'astuce aboutirait à une trahison ? Le passage à l'image se réduit-il à un repli vers un imaginaire ou les sciences dites expérimentales perdraient du « réel » ? J'entrevois parfois dans les yeux de quelques Anciens ce soupçon sourcilieux. Ces nouvelles méthodes, disent-ils, vont donner à la jeunesse de mauvaises habitudes ; elle y perdra

le sens du concret. Plus de main, plus de pâte. Mais qu'entendons-nous par ces mots de pratique et ces métaphores boulangères ?

L'histoire des sciences peut répondre à ces questions. Elle répute parfois le contemporain fort ancien

Je ne crois pas que l'on passe si brusquement, et seulement aujourd'hui, du « réel » à sa « représentation »

et l'ancien, en récompense, assez moderne. Non, je ne crois pas que l'on passe si brusquement et seulement aujourd'hui, du « réel » à sa « représentation ». Que ces Anciens se rassurent donc, en réfléchissant

à leur propre réel, au concret que leurs mains manipulent, enfin à ce que signifie l'expérience.

De quand date la première expérience, vraie ou supposée ? D'après nombre de textes anciens, de Pythagore soi-même. Ayant ouï, comme tout le monde, les sons émis par un forgeron frappant à la masse le fer chaud sur l'enclume, il chercha, dit-on, à les reproduire, en pendant des poids divers à des cordes qui se mirent à vibrer ; ainsi mesurait-il pour la première fois les rapports harmoniques de tierce, de quarte, de quinte... Comment commence cette expérimentation, sinon par une simulation ? En passant de la frappe de la masse sur l'acier résonnant aux cordes qu'il fait vibrer, en passant, dis-je, du passif perçu à la production active, Pythagore reproduisit des sons ; en cherchant à les imiter, il les stimula. Certes, il se servit de cordes et de poids, tangibles et résistants ; reste qu'avec ces moyens « durs », la reproduction imite et stimule.

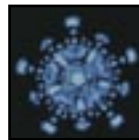
LA CÉLÈBRE EXPÉRIENCE DE BLAISE PASCAL au puy de Dôme, destinée à établir que « la pesanteur et la pression de l'air » expliquent le vide de Toricelli, n'eut jamais lieu autrement... qu'en pensée. © PALAIS DE LA DÉCOUVERTE

Expériences de pensée

Qu'appelle-t-on donc expérience ? Quand les praticiens l'appellent « manip », ils savent que ce nom suppose la main et certaine pâte en face d'elle. Or ladite manip ne se déroula presque jamais au grand air ou dans la nature, comme on dit, ou sur les choses elles-mêmes, directement sur la pâte du morceau de cire que cite Descartes, par exemple. Pythagore arrête sa promenade ou, comme on dirait aujourd'hui, quitte le terrain et, pensif, rentre chez lui, reconstruit le phénomène à étudier, le raffine, le débarrasse des bruits parasites, ne le recueille pas tel qu'il a pu le repérer *in situ* ou *in vivo*, mais le reproduit et le répète. Mais que signifient ces mots : reproduit et répétable, sinon imitable et simulé ?

Pour je ne sais plus quel anniversaire, nous avons tenté jadis de refaire l'expérience célèbre de Blaise Pascal sur la pression atmosphérique, préten-

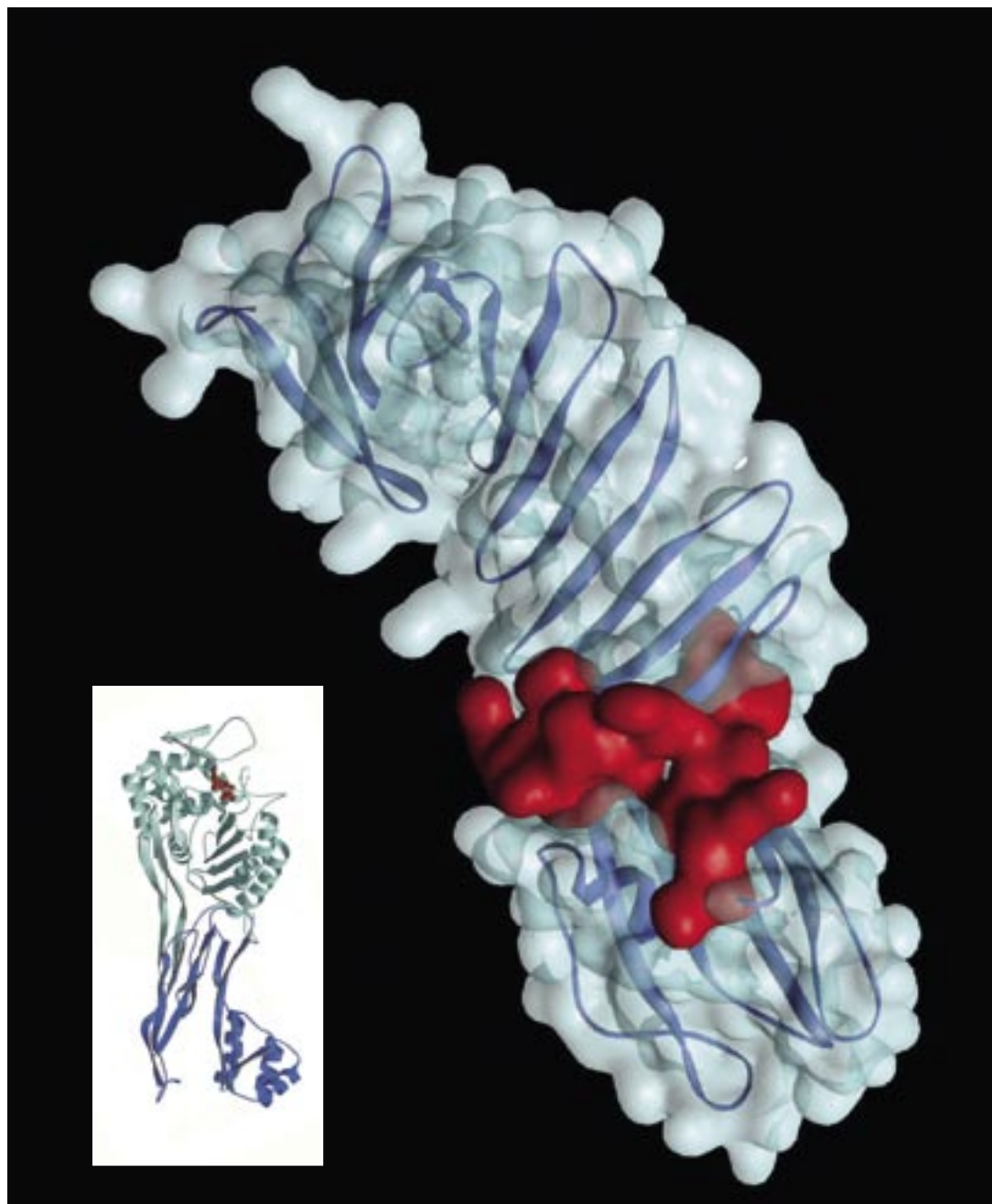




dument réalisée au sommet du puy de Dôme. Il va sans dire que nous avons échoué. Comment transporter, dans les conditions du temps, c'est-à-dire à dos d'âne, sans la casser, une colonne fragile et interminable et, de plus, fabriquée dans les premières années de l'industrie manufacturière du verre? Nous avons vite soupçonné que Pascal s'adonnait, comme tant d'autres et là comme ailleurs, à des expériences de pensée. Il simulait dans des récits, comme nous à l'ordinateur!

Vous avez dit réel ?

Et pour réaliser vraiment cette expérimentation comme toutes les autres, mieux vaut construire des cabinets, comme on les appelait jadis, c'est-à-dire des laboratoires, dont, peu à peu, les instruments transformèrent l'allure et la taille, au lieu d'aller sur le terrain, où l'on ne maîtrise pas les conditions. En ce nouvel environnement, hautement abstrait, artificiel, technique, raffiné, sophistiqué même, que font les physiciens anciens, classiques, et même ceux des XIX^e et XX^e siècles, sinon reproduire, c'est-à-dire imiter ou simuler des faits qui se développent au grand air? Où se trouve le concret, le « réel »? En haut du puy de Dôme ou sur la paillasse? Sur celle-ci ne commence-t-on point par simuler ce qui se passe là? Je le répète, au laboratoire, on imite le fait avec un équipage de verre, de fils de laiton ou des barres de fer... bref au moyen de choses dures et non de signes ou de codes, n'empêche point qu'il s'agit toujours d'une reproduction, donc d'une imitation. De plus, il faut que tout physicien puisse la répéter. Relisez attentivement la célèbre formule: « *Dans les mêmes circonstances, les mêmes causes produisent les mêmes effets* »; trois fois répété, le mot même y emporte, certes, notre adhésion à propos de ce principe, mais, à bien regarder son sens, il exige, de nouveau, l'imitation. La maîtrise maximale des con-



DEUX APPLICATIONS DE LA SIMULATION NUMÉRIQUE : la reconstitution du pseudo virus (au premier plan) et celle de l'enzyme PBP2x (Penicillin Binding Protein) que synthétise le streptocoque pour se protéger de l'action d'un antibiotique (en rouge). © CEA, DIRECTION DES SCIENCES DU VIVANT

ditions et de la réalisation garantit la fidélité de la répétition. Et qu'entend-on, enfin, par conditions de l'expérience? L'ensemble des réquisits qui la rend reproductible, maîtrisable et fidèle à elle-même, c'est-à-dire des réquisits de simulation. Toute expérience sup-

pose t-elle donc, en quelque façon, plusieurs types de simulation? Qui peut le nier? Elle quitte le « réel » tel quel depuis l'aurore même de la physique expérimentale. « *De tout temps l'homme observa les graves tomber, s'étonna du tonnerre et de l'arc-en-ciel, contempla les*





▷ *étoiles...* Voilà l'énoncé du tic le plus commun en histoire des sciences, telle qu'elle se pratique tout naïvement: sans erreur possible, vous reconnaîtrez les mauvais livres à ce commencement. Comment se délivrer de cette sottise? En répétant, à temps et à contretemps, qu'il n'y avait ni étoiles ni chute des corps ni tonnerre pour les Chaldéens ni pour les Chinois, ni pour les Égyptiens ni pour Aristote, quoiqu'ils usent parfois du même mot que nous, à la traduction près; que le ciel à leurs yeux n'avait pas la même réalité qu'à ceux des astrophysiciens d'aujourd'hui, dont les données n'ont, de plus, rien à voir même avec celles de Galilée ou de Tycho Brahé... Newton estimait la vieillesse du monde à quatre mille ans... la langue grecque ancienne n'a même pas de mot pour dire: «volcan», alors que l'une des plus belles civilisations hellènes disparut corps et biens dans la caldeira de Santorin...

Aux limites de l'impossible

Le réel change avec les pratiques et les peurs, les religions et les mythes, les théories et les moyens d'observation, avec les outils et les appareils. Du coup, la perception commune et les objets eux-mêmes changent d'objectivité. Divinité, âme d'un défunt, trou dans un bouclier d'airain, épaule d'Orion... l'étoile met des millénaires à devenir ce qu'elle nous semble aujourd'hui: un ensemble évolutif et temporaire de réactions nucléaires. Ce «de tout temps» n'eut jamais lieu, cet «homme» stable ne vécut nulle part, le monde et les choses «réels» varièrent en temps variables pour des sens variables.

À chaque génération ou presque son réel. J'ai connu, dans ma jeunesse, pourtant pas si lointaine, des savants et non des moindres qui, en ces temps, niaient farouchement l'existence des plaques tectoniques ou des grosses molécules biochimiques. Ils les pensaient imaginaires, virtuelles... simulées! Ils n'exprimaient là que leur retard et que la proximité

de leur retraite. Ils ne voyaient pas la réalité basculer. Celle que visent les techniques de simulation me paraît donc aussi «réelle», ou aussi peu, que celle de ces Anciens sourcilleux qui croient, eux, la manipuler plus et mieux que leurs successeurs, parce qu'ils utilisaient des règles à calcul et que leurs enfants adoptèrent les ordinateurs dès l'âge tendre. Oui, cette réalité dépend, là, de la puissance de calcul.

Cela ne signifie pas qu'il n'y a pas de «réel». Disant cela, je ne cède pas aux relativismes, ni subjectif, comme celui des opinions ou des goûts, ni culturel ou sociologique, comme celui des idéologies, des lois, des institutions et des mœurs. Que la réalité change ne veut pas dire qu'elle s'évanouit. Je la crois présente et promise comme une tâche infinie, cédant sans cesse à nos prises comme un horizon asymptotique, derrière les profils successifs des théories et des vérités que découvrent les sciences au cours de leur histoire. Absente au départ, changeante dans le temps, mais convergente à la limite, quoique les sciences ne sachent rien de

La simulation est une extension ou une généralisation de l'expérience

son accessibilité. Qu'elle existe, nos prévisions précises et l'efficacité de nos applications nous en donnent tous les jours des preuves invincibles.

Il faudrait donc définir des générations d'expériences ou de laboratoires comme on dit qu'il existe des générations d'ordinateurs. Elles dépendent toutes de l'état des techniques. Cette technicité change avec le temps, où l'on voit croître la finesse et la portée des simulations. Qu'ont en commun,

en effet, les gigantesques appareils du CERN et le soi-disant labo de mon ancien lycée où la machine d'Atwood avoisinait le pont de Wheatstone? Et qu'avait en commun cette salle avec celles où trônaient le plan incliné de Galilée, la balance de Roberval et les hémisphères de Magdebourg?

Lieu de simulation, modèle réduit d'un sous-ensemble, bien découpé, de la nature, chaque état du laboratoire vise un monde différent, celui de la mécanique classique, celui de l'électromagnétisme, celui de la physique quantique... Alors que les générations précédentes se succédaient souvent sur un seul de ces états, j'aurai donc vécu plusieurs états du laboratoire où, dans le dernier, pullulent les ordinateurs. Et, de nouveau, le virtuel entre-t-il dans le réel ou nous en fait-il sortir?

Que je sache, l'usage de ce terme ne date pas de l'âge des ordinateurs. L'image virtuelle sert à l'optique depuis au moins l'âge classique; les travaux virtuels occupent les mécaniciens depuis Lagrange; et la physique atomique utilise ce même terme aussi bien pour les noyaux que pour l'émission d'une particule. Avant

même que naisse la physique proprement dite, le virtuel pénètre donc l'optique et la mécanique, encore mathématiques et presque dénuées d'expérience. Ces trois disciplines étudient, certes, le

«réel» mais y incluent le possible depuis fort longtemps. Rien de nouveau sous le soleil.

Que la poussée du possible se renforce aujourd'hui, qu'il borde et entoure de plus en plus ledit «réel», voilà une conquête qui rend compte du monde plus souvent qu'elle ne le déréalise. Nous pensons toujours ces questions à l'aide d'une logique classique, dont le carré de base oppose le particulier au général et l'affirmation à la



LA NÉBULEUSE DE LA ROSETTE, photographiée en février 2003 avec la caméra numérique MegaCam développée par le DAPNIA, du CEA.

© CANADA-FRANCE-HAWAÏ TELESCOPE

négarion. Je crois, quant à moi, à la logique modale : nous pensons un monde contingent et expérimentons sur lui, par manipulation du possible, jusqu'aux limites de l'impossible et par découverte de lois nécessaires. Plus souple que l'ancien, le carré des modes rend mieux compte de nos avancées. À suivre patiemment les linéaments de divers sites sculptant certaines grosses molécules responsables de maladies, les simulations permettent de découvrir, voire d'inventer des médicaments qui, en se logeant exactement dans ledit site, en inhibent les fonctions délétères. Même obtenue à l'aide d'images possibles, quoi de plus réel, bien que contingent, qu'une guérison ? Quoi de plus « réel » que d'éviter les acci-

dents possibles dans les usines nucléaires ou devant des équipages sous hautes pressions ?

Une falsification de l'abstrait

Prenant ainsi droit de cité dans notre épistémologie, le virtuel, du coup, occupe un immense espace intermédiaire entre l'abstrait, d'une part, et le concret, de l'autre, entre la théorie et les applications, entre les mathématiques et les techniques proprement dites. Comme un lien, il attache ce que je ne puis avoir sous les yeux et ce que je puis me représenter. Il assume cette fonction, aussi bien dans les images ou travaux virtuels de nos prédécesseurs que dans les simulations de l'évolution du climat ou la modélisation des macromolécules.

Inversement, qu'est ce alors que l'abstrait ou que le théorique, sinon la totalité du virtuel possible ? Les mathématiques expriment le réel, c'est-à-dire tout le possible, et les expériences délivrent des profils du monde contingent. Dès lors, la simulation en images virtuelles extrait l'abstrait de son royaume pour, elle aussi, nous en livrer des profils. Or qu'est-ce, à nouveau, que l'expérience, sinon une falsification, au sens de Popper, de l'abstrait ? Donc la simulation a un statut semblable à celui de l'expérience. Voilà ce que je voulais démontrer.

Simulacres

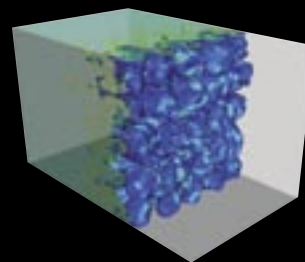
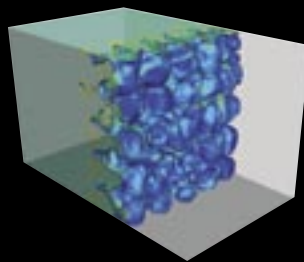
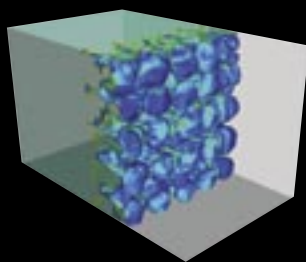
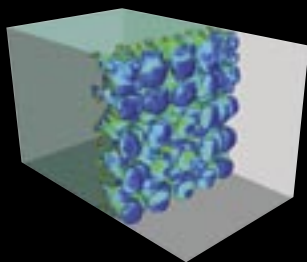
Elle l'élargit, varie sur ses conditions et ses buts, raccourcit le chemin entre elle et la théorie, lui donne donc un autre visage. Entendez-la donc comme une extension ou une généralisation de l'expérience. Mais, de génération en génération, ce visage expérimental changea plusieurs fois. Certes, nous venons de franchir une nouvelle étape, mais sur une voie que l'histoire des sciences reconnaît comme canonique.

Je ne résiste pas, pour finir, au plaisir de citer, encore et toujours, le vieux Lucrèce, que les physiciens ne lisent plus (Jean Perrin le savait par cœur) parce qu'il écrit en latin et que les latinistes ne le comprennent jamais parce qu'il fait de la bonne physique. Voici plus de deux mille ans, il prétendait que nous percevons par simulacres ; il appelait ainsi les membranes translucides qui se détachaient des choses et volaient, à travers l'air, du perçu vers le percevant. Par homothétie, elles gardaient la forme de ces choses et venaient ainsi frapper l'œil. Bien qu'étrange, cette explication de la perception touche pourtant juste quelque part : ces simulacres simulent par similitude ! Nous ne connaissons jamais que par imitation. En voyant évoluer devant mes yeux éblouis les sites et les plis des molécules, je ne puis m'empêcher de rêver, avec l'ancien poète latin, qu'elles m'envoient leurs simulacres. ■ M. S.



Bac to basics

9 questions la simulation



Jean-Michel Ghidaglia

est professeur à l'École normale supérieure de Cachan et directeur scientifique de *La Recherche*.

Benoît Rittaud

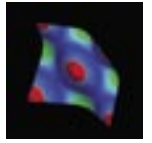
est maître de conférences à l'université Paris-XIII.

Elle fait gagner du temps, et beaucoup d'argent, aux constructeurs d'automobiles et d'avions. Elle permet aux météorologues de prévoir le temps qu'il fera dans cinq jours. La simulation numérique, dont la montée en puissance est allée de pair avec celle des ordinateurs, est aussi aujourd'hui un outil indispensable de la recherche.

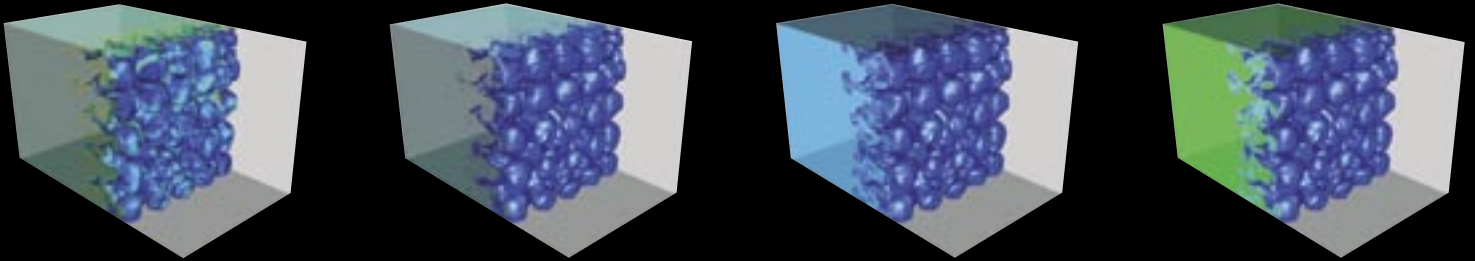
S'agit-il seulement de calcul ?

Non ! Comme on ne peut pas simuler à l'aide de nombres sans modèle mathématique, modélisation et simulation vont toujours de pair. Imaginons, par exemple, que nous voulions simuler le mouvement des planètes autour du Soleil. Dans un premier temps, nous devons mener un travail de modélisation du phénomène, c'est-à-dire déterminer les paramètres essentiels à une description à la fois simple et réaliste. Le souci de simplicité conduit à assimiler le Soleil et chaque planète à un point matériel. Il en résulte que connaître position et vitesse de chaque astre permet de caractériser entièrement le mouvement. Ce modèle est alors complet une fois écrites les équations qui décrivent quantitativement l'attraction réciproque des planètes et du Soleil. Selon le degré de raffinement choisi pour cette description du phénomène, la résolution pratique est plus ou moins compliquée : si l'on fait l'hypothèse que les planètes ont des masses suffisamment faibles pour que l'on puisse négliger leurs interactions réciproques (en ne conservant donc que celles qui con-





pour comprendre numérique



cernent le Soleil), alors la résolution des équations de la mécanique classique peut se faire de manière entièrement explicite. Plus souvent, hélas, comme dans le cas où il faut tenir compte de l'attraction gravitationnelle entre toutes les planètes, des raisons théoriques interdisent une résolution analytique complète des équations du modèle, c'est-à-dire que l'on ne peut obtenir une formule explicite de la solution. Il faut donc substituer à cette solution inexprimable une expression approchée. C'est seulement lorsque l'on représente, sur l'écran de l'ordinateur, les trajectoires des différentes planètes à partir de ces calculs que l'on réalise une simulation numérique proprement dite.

A-t-on forcément besoin d'un ordinateur ?

Au XVIII^e siècle, le Français Pierre Simon de Laplace faisait déjà des simulations, même si le mot lui était inconnu. Il utilisait, dans une version simple, le modèle planétaire que nous avons décrit, et il effectuait ses calculs à la main, en s'aidant de tables numériques telles que les anciennes tables

QUE SE PASSE T-IL À L'INTERFACE DE DEUX MILIEUX DIFFÉRENTS lorsqu'une onde de choc se propage ? Une zone de mélange se forme, des turbulences apparaissent dont l'évolution au fil du temps a pu être reproduite par le calcul grâce au code TRICLADE.

© MIREILLE BOULET/CEA

de logarithmes. Mais les besoins de plus en plus importants de simulations de modèles physiques ont conduit à l'invention des machines à calculer programmables, les futurs ordinateurs. C'est ainsi que si, aujourd'hui, les simulations sont tributaires de l'outil informatique, il n'en reste pas moins que, du point de vue historique, ce sont les ordinateurs qui sont nés de l'idée de simulation ! C'est dans le cadre du « projet Manhattan », le programme nucléaire militaire qui permit aux États-Unis de se doter de la première bombe atomique, que le mathématicien américain d'origine hongroise John von Neumann, désireux de mener des calculs portant sur les variations de pression et de température dans le voisinage immédiat de la bombe, s'est attelé à la fabrication du premier ordinateur, qui vit le jour en 1946 (lire « De Charles Babbage à Seymour Cray », p. 26).

Les exigences toujours croissantes de la simulation ont également été à l'origine de grands progrès dans la conception des ordinateurs. Ce sont ainsi les gigantesques besoins de simulation



ENJEUX BAC TO BASICS

▷ numérique pour les prévisions météorologiques qui ont conduit l'informaticien américain Seymour Cray à concevoir les ordinateurs vectoriels* dans les années 1980. Les prévisions météorologiques modernes s'appuient en effet sur l'évolution des innombrables paramètres relevés dans les stations météorologiques, comme la vitesse du vent, la température, ou encore la pression atmosphérique [1]. Non seulement cela constitue une quantité colossale de données à traiter, mais il faut aussi mener tous les calculs en un temps très court : la détermination du temps qu'il fera demain doit être terminée... avant demain ! À côté des percées conceptuelles qui touchent les architectures des ordinateurs ou les logiciels, les progrès sur le matériel lui-même, le *hardware*, ont fait croître exponentiellement les capacités de simulation numérique. La puissance d'un banal ordinateur personnel disponible dans le commerce permet aujourd'hui de mener des simulations totalement inenvisageables avec les plus puissantes machines d'il y a seulement trente ans.

Peut-elle remplacer les expériences ?

La puissance des « supercalculateurs » actuels permet d'envisager, dans de nombreux domaines, des simulations qui rivalisent en qualité avec certaines expériences, pour des coûts dérisoires par rapport à celles-ci. Par exemple, il existe un nombre infini de formes possibles pour l'aile d'un avion, et la question de savoir laquelle choisir pour rendre maximale la portance* est très délicate. La réalisation de la masse d'expériences nécessaires pour la déterminer mobiliserait une soufflerie aéronautique pendant plusieurs jours. Il est moins coûteux de passer du temps à élaborer un bon modèle et de le faire fonctionner sur un ordinateur : partant de la forme dessinée par un ingénieur, la simulation numérique permet de déterminer en quelques heures une forme optimale. C'est ce type de situation qui fait que l'on parle de plus en plus de « souffleries numériques » pour désigner un ensemble de programmes informatiques qui reproduisent une situation physique, aussi bien en aérodynamique que dans d'autres contextes.

Si précise que soit la modélisation de notre aile d'avion, seule l'expérience permet d'obtenir les données numériques nécessaires au paramétrage de la simulation. Il s'agira par exemple de certains coefficients dans les équations du modèle. L'expérience alimente donc indirectement la simulation. De plus, l'exploration de nombreuses situations que rend possible la simulation permet d'observer ou

[1] Jean-Michel Ghidaglia, « Grenouilles *in silico* », *La Recherche*, octobre 2004, p. 96.

*Un ordinateur **vectoriel** effectue les opérations élémentaires simultanément sur une certaine quantité (8 par exemple) de nombres, contrairement à un ordinateur séquentiel qui les effectue les unes après les autres.

LE LOGICIEL MITHRASIG, lancé en 2005 par l'Institut géographique national, permet de réaliser des cartes en 2 ou 3 dimensions du niveau sonore à l'échelle d'une commune entière. Croisées avec des données cartographiques ces cartes permettent de localiser les populations les plus exposées. © IGN

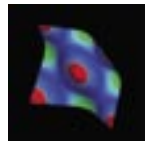
*La **portance** est la force verticale qui s'exerce sur un corps aérodynamique placé dans un courant d'air. C'est elle qui maintient un avion dans les airs.



de prévoir des comportements inattendus, ce qui, parfois, suggère des expériences et fait ainsi progresser la connaissance de la physique. Ainsi, loin de supplanter l'expérimentation, le rôle de la simulation est plutôt de donner une nouvelle prise sur le réel, permettant de dépasser le couple traditionnel théorie/expérience qui s'est patiemment élaboré au fil des siècles. La simulation numérique est une troisième forme d'étude des phénomènes, complémentaire des deux autres et qu'on qualifie souvent d'étude *in silico*, le matériau de base des ordinateurs étant le silicium.

Comment sont élaborés les modèles ?

Traduction et simplification d'un phénomène dans la langue des équations mathématiques (la seule que comprenne l'ordinateur), un modèle peut provenir d'observations soigneuses. Par exemple, la *Grande Syntaxe mathématique* de l'astronome grec Claude Ptolémée, au II^e siècle (un livre plus connu sous son nom arabe d'*Almageste*), a fourni un modèle conçu pour « sauver les apparences », c'est-à-dire rendre compte de la position des planè-



[2] P. Jensen et X. Blase, Les matériaux virtuels, *La Recherche*, avril 2002, p.40.

faire appel à la simulation numérique pour tester ces modèles, voire imaginer la bonne expérience qui permettrait de se faire un avis plus tranché sur la théorie [2].

Pour obtenir un modèle dans le contexte de la physique, par exemple pour décrire un écoulement d'eau dans une canalisation, on passe ainsi par trois grandes étapes. La première consiste à prendre en compte les principes fondamentaux, comme la conservation de la masse, de l'énergie, etc. La seconde consiste à particulariser cet ensemble d'équations à la situation considérée : les équations de base décrivant un écoulement d'eau dans une canalisation ou le comportement d'une poutre en béton sous la contrainte sont les mêmes, ce sont les différences de comportement physique entre l'eau et le béton qui permettent de préciser les équations du modèle qui nous intéresse. Ainsi, ce qui différencie fondamentalement un milieu d'un autre, ce sont les déplacements internes des molécules du milieu sous l'action d'efforts comme une force extérieure. On conçoit bien que de ce point de vue-là, un solide et un fluide se comportent de manière fort différente. La troisième étape, elle, fait souvent appel à l'expérience, qui permet notamment de déterminer la valeur numérique des paramètres du modèle.

Peut-on faire des prédictions grâce à la simulation ?

Boule de cristal, un modèle prédictif (et la simulation qui va avec) permet 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 un intérêt essentiel de la simulation numérique, par exemple dans le contexte de la sûreté nucléaire. Il va de soi que la prévision des incidents, les moyens d'y faire face, ou encore les risques encourus suite à des manœuvres malheureuses, sont autant de données capitales à notre sécurité qu'il n'est pas envisageable de vouloir mieux connaître à l'aide d'authentiques expériences. Les « codes accidents graves » sont des plateformes logicielles de simulation qui permettent au constructeur ou aux autorités de sûreté nucléaire de tester le comportement de l'installation dans des cas extrêmes. Bien évidemment, aucun protocole expérimental ne valide jamais en totalité ces programmes. Dans un tel contexte, on attend de la simulation des résultats qualitatifs pour confirmer que l'on a bien envisagé certains scénarios et que, par exemple, la conduite à tenir proposée aux opérateurs est bien à même de contenir la gravité d'un

▷ tes dans le ciel, avec une précision plus ou moins bonne, sans vraiment s'attacher à élaborer une théorie (l'idée de théorie scientifique étant pourtant, pour l'essentiel, née en Grèce ancienne).

A partir du XVII^e siècle, les modèles se sont de plus en plus souvent inspirés des expériences, l'idée même d'expérience scientifique n'ayant pleinement été acceptée qu'à partir de l'époque de Galilée. Il arrive enfin que les modèles soient déduits de théories elles-mêmes conçues sans expérience : Albert Einstein, par exemple, a conçu la théorie de la relativité générale en 1915, à l'aide d'une démarche purement intellectuelle, l'« expérience de pensée » (un procédé qui semble avoir aussi été employé par Galilée). Les équations de la théorie produisent un modèle de la courbure des rayons lumineux lorsqu'ils passent à proximité d'un corps très massif, qui n'a pu être confronté à l'expérimentation qu'en 1919, lors d'une éclipse de Soleil. Aujourd'hui, plusieurs théories physiques, comme la théorie des cordes, fournissent des modèles qu'il n'a pas encore été possible de tester par l'expérience : on en est donc réduit à

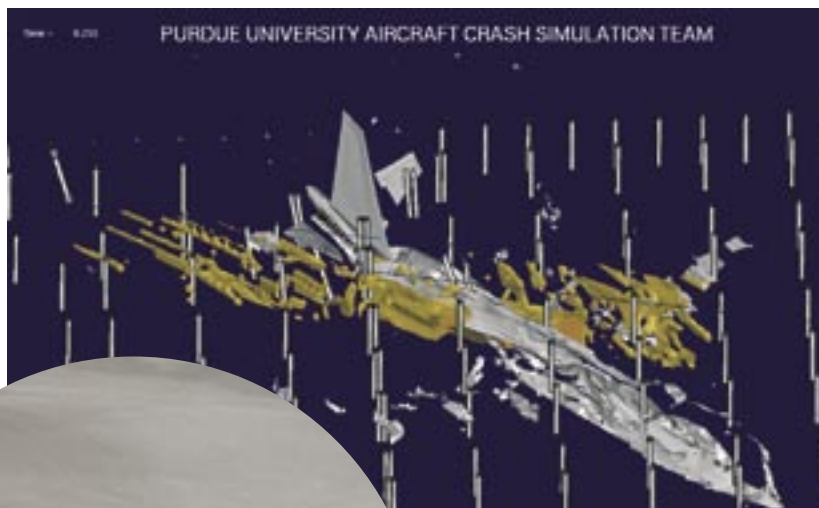


▷ incident mineur en soi mais qui porte en germe la possibilité d'un accident plus sérieux. Pour disposer d'un modèle prédictif à partir duquel une simulation peut être réalisée, il convient de s'assurer que l'on a une très bonne compréhension des phénomènes fondamentaux en jeu. Dans le cas contraire, on doit se contenter d'une extrapolation, à la fiabilité plus ou moins hasardeuse. Quand on ne peut pas faire autrement, c'est-à-dire qu'il est trop difficile (ou trop coûteux) de parvenir à une connaissance complète du phénomène, on a recours aux « boîtes noires ». Une boîte noire est une formule *ad hoc*, c'est-à-dire non spécifique au domaine d'utilisation qui, lorsqu'on lui attribue des paramètres d'entrée, fournit en retour des nombres en sortie. Mais il est plus « rassurant » de pouvoir justifier une formule par des arguments théoriques plutôt que par un simple recueil de constatations empiriques.

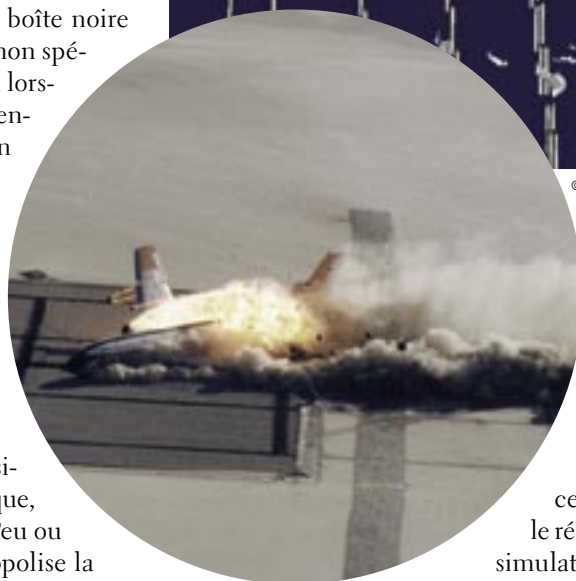
Qui utilise le plus la simulation numérique ?

Nous avons déjà évoqué plusieurs domaines : mécanique céleste, physique nucléaire, prévision météorologique, aéronautique, physique théorique. Peu ou prou il s'agit de physique, qui monopolise la très grande majorité des simulations. Pour rester dans ce domaine, le calcul, dit *ab initio*, qui consiste à retrouver les propriétés des matériaux qui nous entourent en partant de la physique atomique, est en plein essor.

La mécanique quantique régit le comportement de la matière à l'échelle atomique et le programme du calcul *ab initio* consiste, par exemple, à prédire le comportement à notre échelle de nouveaux matériaux *in silico* afin de ne passer à la phase de synthèse ou de fabrication, fort coûteuse, qu'une fois que l'on est satisfait des résultats. D'autres domaines utilisent de plus en plus la simulation. Depuis une quinzaine d'années, la finance en consomme sans modération. Plus récemment, la biologie est devenue un très gros utilisateur de temps calcul. C'est ainsi que la simulation numérique est le passage obligé pour à la fois concevoir la structure dans l'espace des protéines, à partir de mesures expérimentales, et ensuite en déduire leurs propriétés biologiques. Attention, bien que la génomique s'appuie sur beaucoup de moyens informatiques, il s'agit dans ce cas de fouille de données (*data mining*) et non de simulation numérique.



© NASA ©SCHOOL OF CIVIL ENGINEERING AND DEPARTMENT OF COMPUTER SCIENCES/PURDUE UNIVERSITY



UNE SIMULATION NUMÉRIQUE peut être plus précise qu'une expérience difficilement reproductible ou très coûteuse. En haut, la destruction du Boeing 757 qui a pénétré dans les bâtiments du pentagone lors des attentats de septembre 2001. En bas, un essai de crash volontaire d'un Boeing 720.

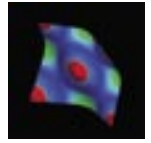
*Les lois de Kepler, au nombre de trois, affirment que les orbites des planètes sont des ellipses dont le Soleil est l'un des foyers, et précisent les rapports entre les caractéristiques géométriques des orbites et la vitesse (variable) à laquelle les planètes les décrivent.

La réalité virtuelle, est-ce de la simulation numérique ?

La réalité virtuelle met effectivement en œuvre des méthodes de simulation. Dans ce cas, l'objectif est de produire une image qui suggère à notre cerveau une analyse identique à celle produite par une scène réelle. Mais le réel est en général complexe... La simple simulation du déplacement d'un homme qui marche n'a rien d'évident, avec le balancement des bras, la réaction du cou qui maintient la tête horizontale, etc. Il faut donc trouver un compromis entre la nécessaire simplicité des modèles (pour permettre à l'ordinateur de traiter les données en un temps raisonnablement rapide) et le juge impitoyable qu'est notre œil, si bien habitué à voir de vraies personnes marcher dans la rue qu'il en devient capable de repérer des écarts même faibles à la vraisemblance d'une simulation. Les spectateurs de plus en plus exigeants que nous sommes quant au réalisme des jeux vidéo ou des effets spéciaux au cinéma contraignent les modèles à être de plus en plus précis, ce qui impose non seulement de disposer d'ordinateurs à la puissance croissante, mais aussi de méthodes de simulation toujours plus perfectionnées.

Que désigne exactement le « Grid Computing » ?

Une grille de calcul (ou *grid* en anglais) est un ensemble de machines, parfois très éloignées géographiquement les unes des autres, qui coopèrent, *via* un réseau de communication, pour obtenir un résultat numérique. Pour comprendre l'intérêt d'une telle architecture, rappelons qu'un ordina-



▷ teur usuel a pour moteur un processeur qui exécute les instructions d'un programme l'une après l'autre. On parle d'« ordinateur séquentiel ». Dans les années 1980, une nouvelle architecture est sortie des laboratoires de recherche en informatique qui a donné naissance à des ordinateurs ayant quelques centaines voire plusieurs milliers de processeurs : les « calculateurs parallèles ». Ainsi sont réunis dans un même lieu de multiples processeurs reliés entre eux par un réseau physique (fils de cuivre ou fibres optiques). Comme chaque processeur reçoit le travail à faire à un instant donné, plusieurs instructions peuvent être effectuées en même temps.

Lorsqu'une instruction demande un résultat déjà obtenu par l'un des processeurs, elle s'exécute, mais lorsqu'il s'agit d'un résultat à venir, elle doit attendre pour pouvoir s'exécuter. Autrement dit, si un programme demande 24 heures sur un ordinateur monoprocesseur, rien ne nous assure qu'il ne nécessitera que 6 minutes sur une machine à 240 processeurs. Les grilles de calculs consistent à fabriquer une architecture similaire à celle d'une machine parallèle mais en reliant, par un réseau de type Internet, des machines (mono ou multiprocesseurs) pouvant se trouver aux quatre coins de la planète. L'efficacité des machines parallèles et des grilles de calculs dépend donc du programme que l'on exécute. Leur rendement est maximum lorsqu'il s'agit de faire des calculs indépendants les uns des autres.

Une des premières applications des grilles de calcul est le projet SETI (Search for Extraterrestrial Intelligence). Lancé en 1999, il a pour objectif d'analyser les signaux captés par des radiotélescopes afin de détecter une éventuelle vie extraterrestre intelligente [3]. Chaque signal doit être ausculté indépendamment dans de très nombreuses

[3] http://setiathome.berkeley.edu/sah_about.php

POUR EN SAVOIR PLUS

« L'invasion programmée de la simulation », *La Recherche*, Décembre 2000, p. 74.

L'AMÉLIORATION DES MODÈLES DE TURBULENCE et l'accroissement des puissances de calcul permet aujourd'hui de simuler avec précision les écoulements autour d'un avion en vol. Des phénomènes qui conditionnent la stabilité des appareils. © ONERA

gammes de fréquences ce qui justifie pleinement le recours aux grilles de calculs. Celle allouée au SETI comprend plusieurs millions de PC personnels et tout volontaire peut la rejoindre avec sa ou ses machines. D'autres projets sont en cours, Decrypton, par exemple, a déjà permis de comparer plus de 550 000 protéines en deux mois grâce à la connexion de 100 000 PC de particuliers. Chacun d'eux ayant contribué à dix heures de calcul. Il aurait fallu 1 140 années pour effectuer les mêmes opérations avec un seul ordinateur !

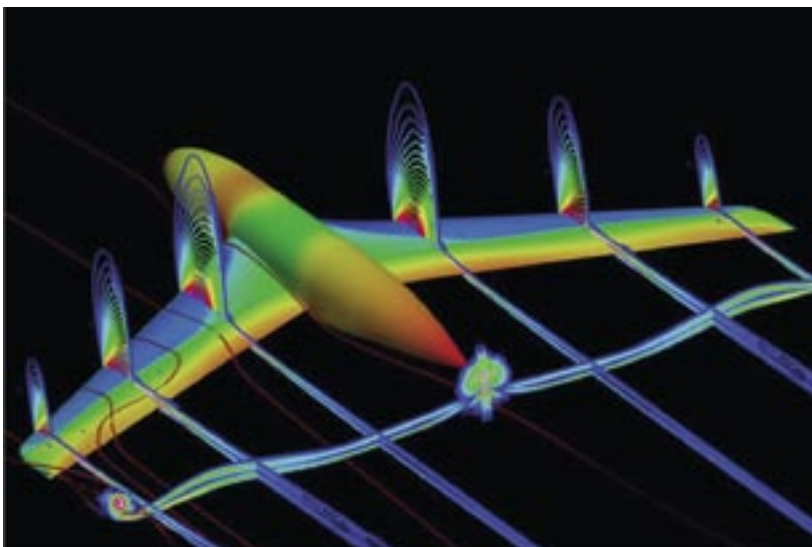
Peut-on tout simuler numériquement ?

Les limitations à la simulation numérique sont de trois ordres. Tout d'abord certains modèles requièrent des puissances de calcul indisponibles actuellement. C'est le cas du problème de la simulation du fonctionnement d'une centrale nucléaire à partir des équations de la physique, totalement hors de portée à ce jour. Il est possible de simuler le fonctionnement du cœur (neutronique), d'un échangeur de vapeur (thermohydraulique) ou d'autres composants, mais la totalité de l'installation est d'une inatteignable complexité pour les ordinateurs d'aujourd'hui. On a donc recours à des « codes systèmes » qui sont des boîtes noires s'alimentant de codes qui simulent chaque composant (cœur, échangeur...) à partir de modèles obtenus à l'aide d'équations.

La deuxième limitation est plus fondamentale. Elle résulte du fait que certains phénomènes sont mal compris et difficilement traduisibles en équations, lesquelles, redisons-le, sont encore le seul moyen de dialoguer avec l'ordinateur. Les pharmaciens ne savent pas modéliser l'effet d'une molécule dans le corps humain, par exemple, car nous ne disposons pas d'un modèle mathématique satisfaisant de la chimie d'un être vivant.

La troisième limitation est d'ordre théorique. Il existe des modèles mathématiques, provenant d'une situation physique, pour lesquels aucune méthode de résolution effective n'est connue. Par effective, on entend qui puisse être résolue par un ordinateur en un temps raisonnable, au pire en quelques jours. Il ne s'agit pas de capacité de calcul à un instant donné, comme pour la première limitation évoquée, mais du fait que le nombre d'opérations nécessaires à la résolution du modèle croît exponentiellement en fonction du degré de précision que l'on demande à la description. Le calcul *ab initio* en fait partie, et c'est pourquoi il n'en est encore qu'à ses balbutiements : seules des molécules très simples peuvent être appréhendées par cette technique. ■

J.-M.G. et B.R.





La percée

Paul Caseau,

ancien directeur
des recherches
chez EDF.

**Christian
Saguez,**

professeur
à l'École centrale
de Paris
et président
de Ter@tec.

Tous deux sont
membres
de l'Académie
des technologies

[1] Académie
des technologies
(2005): Enquête
sur les frontières
de la simulation
numérique,
Diagnostics
et propositions.
www.academie-technologies.fr/pdf/rapport090505Simulation.pdf

LA SIMULATION NUMÉRIQUE a envahi notre quotidien, comme l'atteste cette représentation du *Luna Rossa*, voilier concurrent de l'America's Cup 2003, réalisée grâce au logiciel Enight. COURTESY: PRADA CHALLENGE 2003

La simulation haute performance est devenue un enjeu stratégique tant pour les scientifiques que pour les industriels. Mais, comme le soulignent Paul Caseau et Christian Saguez dans un récent rapport de l'Académie des technologies, la France accuse en ce domaine un retard dommageable.

Mécanique, physique, mais aussi chimie et biologie: tous les grands secteurs de l'industrie et de la recherche utilisent des outils de simulation. Cette présence diffuse, qui s'est affirmée ces dix dernières années, est aujourd'hui unanimement reconnue. La France a acquis dans ce cadre une place plus qu'honorable, notamment grâce à sa grande école de mathématiques appliquées. Cependant, la situation est préoccupante en ce qui concerne les calculs haute performance, pourtant indispensables pour assurer la compétitivité de notre industrie et relever les grands défis scientifiques. En mai dernier, l'Académie des technologies a publié un rapport qui analyse la position française au

regard de ces enjeux et émet quelques recommandations [1].

Dans le domaine industriel, le rôle stratégique de la simulation numérique est évident. Elle n'intervient plus seulement dans les phases d'analyse et de conception, mais tout au long du cycle de vie des produits ou des systèmes. Les enjeux sont primordiaux pour les entreprises. La simulation numérique haute performance accroît la capacité d'innovation, parce qu'elle permet d'introduire des ruptures technologiques ou de faire sauter des verrous. On peut étudier des phénomènes pour lesquels les expériences sont difficiles, coûteuses, voire impossibles. Elle facilite les études paramétriques et réduit considérablement les temps et les coûts de conception d'un pro-

duit. Or, être à temps sur un marché est vital pour une entreprise. Ainsi, dans le secteur automobile, l'objectif est-il de diminuer de plus de la moitié les temps de conception. Mais en aval, la simulation assure aussi une garantie accrue de qualité et de suivi des produits. À tel point que dans beaucoup de secteurs industriels, les dossiers de calcul sont maintenant déterminants pour l'acceptation par l'acheteur d'un produit ou d'un système. Ces outils sont devenus essentiels pour garantir le développement, la compétitivité et la pérennité même de l'entreprise.

Cette pénétration de la simulation dans l'entreprise peut, dans certains cas, être uniquement du ressort des directeurs techniques, quand il s'agit de résoudre un pro-



de la simulation numérique **haute performance**

blème critique, ou bien du fonctionnement quotidien de la chaîne de conception/fabrication. Il en va autrement lorsqu'elle sert à concevoir un nouveau produit intégrant un saut technologique majeur. Il est alors fondamental que la simulation haute performance soit considérée au niveau de la présidence ou de la direction générale. En cas de succès, l'entreprise pourra conquérir un avantage décisif face à ses concurrents. Disposer d'outils de simulation pour la conception (essais, validation, mise en fabrication) est un atout majeur. De même, la simulation peut contribuer à la maîtrise globale des liens avec les équipementiers et les sous-traitants, en fournissant un système virtuel complet de l'entreprise et de sa chaîne industrielle. Là aussi, on se situe au niveau de la stratégie élaborée par la direction de l'entreprise.

Dans le domaine des services, la simulation va connaître un fort développement au cours des années à venir. Elle sera amenée à jouer un rôle essentiel pour les prévisions dans des secteurs tels que les banques, les assurances (calculs de ris-

ques) et les télécommunications, ou pour l'étude et la gestion des risques naturels, par exemple.

La simulation haute performance est enfin un élément clef dans les travaux de recherche associés aux grands défis scientifiques, tels que la météorologie, le climat, l'étude de nouveaux matériaux ou les nanotechnologies (voir la partie application de ce numéro).

De tels enjeux méritent un engagement fort, aussi bien de la part des directions générales des sociétés que des pouvoirs publics. Il s'agit d'une nécessité absolue si la France veut rester dans le peloton de tête, face à la progression actuellement plus rapide des autres pays développés. La situation française est préoccupante tant en terme de puissance accessible que dans le domaine des logiciels et des grands projets applicatifs. C'est ce qui ressort de l'analyse de différents indicateurs qui, bien que n'étant pas individuellement totalement pertinents, convergent tous vers la même conclusion.

Le premier critère a déjà été commenté par de nombreux observateurs



DES CHAMPIGNONS? Non, des turbulences se développant à l'interface de deux milieux de nature différente. ©DAM/CEA



Un pétaflop : un million de milliards d'opérations par seconde.

de la vie scientifique française : il concerne la position française au Top 500 (lire « Le Top 500 des supercalculateurs » p. 36). Cet indicateur montre un recul important de la France, qui, en terme de puissance de calcul disponible, se retrouve en novembre 2005 au niveau de l'Espagne et de l'Italie, avec moins de 2% de l'ensemble du Top 500, loin derrière l'Allemagne et le Royaume-Uni. Quant au nombre de systèmes répertoriés, il est passé, sur la seule année 2005, de 11 à 8, soit 1,6% du total, la seule machine française devant apparaître dans les 5 premiers étant celle de 60 téraflops en cours d'installation au CEA (voir l'article page 48). La place de la France se dégrade ainsi dans une Europe elle-même très largement distancée par les États-Unis : plus de 95% des systèmes sont construits Outre-atlantique, contre moins de 0,2% en Europe.

La situation est similaire en ce qui concerne deux autres points essentiels : les problèmes traités et les grands projets. Ainsi, aux États-Unis, le Department of Energy a-t-il décidé, à travers son programme ASCI (Accelerated Strategic Computing Initiative), de promou-

voir les capacités de modélisation et de simulation en mettant en place cinq grands centres d'excellence : dynamique rapide des matériaux au California Institute of Technology, flashes thermonucléaires en astrophysique à l'université de Chicago, simulation des moteurs de fusées avancés à l'université d'Illinois à Urbana Champaign, turbulence à l'université de Stanford, feux accidentels et explosions à l'université de l'Utah. Ce programme conçu dans

Il manque à la France une vision stratégique, pourtant indispensable

la durée (dix ans) aura sans aucun doute, vu sa qualité et l'importance des financements, des répercussions fortes sur le plan industriel.

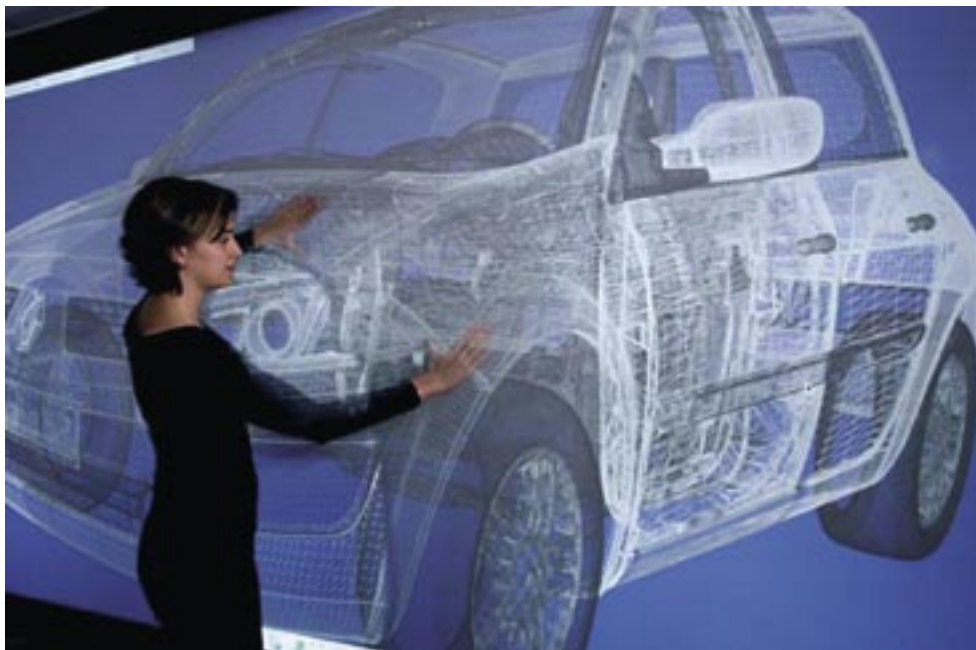
De même, le Japon a mis en place plusieurs programmes de simulation extrême. Le plus connu, baptisé « Earth Simulator », lui a permis d'occuper la tête du Top 500 pendant plusieurs années. S'y ajoutent,

entre autres, le projet « Numerical Simulator III » de l'Institut de technologie spatiale et aéronautique de Mitaka, près de Tokyo, et le projet « Frontier Simulation Software for Industrial Science » de l'université de Tokyo.

Qu'en est-il en France ? On compte certes des succès en aérodynamique ou dans le domaine de la météorologie et du climat, et bien sûr le programme Simulation du CEA-DAM (voir page 82). Mais on se doit de constater qu'on ne trouve que rarement la vision stratégique, reposant sur des programmes ambitieux de simulations extrêmes, qui serait pourtant indispensable.

En pratique, quels sont les problèmes à résoudre, les techniques à mettre en œuvre ? Un premier axe correspond à la prise en compte de la complexité géométrique des systèmes, qu'il s'agisse de passer en 3D, de simuler des objets entiers ou encore d'inclure directement – sans manipulation ni simplification – les données de la vie réelle ou issues des grands systèmes de conception assistée par ordinateur. Un autre défi concerne le traitement des problèmes multiphysiques et multi-échelles (voir page 76). L'objectif est, d'une part, d'intégrer dans un même environnement l'ensemble des problématiques des métiers associés à un système donné, et d'autre part, de relier l'analyse des matériaux à l'échelle nano ou microscopique au comportement global des objets (assemblage, étude du crash). Un troisième axe de progrès consiste à améliorer les modèles probabilistes et stochastiques, pour pouvoir réaliser des évaluations probabilisées – un point particulièrement important dans l'évaluation des risques, par exemple. Enfin, il faut aussi veiller, au sein des entreprises,

L'INDUSTRIE AUTOMOBILE est l'un des gros utilisateurs de la simulation. Ici, une expérience de réalité virtuelle chez Renault.



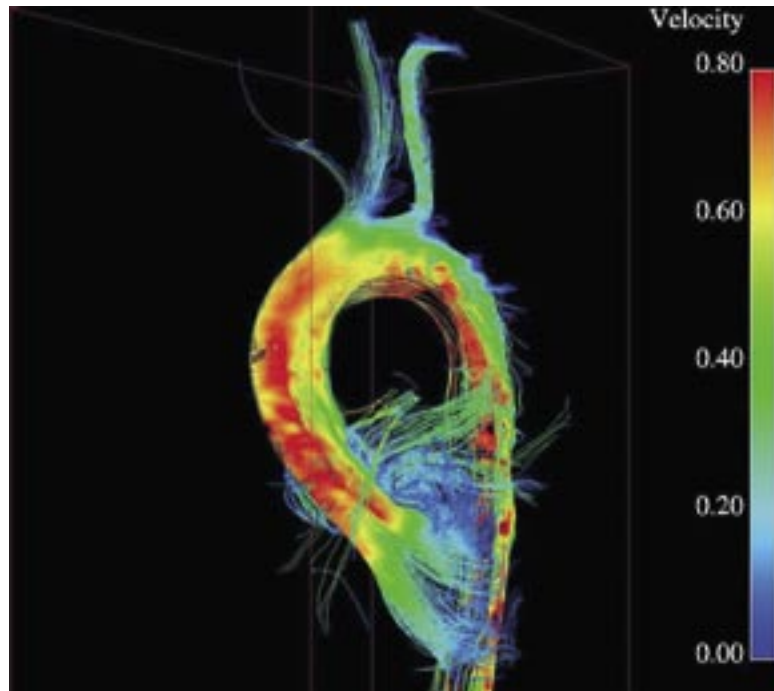
© PATRICK DUMAS/EURELIOS



à l'optimisation globale des chaînes de conception/fabrication. La finalité ultime des outils de simulation est en effet de concevoir un produit innovant aux meilleures qualités, de le fabriquer au meilleur coût... Objectifs qui ne peuvent être atteints si le système opérationnel est en mesure d'accompagner les progrès techniques permis par la simulation.

Ces différents points nécessitent des travaux scientifiques et technologiques importants, dans le cadre de grands projets intégrant les composantes matérielles et logicielles. Pour ce qui est des machines, il est clair que nous devons garder la maîtrise de la conception des architectures associées aux calculs hautes performances permettant de disposer, aux environs de 2010, de machines Pétaflops*. Ces travaux concernent notamment l'étude des architectures parallèles, les grands systèmes cluster (lire « De Charles Babbage à Seymour Gray », p. 26), les réseaux de très haut débit, les réseaux d'interconnexion, les architectures Grille (voir article page 56) et l'ensemble des logiciels de base associés (systèmes d'exploitation et d'administration, outils et langages de développement, etc.).

Dans le domaine des logiciels, trois points méritent une attention particulière. Les études algorithmiques tout d'abord, qui doivent évoluer pour tirer le meilleur parti des nouvelles architectures, sans en être prisonnier. Les méthodes et outils de développement logiciel ensuite: développer des logiciels de qualité nécessite qu'ils soient conçus de manière collaborative, par un nombre élevé de personnes de spécialités variées. Il faut enfin tenir compte de l'impact du logiciel libre. La promotion des travaux qui se matérialisent le plus souvent en logiciels doit en effet être pensée dès le début des projets, et dans ce cadre, la diffusion sous forme de logiciels libres est clairement



SUR CE CŒUR VIRTUEL QUI BAT, on visualise le flot et les turbulences du sang. © ENSIGHT IMAGE, COURTESY OF LINKÖPING UNIVERSITY

un phénomène fort. Elle offre des opportunités nouvelles pour redonner une place correcte à la France, comme le prouve par exemple le succès du logiciel libre de calcul scientifique SCILAB, développé par l'Institut national de recherche en informatique (Inria). Une initiative de grande ampleur en France dans ce domaine est très souhaitable.

Les modèles qui seront utilisés en 2010 sont ceux que l'on expérimente aujourd'hui

Les modèles qui seront d'usage courant en 2010 seront ceux que l'on expérimente aujourd'hui. Il est important de soutenir dès maintenant un effort de recherche global, mené de manière cohérente par les pouvoirs publics et les industriels, pour assurer à notre pays une position raisonnable dans les dix ans à venir. Se maintenir au bon niveau repose nécessairement sur

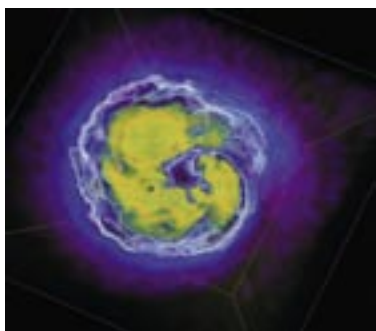
des travaux de pointe, aux frontières, tant pour la complexité des modèles que pour les capacités de traitement. L'analyse menée par l'Académie des techniques nous amène à formuler quelques recommandations, en termes d'organisation et de politique générale. Ces recommandations se situent dans le cadre de la maîtrise en 2010 de machines d'une puissance voisine du pétaflop.

La première mesure est d'organiser au niveau national, européen, voire mondial, des communautés bâties autour des grands défis technologiques et scientifiques, à l'image de celle qui a émergé autour du climat. Ces communautés devront, chaque fois que c'est possible, se situer dans le cadre d'une collaboration volontariste entre recherche d'une part, industrie et services d'autre part. Elles devront participer à l'élaboration de grands projets débouchant sur des machines et des logiciels opérationnels. Il faut



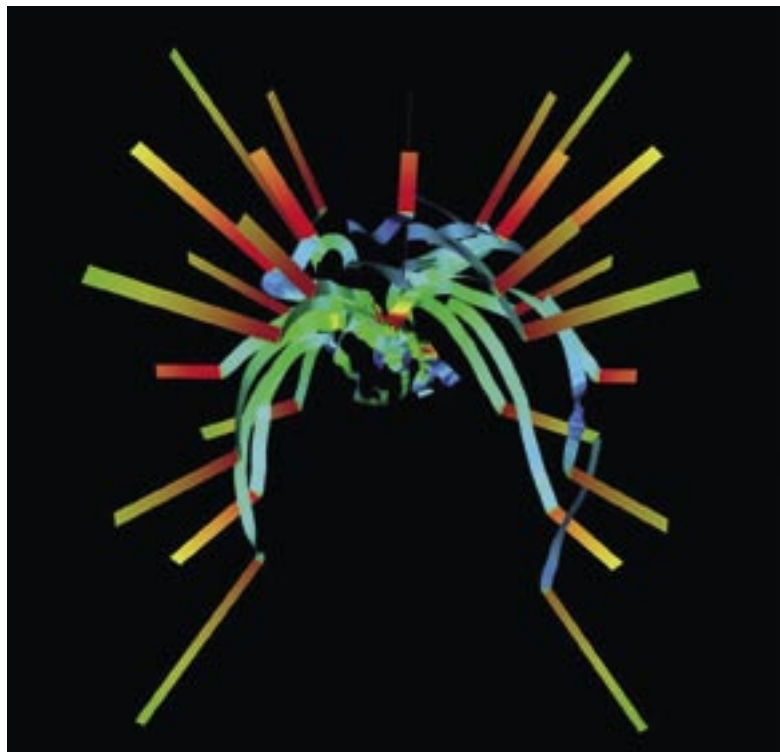
garder à l'esprit que la simulation haute performance est par nature pluridisciplinaire et « orientée-problème ». Elle concerne notamment les disciplines liées aux domaines simulés (physique, chimie, biologie...), à l'informatique (matériel et logiciel) et aux techniques algorithmiques. Il est indispensable de mettre en place des projets spécifiques de simulation, capables de faire travailler, autour d'un but commun, des équipes très diverses. Les autorités politiques nationales et européennes doivent promouvoir de tels projets et ne pas s'intéresser uniquement à la simulation au travers d'applications dans le cadre de projets informatiques.

Outre une orientation tournée vers une application multidisciplinaire, ces projets doivent prendre en compte, dès le départ, les aspects de diffusion, de maintien et d'évolution des logiciels. C'est indispensable si l'on veut redonner à la simulation numérique l'attrait qu'elle mérite et résorber le déficit d'image dont elle souffre, en particulier auprès des jeunes. Il convient aussi de faire reconnaître, à la fois dans le milieu académique, l'apport scientifique des personnes qui développent des logiciels, et dans le milieu industriel, l'expertise et la technicité des ingénieurs qui participent à ces activités. Attirer de jeunes diplômés est essentiel, ce qui peut se faire par des actions de communication sur les résultats, les métiers. Il faut aussi développer les formations axées sur une approche globale de la simulation et encourager les carrières associées. Fruit d'une collaboration



LES DIFFÉRENTS ÉTATS DE L'EAU DANS UN CYCLONE, visualisés grâce au logiciel Enight : sous la forme de cristaux de glace (magenta), de neige (bleu) et de pluie (jaune).

COPYRIGHT : ENSIGHT IMAGE/ COURTESY OF LANL



EXPLOSION D'UNE SUPERNOVAE. La matière est d'abord attirée vers le cœur de l'étoile qui s'effondre. Puis, au moment de l'explosion, elle est expulsée dans toutes les directions. ..COPYRIGHT ENSIGHT GOLD IMAGE/COURTESY OF NC STATE UNIVERSITY

volontariste entre l'industrie et la recherche, l'initiative Ter@tec répond parfaitement à ces objectifs (lire « Ter@tec : 2 ans et un brillant avenir, p. 53). Technopole dédiée au calcul haute performance, elle permet de fédérer au niveau national les principaux acteurs de la recherche, de l'industrie et des services, autour de grands projets collaboratifs.

La mise en place de tels centres est une priorité. Ils doivent assurer trois éléments essentiels : l'accès à de très grandes puissances de calcul, la mise en place au niveau national et européen de ces grands projets, et la formation aux techniques de la simulation numérique, ainsi que leur promotion et leur diffusion. Face à une situation qui, malgré des compétences mondialement reconnues, est devenue préoccupante, il est indispensable que la France prenne toutes les dispositions nécessaires pour atteindre ces objectifs. C'est seulement

ainsi qu'elle pourra se maintenir parmi les tout premiers acteurs et garantir à la simulation la place qu'elle n'aurait jamais dû quitter. ■ **P.C. et C. S.**

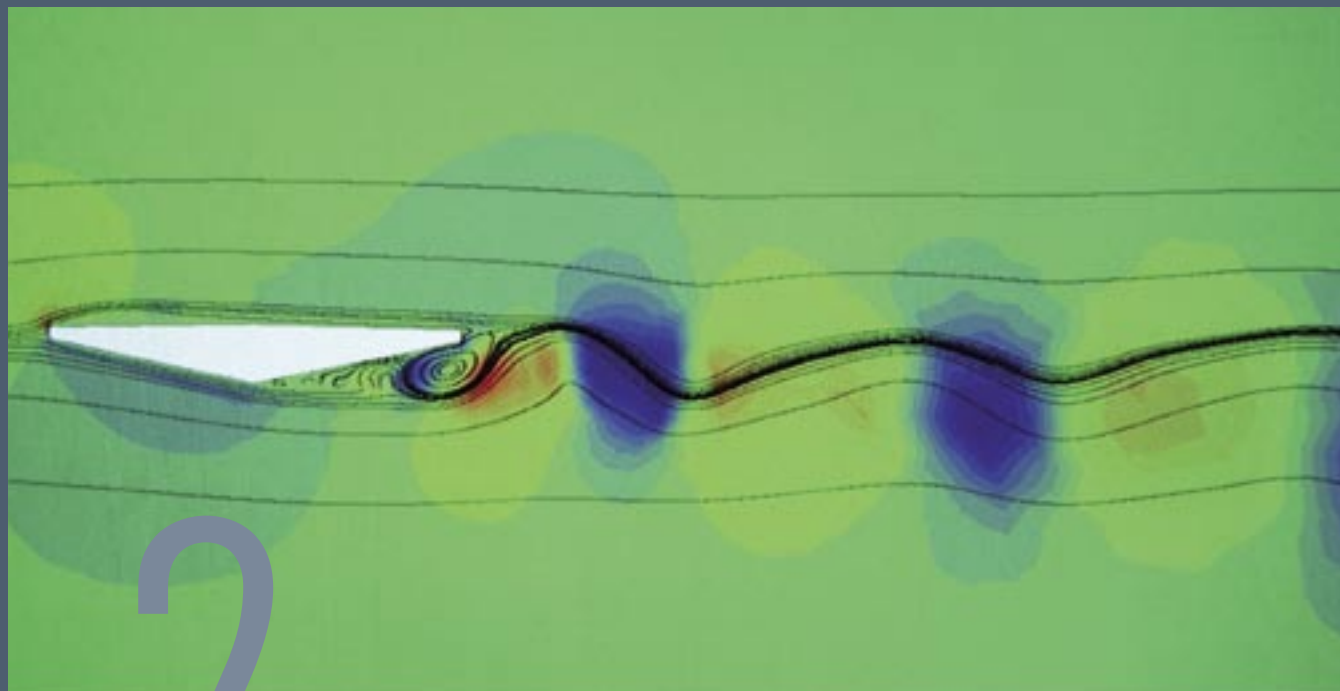
POUR EN SAVOIR PLUS

► Robert Dautray (sous la dir. de), « *Le calcul scientifique* » – Rapport du Comité des Applications de l'Académie des Sciences, publié dans *La Vie des Sciences, Comptes-Rendus, série générale, tome 9*, pp. 63-83, 1992.

► Susan L. Graham et Marc Snir (2004) ; « Getting up to speed : the future of supercomputing », National Research council.

► Orap (2006) 1994-2004 : Promouvoir le calcul haute performance Disponible à l'adresse www.irisa.fr/orap/Publications/Bi-orap/livre.pdf

Le calcul haute performance



2 Moyens

- | | | | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <i>Pierre Vandeginste</i>
De Charles Babbage à Seymour Cray | 26 | <i>Fabienne Lemarchand</i>
Ter@tec : deux ans et un brillant avenir | 53 |
| <i>Fabienne Lemarchand</i>
Le Top 500 des supercalculateurs | 36 | <i>Claude Camozzi et Pierre Leca</i>
Nom de code : FAME 2 | 54 |
| <i>Jean Gonnord</i>
« L'Europe de retour sur
la scène des supercalculateurs » | 39 | <i>Thierry Priol</i>
Un superordinateur mondial
à la demande | 56 |
| <i>Bernard Ourghanlian</i>
Un flot ininterrompu de données | 45 | <i>Pierre Vandeginste</i>
Sur la route des pétaflops | 60 |
| <i>Jean Gonnord, Pierre Leca et François Robin</i>
60 mille milliards d'opérations par seconde! | 48 | | |



De Charles Babbage

Qui n'a entendu parler de Seymour Cray, sans conteste la figure centrale de l'histoire du supercalculateur ? Il y a eu l'avant Cray, les années Cray (1965 à 1995) et l'après Cray. Mais si l'on cherche un grand-père pour cette discipline, on peut remonter jusqu'à Charles Babbage au XIX^e siècle.

Pierre Vandeginste
est journaliste scientifique

La préhistoire des supercalculateurs se confond plus ou moins avec celle de l'ordinateur. Les pionniers de l'informatique visaient en effet à automatiser le calcul scientifique, et c'est bien plus tard que furent envisagées des applications plus « littéraires », comme la gestion des entreprises ou le traitement de texte. Le concept de calculatrice programmable a tout d'abord germé dans l'esprit du mathématicien londonien Charles Babbage (1791-1871). Son « Analytical Engine », qu'il conçoit à partir de 1834, est bien entendu mécanique, et par ailleurs décimal, mais il comporte un « moulin » (« mill », autrement dit une unité centrale), un « magasin » (« store », une mémoire centrale), un lecteur de cartes perforées emprunté à Jacquard pour les entrées et une imprimante pour les sorties. Surtout, cette machine, programmable à l'aide de séquen-

ces d'instructions enregistrées sur des cartes perforées, est aussi capable d'effectuer des boucles et même d'en sortir à l'aide d'instructions de saut conditionnel.

Peut-on déjà parler de supercalculateur ? Charles Babbage prévoyait une mémoire généreuse de 1 000 nombres de 50 chiffres. La machine devait être imposante : 30 mètres sur 10, mais seul un fragment fut réalisé de son vivant. Sans doute surtout parce qu'il la réinventait chaque jour tandis que l'atelier exécutait les plans de la veille...

Une machine imposante

Le premier ordinateur binaire fut réalisé un siècle plus tard à Berlin. Konrad Zuse finalise sa première machine, la Z1, en 1938 dans le salon de ses parents. Elle est strictement mécanique mais les roues à 10 positions des calculatrices décimales sont remplacées par des bascules, des dispositifs mécaniques

à deux positions stables. Le programme est stocké sur bande perforée. Point important, la Z1 comporte une mémoire de 64 nombres binaires sur 22 bits, déjà représentés « en virgule flottante* », ce qui facilite le calcul sur des nombres très petits ou très grands. Dans la foulée, Konrad Zuse réalise la Z2 dont la mémoire est réalisée à l'aide de 800 relais électriques. Enfin, en 1941, la Z3, entièrement électromécanique, comporte 2 400 relais. Elle fonctionne. Un bombardement la détruit mais Zuse la reconstruit en 1961.

C'est pendant l'été 1942 que le professeur John Atanasoff et son étudiant Clifford Berry, de l'Iowa State University, présentent le premier calculateur électronique, l'ABC (Atanasoff Berry Computer). Il comporte 311 tubes à vide, fonctionne à la fréquence de 60 Hz, réalise une addition par seconde mais... n'est pas programmable. En revanche, il

* Représentation en virgule flottante : par exemple, $12500000 = 1,25 \cdot 10^7$ est représenté (en décimal) par la « mantisse » 1,25 et « l'exposant » 7.



à Seymour Cray

LE PLAN DE L'«ANALYTICAL ENGINE», tel qu'il fut dessiné en 1840 par le mathématicien britannique Charles Babbage.

©SCIENCE MUSEUM ARCHIVE/SCIENCE AND SOCIETY PICTURE LIBRARY

DANS LES ANNÉES 1960, l'Américain Seymour Cray conçoit les premiers supercalculateurs commerciaux. Ici le CDC 6600.

©CERN



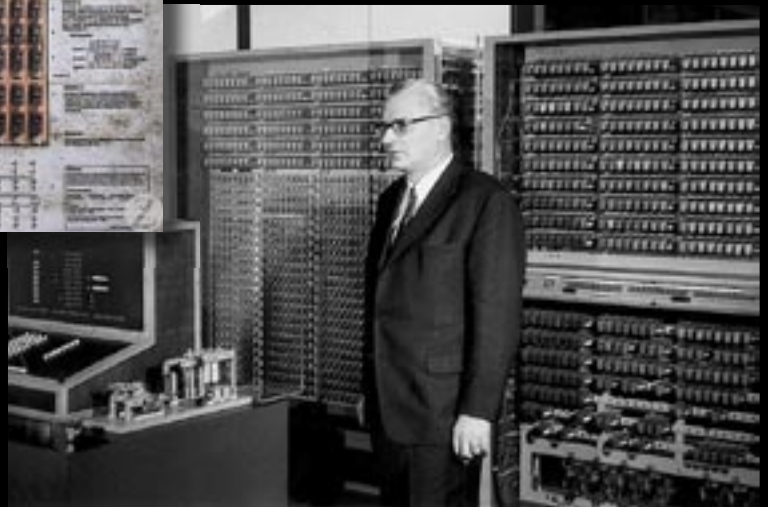


Dès février 1944, le Colossus, sorte de grosse calculatrice spécialisée installée près de Londres, « cassait » les codes secrets nazis



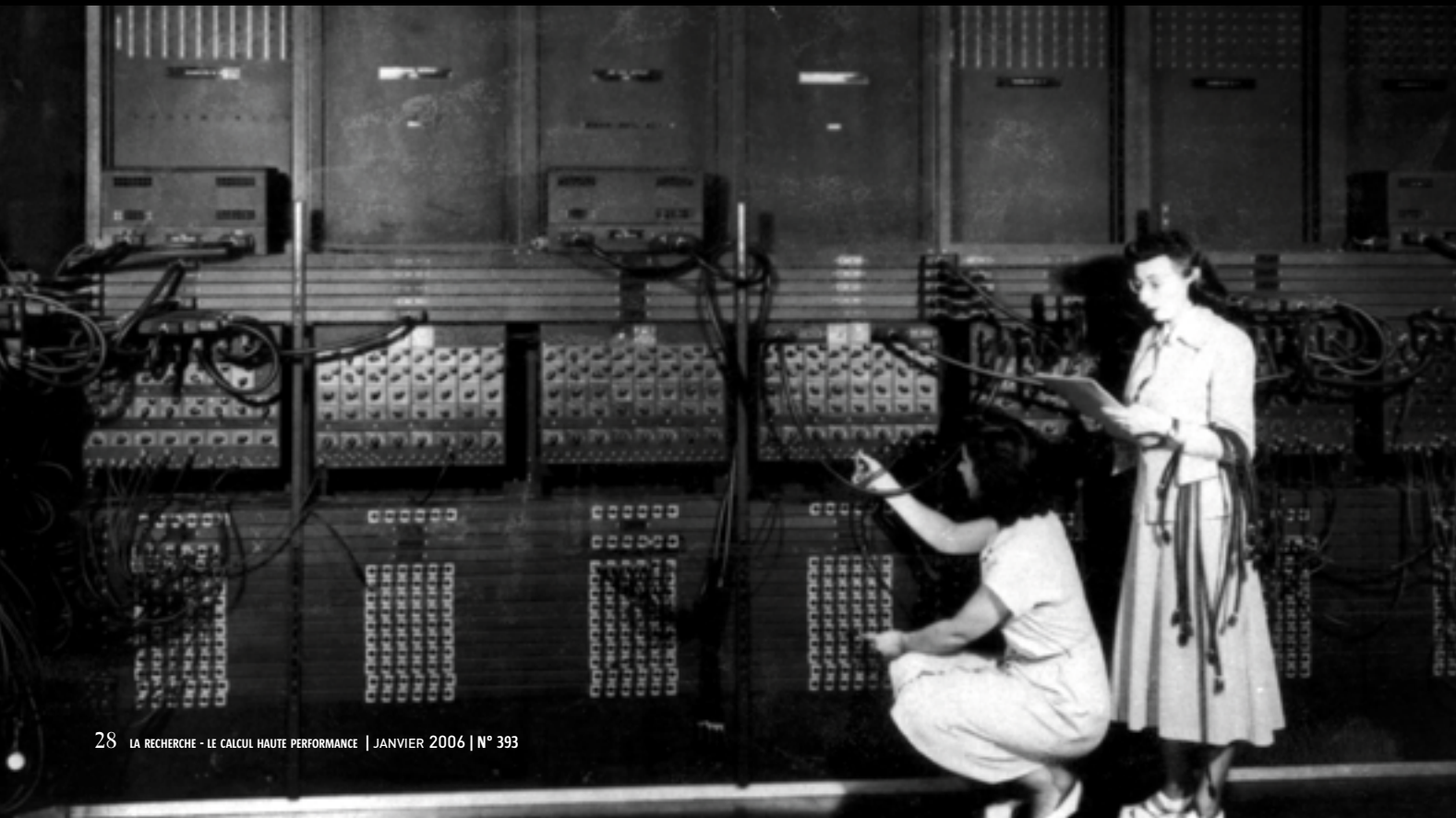
KONRAD ZUSE (ci-dessous) devant sa machine Z3 (plan ci-contre), en 1961. Ses dimensions : près de cinq mètres de long, deux mètres de haut et 80 centimètres de profondeur.

© PAUL ROJAS (CI-CONTRE) ET HORST ZUSE (CI-DESSOUS)



CONSTRUIT EN 1946, L'ENIAC était programmé à l'aide de nombreux interrupteurs et cordons électriques.

© US ARMY PHOTO/ARCHIVES ARL TECHNICAL LIBRARY





présente, déjà, une caractéristique qui deviendra moderne bien plus tard : il calcule en parallèle (30 additions simultanément).

Une autre machine précocement destinée au calcul intensif est ce fameux Colossus qui, dès février 1944, à Bletchley Park, près de Londres, « cassait » les codes secrets nazis : 1 500 tubes à vide, 5 000 opérations par seconde... mais il s'agit d'une calculatrice spécialisée difficilement programmable.

En février 1946, à défaut d'être un vrai ordinateur, l'Eniac (« Electronic Numerical Integrator And Computer ») de l'université de Pennsylvanie est un petit monstre tout électronique : 30 tonnes, 160 kW consommés, pour 50 000 opérations par seconde. Mais pas de virgule flottante et on le programme à l'aide d'interrupteurs et de cordons enfilés dans des matrices de prises.

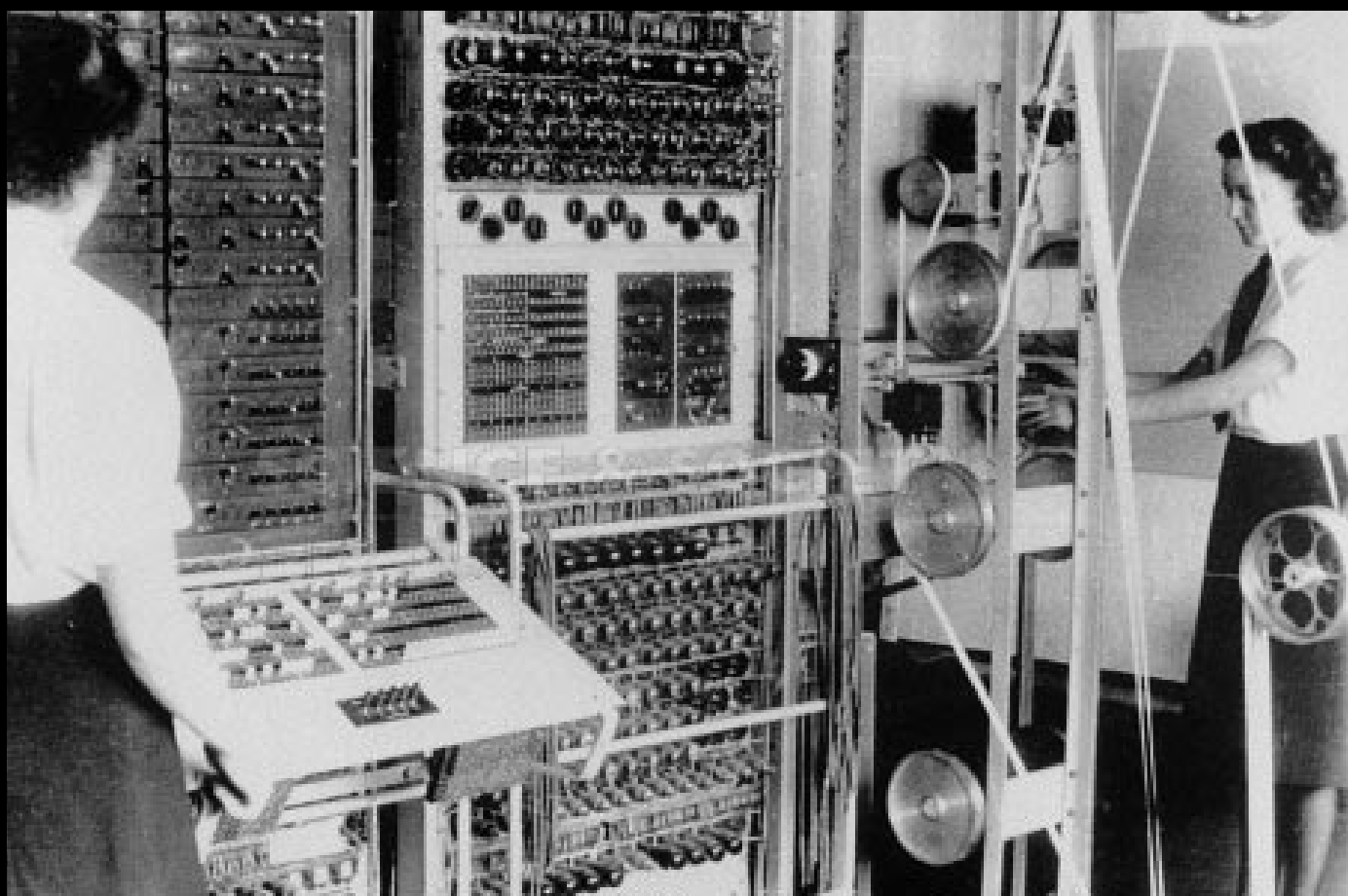
Mentionnons en passant la naissance, le 21 juin 1948 à Manchester, de « Baby », alias « Manchester Mark I », le premier véritable ordinateur jusqu'au bout des ongles, conforme au modèle dit de von Neumann, puisque respectant même le principe du programme enregistré en mémoire centrale. L'ordinateur devient un produit. En septembre 1950, Konrad Zuse vend un exemplaire de son Z4 à l'ETH* de Zurich. Six mois plus tard est livré le premier exemplaire de l'Univac I. Quarante-cinq autres suivront.

En Union soviétique, Sergeï Alexeïevitch Lebedev réalise en 1953 sa BESM (*Bystrodejvoritstvu yushchaya Ehlektronno-Schetnaya Mashina*, machine à calculer électronique rapide), qui calcule en virgule flottante sur 39 bits grâce à 5 000 tubes. Un seul exemplaire

L'ENIAC EN COURS DE CONSTRUCTION ET DE TEST, au centre de démonstration de l'armée, à Aberdeen dans le Maryland, en août 1947. Cette machine électronique ne pesait pas moins de trente tonnes et comprenait 18 000 tubes à vide !

* **ETH** : Institut de technologie de Zurich.





C'EST DANS CETTE PIÈCE DE BLETCHLEY PARK, près de Londres, que les services de renseignements britanniques décryptaient les instructions d'Hitler à ses forces armées (1943). © BLETCHLEY PARK TRUST/SCIENCE & SOCIETY PICTURE LIBRARY

LE LOS ALAMOS NATIONAL LABORATORY (LANL), impliqué dans le développement de l'arme nucléaire américaine, acquiert une machine d'IBM, STRETCH, au tout début des années 1960. © IBM CORPORATE ARCHIVES



sera construit. En 1955 apparaît aux États-Unis l'IBM 704, le premier ordinateur commercial scientifique, avec virgule flottante.

La révolution « Cray »

En 1957 est fondée la société CDC (Control Data Corporation) qui va lancer une impressionnante série d'ordinateurs à vocation scientifique. C'est d'abord, en 1958, le CDC 1604, premier ordinateur commercial entièrement transistorisé. La machine est puissante, manipule le nombre flottant sur 48 bits, mais on n'a encore rien vu.

Son architecte, un certain Seymour Cray (1925 - 1996), donne la mesure de son talent en 1965 en présentant le CDC 6600, premier supercalculateur commercial. C'est une petite révolution. La machine impressionne à la fois par ses performances et par l'élé-

gance, la simplicité de son architecture. Priorité absolue est donnée au calcul en virgule flottante, sur 60 bits, une précision jamais vue. Cray a prévu deux multiplicateurs flottants, un diviseur, un additionneur et d'autres opérateurs ultrarapides et pouvant travailler en parallèle. Toute l'architecture est organisée pour « nourrir » ces opérateurs gloutons. La machine est rythmée par une horloge à 10 MHz, sa mémoire est gigantesque : 256 000 mots de 60 bits. Le CDC 6600 restera cinq ans la machine la plus puissante du monde.

Le CDC 6600 séduit immédiatement le marché naissant du supercalculateur, à commencer par les gros laboratoires du DOE (Department of Energy) impliqués dans le développement de l'arme nucléaire états-unienne, comme le LANL (Los Alamos National



LE CRAY 1, cette machine vectorielle incarne LE supercalculateur.

© DAM/CEA

LE CRAY 2 (ci-dessous). Au premier plan, les réservoirs accueillant son liquide de refroidissement lors des vidanges de maintenance.

© NASA CENTER

En 1975, le célèbre « Cray 1 » s'impose comme la référence dans le monde des supercalculateurs

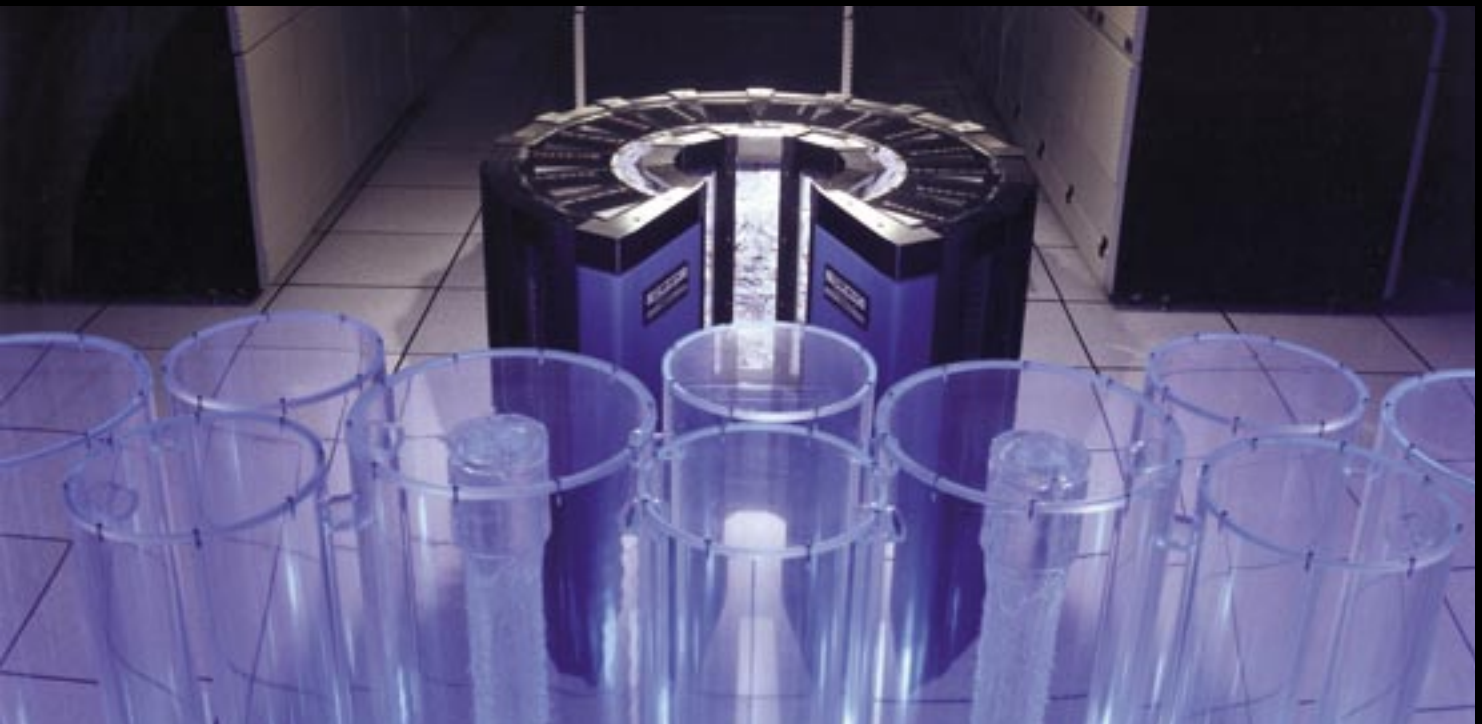
Laboratory) ou le LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory)... Ils y prendront goût.

Dans le camp de l'autre superpuissance, Sergeï Alexeïevitch Lebedev crée en 1967 le BESM-6, transistorisé, dont 355 exemplaires seront fabriqués sur vingt ans. Le retard sur l'oncle Sam est modéré mais s'aggravera par la suite.

1969: Seymour Cray est de retour. Son CDC 7600, dix fois plus puissant que le 6600, restera lui aussi cinq ans sur la première marche du podium. Cette fois Seymour Cray s'est heurté de plein fouet à un problème récurrent de la spécialité: le dégagement de chaleur. L'air pulsé ne suffisant plus à refroidir les modules très denses du 7600, il a fait appel au refroidissement par circulation d'un liquide.

Lassé d'une hiérarchie qui a d'autres objectifs que le sien, concevoir l'ordinateur le plus puissant du monde, Seymour quitte CDC en 1972 et crée Cray Research.

Le Cray 1 est un mythe dès sa sortie en 1975. Commentaires dithyrambiques. Cadencé par une horloge à 80 MHz, il peut produire





Le Cray 2, plongé dans un liquide réfrigérant, est le premier ordinateur aquarium

deux résultats flottants par cycle de 12,5 nanosecondes, comporte une mémoire de un million de mots de 64 bits.

Le Cray 1 est une machine « vectorielle », optimisée pour effectuer la même opération sur des séries de nombres. Un concept essentiel sur lequel repose sa puissance est le « pipeline », qui applique au calcul le principe du travail à la chaîne. Chaque opérateur (additionneur, multiplicateur...) est décomposé en plusieurs étapes élémentaires qui traitent en même temps des données différentes.

À chaque cycle d'horloge, toutes les données transitent d'une étape à la suivante. Ainsi lorsque deux nom-

bres sont introduits dans un pipeline de division à 14 « postes », le résultat sort 14 cycles plus tard. Mais si deux vecteurs de 100 nombres sont injectés, les 100 résultats sont obtenus en 113 cycles.

Arrivée du parallélisme

La concurrence est KO. Le Cray 1 devient LE supercalculateur. Il s'en vendra 80 exemplaires, à des prix variant entre 5 et 8 millions de dollars. Le marché s'est élargi à toutes sortes d'organismes de recherche, mais aussi des industries : aéronautique, automobile...

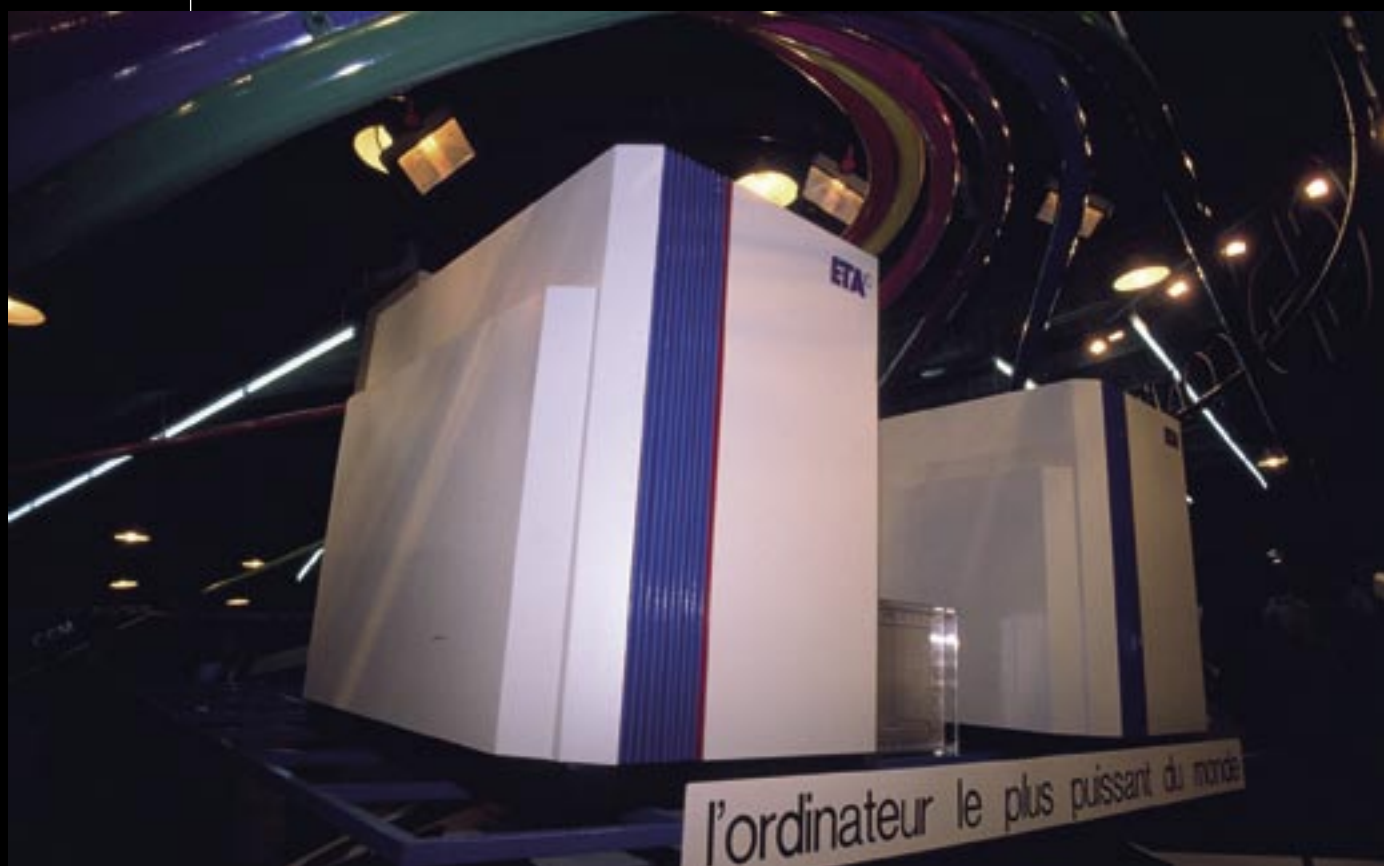
En 1982, arrive un successeur « multiprocesseur ». Un Cray X-MP, c'est en substance deux ou quatre

Cray 1, accélérés, améliorés et compactés, partageant une mémoire de un à 16 millions de mots.

En 1985, soit dix ans après le Cray 1, Seymour crée à nouveau l'événement avec le Cray 2, doté de huit processeurs et d'une mémoire colossale de 2 Go (giga-octets). Il est plus petit que ses prédécesseurs, la densité de composants atteint un nouveau record et le dégagement de chaleur est extrême. C'est pourquoi Seymour Cray a choisi de le refroidir en plongeant carrément le Cray 2 dans un liquide réfrigérant : c'est le premier ordinateur-aquarium. La concurrence a commencé à se ressaisir. Après son Star 100 de

L'ETA 10, sorti en 1989, restera quatre ans durant l'ordinateur le plus puissant au monde.

©CATHERINE LESPINASSE/REA





1974, son Cyber 205 de 1981, CDC a repris l'offensive en 1989 avec l'ETA 10, qui restera quatre ans durant la machine la plus puissante sur le marché. La compétition vient aussi du Japon, dont l'offre en la matière (SX-1 de NEC en 1983, VP-400 de Fujitsu en 1985) commence à séduire. Et puis surtout, depuis quelque temps, un mot d'ordre enfle : « parallélisme ». On ne pourra bientôt plus poursuivre la course à la manière de Seymour Cray, dit-on, il faut passer au parallélisme franc et massif.

Microprocesseurs en série

Et de fait, Seymour Cray va connaître l'échec. En 1989 il crée une nouvelle entreprise pour poursuivre tranquillement son projet de Cray 3 qui prend du retard. Il ne livrera en tout et pour tout qu'un quart de Cray 3 en 1993 avant de faire faillite en 1995. Pour repartir aussitôt à l'assaut d'un hypothétique Cray 4... Mais Seymour Cray meurt dans un accident de la circulation en 1996.

Le parallélisme, donc. Mais combien de processeurs ? Comment les connecter entre eux ? Où mettre la mémoire ? Les idées fusent, les start-up aussi. En 1985, par exemple, Thinking Machine présente sa CM-1 (Connection Machine) : 65 536 processeurs minimaux exécutent ensemble la même instruction sur des données différentes, un concept architectural (SIMD pour Single Instruction Multiple Data) qui ne connaîtra qu'un mince succès.

Entre ce parallélisme franchement « massif » et celui très modéré de Cray, une voie médiane se profile, assise sur un constat économique : le rapport performances sur prix des microprocesseurs du marché est imbattable. Parce qu'ils sont produits massivement. Reste à trouver le moyen de faire collaborer efficacement un grand nombre de processeurs à mémoire



INTERCONNEXIONS entre deux armoires de « Asci Red », champion du monde 1997, réalisé par Intel pour les Sandia National Laboratories.

©CATHERINE LESPINASSE/REA

des premiers en 1985 à concrétiser cette idée avec son iPSC/1 (Intel Parallel Scientific Computer), réunissant 128 microprocesseurs. D'autres pionniers de cette drôle d'ère se nomment nCube, BBN, Meiko, FPS, Sequent, Parsytec, MasPar... Après une phase de prolifération, la sélection naturelle fait son œuvre.

Dans les années quatre-vingt-dix, le parallélisme se banalise, le processeur vectoriel recule devant le microprocesseur triomphant.

Un recentrage s'effectue autour d'un axe, qui oppose les architectures « fortement couplées », permettant à un nombre raisonnable de processeurs d'accéder à une mémoire partagée, aux architectures distribuées, où un plus grand nombre de processeurs à mémoire locale, mais sans mémoire com-

mune, collaborent en échangeant des messages. Ces dernières années, la seconde manière gagne progressivement du terrain sur la première.

Mais on voit aussi se multiplier des solutions mixtes, réunissant, *via* un réseau d'interconnexion par messages, des nœuds constitués de plusieurs processeurs couplés par mémoire partagée. L'avenir (proche) est sans doute là... ■ P.V.

POUR EN SAVOIR PLUS

■ ORNL (Oak Ridge National Lab.) : www.csm.ornl.gov/ssi-expo/history.html

En français :

■ <http://histoire.info.onLine.fr/super.html>





HP parie sur le calcul à la demande

En installant dans l'Essonne le premier gros supercalculateur scientifique de calcul à la demande, le HPC1, équipé de 212 processeurs et d'une puissance de 1,1 téraflop, HP pariait sur ce nouveau marché. Un an plus tard, la réussite est au rendez-vous.

Le succès du calcul à la demande passe par les standards qui favorisent l'interopérabilité des machines. Philippe Devins, directeur des ventes nouvelles technologies pour HP France, en est convaincu. Sa société a installé en février 2005 la première grosse machine en France de calcul à la demande à Bruyère-Le-Chatel, dans l'Essonne, sur le site de Ter@tec, une technopole destinée à promouvoir le calcul scientifique. Un an plus tard, ce supercalculateur, baptisé HPC1 (High Performance Computing), doté de 212 processeurs répartis sur 53 quadriprocesseurs, et d'une puissance de traitement de plus de mille milliards d'opérations par seconde (1,1 téraflop) est déjà largement sollicitée. « *Nous pouvons doubler la capacité de la machine en moins de 30 jours en fonction de l'évolution de la demande...* », prévoit Philippe Devins certain qu'il est de l'avenir de ce nouveau marché. « *Pour que le calcul à la demande se développe, il fallait*

d'abord que des standards s'imposent », explique-t-il. Jusqu'à un passé récent, pour les grosses machines, les architectures informatiques demeuraient encore fondées sur des infrastructures propriétaires. Début des années 1980, c'est le PC qui montre la voie avec une architecture commune à plusieurs constructeurs. Les serveurs standards, de Compaq notamment, avec des processeurs Intel, lui emboîtent le pas, avant que les systèmes d'exploitation Unix - sous l'impulsion des universitaires et de quelques constructeurs informatiques - s'imposent chez l'immense majorité du marché. Cependant les machines « Unix » restent très dépendantes de leur concepteur et chaque constructeur développe son « propre système Unix » qui n'est pas toujours gage d'interopérabilité.

Standardisation

Il faudra attendre « Linux », premier système d'exploitation - imaginé par un étudiant finlandais en 1991 : Linus Torvalds - libre d'accès et de droit, pour retrouver un système d'exploitation commun aux principales plates-formes du marché informatique (approche différente de Microsoft qui a développé un système propriétaire multiplates-formes largement répandu qui est aujourd'hui un standard de facto).

« *Ce sont tous ces standards auxquels il faut ajouter celui du hardware - avec le processeur et la puce Itanium et Xeon en 64 bits d'Intel ou le processeur*



Opteron d'AMD - qui a permis au calcul à la demande d'atteindre la maturité actuelle », ajoute Philippe Devins. HPC1 est ainsi configuré autour du processeur Opteron d'AMD et du système d'exploitation de Linux, tandis que les deux autres machines de calcul à la demande que possède HP mais cette fois-ci aux États-Unis tournent respectivement sur Xeon et Itanium.

Conséquence de cette standardisation : « *lorsqu'une entreprise demande si l'application dont elle a besoin tourne sans problème sur notre supercalculateur, nous pouvons répondre par l'affirmative dans 99 % des cas.* »

Qui sont les clients du calcul à la demande ? Sont intéressés tous les secteurs de l'entreprise ou du monde académique dont l'amélioration de la productivité lors des phases de conception/fabrication passe par la simulation numérique : par exemple pour les calculs de structures, de crashes, de mécanique des fluides ou de combustion pour les marchés de l'aéronautique et de l'automobile, des calculs de réservoir (gisements pétroliers) ou de

données sismiques pour l'industrie du pétrole, des calculs de séquençage ou de protéomique pour l'industrie pharmaceutique, etc.

Au premier chef avec des sociétés de taille, mais les PME et les établissements de recherche sont déjà utilisatrices de ces moyens de calculs colossaux qu'il leur serait difficile d'acquérir et d'exploiter pour un usage limité dans le temps. Les grandes entreprises de ces secteurs sont déjà équipées de machines de calcul scientifique, mais ces dernières tournent souvent à plus de 90% de leurs capacités. Un calcul imprévu avec une exigence de résultats rapides, et il devient nécessaire, soit de l'intégrer dans le calculateur scientifique interne de la société en retardant d'autres programmes, soit de se tourner vers une solution de calcul à la demande.

Calculs sécurisés

« La principale demande concerne la gestion de ces pics de charge où nous nous faisons forts de répondre à des besoins de simulation demandant des résultats rapides, les entreprises intégreront de plus en plus ces moyens de calculs "externes" dans leurs investissements, cela leur permet d'augmenter leur adaptabilité aux évolutions de leur marché et d'améliorer leur compétitivité », indique Philippe Devins.

Le coût du calcul à la demande - un euro par heure processeur de calcul en intégrant l'accès réseau haut débit et un espace de stockage - est un autre atout du HPC1. « Avec ce supercalculateur, un travail de calcul relativement lourd de 5 000 heures (soit 208 jours de calcul) sur un serveur monoprocesseur peut être exécuté en une journée », note Philippe Devins. « Au prix d'une dépense de 5 000 euros équivalente à cet investissement, mais avec l'avantage de gagner 207 jours sur le même travail s'il était exécuté sur ce serveur monoprocesseur, et sans en assumer les contraintes de gestion et de maintenance. »



Les avantages du calcul à la demande sont donc manifestes et HPC1 a déjà trouvé de nombreuses applications. Citons entre autres, dans le domaine du biomédical, un projet de cartographie des protéines du Vivant pour la société Genomining : « Avec un serveur monoprocesseur, 1 500 ans auraient été nécessaires, le supercalculateur a permis d'exécuter ce travail en quelques semaines ! ». Autres exemples : un calcul d'écoulement de fluide pour l'industrie automobile ou aérospatiale, ou le calcul d'un réservoir de champ pétrolier pour déterminer le plus précisément possible le nombre de mètres cubes disponibles dans la poche...

Ces applications ont toutes pour point commun d'exiger une grande capacité de calculs très sensibles, pour lesquels la confidentialité et la protection des informations sont donc naturellement un impératif. La société HP a surmonté cet obstacle avec des barrières, d'une part de sécurité physique de la machine (isolation de celle-ci avec sécurité d'accès, par badges, sas de sécurité...) et d'autre part, pour la liaison Internet, avec des systèmes de cryptage, l'usage de VPN (Virtual Private Network) ou des échanges de clés de sécurité

pour accéder au supercalculateur. HP peut également mettre à disposition tout ou partie du supercalculateur en mode mono utilisateur afin qu'aucun autre programme ne puisse s'exécuter en même temps que l'application critique du client.

Demande croissante

Une autre exigence du calcul à la demande tient à la capacité des réseaux d'accès. HP a installé une communication sur ligne privée à haut débit dans les deux sens de 100 mégabits par seconde. Elle pourra être 400 fois plus rapide en 2008 avec une vitesse atteignant les 40 gigabits par seconde... La société est prévoyante, afin de répondre à des prévisions de trafic accru. « Le calcul à la demande, qui fut inauguré par des grandes entreprises internationales et des PME pionnières, connaît d'ores et déjà une croissance annuelle de 40% », indique Jean-Marie Verdun, responsable activité Linux du constructeur informatique. Explication de ce succès foudroyant : toute entreprise, grâce aux standards, peut désormais accéder aux formules 1 que sont les supercalculateurs scientifiques, réservés auparavant uniquement à une petite élite.



Le Top 500 des

En 2005, une fois de plus, les États-Unis caracolent en tête du classement international établi tous les six mois par des scientifiques allemands et américains.

Fabienne Lemarchand
est journaliste scientifique

Les États-Unis dominent toujours très largement le vingt-sixième palmarès établi par des chercheurs des universités de Mannheim, en Allemagne, et du Tennessee, ainsi que du Lawrence Berkeley National Laboratory aux États-Unis: 305 machines classées parmi les 500 plus puissantes du monde sont concentrées dans ce pays. Avec une puissance soutenue de 280,6 téraflops, le double d'il y a six mois, Blue Gene/L, conçu par IBM pour le Livermore National Laboratory du département de l'Énergie états-unien, conforte sa position de leader.

L'Europe est loin derrière avec seulement 100 supercalculateurs. Elle devance toutefois l'Asie (66 machines). Avec seulement 8 supercalculateurs dans les 500 premiers mondiaux, la France obtient un résultat modeste.

Côté constructeurs, IBM se taille la part du lion. Il a assemblé quelque 43,8% des machines figurant dans

le classement! Viennent ensuite HP (33,8% des systèmes assemblés) et, loin derrière, SGI (3,6%), Cray Inc. (3,6%), Dell (3,4%) et Linux Network (3,2%). Finalement, plus de 95% des systèmes sont «made in USA» contre 3% en Asie et moins de 0,2% en Europe.

On peut toutefois se demander quel crédit accorder à ce Top 500. Ce classement est en effet loin d'être exhaustif. Certains utilisateurs ne déclarent pas leurs machines. Surtout, il s'appuie sur l'exécution d'un programme étalon nommé «Linpack» qui n'est pas forcément représentatif de l'utilisation réelle des machines. Malgré tout, même imparfait, le Top 500 souligne l'accroissement général de la puissance des supercalculateurs. Aujourd'hui, il faut aligner plus d'e 1,6 téraflop pour entrer dans le classement, et plus de 20 téraflops pour être dans le Top 10! Et aucun des supercalculateurs classés en 1998 ne pourrait plus y figurer...

Autre fait marquant: on note depuis quelques années l'émergence des machines massivement parallèles, basées sur des architectures scalaires. Une seule machine vectorielle figure aujourd'hui dans les dix premières du Top 500: l'Earth simulator japonais dédiée à la climatologie et à la géophysique, qui occupe la 7^e place. Et seule l'industrie japonaise, en l'occurrence NEC, défend encore ce type d'architecture, très volumineuse et gourmande en énergie.

A titre d'exemple, Blue Gene/L n'occupe que 1% du volume au sol couvert par l'Earth Simulator et ne consomme que 3,6% de sa puissance. Même Cray Inc. fait aujourd'hui son grand retour dans le Top 500 avec des machines parallèles...

Notons, pour terminer, la percée fulgurante de la Chine: ce pays alignait neuf supercalculateurs il y a un an et demi, dix-sept aujourd'hui! ■

Fabienne Lemarchand



supercalculateurs

TOP 10

USA

1 BlueGene/L IBM

280,6 TFlops
131072 Proces.
DOE/NNSA/LLNL

2 BGW solution IBM

91,2 TFlops
40960 Proces.
IBM Thomas J. Watson Research center

3 ASC Purple IBM

63,3 TFlops
10240 Proces.
DOE/NNSA/LLNL

4 Columbia SGI

51,8 TFlops
10160 Proces.
Center/NAS

5 Thunderbird Dell

38,2 TFlops
8000 Proces.
Sandia National Laboratories

6 Red Storm Cray XT3, Cray inc

36,1 TFlops
10880 Proces.
Sandia National Laboratories

10 Jaguar - Cray XT3, Cray Inc.

20,5 TFlops
5200 Proces.
Oak Ridge National Laboratory

PAYS-BAS

9 eServer Blue Gene Solution IBM

27,4 TFlops
12288 Proces.
Astron /University Groningen

ESPAGNE

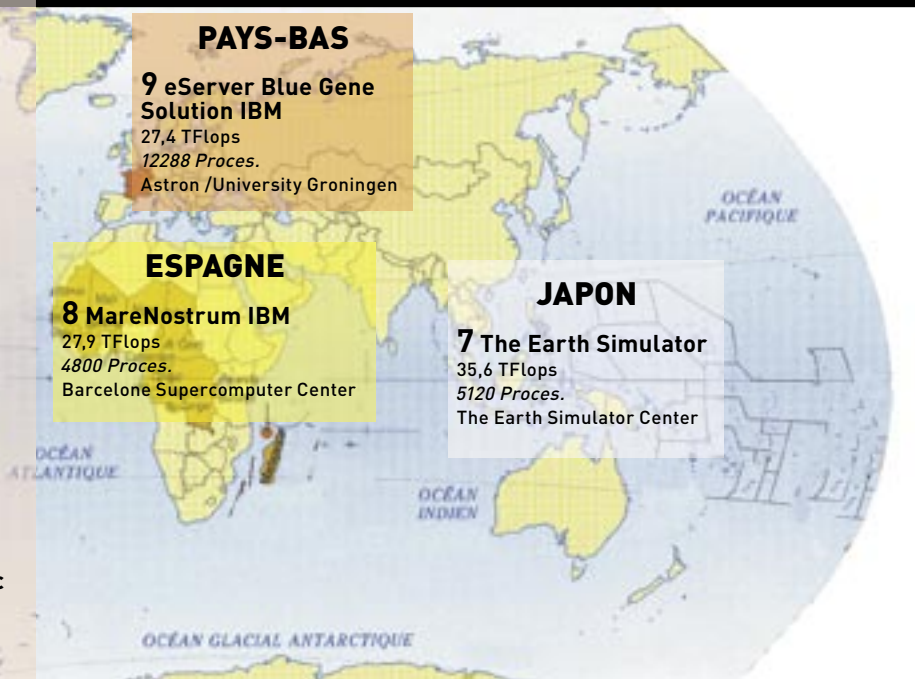
8 MareNostrum IBM

27,9 TFlops
4800 Proces.
Barcelone Supercomputer Center

JAPON

7 The Earth Simulator

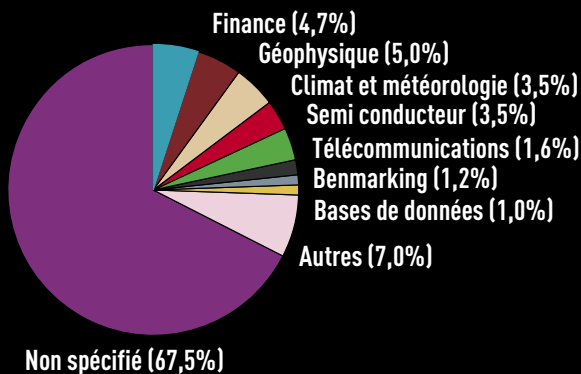
35,6 TFlops
5120 Proces.
The Earth Simulator Center



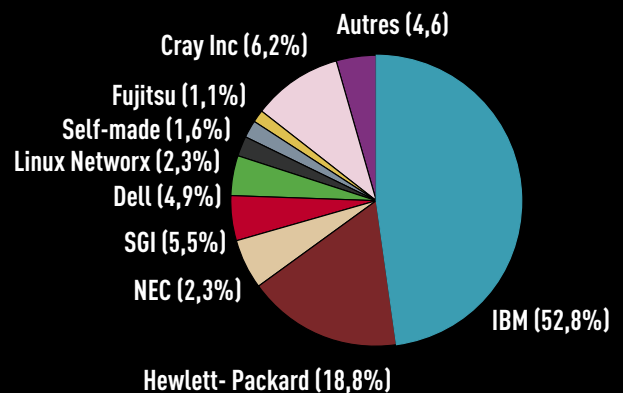
www.top500.org

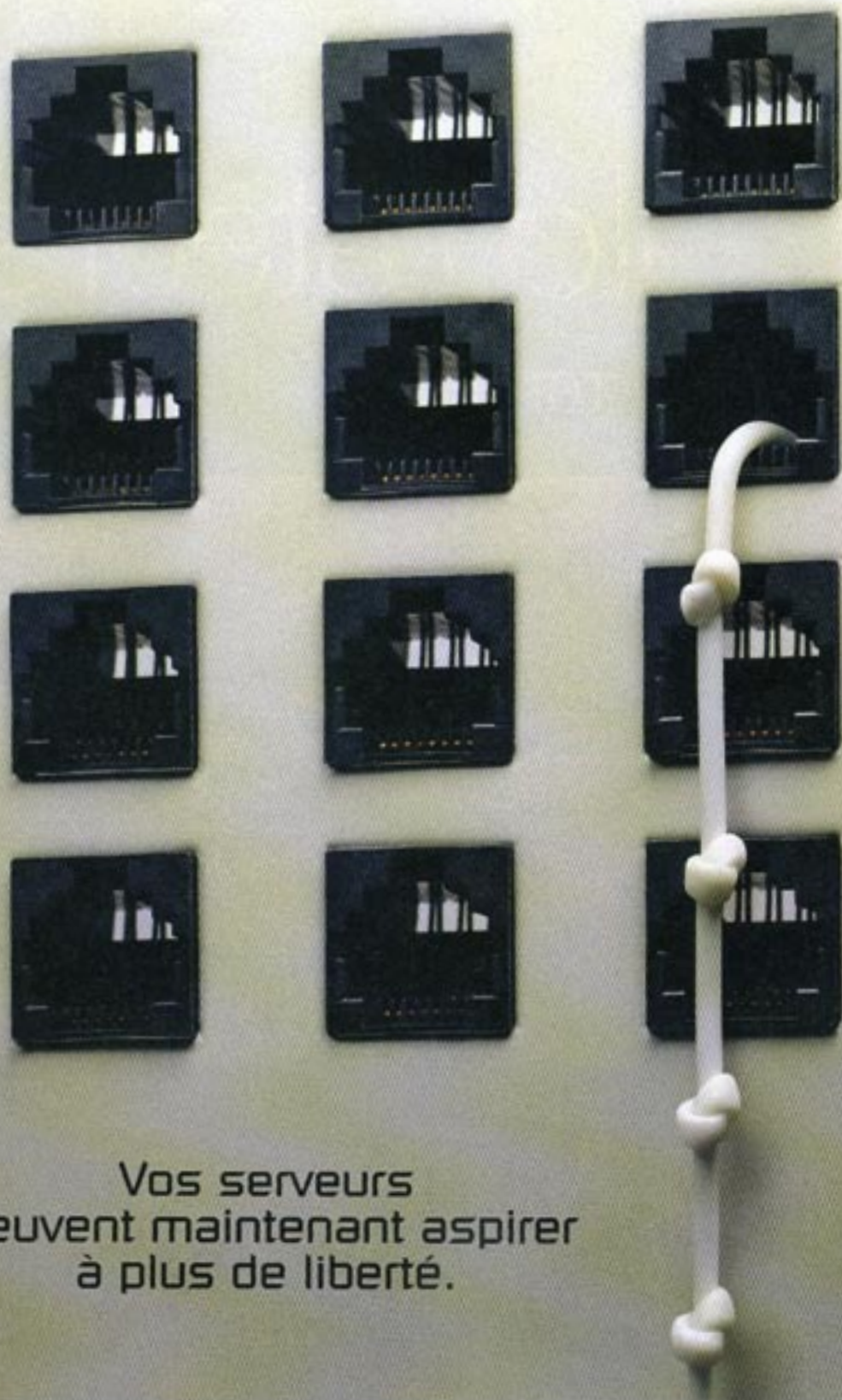
Applications

Technologie de l'information (5,1%)



Constructeurs





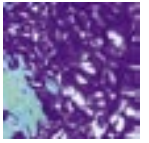
Vos serveurs
peuvent maintenant aspirer
à plus de liberté.

Produits et Systèmes Bull

Des années pour passer d'un système d'exploitation à un autre. Des mois pour faire interopérer vos applications. Et si vous optiez pour des serveurs qui libèrent votre système d'information ? Nos serveurs NovaScale et Escala sont ouverts, flexibles et totalement interopérables, quelles que soient vos applications. Pour vous affranchir d'un monde de contraintes et entrer dans une nouvelle ère de liberté, connectez-vous sur www.bull.fr

BULL

Architect of an Open World™



Jean Gonnord:

« L'Europe de retour sur la scène des **super calculateurs** »

Pour rattraper son retard en matière de supercalculateurs, l'Europe doit impérativement mener une politique plus volontariste, centrée sur une synergie défense, industrie et recherche.

LA RECHERCHE. Un coup d'œil au Top 500 (voir page 38) suffit pour s'en convaincre, la France et l'Europe accusent un retard considérable en matière de supercalculateurs par rapport aux États-Unis ou au Japon. Comment expliquez-vous cet état de fait ?

JEAN GONNORD. Ce retard très alarmant est la conséquence de l'échec des derniers « plans calculs », au début des années 1990. L'industrie européenne de l'informatique de grande puissance s'est alors effondrée et seules quelques entreprises ont survécu. C'est le cas par exemple de Meiko, en Grande-Bretagne, qui, après sa faillite, fut rachetée par la firme italienne Finmechanica. Rebaptisée Quadrics, cette compagnie produit aujourd'hui la « Rolls Royce » des réseaux. En France, et après une longue traversée du désert, Bull réapparaît sur le devant de la scène avec la machine Tera-10.

Du fait de cette quasi-inexistence de tissu industriel, et en l'absence de toute stratégie, les pays européens appliquent en matière de calcul intensif une politique dite de « centre de coûts » [1] : l'informatique n'est plus qu'un simple outil au service de certaines disciplines. Chacune investit sur ses fonds de recherche. L'objectif est donc d'obtenir les machines au moindre coût. Cela a des effets pervers : les utilisateurs s'autocensurent et s'en remettent aux constructeurs américains ou japonais pour définir ce que sera l'informatique de demain. Ce qui aggrave encore le retard de l'Europe.



CEA/DAM

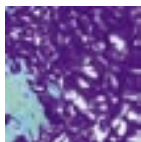
Jean Gonnord

est chef du projet simulation numérique et informatique au CEA/DAM.

[1] Enquête sur les frontières de la simulation numérique, Académie des Technologies, Rapport du groupe de travail « Simulation », mai 2005 www.irisa.fr/orap/Publications/AcaTec-rapport_Simulation.pdf

À l'opposé, la politique informatique des États-Unis et du Japon, que vous qualifiez « d'opportunité stratégique » [1], implique un soutien massif aux industriels du secteur...

J. G. Les Américains briguent une chose : la suprématie mondiale dans ce domaine qu'ils considèrent comme stratégique. Et ils s'en donnent les moyens, notamment en profitant au mieux des synergies entre la défense, l'industrie et la recherche. Concrètement, la politique informatique est décidée au niveau du président lui-même, qui s'appuie sur les conclusions d'un rapport commis chaque année par le PITAC (President's Information Technology Advisory Committee). Elle est ensuite



ENJEUX ENTRETIEN

▷ mise en œuvre par le Département de l'énergie (DoE*), le Département de la défense (DoD) et les grandes agences de programme: la National Science Foundation (NSF) et la Defense Advanced Research Project Agency (DARPA). Ces dernières financent les laboratoires, tant civils que militaires, les universités et les grands centres de calcul afin qu'ils s'équipent en très grosses machines. Mais, point important, les appels d'offres ne sont accessibles qu'aux seuls industriels américains!

Les Japonais ont une politique sensiblement identique. Mais leur objectif applicatif principal est la sécurité civile.

Pouvez-vous nous donner une idée des budgets américains ?

J. G. Ils sont considérables. Pour le seul programme ASCI (Advanced Scientific Computing Initiative), le DoE investit depuis 1995 quelque 100 millions de dollars par an dans ses trois grands laboratoires militaires (Lawrence Livermore, Los Alamos et Sandia) pour une machine dont l'objectif est uniquement de fournir de la puissance et 120 millions de dollars tous les trois ans pour en développer une autre à la limite des capacités technologiques! Et ce n'est pas tout, l'ASCI finance également un programme de recherche et développement (R&D) « Path Forward » s'adressant aux constructeurs américains afin qu'ils se focalisent sur le calcul haute performance (50 millions de dollars par an), et un autre de soutien aux universités (Alliance) pour les recherches en amont (8 millions de dollars par an). Et cet exemple n'est que la partie émergée de l'iceberg. Historiquement, le grand pourvoyeur de fonds pour la recherche et le développement (R&D) dans le domaine de l'industrie informatique américaine a toujours été la National Security Agency (NSA) et cela n'a bien entendu pas changé depuis le 11-Septembre...

*Le DoE (Département de l'énergie) pilote la dissuasion nucléaire aux États-Unis.

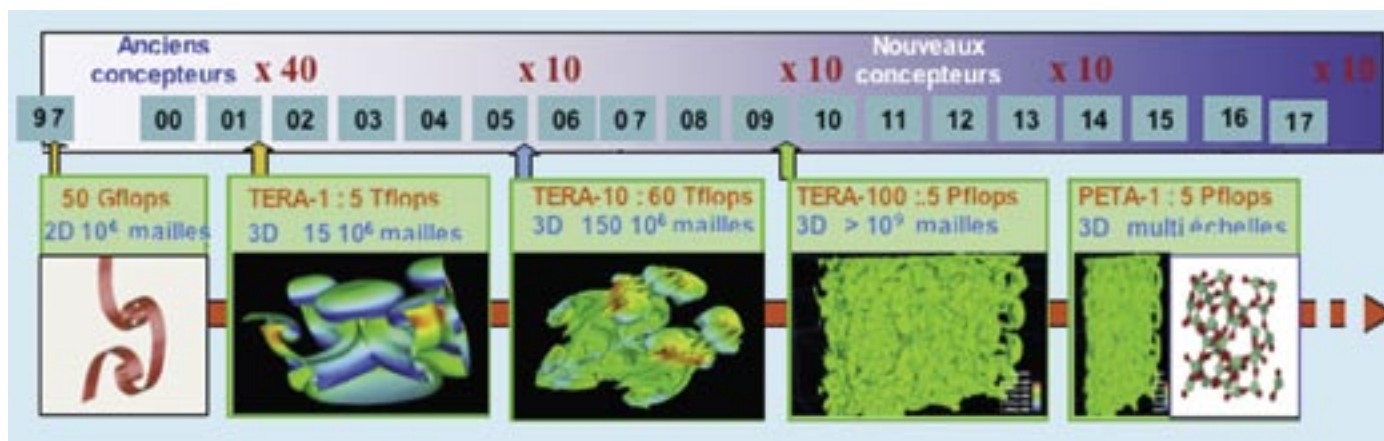
*Un pétaflop: un million de milliards d'opérations par seconde (10^{15} opérations/s).

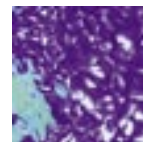
L'OBJECTIF DU PROJET TERA est de disposer, à l'horizon 2017, d'une puissance informatique de 10 pétaflops soutenus.

Il y a deux ans, la Chine a créé la surprise en alignant une machine à la 13^e place du Top 500 des supercalculateurs...

J. G. L'irruption de ce pays dans le domaine des supercalculateurs est quelque chose de fabuleux. La politique suivie est proche de celle des États-Unis, mais l'objectif affiché du gouvernement chinois est plus modeste, du moins pour l'instant: l'indépendance et donc la maîtrise de l'ensemble de la chaîne technologique, de la fabrication du processeur jusqu'à l'intégration finale de systèmes. C'est dans cette perspective que le ministère de la Science et de la Technologie a lancé dès 1986 un ambitieux programme de R&D avec des objectifs à la fois civils et militaires, planifiés par périodes de cinq ans. Neuf grands centres de calcul ont été créés. Depuis deux ans, la puissance de calcul installée dépasse celle de la France! Et leur vitesse de progression est impressionnante. Si les premiers gros supercalculateurs chinois ont été achetés aux États-Unis, la seconde génération a été développée et intégrée en Chine avec des processeurs américains. La prochaine sera vraisemblablement 100% chinoise. Deux projets ont en effet été lancés pour la fabrication de microprocesseurs: l'un, « Godson », pour le calcul scientifique, l'autre, « ArkII », pour le grand public. Récemment, les Chinois ont d'ailleurs annoncé qu'ils entraient dans la course au pétaflop*... Comme aux États-Unis, le modèle de développement est fondé sur une synergie défense-industrie-recherche. L'Europe et la France feraient bien de s'en inspirer. Seules une politique d'opportunité stratégique et la mise en place d'un grand programme de R&D européen permettront de combler notre retard.

C'est justement ce que vous avez fait avec le projet Tera. Quand et comment ce projet a-t-il germé ?





TERA-10, construite par Bull, signe le grand retour de la France dans le monde du calcul haute performance.

©CEA/DAM

*La puissance réelle de l'ordinateur est exprimée en **téraflops soutenus**.

Elle correspond au produit de la puissance théorique par le rendement, c'est-à-dire le nombre d'opérations qu'un code de calcul est capable d'utiliser. Sur une machine parallèle, ces rendements sont de l'ordre de 20 % à 25 %.

« C'est pour partager avec la communauté scientifique et l'industrie les retombées du programme Défense que nous avons créé Ter@tec »

▷ **J. G.** En 1996, après que le Président de la République eut signé le traité interdisant tout essai nucléaire, le CEA a mis en place, au sein de sa Direction des applications militaires, le programme Simulation (Voir l'interview de Daniel Verwaerde, page 82). L'objectif? Garantir la sûreté et la fiabilité des armes de dissuasion. Ce programme comprend deux volets. L'un est centré sur l'expérimentation (avec l'appareil de radiographie éclair AIRIX et le Laser Mégajoule, en construction à Bordeaux), l'autre sur la simulation numérique. Il s'agit de reproduire, par le calcul, les différentes étapes du fonctionnement d'une arme. Une centaine d'ingénieurs informaticiens et numériciens travaillent sur ce simulateur depuis près de dix ans. Ils écrivent des logiciels c'est-à-dire des millions de lignes de code développées à partir de « modèles » établis par autant de physiciens et validées *in fine* grâce aux expériences passées. Ce travail colossal se poursuit encore aujourd'hui et des modèles de plus en plus sophistiqués sont introduits dans le simulateur.

Pour faire « tourner » ce simulateur en un temps raisonnable (quelques semaines au maximum), il nous fallait un ordinateur autrement plus puissant que celui dont nous disposions à l'époque. La puissance nécessaire en 2010, lorsque la construction du simulateur s'achèvera, a été évaluée à 100 téraflops soutenus*, soit cent mille milliards d'opérations utiles par seconde! Or notre Cray T90 ne nous offrait à l'époque que 20 gigaflops* (vingt milliards d'opérations par secondes)! Notons au passage que ce

préfixe « tera » (pour 10^{12}), qui signifie « monstre » en grec, a donné son nom au projet.

Cela posait-il un problème particulier aux constructeurs ?

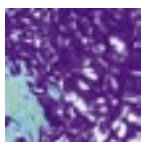
J. G. Cette puissance de 100 téraflops soutenus en 2010 était bien au-dessus de ce qu'ils pouvaient offrir en vertu de la loi de Moore. En gros, cette loi prédit que la puissance des ordinateurs double tous les dix-huit mois à un coût constant. Ce qui nous donnait tout au plus, en extrapolant la puissance des très puissants ordinateurs Cray dont nous disposions, 2 à 5 téraflops soutenus en 2010. Autant dire que ce gain de puissance, qui impliquait un changement fondamental des architectures de machine, nécessitait des sauts scientifiques et technologiques considérables... Seule la mise en parallèle d'un grand nombre de processeurs permettait de résoudre ce problème. Mais pour des raisons de coût, ces processeurs devaient être les moins chers possibles, donc ceux du marché de masse.

Nous avons très vite pris conscience de la nécessité de pousser les constructeurs au-delà de leurs limites. Mais encore fallait-il être capable de discuter d'égal à égal avec eux pour pouvoir influencer sur leurs choix. En 1997, nous avons donc constitué, sur le site du CEA/DAM-Île-de-France, à Bruyères-le-Châtel, une équipe d'experts de très haut niveau. Une cinquantaine d'ingénieurs pouvaient ainsi interagir avec les constructeurs afin de les aider à définir une architecture répondant à nos besoins. Un calendrier fut établi : il s'agissait d'atteindre 1 téraflopp soutenu en 2001 (opération Tera-1), 10 téraflops soutenus en 2005 (Tera-10) et les 100 téraflops soutenus en 2009. Tout cela avec un budget contraint. Aujourd'hui, nous prévoyons de porter cette capacité jusqu'à 10 pétaflops soutenus en 2017.

Concrètement, vous avez lancé un appel d'offres en 1999 pour une machine de 1 téraflopp soutenu. Le cahier des charges était extrêmement complexe, avec plus de 250 critères et pénalités associées! Quelle a été la réponse des constructeurs ?

J. G. La plupart jugeaient cela infaisable... Deux ont répondu du mieux qu'ils pouvaient : IBM et Compaq (en fait, Digital qui venait d'être racheté par Compaq). Ce dernier l'a emporté. Mais, compte tenu de l'évolution très rapide des technologies, la machine qu'ils nous ont livrée fin 2001 n'était pas exactement celle que nous avions commandée! Elle nous a cependant permis de répondre à nos objectifs et d'atteindre 1,37 téraflopp soutenu. Un très beau succès... ▷

*Un gigaflop : un milliard d'opérations par seconde (10⁹ opérations/s).



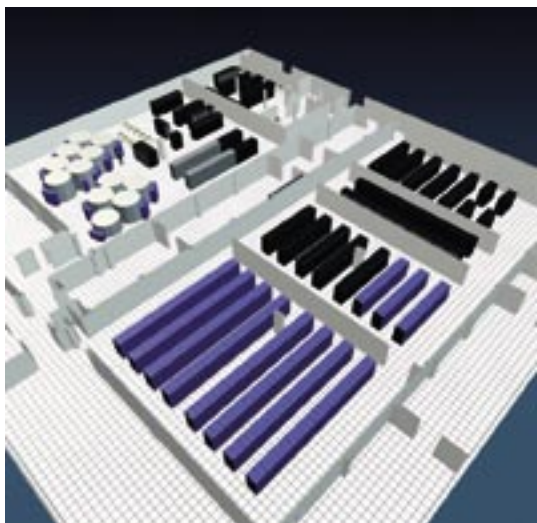
ENJEUX ENTRETIEN

Quelles conclusions avez-vous tirées de cette première expérience ?

J. G. Tout d'abord, qu'il était effectivement possible de dépasser la loi de Moore, au corps défendant des constructeurs et ce, pour le bénéfice de tous les partenaires. La communauté scientifique a elle aussi été gagnante. Cette machine n'aurait sans doute pas existé sans nous ou, du moins, pas si tôt. De notre côté, elle nous a permis, non seulement d'assurer nos besoins sur près de cinq années et de tester le simulateur en cours de développement, mais aussi de tirer quelques leçons pour préparer Tera-10.

Lesquelles, par exemple ?

J. G. Lorsque nous avons commandé Tera-1, la puissance était notre principale obsession. Mais une fois l'objectif atteint, on s'est rendu compte que la gestion des données était au moins aussi importante. Je ne donnerai que quelques chiffres : chaque jour, cette machine produit plus de 3 téraoctets de données, c'est-à-dire de l'ordre d'un pétaoctet par an. Or aucune machine n'est à l'abri d'une panne. Comme on ne peut pas se permettre de perdre les résultats d'un calcul qui a duré plusieurs semaines sur des milliers de processeurs, il faut faire des sauvegardes très régulières. Malheureusement, ces opérations sont gourmandes en temps de calcul. On estime que sur une heure, la machine ne doit pas passer plus de cinq minutes à sauvegarder et à vider sa mémoire, ce qui dimensionne le système d'entrées-sorties. Mais cela s'est révélé beaucoup plus complexe que prévu. Nous avons sous-estimé les capacités d'entrées-sorties de la machine. En outre, du fait de l'architecture, les données doivent être écrites en parallèle, en gardant la possibilité de les recharger, et pas forcément sur les mêmes



« Tera-10 n'aurait sans doute pas existé sans nous ou, du moins, pas si tôt. »

[2] V. Croixmarie *et al.*,
J. of structural biology,
150(3), 284, 2005

processeurs. Tout cela posait des problèmes de synchronisation lorsque la machine a fonctionné à pleine charge. Il a fallu plusieurs mois à nos équipes et à celles du constructeur pour contourner ce type de problèmes...

Les choses n'auraient-elles pas été plus simples si vous n'aviez pas commandé une machine sur papier ?

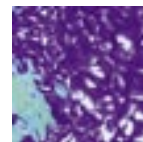
J. G. Bien évidemment. En informatique, deux ans valent une éternité. En 1999, les constructeurs ont répondu à notre appel d'offres avec des technologies qui n'existaient que sur le papier. Il leur fallait donc du temps pour les développer et les mettre en œuvre. La leçon était claire : le délai entre la commande et la livraison doit être réduit au minimum. Surtout, il faut imposer avant la signature des démonstrations technologiques prouvant l'existence des éléments essentiels de la machine.

Dès le début de l'opération Tera-1, vous avez offert du temps de calcul et vos compétences aux chercheurs et aux industriels. Quelles étaient vos motivations ?

J. G. Leur permettre d'accéder à des moyens dont ils ne disposaient pas et, ce faisant, asseoir la crédibilité de notre démarche. La simulation numérique est généralement validée par une ou plusieurs expériences. Mais avec l'arrêt des essais nucléaires, nous nous trouvions dans une situation inédite : il n'y aurait plus d'expérience globale possible. Dès lors, comment assurer la crédibilité de notre démarche vis-à-vis du monde extérieur sans pour autant divulguer, pour des raisons évidentes de sécurité, le détail de nos méthodes ? C'est pour démontrer que nous maîtrisons la technologie et que nous disposons, dans ce domaine, des meilleures équipes et des moyens informatiques les plus puissants, que nous avons démarré une politique d'ouverture. L'idée était simple : tout grand challenge résolu avec notre aide, quel que soit le domaine, renforcerait la crédibilité de nos équipes et de nos méthodes. C'est ainsi que nous avons fait participer nos experts et offert notre puissance de calcul pour le séquençage de génomes ou pour le calcul du déploiement du prion [2] [fig. 1].

LE PROJET TERA occupe quelque 2000 m². Sur ce plan, les alignements de processeurs se retrouvent au premier plan, la salle de gestion des données au second.

© CEA/DAM



Cette politique d'ouverture s'est traduite par la création du Complexe de calcul scientifique du CEA. Avec sa machine de 60 téraflops, c'est le plus grand centre de calcul d'Europe. Comment fonctionne-t-il ?

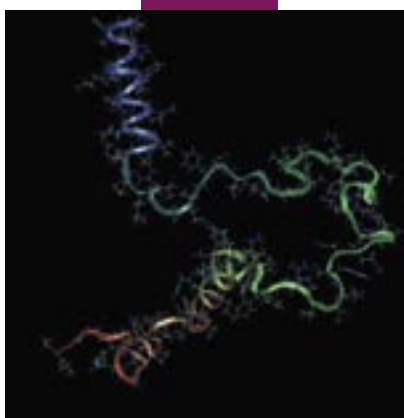
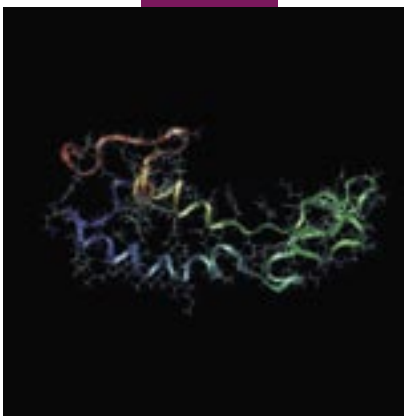
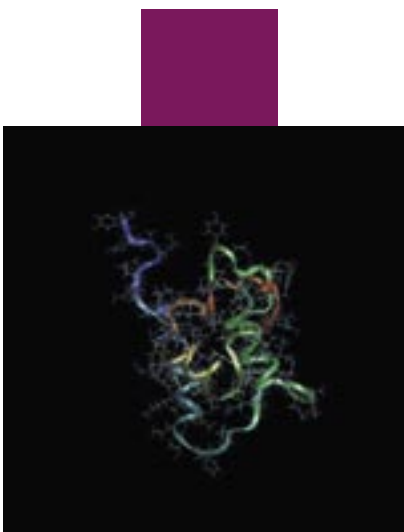
J. G. En créant ce complexe, le CEA a voulu profiter au maximum de la synergie de ses programmes défense -industrie - recherche et des retombées du programme simulation numérique. Près de 150 ingénieurs et chercheurs du CEA/DAM y travaillent actuellement. Ce complexe est en fait composé du Centre de calcul défense, avec la machine Tera, du Centre de calcul recherche et technologie (CCRT), qui lui, est ouvert à tous, et enfin, d'un centre d'expérimentation dans lequel nos experts travaillent avec des universitaires et des industriels. La gouvernance de l'ensemble est assurée d'une part par la Défense (pour le programme simulation numérique), d'autre part, en ce qui concerne le CCRT, par un comité où chaque partenaire dispose de parts proportionnelles à son investissement. À ce jour, le CEA y a un peu plus de la moitié des parts. L'autre moitié appartient à de grands industriels (EDF, Snecma...) ou des laboratoires comme l'Onera par exemple. Avec l'arrivée de Tera-10, la puissance globale du complexe atteint les 70 téraflops (60 pour la Défense, 8 pour le CCRT et 2 pour l'Expérimentation). Elle dépassera les 100 téraflops en 2006 avec la commande de la nouvelle machine du CCRT et ses 40 téraflops.

Il y a presque deux ans, une technologie - Ter@tec - a également vu le jour sur le site de DAM-Île-de-France à Bruyères-le-Châtel...

J. G. Le complexe de calcul scientifique du CEA est en effet le noyau d'une opération plus vaste : Ter@tec (lire l'article « Ter@tec : 2 ans et un brillant avenir », p. 53). L'objectif de cette technologie est de fédérer, autour du complexe de calcul scientifique, l'ensemble des acteurs de la simulation numérique : chercheurs, industriels, utilisateurs ou fournisseurs de technologies. Et aussi de partager avec la communauté scien-

FIG. 1 LE DÉPLOIEMENT DES ACIDES AMINÉS DU PRION A pu être déterminé grâce à la puissance de calcul de Tera-1. Un changement qui, dans l'encéphalopathie spongiforme, est à l'origine de la dégénérescence du tissu neuronal.

©CEA/DAM



tifique et l'industrie les retombées du programme Défense et, par là, de porter l'Europe au plus haut niveau en matière de calcul haute performance.

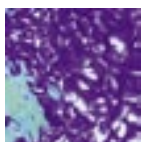
Cette collaboration a-t-elle déjà porté ses fruits ?

J. G. Bien sûr. Deux laboratoires associés ont été créés avec l'université de Versailles. L'École centrale de Paris et de grands industriels (Bull, Dassault, EDF, HP, Snecma) participent avec nous à la promotion de la simulation ou à la définition des machines de la prochaine génération. FAME est l'un des premiers projets issu de cette synergie défense-industrie-recherche (lire « Nom de code : FAME 2 », p. 54). Réunissant Bull, le CEA et l'université de Versailles, ce projet, soutenu par le ministère de l'Industrie, a permis de développer un serveur performant dédié au calcul scientifique. Il est commercialisé par Bull depuis 2002 sous le nom de NovaScale. Fort de ce succès, un second projet (TeraNova) a été mené en 2003-2004, cette fois-ci sans l'aide de l'État, avec l'université de Versailles et les sociétés Bull, Dassault et Quadrics. L'objectif était alors de réaliser une machine téraflopique.

Les retombées industrielles de ces opérations sont évidentes. Grâce à elles, Bull a pu développer un produit commercial extrêmement général pouvant être utilisé à la fois pour le marché de la gestion et celui du scientifique, mais surtout, des compétences qui le mettaient au niveau des plus grands industriels. Cela lui a permis de répondre à l'appel d'offres Tera-10.

Justement, venons-en au joyau du programme : la machine Tera-10. Quelles étaient les contraintes ?

J. G. Là encore, notre objectif principal – 10 téraflops soutenus – était très au-delà des prévisions de la loi de Moore. Comme pour Tera-1, l'architecture générale de la machine devait être de type « cluster de SMP » [système à mémoire partagée]. Mais nous avons trois contraintes supplémentaires. Tout d'abord, nous voulions une puissance soutenue très élevée à un coût global – y compris en ce qui concerne la puissance



dissipée et l'encombrement au sol – minimal. Cela a impliqué d'utiliser les premiers processeurs « dualcore » disponibles sur le marché. Ce qui nous a placé une fois de plus en limite de la technologie. Ensuite, nous souhaitions disposer de gros serveurs SMP et ce, pour des raisons techniques (existence de codes à faible degré de parallélisme et développement de nouveaux modèles multi-échelles). Un pari difficile pour les constructeurs ! Enfin, nous voulions des capacités d'entrées-sorties quinze à trente fois plus importantes avec bien entendu les logiciels capables de traiter de tels volumes avec une fiabilité maximum. C'est sur la base de ces directives que la maîtrise d'œuvre a rédigé un cahier des charges très complet, avec 278 critères dont 53 correspondaient à des mesures sur des *benchmarks* (repères) définis par nos experts. L'appel à candidature a été lancé en janvier 2004. Huit constructeurs ont manifesté leur intérêt. L'appel d'offres sur performances a suivi en mars.

Tera-10 est la machine européenne la plus puissante. Qui plus est, pour la première fois de l'histoire du calcul haute performance, elle a été fabriquée en Europe. Est-ce pour cette raison que vous avez choisi Bull ?

J. G. Bien sûr que non ! Je vous rappelle que cette machine est l'un des éléments essentiels d'un programme devant, *in fine*, garantir les armes de dissuasion françaises. Comment peut-on imaginer que le CEA/DAM, à qui incombe cette responsabilité, puisse faire un choix compromettant son programme pour de simples raisons économiques ou de prestige ?

Cinq grands constructeurs ont répondu à l'appel d'offres : Bull, Dell, IBM, HP et Linux Networks. Bull a fait la meilleure proposition. Il a été capable de nous proposer une machine homogène avec des nœuds à 16 processeurs dualcore, mais aussi une performance soutenue sur notre benchmark Tera d'au moins 12,5 téraflops. La machine de Bull avait aussi, et de très loin, le meilleur système d'entrées-sorties et la consommation électrique la plus raisonnable. Enfin, ce constructeur a proposé une solution essentiellement « open source » préservant pour l'avenir la liberté de choix du CEA.

Nous sommes évidemment très fiers qu'une entreprise française ait gagné ce challenge. Cela souligne la qualité de notre démarche d'ouverture via Ter@tec et les bénéfices que l'économie française peut reti-



CEA/DAM

rer d'une synergie défense, industrie, recherche... La victoire de Bull marque le grand retour de l'Europe dans le domaine du calcul haute performance et nous ne pouvons que nous en satisfaire.

Cette « success story » montre-t-elle la voie à suivre pour que la France revienne dans la course ?

J. G. Les conclusions du rapport d'Emmanuel Sartorius et de Michel Héon remis au ministre de la Recherche voici quelques mois [3], sont très claires : la mise en œuvre d'une vraie politique en matière d'informatique de grande puissance s'impose et nos méthodes – regroupement des moyens et synergie entre défense, industrie et recherche – leur semblent les plus appropriées... Les temps et les mentalités changent ! Depuis le début de l'année 2005, on note d'ailleurs quelques changements. Ainsi, l'Agence nationale pour la recherche a inclus une ligne « calcul intensif » dans son programme et lancé un appel à projets en juillet dernier. Près de cinquante projets ont été soumis en septembre dernier qui sont en cours d'évaluation. Autre signe : le pôle de compétitivité « System@tic », dont Ter@tec est l'une des pièces maîtresses, vient de lancer, avec le soutien du ministère de l'Industrie, un projet de développement d'ordinateur de nouvelle génération (lire « Nom de code : FAME 2 », p. 54). Certes, ces efforts sont sans commune mesure avec ceux entrepris aux États-Unis. Mais c'est un bon début.

Assiste-t-on à un mouvement identique au niveau européen ?

J. G. Oui. Après une année d'efforts et de persuasion, l'informatique de grande puissance va réapparaître dans les lignes budgétaires du 7^e PCRD* (2007-2013) [4], qui devrait inclure un volet industriel. Le projet phare de cette opération consisterait, s'il est accepté, à mettre en place trois ou quatre grands centres de calcul en Europe dont la vocation serait non pas de fournir du calcul à un thème donné, mais d'être en permanence dans le trio de tête du Top500. Cela permettrait sans doute la résolution de grands challenges numériques dans la majorité des disciplines scientifiques et entraîner d'importants sauts technologiques. Le complexe de calcul scientifique du CEA/DAM-Île-de-France est naturellement candidat pour recevoir et animer une telle structure. Mais une chose est claire : tous ces projets n'auront de sens que s'ils s'appuient, comme aux États-Unis, au Japon et maintenant en Chine, sur une réelle volonté du pays et un solide tissu industriel local. ■

Propos recueillis par Fabienne Lemarchand

[3] E. Sartorius et M. Héon, « La Politique française dans le domaine du calcul scientifique », mars 2005. www.recherche.gouv.fr/rapport/calcul/2005-017.pdf

[4] http://europa.eu.int/comm/research/future/index_en.cfm

* PCRD : Programme Cadre européen pour des actions de recherche, de développement technologique et de démonstration.



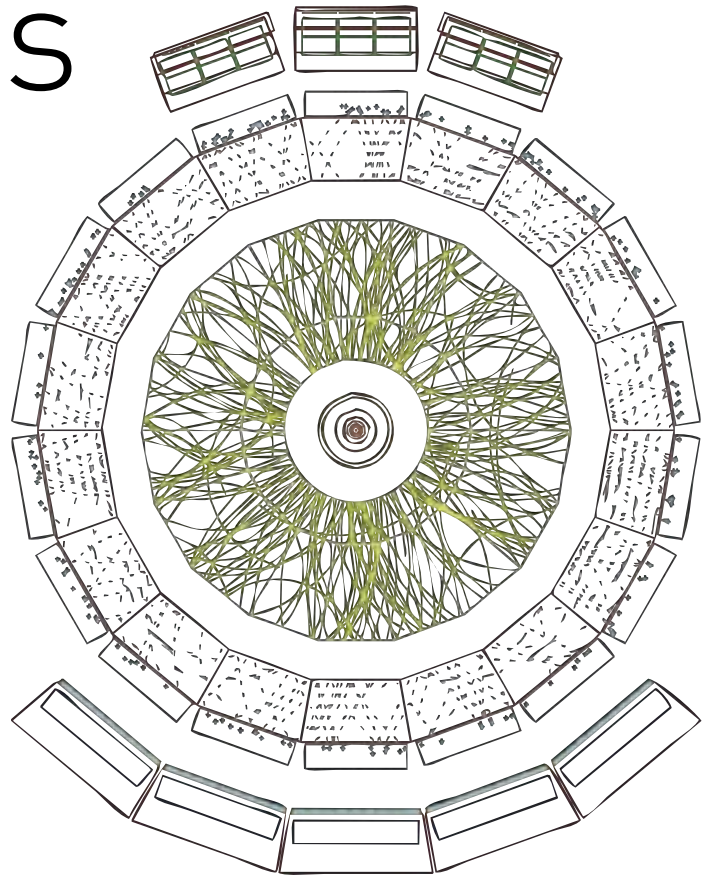
Un flot ininterrompu de données

La puissance des ordinateurs ne cesse de croître, et avec elle, le volume de données générées. Une flambée à laquelle les concepteurs informatiques doivent faire face.

Bernard Ourghanlian est directeur technique chez Microsoft France.

Voici un millier d'années, la science était essentiellement empirique. Quelque cinquante ans plus tard, elle se dotait d'une composante théorique. Et depuis une cinquantaine d'années, une troisième branche a fait son apparition que l'on peut qualifier de « calculatoire ». Longtemps, cette science du calcul a porté essentiellement sur la simulation et a pris naissance dans notre incapacité à trouver des solutions formelles à des modèles mathématiques complexes. À ce stade, elle a largement bénéficié des ordinateurs et de leur capacité à fournir des « solutions », même approchées.

Toutefois, ces toutes dernières années, le calcul scientifique a dû évoluer pour embrasser ce que les informaticiens appellent la « gestion de l'information ». Il faut dire que les supercalculateurs fournissent des données de plus en plus envahissantes. Et ce, pour quatre raisons qui ont en outre la fâcheuse tendance de se renforcer mutuellement. Tout d'abord, en vertu de la fameuse loi de Moore, le volume des données en provenance des nouveaux instruments scientifiques dou-



SIMULATION d'une collision entre deux noyaux de plomb dans le détecteur ALICE. © CERN GENÈVE

ble en gros tous les dix-huit mois. Deuxièmement, les données issues des simulations ne cessent de croître, toujours grâce à la loi de Moore. Ensuite, il est aujourd'hui possible de stocker des pétaoctets (10^{12}) de données en ligne à un coût acceptable: on peut par exemple acheter un disque d'un téraoctet (10^9) pour moins de 1 000 euros! Enfin, avec l'Internet et les architectures de grilles, les données sont accessibles à tous. Elles sont donc facilement reprises et répliquées, décuplant leur volume.

Et la situation s'aggravera encore avec les prochaines générations de systèmes et d'instruments scien-

tifiques. Prenons le projet *BaBar*. Quelque six cents physiciens et ingénieurs de soixante-quinze instituts de dix pays collaborent autour de la recherche de nouvelles particules (méson-B) et de l'antimatière. Pas moins de un pétaoctet d'événements sont d'ores et déjà traités chaque jour. Quant au projet LHC (Large Hadron Collider) du CERN, à Genève, il générera plusieurs millions de milliards d'opérations et en stockera une quinzaine de pétaoctets par an.

Certes, SETI@home (recherche d'une vie extraterrestre) et autres projets du même genre ont montré que l'on pouvait se contenter de

L'essentiel de ce texte s'inspire très largement de la lettre *Petascale Computational Systems: Balanced Cyber Infrastructure in a Data-Centric World* [1], qui vient d'être envoyée au directeur de la cyber-infrastructure de la NSF. Je tiens donc à en remercier ici ses auteurs.





CPU (pour Central Processor Unit). En Français, unité centrale de calcul. Plus connue sous le nom de processeur, c'est la partie de l'ordinateur responsable des calculs à effectuer.

Les entrées/sorties (ou ES) ne sont autres que les flux de données en provenance et à destination des disques durs, écrans graphiques, claviers, etc.

Format XML : « Extensible Markup Language » ou « langage de balisage extensible » : standard du World Wide Web Consortium qui sert de base pour créer des langages balisés spécialisés. En ce sens, il s'agit d'un « métalangage » permettant de définir un vocabulaire et une grammaire associée sur la base de règles formalisées.



LA NOUVELLE SALLE informatique du CERN. © CERN

faibles capacités d'entrées et de sorties, avec un rapport CPU*/ES* (capacité de traitement/capacités d'entrées-sorties) d'environ 100 000 instructions de calcul par octet d'entrées-sorties ou plus. Mais la plupart des tâches scientifiques nécessitent des capacités d'entrées-sorties plus équilibrées, avec des rapports CPU/ES très en dessous de 10 000/1.

Nous l'avons dit : les performances des systèmes croissent depuis plusieurs dizaines d'années selon la loi de Moore ; et cette évolution se poursuivra probablement avec l'avènement des processeurs « multicœurs », même si ces derniers nécessitent d'améliorer nos techniques de programmation en parallèle (lire « Sur la route des pétaflops », p. 60). Dans le même temps, la quantité de données (expérimentales et simulées) a, dans la plupart des disciplines scientifiques, crû plus vite encore. En résumé, les problèmes calculatoires deviennent de plus en plus des problèmes de données. Comment les constructeurs y font-ils face ?

Il y a une quarantaine d'années, l'informaticien américain Gene Amdahl a édicté de nombreuses règles empiriques destinées à l'élaboration des architectures d'ordinateurs et qui, de façon surprenante, sont toujours appliquées de nos jours par les concepteurs de systè-

mes informatiques (lire l'encadré « Les lois d'Amdahl » ci-contre). En outre, ces derniers allouent typiquement un budget à peu près comparable pour la mémoire vive et pour le stockage de plus long terme (disques, bandes...). Or celui-ci coûte

Les problèmes calculatoires deviennent des problèmes de données

environ cent fois moins que la mémoire vive.

Bien sûr, ces chiffres de bande passante et de stockage de masse sont intimidants : il ne faut pas moins d'un million de disques pour supporter les besoins en entrées-sorties d'un processeur capable d'effectuer un million de milliards d'opérations par seconde ! Google, Yahoo ! et MSN Search sont de tels systèmes distribués. Ils ont des dizaines de milliers de nœuds de calcul (approximativement l'équivalent d'un million de milliards d'opérations) et environ 100 000 disques attachés localement à chacun des nœuds de calcul pour fournir la bande passante appropriée. Peu courants, ces systèmes sont néanmoins utilisés quotidiennement.

Pour être exploitables, les bases de données dans lesquelles sont stockées ces informations requièrent de pouvoir traiter les informations au niveau sémantique [1], et pas seulement sous la forme d'une collection d'octets. Ainsi, les données doivent être complétées par des métadonnées stockées sous un schéma avec un vocabulaire défini puis indexées et organisées pour effectuer rapidement et efficacement des recherches temporelles, spatiales et associatives. Rappelons que les métadonnées - littéralement « des données sur les données » - constituent un ensemble structuré d'informations servant à décrire une donnée afin de lui restituer son sens, son contexte, etc. À l'avenir, ces bases de données seront un composant essentiel des centres de calcul et requerront très certainement des investissements logiciels substantiels.

La localisation des données est un autre point à prendre en considération. Déplacer un octet de données vers un moyen de traitement distant (l'Internet ou un CPU « libre ») a un coût [2]. Cette opération n'est intéressante que s'il y a plus de 100 000 cycles de calcul CPU* par octet de données à consommer pour y effectuer l'analyse. Pour des traitements moins gourmands, il est préférable de co-localiser le calcul et les données. Car déplacer les données sur l'Internet n'est « gratuit » que si le calcul représente plus que 10^5 instructions par octet. Ce qui est rare pour une tâche d'analyse de données. Cela pose un problème logiciel substantiel : l'actuel intergiciel - c'est-à-dire l'ensemble des couches réseau et services logiciels permettant le dialogue entre les différents composants d'une application distribuée - utilisé dans les environnements de la grille présuppose bien souvent que le déplacement des données est gratuit. Or l'expérience prouve que ce n'est pas le cas aujourd'hui et qu'il y a peu de chance que cela le soit dans le futur.



La tendance est d'installer, au plus près des grands instruments, des centres de gestion de données

Le transfert de données du CERN à Pasadena a été réalisé à la vitesse de 1 gigaoctet par seconde. Mais son coût élevé fait qu'il ne peut être renouvelé quotidiennement.

La tendance actuelle est d'installer autour des grands instruments en cours de construction de centres scientifiques capables de « nettoyer » et de « servir » les données. Les initiatives telles que le *World-Wide Telescope*, *GenBack* ou *BaBar* préfigurent la situation de demain : des scientifiques recueillent les données et gèrent les archives tandis que d'autres explorent ces dernières afin d'en extraire leur substantifique moelle.

Puisque la collecte des données et leur analyse sont maintenant séparées, le recours aux métadonnées est indispensable. Elles seules permettent de décrire les données collectées en des termes standards com-

préhensibles par les programmes prévus à cet effet. Dans une telle perspective, et compte tenu du fait que les systèmes de base de données savent traiter à la fois les données structurées sous la forme de tables et celles, non structurées, que l'on trouve par exemple dans des documents au format XML*, il devient possible d'utiliser les systèmes de gestion et de traitement habituels propres aux bases de données. Ceux-ci ont l'énorme avantage de savoir paralléliser, indexer et analyser de très grands ensembles de données. Il semble aujourd'hui acquis que les possibilités récentes d'extension des bases de données pour les rapprocher des langages de programmation permettront la mise en œuvre d'une telle approche [3].

Trois avancées technologiques seront cruciales pour l'analyse scien-

tifique de tels ensembles. *Primo*, l'utilisation massive des métadonnées pour faciliter la compréhension des données par les scientifiques et les programmes informatiques. *Secundo*, la disponibilité d'outils puissants d'analyse afin que les chercheurs comprennent et visualisent les réponses à leurs questions. *Tertio*, des accès parallèles aux données supportés par de nouveaux mécanismes d'indexation et de nouveaux algorithmes. L'objectif ? Explorer de manière interactive plusieurs péta – octets de données.

Encore faudra-t-il disposer de grands centres de calcul où les données seront nettoyées et mises à disposition de la communauté scientifique. Mais dans la mesure où le flot de données sera de plus en plus important et que la bande passante en entrées-sorties ne pourra s'accroître dans les mêmes proportions, il faudra très certainement exécuter les calculs au plus près de l'endroit où se trouvent déjà les données, afin d'assurer le niveau de performance attendu. ■

[1] G. Bell et al., «Petascale Computational Systems: Balanced Cyber Infrastructure in a Data-Centric World», Letter to NSF Cyberinfrastructure Directorate, <http://research.microsoft.com/~gray/papers/Petascale%20computational%20systems.pdf>

[2] J. Gray et al., «Scientific Data Management in the Coming Decade», Microsoft Technical Report - MSR-TR-2005-10, Jan. 2005, <ftp://ftp.research.microsoft.com/pub/tr/tr-2005-10.pdf>

[3] A. Maria et al., «When Database Systems Meet the Grid», Microsoft Technical Report - MSR-TR-2004-81, August 2004. Proceedings of ACM CIDR 2005, Asilomar, CA, Jan 2005, <ftp://ftp.research.microsoft.com/pub/tr/tr-2004-81.pdf>

B.O.

Les lois d'Amdahl

Elles sont au nombre de quatre.

• **Loi du parallélisme** : Si un calcul présente une portion de code exécutable en série S et une composante parallèle P, alors le gain en performance induit par l'utilisation du parallélisme est de $S/(S + P)$.

• **Loi des systèmes équilibrés** : Un système a besoin d'un bit d'entrées-sorties par instruction par seconde : utiliser environ 10 instructions crée un besoin d'un octet d'entrées-sorties par seconde.

• **Loi de la mémoire** : $\alpha = 1$: Le rapport MB/

MIPS (mégaoctets/million d'instructions par seconde) (appelé alpha, α), dans un système équilibré est 1.

• **Loi des entrées-sorties** : Les programmes effectuent une entrée-sortie toutes les 50 000 instructions.

La loi d'Amdahl des systèmes équilibrés appliquée en fonction de la puissance des systèmes

Nombre d'opérations	Nombre d'opérations	Mémoire Ram	E/S disque en octet/s	Nb de disques pour cette bande passante à 100 MO/s/disque	Capacité du disque en octets (100 X RAM)	Nb de disques pour cette capacité à raison de 1 TO/disque
giga	10 ⁹	giga-octet	10 ⁸	1	10 ¹¹	1
téra	10 ¹²	giga-octet	10 ¹¹	1 000	10 ¹⁴	100
péta	10 ¹⁵	giga-octet	10 ¹⁴	1 000 000	10 ¹⁷	100 000
exa	10 ¹⁸	giga-octet	10 ¹⁷	1 000 000 000	10 ²⁰	100 000 000



60 mille milliards

Jean Gonnord,
chef du projet
simulation
numérique
et informatique
au CEA/DAM
Ile de France

Pierre Leca,
chef du
département
sciences de la
simulation et de
l'information au
CEA-DAM Ile de
France

François Robin,
adjoint au chef
du département
sciences
de la simulation
et de l'information
au CEA-DAM
Ile de France
et responsable
opérationnel
du projet TERA-10.



© CEA

Avec plus de 60 mille milliards d'opérations par seconde, Tera-10 sera le plus puissant ordinateur d'Europe. Portrait du tout nouveau supercalculateur construit par Bull pour la direction des applications militaires du commissariat à l'énergie atomique.

Depuis 1998, date de la ratification par le Parlement du Traité d'interdiction complète des essais nucléaires, les nouvelles armes nucléaires françaises ne sont plus testées. Celles-ci évoluent pourtant... Pour s'assurer de leur pertinence et de leur sécurité, la simulation numérique a pris le relais des essais. Les modèles prédictifs développés par les chercheurs de la direction des applications militaires (DAM) du CEA sont fondés sur des équations non linéaires dont la résolution passe par le calcul itératif sur des mailles, dont la finesse conditionne la fiabilité des prédictions. En d'autres termes, ces modèles nécessitent de puissants ordinateurs. Les besoins en puissance de calcul, poussés également par l'amé-

lioration des modèles, croissent à une vitesse vertigineuse: en gros, d'un facteur dix tous les quatre ans. Cette cadence soutenue a conduit à installer un nouveau supercalculateur tous les quatre ans. Tera-1, installé par HP fin 2001, va ainsi laisser la place, d'ici la fin 2005, à Tera-10. Cette machine, construite par Bull, devrait se hisser au niveau des premiers du Top 500 des supercalculateurs mondiaux.

Vectorielle ou parallèle ?

Comme son prédécesseur, Tera-10 adopte une architecture en grappe de multiprocesseurs à mémoire partagée, ou « cluster de SMP* ». Les processeurs, ces unités de base des calculateurs qui effectuent les calculs, sont en effet de deux types: scalaires et vectoriels. Les premiers exécutent

des opérations simples portant sur des scalaires, des grandeurs entièrement définies par leur mesure, l'addition de deux nombres par exemple. Les seconds réalisent des opérations portant sur des vecteurs, grandeurs qui ne peuvent être définies que par plusieurs entités mathématiques. L'addition de deux vecteurs de cinq cents éléments est l'une d'elles. Les processeurs vectoriels sont particulièrement adaptés aux calculs réguliers, très fréquents en simulation numérique: lors de l'exécution d'une opération de ce type, un processeur vectoriel peut fonctionner à une vitesse proche de sa performance maximale (dite de « crête* »). La même opération avec un processeur scalaire exige en revanche de nombreuses opérations indépendantes (par composante des vecteurs) et



d'opérations par seconde !



LES AUTEURS
devant une ran-
gée d'armoires
de la machine
Tera. © CEA

ce, à une vitesse bien inférieure à la vitesse crête. Trois architectures permettent de mettre en parallèle des processeurs : les supercalculateurs vectoriels, les grappes de processeurs scalaires à mémoire partagée et les grappes de PC (l'ordinateur que chacun possède chez soi). Peu coûteuse, cette dernière architecture est mal adaptée à des environnements où de nombreux utilisateurs font beaucoup de calculs très gourmands en puissance machine et en mémoire. Les supercalculateurs vectoriels s'avèrent très onéreux mais plus perfor-

mants (sur du calcul scientifique, ils affichent des rendements pouvant dépasser 50% des performances crêtes sur certaines applications scientifiques). Les grappes de processeurs scalaires, processeurs qui équipent les machines grand public, sont certes moins performantes (5% à 20% des performances de crêtes), mais nettement moins chères. Elles offrent ainsi, et de loin, le meilleur rapport prix-performance pour les applications du CEA/DAM.

C'est la raison pour laquelle, dès Tera-1, nous avons délaissé les

ordinateurs scientifiques classiques que nous utilisions jusque-là (des machines vectorielles CRAY) et opté pour une architecture de type cluster de SMP. L'unité de base du calculateur est constituée d'un ensemble de seize processeurs partageant une même mémoire. Ces unités (on parle de « nœuds ») sont assemblées en parallèle, chacune effectuant une partie du calcul. Les nœuds sont interconnectés et partagent un espace disque commun. Certains d'entre eux (les contrôleurs d'entrée/sortie) sont dédiés au pilo-

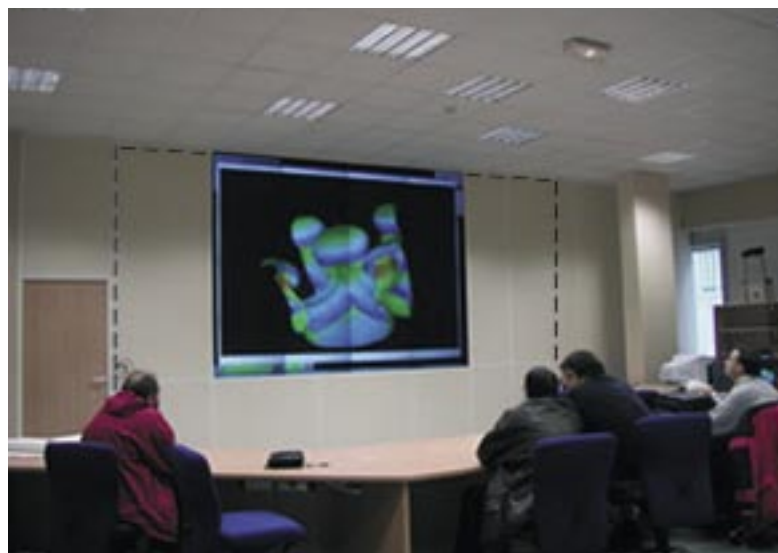
*SMP, shared memory multiprocessors

*Puissance de crête : puissance maximale que le calculateur peut fournir pendant un bref instant



AVEC TERA-10, un mur d'image de 5,5 sur 3 mètres (en pointillés) va remplacer l'écran actuel.

© CEA



tage de l'espace disque. Ils permettent aux nœuds de calcul d'accéder à l'espace disque pour y déposer les résultats de leurs calculs ou y prélever les conditions initiales nécessaires aux calculs suivants.

L'expérience du CEA sur Tera-1 a permis d'identifier les forces et les limites de ce type de supercalculateurs. La première question était de savoir si cette architecture proposait une puissance de calcul suffisante. C'est le cas, à condition de disposer d'applications bien parallélisées. Quand une application tourne sur des centaines voire des milliers de processeurs, elle doit en effet être découpée en autant de petites tranches de calcul qu'il y a de processeurs. Ces tranches communiquent régulièrement pour que les résultats aux limites se recoupent, ce qui mange du temps de calcul. Cet échange doit donc être optimisé. Par ailleurs, l'application est fragmentée de manière à ce que chaque calcul sur chaque tranche se déroule sur une durée quasi identique. Aucune tranche ne doit en effet freiner l'ensemble du calcul. Quand l'écriture des applications répond à ces critères de parallélisation, la performance des clusters de SMP est effectivement au rendez-vous.

Sa performance globale dépend également de la capacité de

remplissage du supercalculateur. Le calendrier des travaux à effectuer doit donc être correctement géré de manière à ce qu'un maximum de processeurs soient occupés en continu. Petits et gros travaux seront lancés simultanément. La constitution d'une file d'attente optimisée, qui nécessite de prendre en compte la priorité relative des calculs, a permis d'atteindre sur Tera-1 un rendement de production supérieur à 80%. Ce qui est assez exceptionnel pour de tels systèmes (en général inférieur ou égal à 70%).

Inévitables pannes

L'architecture adoptée pour les calculateurs Tera présente cependant des limites. La plus importante est sans doute la charge représentée par les entrées-sorties vers un espace disque partagé du « cluster de SMP » de stockage. Seconde limite de ces très grands systèmes : le nombre élevé d'éléments électroniques. Même s'ils sont individuellement très fiables, aucun n'est à l'abri d'une panne. Sur Tera-1, on en dénombre une vingtaine par mois. La plupart d'entre elles provoquent des retards de quelques heures seulement dans un calcul (qui dure souvent plusieurs centaines d'heures). Les pannes plus

importantes – provoquant l'indisponibilité de la machine – sont heureusement assez rares : moins d'une par trimestre.

Dans ces conditions, il était essentiel de mettre en œuvre des stratégies de tolérance aux pannes et ce, à tous les niveaux. Ainsi, sur Tera-1, les éléments matériels critiques (le réseau d'interconnexions de la machine, une partie de l'espace disque partagé), indispensables au fonctionnement de l'ensemble, sont doublés. Les autres ne le sont pas, pour des raisons de coût. En cas de panne, le logiciel peut alors être mis à contribution. Par exemple, si un nœud de calcul nous lâche, le calcul en cours d'exécution sur ce nœud est perdu. On le relance alors depuis un « point de reprise » écrit régulièrement par les applications qui tournent sur le calculateur. Bien évidemment, ce risque de panne nécessite la présence de systèmes de maintenance et de surveillance importants. Une quinzaine de personnes sont affectées à la surveillance au CEA, la maintenance étant assurée par le constructeur.

Testée sur Tera-1, l'architecture en « cluster de SMP » a été conservée sur Tera-10. Cela facilite grandement le transfert des logiciels de l'un à l'autre. Ceux-ci devront tout de même être optimisés, ce qui représente un lourd travail. Pour répondre à l'évolution actuelle et prévisible des codes de production et pour limiter le nombre de nœuds du cluster, le choix s'est porté sur une machine équipée de nœuds puissants (100 gigaflops/nœud), offrant une puissance soutenue* réelle dix fois supérieure à ceux de Tera-1.

Ainsi, si l'architecture générale reste identique, les composants et leur nombre changent. Les 544 « nœuds de calcul » de Tera-10 sont équipés de 16 processeurs soit, en comptant les nœuds dédiés aux entrées-sorties, quelque 9000 processeurs. Si les performances de calcul de

*Puissance soutenue : puissance moyenne que le calculateur fournit sur une application réelle.



Tera-10 sont dix fois supérieures à celles de Tera-1, l'espace disque, lui, a été multiplié par vingt, afin de répondre aux besoins extrêmes dans le domaine de la quantité de résultats produits par les logiciels de simulation.

Stockage sur bandes

Du côté des logiciels « système », qui assurent le fonctionnement de la machine, le choix s'est porté sur des logiciels libres : Linux pour le système d'exploitation des serveurs et Lustre pour le logiciel de système de fichiers global parallèle. Des composants auxquels Bull ajoute des éléments et des encapsulations spécifiques pour optimiser les calculs.

Le passage de Tera-1 à Tera-10 implique également de nombreuses adaptations des infrastructures informatiques. En effet, pour permettre aux utilisateurs de tirer parti de cette nouvelle puissance, le supercalculateur doit être mis en réseau, relié à des systèmes de stockage de données, à des logiciels assurant l'interface et permettant de visualiser les données, etc. C'est ainsi que Tera-10 disposera d'un mur d'image de 5,5

sur 3 mètres. Il permettra aux utilisateurs de visualiser ensemble les résultats des simulations.

Actuellement, la production journalière Tera-1 est de l'ordre de 3 à 5 téraoctets de données par jour. Avec Tera-10, ce volume augmentera de façon quasi proportionnelle avec l'évolution de la puissance de calcul. D'où la mise en place, en 2005 et 2006, d'équipements réseaux et de stockage de données plus performants. Les réseaux internes ont été consolidés, les systèmes de stockage de données revus à la hausse. Ce stockage est effectué à deux niveaux : les données de plus d'un an, qui ont le moins de chances d'être redemandées, sont gardées sur bandes magnétiques (le moyen le plus fiable et le plus économique pour stocker de gros volumes de données), conservées dans des silos. Les données les plus importantes sont dupliquées et placées dans des zones protégées. Pour le stockage à court terme, les bandes magnétiques seront remplacées par des disques durs magnétiques, dont le coût, porté par le marché du PC domestique, a énormément

Une fois Tera-10 en fonctionnement, Tera-1 sera démonté, libérant de l'espace pour Tera-100, qui verra le jour en 2009

baissé. Dans ce cadre, un espace disque de 4 pétaoctets pour le premier niveau de stockage de données sera installé pendant l'année 2006.

Pour accueillir Tera-1, un grand bâtiment (2 000 m² de salles machines) avait été construit. Il avait alors été conçu pour recevoir les différentes générations d'équipements de simulation (calculateurs et stockage) y compris Tera-100, prévue pour 2009. Toutefois, chaque nouvelle version nécessite quelques adaptations. Ainsi, pour passer de Tera-1, qui consomme environ 0,6 MW, à Tera-10 qui va en absorber trois fois plus, il a été nécessaire d'installer un nouveau groupe froid de 2 MW, trois onduleurs (qui fournissent du courant alternatif à partir de batteries en cas de coupure électrique), sans oublier une extension du réseau de détection/extinction incendie et le câblage de la salle machine ! Une fois les codes de simulation utilisés pour la conception et la garantie de Tera-10 validés, Tera-1 sera arrêté et démonté. Cette opération est prévue à la mi-2006. L'espace libéré accueillera en 2009 Tera-100.

Avec Tera-10, les physiciens et concepteurs du CEA/DAM disposeront d'une capacité de simulation dix fois supérieure à celle fournies par Tera-1. Mais l'installation, puis les six mois d'optimisation d'un système de cette taille restent un défi. Car, comme pour tout équipement exceptionnel, les technologies et les expériences humaines seront ici poussées à des niveaux rarement atteints. ■

J. G., P. L. et F. R.

TERA-10 consommant trois fois plus d'énergie que son prédécesseur, un groupe froid supplémentaire de 2 MW a été installé. © CEA

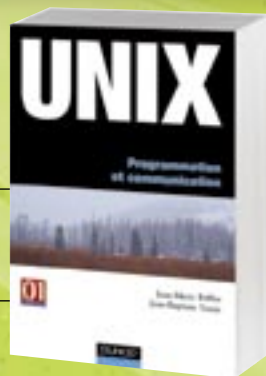




La RECHERCHE

Retrouvez d'autres ouvrages sur www.larecherche.fr

Une sélection d'ouvrages sur le calcul



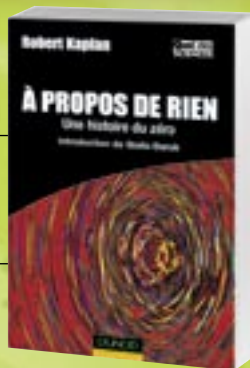
UNIX Programmation et communication

Trouvez les informations indispensables sur la programmation et la communication sous Unix. Global, cet ouvrage se veut ouvert sur l'ensemble des systèmes de la famille Unix : Linux, Solaris, FreeBSD, HPUX...

Jean Marie RIFFLET et Jean-Baptiste YUNÈS

175X250 • 800 pages • **49,90 €**

• ISBN : 2 10 007966 2



À PROPOS DE RIEN : une histoire du zéro

Si la "découverte" du zéro est attribuée aux Indiens aux environs de 600 ap. JC, le Zéro est seulement parvenu en Europe de l'Ouest au Moyen Age grâce aux commerçants arabes. Ce livre passionnant retrace 2000 ans d'évolution de la pensée humaine.

Robert KAPLAN

Introduction de Stella BARUK

155X240 • 256 pages • **22 €**

• ISBN : 2 10 048529 6



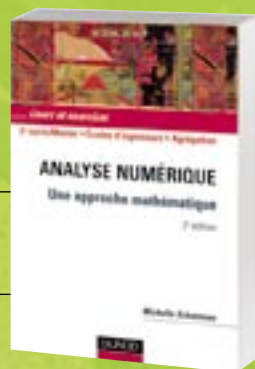
CES NOMBRES QUI N'EXISTENT PAS

Ce brillant essai vous fait vivre le voyage imaginaire qui a conduit les mathématiciens à envisager les racines carrées des nombres négatifs.

Barry MAZUR

155X240 • 240 pages • **25 €**

• ISBN : 2 10 008313 9



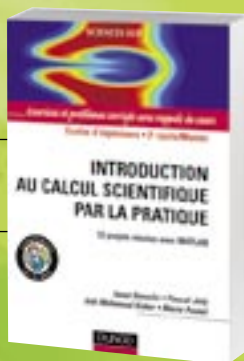
ANALYSE NUMÉRIQUE Une approche mathématique

Retrouvez les grandes méthodes d'analyse numérique élémentaire en tenant compte des aspects expérimentaux de cette science. Les démonstrations sont complètes et les exercices nombreux. De plus, Les algorithmes sont fournis en langage mathématique.

Michelle SCHATZMAN

• 170x240 • 480 pages • **43 €**

• ISBN : 2 10 048732 9



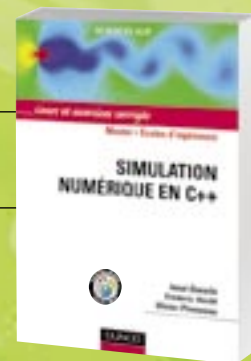
INTRODUCTION AU CALCUL SCIENTIFIQUE PAR LA PRATIQUE 12 projets résolus avec Matlab

Des études de cas dans différents domaines avec la même méthode appliquée : modélisation mathématique du problème, outils et techniques d'analyse numérique nécessaires à la résolution, algorithmes de calcul, programmation des algorithmes et mise en oeuvre dans l'environnement Matlab.

Ionut DANAILA, Pascal JOLY, Sidi MAHMOUD KABER et Marie POSTEL

• 170x240 • 304 pages • **30 €**

• ISBN : 2 10 048709 4



SIMULATION NUMÉRIQUE EN C++

La simulation numérique est devenue un outil de compréhension et de contrôle irremplaçable. Voici les techniques les plus avancées pour la simulation et la programmation en C++ de systèmes modélisés par des équations aux dérivées partielles (EDP).

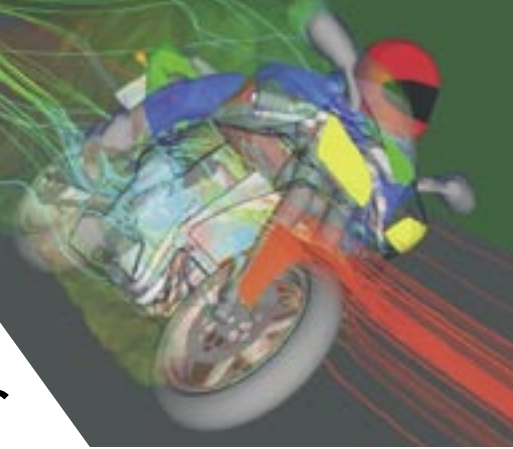
Ionut DANAILA, Frédéric HETCH et Olivier PIRONNEAU

• 170x240 • 352 pages • **35 €**

• ISBN : 2 10 006975 6

Catalogue complet sur
www.dunod.com

Ter@tec: deux ans et un brillant avenir



La jeune technopole, installée à quelques encablures d'Arpajon, rassemble des chercheurs, des ingénieurs et des industriels, tous spécialisés dans la simulation numérique haute performance. Un lieu unique en France...

Bruyères-le-Châtel, dans l'Essonne. Hors de l'enceinte sécurisée du centre de la direction des applications militaires du Commissariat à l'énergie atomique (DAM/CEA), deux bâtiments accueillent sur deux étages une soixantaine de personnes, issues du monde de la recherche, de l'informatique et de l'industrie. Toutes ont un point commun : elles travaillent dans le domaine du calcul intensif dans le cadre de la jeune technopole Ter@tec. « Un lieu unique en France », s'enthousiasme Christian Saguez, président de Ter@tec.

L'idée de Ter@tec est née, courant des années 2003-2004, d'une volonté des dirigeants du CEA/DAM. Leur objectif ? S'ouvrir sur l'extérieur et faire bénéficier la communauté scientifique et industrielle de leur expérience et de leurs moyens de calcul. « Nous avons d'abord créé le Centre de calcul, recherche et technologie, (CCRT). Très vite, nous avons développé d'étroites relations avec les universités et les grands groupes industriels (EDF, Snecma, Onera, etc.). Nous avons mis à leur disposition une machine de 2 téraflops. Et, petit à petit, grâce à ces collaborations, le centre de calcul a grossi », raconte Jean Gonnord, chef du projet simulation numérique et informatique au CEA/DAM. « Ensuite, il nous a semblé indispensable d'aller au-delà de la simple mise à disposition de grosses puissances de calcul », complète

Christophe Béhar, directeur du centre CEA/DAM-Île de France.

« Nous avons alors pensé regrouper autour d'un même objectif – en l'occurrence le calcul haute performance – des industriels, qu'ils soient utilisateurs ou issus du monde informatique, et des laboratoires. C'est ainsi qu'est né le projet Ter@tec. »

Depuis, des start-up (Distène, Numtech) et des constructeurs (HP, Bull) ont rejoint la technopole. « Aujourd'hui, nous comptons vingt partenaires*, se félicite Christian Saguez, et les demandes se multiplient tant de la part des chercheurs que des industriels. »

Car le calcul intensif est un enjeu stratégique. Il permet à la recher-

chiste. Dans bien des domaines, elle a remplacé l'expérimentation, devenue trop coûteuse et trop consommatrice de temps » précise Christophe Béhar. Et les constructeurs dans tout ça ? « Dans le monde de l'informatique, le calcul scientifique tire tout le reste. Ce sont des niches où le matériel est très sophistiqué. Et c'est ce matériel que l'on retrouve plus tard dans le grand public, dans l'informatique industrielle », explique Christian Saguez.

Pour l'heure, Ter@tec offre une puissance de calcul totale de 7 téraflops : aux 4 téraflops du CCRT s'ajoutent en effet les 2 téraflops de la machine Teranova de Bull et 1 téraflop pour HP.

Une technopole tournée vers l'avenir. « Avec l'arrivée de Tera 10, la DAM a décidé d'augmenter sa puissance de calcul qui passera alors à 50 téraflops. Par ailleurs, avec la communauté de communes de l'arpajonnais, nous

allons acheter les terrains environnants afin d'y construire d'ici 2009 quelque 8 000 m² de nouveaux bâtiments destinés à accueillir d'autres entreprises et à accompagner l'augmentation de puissance de calcul du CCRT », ajoute Christophe Béhar. Une extension d'autant plus nécessaire que Ter@tec est l'une des pièces maîtresses de l'un des six pôles de compétitivité d'envergure internationale baptisé System@tic. ■

Fabienne Lemarchand

* Parmi les partenaires de Ter@tec : Communication et Systèmes, Dassault aviation, Distène, École centrale de Paris, EDF, ENS Cachan, Institut Français du Pétrole, Institut national des Télécom d'Evry, Snecma moteurs, Turboméca, Université de Versailles -St -Quentin, Communauté de communes de l'arpajonnais et les villes de Bruyères-le-Châtel et d'Ollainville.

Les simulations remplacent souvent les expériences, devenues trop coûteuses

che de faire progresser les défis scientifiques et techniques dans des domaines aussi divers que l'électronique, l'aéronautique, la sûreté des réacteurs nucléaires, l'évolution du climat, la génomique ou encore le comportement des matériaux. Côté industrie, le calcul intensif est synonyme de compétitivité. « Les industriels n'ont plus de temps à perdre. Si bien qu'ils recourent massivement à la simulation pour concevoir et développer de nouveaux produits compé-



Nom de code :

Lancé l'an dernier avec Bull, FAME2 est l'un des premiers projets nés de la politique d'ouverture du CEA. Sa mission ? Développer de nouveaux serveurs adaptés au calcul intensif et au traitement de données multimédias.

Claude Camozzi est vice-président Stratégie des plate-formes du groupe BULL.

Pierre Leca est chef du département sciences de la simulation et de l'information au CEA/DAM Ile-de-France.

■ **Pôle System@tic Paris Région** : www.polelsc.org/pole_logiciel_et_systemes_complexes.php3

■ **Serveur NovaScale** : www.bull.com/fr/novascale/hpc.html

■ **Livre blanc de Bull, Les Nouveaux enjeux du calcul haute performance** : www.bull.com/download/whitepapers/hpcfcr.pdf

Développer pour 2008 une nouvelle génération de serveurs, adaptés au calcul intensif et au traitement de données multimédias : tel est l'objectif du projet FAME2, lancé en 2005 sous l'égide de BULL et du CEA. L'acronyme FAME – pour « Flexible Architecture for Multiple Environment » – désigne une architecture qui, dans sa conception, prend en compte les critères d'extensibilité matérielle (nombre de processeurs variables par exemple) et de versatilité des logiciels d'exploitation. Le projet fait partie des initiatives à vocation industrielle de Ter@tec, au sein du pôle de compétitivité francilien System@tic*. Il rassemble des acteurs du monde de la recherche (IRISA, universités de Versailles et d'Évry, Institut national des télécommunications, École centrale de Paris) et de l'industrie : éditeurs de progiciels (ILOG), jeunes entreprises innovantes (RESONATE, CAPS-Entreprise et NewPhenix) et utilisateurs expérimentés (Dassault-Aviation et Institut français du pétrole).

Pourquoi tant de partenaires ? Les évolutions technologiques du calcul intensif permettent à de nouveaux acteurs de venir sur ce marché, à condition d'apporter des produits basés sur des technologies très compétitives

et de constituer un réseau de compétences complémentaires. Trois tendances sont révélatrices de ces évolutions. La première est celle de la standardisation. Dans le domaine du logiciel, d'abord, la durée de vie des grands codes de calcul dépasse aujourd'hui largement celle des systèmes informatiques utilisés. D'où la volonté de s'appuyer sur un envi-

La durée de vie des grands codes de calcul dépasse celle des systèmes informatiques

ronnement pérenne pour le développement des codes de calculs. Cela se traduit par l'utilisation croissante de logiciels libres (*open source*), ou de produits d'éditeurs indépendants ayant établi un standard *de facto*, qui peuvent être partagés par de larges communautés d'utilisateurs et de développeurs.

Une telle tendance à la standardisation se retrouve pour le matériel. L'utilisation de composants commer-

ciaux de grande diffusion (baptisés COTS pour « Components On The Shelf » ou « composants sur étagère ») est en effet de plus en plus répandue, et conduit les constructeurs informatiques à n'effectuer que les développements strictement nécessaires à l'introduction rapide de nouveaux produits sur le marché.

Un deuxième tournant technologique important tient à l'énorme masse de données brassées par les applications du calcul intensif. On a en effet pris conscience que la productivité globale d'une architecture informatique est directement liée à sa capacité à gérer les flux d'informations et les volumes de données issues des simulations ou des expérimentations. Une telle demande s'est accompagnée de l'émergence de communautés actives dans le développement d'intergiciels spécifiques de ce domaine. Enfin, la troisième tendance est l'intégration des caractéristiques multimédias propres aux applications de la simulation haute performance.

Le projet FAME2 tire parti de ces évolutions et vise la réalisation d'un multiprocesseur à mémoire partagée, qui utilisera en 2008 la prochaine génération de processeurs de la société Intel. Comme on cherche à limiter l'augmentation de la



FAME2

fréquence des processeurs au profit de la maîtrise de la consommation d'énergie, un des enjeux du projet est de parvenir à exploiter efficacement un haut degré de parallélisme au sein des serveurs. L'utilisation de processeurs multicœurs, avec plusieurs cœurs d'exécution, conduira ainsi à intégrer plusieurs centaines d'unités de calcul au sein d'un même serveur. Un tel choix exige des compromis et des optimisations tant du point de vue de l'architecture matérielle (hiérarchie et cohérence des informations en mémoire) que de l'architecture logicielle (gestion du parallélisme, environnement d'exploitation et de développement).

Procéder par étapes

Pour relever de tels défis, le projet FAME2 s'est structuré autour de quatre grands axes. Le premier concerne l'étude de l'architecture logicielle et portera plus particulièrement sur l'évolution du noyau Linux, la gestion des processus de poids légers en exécution ou « threads », et la génération de code pour les processeurs multicœurs. Le deuxième axe concerne l'architecture matérielle; il prêter une attention particulière aux architectures NUMA (Non Uniform Memory Access) régissant l'accès aux différentes régions de mémoire, ainsi qu'aux entrées-sorties. Le troisième point tient à la gestion des données: outre les applications bien connues du calcul intensif dans les secteurs de l'énergie et de l'aéronautique, la gestion des grandes bases de données au format XML et des flux multimédias

ont en effet été sélectionnées comme particulièrement représentative des nouvelles applications émergentes. Enfin, un quatrième axe consistera à prendre en compte les contraintes d'intégration du serveur dans un centre de calcul et la sécurité informatique.

Prévu sur une durée de 18 mois, le projet s'est fixé plusieurs jalons: définir d'abord les points clés et les éléments de base de l'architecture, démontrer ensuite la faisabilité et l'efficacité d'une architecture d'interconnexion interne homogène, puis fournir un démonstrateur pour l'émulation d'un serveur exploitant les microprocesseurs les plus récents avec des niveaux de parallélisme différenciés. L'étape suivante sera de réaliser un environnement de développement et d'optimisation pour prendre en compte cette nouvelle architecture matérielle, afin de la mettre à disposition d'applications typiques du calcul intensif et de prouver l'efficacité du serveur pour ces applications. La dernière étape sera alors de proposer des solutions complètes pour l'accès aux très grandes bases de données. ■ C.C. et P.L.



ISSUE D'UN PARTENARIAT ENTRE BULL, DASSAULT ET LE CEA-DAM, la plate-forme Teranova, un cluster de 20 serveurs NovaScale, a permis de tisser les collaborations à l'origine du projet. Le serveur NovaScale est la version industrielle des prototypes évalués dans le cadre du projet FAME. © BULL

* Créé en 2005, le pôle de compétitivité **Systematic** Paris Région a pour vocation de donner à l'Ile-de-France une visibilité mondiale dans le domaine des systèmes complexes. Il se concentre sur quatre marchés prioritaires: automobile et transports, sécurité, télécommunication et ingénierie de conception.



La Grille, superordinateur

Rendre la puissance de calcul aussi aisément disponible que l'électricité, telle est l'ambition finale des grilles informatiques. Leur mise en œuvre pose un certain nombre de défis. Et le concept se décline en plusieurs variantes.

Thierry Priol

est directeur de recherche à l'Inria et directeur de l'action concertée incitative Grid

L'évolution sans cesse croissante des besoins en puissance de calcul à fait naître le projet de relier entre eux — *via* l'Internet en particulier — des ordinateurs géographiquement dispersés sur plusieurs sites. Objectif : constituer une machine qui cumule les capacités de calcul de tous ces éléments. Telle est l'idée de base des « grilles de calcul ». Ce nouveau concept pose un défi aux chercheurs en informatique : comment rassembler non seulement la puissance de calcul mais aussi les capacités de stockage afin de les rendre accessibles sur le même mode décentralisé que l'électricité domestique ? Car tel est l'enjeu final des « grilles informatiques » : ce concept sous-entend une globalisation et une dématérialisation des ressources informatiques.

L'histoire commence vers la fin des années 1990 avec les projets américains Globus et Legion. Il s'agit alors de relier ensemble plusieurs supercalculateurs afin de construire un calculateur parallèle encore plus puissant : chaque centre de calcul pourra ainsi soumettre ses travaux à la grille en utilisant la puissance de tous les autres. Mais aujourd'hui, les chercheurs souhaitent aller beaucoup plus loin. Ils veulent rassembler un ensemble de supercalculateurs et aussi les ordinateurs personnels connectés à l'Internet.

La réalisation de grilles informatiques se heurte à de nombreuses difficultés d'ordre scientifique

et technique : faire communiquer et coopérer, à grande échelle, des matériels distants et hétérogènes par leurs modes de fonctionnement comme par leurs performances, créer les logiciels permettant de gérer efficacement la distribution des équipements, mettre au point des outils de programmation adaptés au caractère diffus et à grande échelle de l'exécution des tâches confiées à la grille, etc. Le facteur « grande échelle » de ces nouvelles infrastructures fait augmenter considérablement la probabilité d'une défaillance de l'un des équipements de la grille. Ces risques de défaillance

Le concept de « grilles » sous-tend une globalisation et une dématérialisation des ressources informatiques

ces doivent être pris en compte à tous les niveaux lors de la construction des grilles. Mais cela ne doit pas constituer un facteur de complexité supplémentaire tant dans la programmation des grilles que dans leur utilisation. Enfin, dans l'environnement « sans frontières » de l'Internet, la sécurité doit être garantie. On veut parvenir à un usage le plus large possible des infrastructures de grilles informatiques. Mais cela impose de garantir la confiden-

tialité, notamment pour des applications industrielles.

Si l'analogie entre l'accès à la « puissance informatique » et la distribution de l'énergie électrique semble suffisante pour caractériser le concept de grille informatique, sa mise en œuvre ne fait pas l'unanimité. Plusieurs visions existent aujourd'hui. Comme indiqué précédemment, une grille est un assemblage d'équipements informatiques mis en commun : processeurs, mémoire, disques, réseaux etc. Ce concept étant assez large, il se décline déjà au moins sous deux formes : grilles de calculs, pour lesquelles il s'agit de mettre en commun

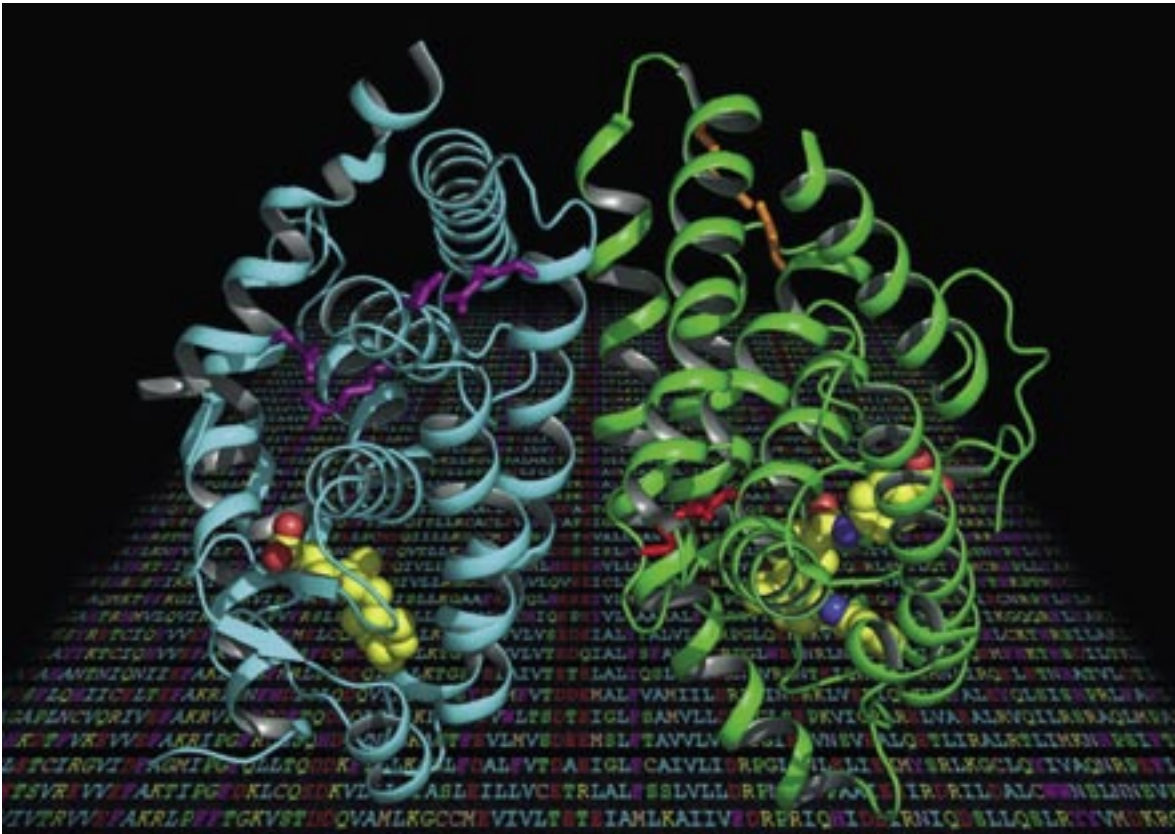
un ensemble de machines – supercalculateurs – ou un très grand nombre de PC – et grilles de données où l'on met en commun les capacités de stockage (lire « Dominique Boutigny : "Il faut définir une stratégie pour répartir les données" », p. 59). Au sein même de ces

deux types de grilles, plusieurs approches existent et font actuellement l'objet de recherches.

Les grilles de calcul peuvent, par exemple, être constituées d'un assemblage de supercalculateurs avec pour objectif d'offrir à l'utilisateur un accès à un supercalculateur virtuel unique. Les calculs soumis par les utilisateurs sont distribués de manière transparente aux supercalculateurs formant la grille de calcul. Cette approche a



mondial à la demande



**LA COMPARAI-
SON** des quel-
que 500 000
protéines con-
nues du monde
vivant, réalisée
dans le cadre
du programme
Décrypton, a
révélé que les
acides aminés
constituent une
voie de commu-
nication à l'inté-
rieur des récep-
teurs nucléaires
impliqués dans
de nombreux
cancers, mala-
dies neurodé-
génératives ou
encore l'obé-
sité.

© IGBMC/D. MORAS/O. POCH

notamment été popularisée par le système Globus. Précisons qu'il ne s'agit pas de concevoir un supercalculateur virtuel capable de cumuler la puissance de calcul de tous ses éléments pour exécuter plus rapidement une seule application. L'objectif est plutôt de mieux utiliser les ressources de calcul pour un ensemble d'applications indépendantes, soumises par un plus grand nombre d'utilisateurs.

Une application conçue pour des supercalculateurs repose sur la capacité à découper les calculs en sous-ensembles pouvant s'exécuter indépendamment et communiquant à des instants donnés. Ces communications doivent être réalisées le

plus rapidement possible car cela conditionne l'efficacité globale de l'application.

Une grille de calcul s'appuie sur l'Internet dont les performances, malgré toutes les évolutions récentes, ne seront jamais celle d'un réseau reliant les processeurs au sein d'une même machine. Tout simplement parce que ce réseau est partagé avec d'autres utilisateurs et que l'on ne peut pas aller plus vite que la vitesse de la lumière : deux ordinateurs distants de plusieurs milliers de kilomètres auront toujours des communications plus lentes que s'ils étaient installés dans la même salle machine. Toutes les recherches autour de cette approche visent à construire des environ-

nements logiciels capables de localiser les machines nécessaires aux besoins des utilisateurs. C'est l'un des objectifs du logiciel Diet développé par l'équipe Graal de l'Institut national de recherche en informatique et en automatique (Inria). Diet permet, de façon transparente pour l'utilisateur, de trouver le meilleur serveur pour effectuer la tâche demandée, et ensuite d'effectuer cette tâche au plus vite. Ainsi, un biologiste demandera à son ordinateur connecté à une grille de calcul d'exécuter le calcul d'une conformation de molécules. Et le logiciel Diet répondra à cette question.

Pour des applications dont les calculs peuvent se découper en





MOYENS GRILLES



un très grand nombre de tâches indépendantes, il existe une autre approche prometteuse, les grilles de bureau (*Desktop Grid*). Elle est fondée sur la mise à disposition volontaire d'un très grand nombre de PC connectés à l'Internet.

De nombreux projets sont fondés sur cette approche. Le plus célèbre est SETI@home pour la recherche de signaux extraterrestres. Le procédé est le suivant : un serveur distribue des données à des ordinateurs clients, des ordinateurs personnels dont la puissance de calcul est sous-utilisée la plupart du temps ; chaque ordinateur récupère une donnée, exécute un programme de traitement et envoie le résultat au serveur ; le serveur rassemble les résultats, relance de nouvelles données vers les ordinateurs et en tire les informations pertinentes.

En France, le Décryphon a mobilisé pour quelques mois, jusqu'en mai 2002, environ 75 000 internautes volontaires pour comparer les séquences des quelque 500 000 pro-

téines connues du monde vivant. Le succès de cette technique est telle que les organisateurs (l'Association française contre la myopathie, IBM et le CNRS) ont relancé depuis plusieurs mois une nouvelle initiative pour accélérer la recherche en génomique et en protéomique avec des technologies de grilles.

De nombreux problèmes existent cependant avec ce type d'approche, par exemple la sécurité et la tolérance aux pannes. Par définition, le programme que le participant accepte sur son ordinateur est susceptible de corrompre la machine à la manière d'un virus. Pour circonvenir ce problème, une des stratégies est d'engendrer dans l'ordinateur une machine virtuelle, sorte de sous-système d'exploitation, qui sera la seule à pâtir d'un code se révélant agressif.

Par ailleurs, pour éviter que des panes de machines n'obligent l'application à marquer le pas, il est nécessaire de sauvegarder régulièrement les calculs déjà réalisés, afin de pou-

voir réactiver l'application sans avoir à tout recalculer depuis le début.

Le logiciel de calcul distribué XtremWeb, développé par l'équipe Grand Large de l'Inria, repose sur ces stratégies. Il a été utilisé avec succès par des astrophysiciens et des biologistes mais aussi par quelques industriels qui ont souhaité expérimenter cette approche. En effet, au sein de grandes compagnies, beaucoup de PC sont sous-utilisés : construire une grille à l'échelle de l'Intranet d'une société pourrait répondre aux besoins non satisfaits en puissance de calcul.

Les grilles informatiques sont sans doute appelées à devenir les infrastructures de calcul et de stockage de demain. Mais il reste encore à inventer de nouvelles méthodes de conception et de programmation pour en maîtriser la complexité. ■ T. P.

- ➔ www.globus.org
- ➔ <http://legion.virginia.edu>
- ➔ <http://setiathome.ssl.berkeley.edu>
- ➔ www.decryphon.fr

GRID'5000, 5 000 PROCESSEURS EN 2007



ÉTAT D'ACTIVITÉ DE LA PLATE-FORME GRID'500 OBSERVÉE EN TEMPS RÉEL. Chaque point représente un processeur de la grille. La couleur permet de visualiser leur activité, par exemple, les points verts pour les processeurs actifs. ©D. R.

Lancé par le ministère de l'Enseignement supérieur et de la Recherche dans le cadre de son action concertée incitative Grid, le projet Grid'5000 a pour objectif la construction d'une grille informatique dotée d'environ 5 000 processeurs à l'horizon 2007. Ce projet est soutenu par le CNRS, l'Inria, Renater, plusieurs universités, des conseils généraux et régionaux. Les 5 000 processeurs seront répartis sur neuf sites : Bordeaux, Grenoble, Lille, Lyon, Nancy, Orsay, Rennes, Sophia-Antipolis et Toulouse. Grid'5000 offrira aux chercheurs la possibilité d'expérimenter, à très grande échelle, de nouveaux algorithmes, par exemple, pour rendre le calcul scientifique plus efficace sur les grilles. La puissance théorique de Grid'5000 sera de plusieurs téraflops une fois sa construction achevée. Mais seule une fraction de cette puissance pourra être exploitée car les communications sont assurées par des réseaux dont les technologies sont similaires à celles de l'Internet. Un des enjeux des recherches autour de Grid'5000 est donc la maîtrise des communications : concevoir, par exemple, des protocoles de communication mieux adaptés aux grilles et surtout beaucoup plus efficaces que celui de l'Internet, TCP/IP. D'autres recherches se concentreront sur la conception de logiciels pour faciliter la programmation des grilles. Aujourd'hui, elle reste encore bien plus complexe que la programmation des supercalculateurs.

- ➔ www.grid5000.fr



Dominique Boutigny :

« Il faut définir une stratégie pour répartir les données »



Dominique Boutigny, physicien des particules, est directeur du centre de calcul de l'In2P3 (Institut national de physique nucléaire et de physique des particules). © D. R.

Qu'est-ce qui distingue une grille de données d'une grille de calcul ?

DOMINIQUE BOUTIGNY : À l'instar d'une grille de calcul, dont l'objectif est de répartir les calculs sur le plus grand nombre possible de machines, une grille de données cherche à répartir une très grande masse de données sur un très grand nombre de serveurs, cela *via* Internet et de manière transparente pour l'utilisateur. Le paradigme en la matière, c'est, pour le grand public, le World Wide web : les internautes accèdent à un très grand nombre d'informations stockées sur des serveurs qui sont répartis dans le monde entier. Ils ne savent pas où se trouvent ces informations et la grille se débrouille à l'aide de moteurs de recherche comme Google pour les leur fournir.

Et dans le domaine scientifique ?

Dans le domaine scientifique, le concept de grilles de données se décline un peu différemment : il s'agit d'adopter une stratégie pour répartir des données entre plusieurs centres de calcul lorsque des applications ont un très grand nombre de données à traiter. C'est le cas en physique des particules, où nous allons avoir des masses de données gigantesques à digérer lorsque le nouveau collisionneur de particules, le LHC (Large hadron collider), entrera en service au CERN de Genève à partir de 2007. Ainsi le centre de calcul de l'IN2P3 devra pouvoir recevoir et stocker sur disque 4 pétaoctets (4×10^{15}) de données en provenance du LHC en 2008. Encore, n'est-ce que l'un des onze centres de calculs qui recevra directement des données du LHC, sans compter celles qui seront stockées au CERN lui-même. À partir de ces onze centres principaux, les données seront à nouveau réparties sur une centaine de centres de calcul plus petits.

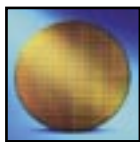
Quelles difficultés pose la mise en œuvre de ce type de grille de données ?

Il ne s'agit pas simplement de trouver un moyen universel d'accéder à ces données comme avec le Web. Il faut pouvoir exécuter des programmes complexes d'analyse sur ces données pour en extraire des résultats de physique fondamentale. La grille de données est donc indissociable de la grille de calcul sur laquelle elle s'appuie. On ne sait pas précisément à l'avance quelles données seront exploitées, mais elles doivent

être disponibles rapidement depuis n'importe quel point de la grille. Au niveau technique, cela suppose un réseau très rapide en débit – 10 gigabits seconde entre le CERN et chacun des onze centres de calcul de premier niveau – et des serveurs de données très performants pour absorber ce flot de données. Nous avons dû développer des applications sur mesure que nous testons actuellement avec des systèmes de gestion des données spécifiques. Une partie de ces logiciels a été développée dans le cadre du projet européen Egee (Enabling Grid for E-science). ■ **Propos recueillis par Marie-Laure Théodule**



SIMULATION DE LA DÉSINTÉGRATION D'UN BOSON DE HIGGS dans l'un des détecteurs du collisionneur de particules du CERN, à Genève. Les traces représentent les particules produites lors de la collision de protons de très haute énergie. © CERN



Sur la route des

Dans leur course à la puissance, les concepteurs de supercalculateurs se heurtent à une multitude d'obstacles techniques et économiques. Petit tour d'horizon.

Pierre Vandeginste

est journaliste scientifique

À peine nous étions nous familiarisés avec le « téraflop », que le petit monde des supercalculateurs parle de passer à la vitesse supérieure, celle du « pétaflop* ». Certains réfléchissent, se concertent, notamment aux États-Unis et au Japon, pour proposer des solutions permettant d'effectuer ce million de milliards d'opérations « en virgule flottante » par seconde. Un objectif qui devrait être atteint avant 2010.

Dans les années 1960, la puissance des supercalculateurs se mesurait en mégaflops, c'est-à-dire en millions d'instructions par seconde. Ensuite, les monstres des années 1980 affichaient des gigaflops (comme le Cray 2, en 1985). Et puis dès 1997, coup d'accélérateur : le ASCI Red d'Intel passe la barre du téraflop, mille milliards d'opérations par seconde.

Depuis dix ans donc, les machines les plus puissantes du monde se jaugent en téraflops. La championne du monde en titre, BlueGene/L, atteint les 281 téraflops au Top 500 des supercalculateurs (lire « Le Top 500 des supercalculateurs », p. 36). Construit par IBM pour le département de l'Énergie des États-Unis, ce petit monstre

simule le vieillissement des têtes nucléaires au LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory), en Californie. Quant au 500^e du classement, il développe tout de même 1,6 téraflop.

Quels progrès ont permis d'atteindre de telles puissances ? On le sait, aujourd'hui, le maître mot est « parallélisme » : on met les petits ordinateurs dans les grands. Mais il y a mille manières de le faire... Sur quels paramètres jouent les architectes ? Quelles limites faut-il repousser pour aller au-delà ? C'est ce que nous allons essayer de voir.

La puissance d'un supercalculateur résulte de l'interaction de multiples facteurs. Faisons un petit tour chez les poids

lourds du moment. BlueGene/L a développé, au banc d'essai, une puissance de 281 téraflops. Nous sommes en présence d'une machine de type MPP, pour « Massively Parallel Processing ». De fait, elle héberge une petite troupe de 131 072 processeurs. BlueGene/L est un système à mémoire distribuée : chaque processeur dispose de sa propre mémoire et dialogue avec les autres en échangeant des messages, *via* un réseau d'interconnexion sophistiqué.

Le processeur employé est un PowerPC 440, développé au départ par IBM pour des applications dites « embarquées », donc, entre autres,

chiches en énergie. Il est cadencé à 700 MHz, quand le moindre PC vendu en grande surface caracole à 3 GHz. Sa puissance individuelle (théorique) est modeste : 2,8 gigaflops. Voici donc un constat étrange : les ordinateurs les plus puissants du monde ne seraient pas forcément réalisés avec les microprocesseurs les plus véloces du moment.

L'explication ? L'équipe dirigée par Alan Gara, qui a conçu BlueGene/L, la donne sans détour dès la première page d'un article présentant son architecture générale [1]. Pour optimiser la puissance d'une machine

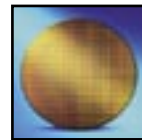
La chaleur dégagée est une des limites à la construction de gros supercalculateurs

qui occupera des alignements de dizaines d'armoires, explique-t-on, il faut tout d'abord optimiser la puissance par armoire. Or, l'une des limites les plus sévères

que l'on rencontre dans la conception d'une armoire est la quantité de chaleur que l'on est capable d'en extraire, de l'ordre de 20 kW dans le cas du refroidissement par air. Notons au passage que le refroidissement par circulation de liquide, qui a connu son heure de gloire à l'époque de Seymour Cray, revient timidement. La chaleur dégagée par une puce découle directement de la puissance électrique qu'elle consomme. Laquelle est proportionnelle à sa fréquence d'horloge. En d'autres termes, une puce très rapide dégage tellement de chaleur que l'on ne peut pas en rassembler un trop grand nom-

* Un pétaflop : un million de milliards d'opérations par seconde. Le préfixe « péta » vient du grec « penta », cinq.

[1] A. Gara et al., Overview of the BlueGene/L system architecture, IBM J. Res. & Dev. Vol. 49 N° 2/3, mars/mai 2005



pétaflops...



BLUE GENE/L, construit par IBM pour le Lawrence Livermore National Laboratory, en Californie, est le seul à dépasser les 100 téraflops au Top 500 des supercalculateurs. © LLNL

bre dans une armoire, sauf à recourir à un mode d'extraction de la chaleur plus coûteux, qu'il faudrait à son tour justifier. Voilà pourquoi Alan Gara a choisi ce Power PC 440 qui ne « tourne » qu'à 0,7 GHz mais dégage peu de chaleur.

Résultat, son équipe a pu réunir 2048 processeurs dans une armoire. Cela grâce à un coup de pouce supplémentaire : IBM utilise en fait une puce « maison » qui contient, entre autres, deux processeurs complets. Il n'en faut donc que 1024 pour réunir 2048 processeurs. De ce fait, les

131 072 processeurs de BlueGene/L (dans sa version actuelle) occupent « seulement » 64 armoires, ce qui est remarquable pour ce niveau de puissance.

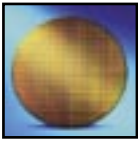
IBM fut en 2001 un pionnier de la puce « dual-core » (à deux cœurs). Toute l'industrie suit cette tendance. « *La course à la fréquence est en train de se calmer* », explique Olivier Temam, responsable à l'Inria du projet Alchemy*. *En revanche le multi-core, c'est-à-dire la multiplication des processeurs sur une même puce, est en train de se généraliser. C'est une façon*

d'offrir plus de puissance de calcul sans dégagement de chaleur excessif. »

Le fait de rassembler autant de processeurs dans un petit volume a des conséquences lourdes. Sur une machine parallèle, le travail est distribué auprès de multiples processeurs, et il faut bien de temps en temps que ces derniers « se parlent », échangent des données. Dans le cas de BlueGene/L, lorsqu'un processeur doit parler à un voisin, il y a de bonnes chances que celui-ci soit proche, puisqu'il y en a déjà 2047 dans son armoire.

*Alchemy est l'acronyme de : « Architectures, Languages and Compilers to Harness the End of Moore Years ».





L'EARTH SIMULATOR, à Yokohama, au Japon, est l'un des rares supercalculateurs «vectoriels» à figurer encore au Top 500. ©EARTH SIMULATOR CENTER / JAMSTEC

⇒ Car dialoguer avec un interlocuteur lointain est synonyme de perte de temps. À cause de la vitesse de l'électricité, qui ne peut excéder celle de la lumière. Le signal parcourt quelque vingt centimètres par nanoseconde dans un bon conducteur, dix centimètres dans un mauvais. La puce qui est à l'autre bout de l'armoire est déjà en gros à dix nanosecondes, celle qui est de l'autre côté de la salle, à une voire des centaines de nanosecondes...

Ainsi, les efforts pour accélérer encore les supercalculateurs rencontrent inéluctablement deux « murs » dressés par les lois de la physique. Le « mur de la lumière » est imposé

par la finitude de la vitesse de propagation des ondes électromagnétiques. Le « mur de la chaleur », celle qui est dégagée par l'électronique et qu'il faut évacuer pour maintenir une température raisonnable, s'oppose à l'augmentation à outrance des fréquences et de la densité de composants dans un volume donné. Le concepteur est en quelque sorte coincé entre ces deux murs. D'un côté, il aimerait rapprocher tous les composants, tous les organes de sa machine dans un dé à coudre, afin de minimiser les délais de transmission. De l'autre, il doit les éloigner pour que la température reste raisonnable.

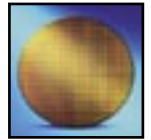
BlueGene/L nous montre une façon de se frayer un chemin entre ces deux murs. « Certains le poursuivront peut-être, imagine William Jalby, responsable de l'équipe Arpa (Architecture parallélisme) du Laboratoire PRiSM de l'université de Versailles, en faisant appel demain à un microprocesseur encore plus spartiate, emprunté aux PC portables, aux consoles de jeux ou aux téléphones portables... »

Ce n'est pas la seule voie possible, d'autant que d'autres contraintes s'exercent. Pour le comprendre, regardons ailleurs... Sautons le numéro deux actuel du palmarès des supercalculateurs, « BlueGene/W », maquette au 5/16 du N° 1 dotée de « seulement » 40 960 processeurs. Oublions aussi le numéro trois, un autre cheval d'IBM. Et passons au quatrième, « Columbia », réalisé par SGI (Silicon Graphics, Inc.) pour la NASA. Il est installé au Ames Research Center de Mountain View, en Californie. Cette machine peut être décrite comme une « grappe de 20 nœuds » comportant chacun 512 processeurs, partageant une mémoire commune via une technologie d'interconnexion appelée NUMA (lire « L'art d'interconnecter : architectures et topologies », p. 64). Columbia héberge 10 160 processeurs et avoue 52 téraflops, sous la toise du Top 500.

La puissance théorique de chaque processeur est ici de 6 gigaflops, contre 2,8 chez BlueGene/L. Un écart notable qui indique clairement

LE LOGICIEL PARALLÈLE RESTE À INVENTER

L'évolution spectaculaire des machines vers un parallélisme toujours plus massif pose un formidable défi au logiciel. S'il a su s'adapter pour suivre le mouvement, il reste, pour l'essentiel, foncièrement séquentiel. « Pendant une trentaine d'années, précise William Jalby, responsable de l'équipe Arpa (Architecture parallélisme) du laboratoire PRiSM à l'université de Versailles, l'essentiel des gains de performances a été assuré par les progrès du matériel, à logiciel presque constant. L'ère de ces progrès "gratuits" est maintenant terminée, puisque le "mur thermique" a contraint les architectes à miser désormais sur le parallélisme massif. Or, pour faire profiter les utilisateurs du potentiel de telles architectures, un travail immense doit être accompli dans les domaines des langages de programmation, des compilateurs, des systèmes d'exploitation, des outils de mise au point et d'optimisation. » On le voit, le grand défi à relever dans les années à venir est logiciel. Plus exactement, il est urgent que s'instaure une coopération étroite entre matériel et logiciel.



une autre manière de voir les choses. Le processeur employé est cette fois un Itanium 2, un microprocesseur proposé par Intel, que l'on retrouve, sous des marques variées, sur de nombreux « serveurs » (PC musclés à usage collectif). La version employée ici galope à 1,5 GHz, soit une fréquence double de celle choisie chez IBM. SGI a réussi à rassembler 512 de ces processeurs dans une armoire, ce qui donne une densité de l'ordre de 2,5 téraflops par armoire (4 pour BlueGene/L).

La plus grosse différence entre les processeurs employés par IBM et SGI est d'ordre économique. SGI utilise une puce « du commerce », donc bon marché, tandis qu'IBM, qui est l'un des rares industriels à maîtriser la technologie des microprocesseurs, a mis à contribution son savoir-faire en la matière. La puce qui fait palpiter BlueGene/L est un « ASIC »

(« Application Specific Integrated Circuit »), un circuit intégré spécialisé. Il ne s'agit pas, *stricto sensu*, d'une puce pensée *de novo* pour faire tourner un

supercalculateur mais de « semi-custom » : IBM a repris le dessin d'un processeur existant et l'a inclus (deux fois) dans une puce complexe comprenant par ailleurs de la mémoire et des circuits annexes. Le coût d'une telle opération est à mi-chemin entre celui de la haute couture et de la confection.

Il faut aller au numéro 7 du Top 500 pour trouver une machine « vectorielle ». L'Earth-Simulator, installé à Yokohama (Japon), a été fabriqué par NEC sur commande gouvernementale. Il était encore numéro un au classement de juin 2004. Sa puissance ? 36 téraflops, obtenue à l'aide de 5 120 processeurs. Il s'agit plus précisément d'un ensemble de 640 nœuds comportant cha-

cun 8 processeurs vectoriels partageant une mémoire commune, interconnectés par un puissant réseau à passage de messages du type « crossbar » (lire « L'art d'interconnecter : architectures et topologies », p. 64). Ces 640 nœuds occupent rien moins que 320 armoires (plus 64 d'interconnexion, le tout occupant 3 250 m², un record).

Chaque processeur développe cette fois 8 gigaflops, encore plus que l'Itanium de Columbia. Earth-Simulator nous offre donc un troisième cas de figure, celui d'un rare constructeur qui a investi dans la conception d'un « processeur vectoriel », plus adapté au calcul scientifique qu'un microprocesseur ordinaire.

Ils ne sont plus que deux constructeurs « historiques » à suivre encore la voie du vectoriel : NEC et Cray. Lequel propose d'ailleurs, à côté

de sa série vectorielle X1E deux autres familles de supercalculateurs qui ne le sont pas. Seules 2,4% des machines citées au Top 500 (18 sur 500) reposent

sur des processeurs vectoriels, contre 10% en 2000 et 25% en 1995. Dès 1993 les très parallèles CM-5 de Thinking Machines narguaient Cray aux quatre premières places du premier Top 500. Mais il aura fallu douze ans, l'inertie de l'histoire aidant, pour que l'industrie achève son virage du vectoriel vers le parallèle.

Nous rencontrons cette fois l'une de ces contraintes de nature économique qui conditionnent durement de nos jours l'évolution technologique du calcul scientifique haute performance. Le coût de conception d'un processeur original, *ad hoc*, est devenu exorbitant pour un constructeur de supercalculateurs. Un géant comme NEC,

L'art d'interconnecter : architectures et topologies

On veut confier du travail à un collectif de processeurs, fort bien, mais comment vont-ils se parler ? Le « partage de mémoire » permet l'accès de multiples processeurs à une même mémoire. Ainsi ce que l'un y écrit peut être lu par un autre. Mais il faut gérer les « conflits d'accès »...

Seconde approche, l'architecture à « mémoire distribuée » : les processeurs ont chacun leur mémoire locale et communiquent par « passage de messages ». Pour partager des données ils doivent se les envoyer, synchroniser. Mais au moins, chacun est maître dans sa mémoire... Cette approche a le vent en poupe.

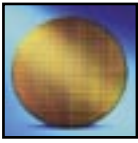
Dans la catégorie « mémoire partagée », on parle de SMP (« Symetric Multiprocessing »), lorsque l'accès à la mémoire commune est égalitaire. Par contraste, le NUMA (Non Uniform Memory Access) propose un compromis en permettant à chaque processeur d'accéder à une mémoire virtuellement commune, mais avec des délais variables, car elle est en fait physiquement distribuée auprès des processeurs et donc plus ou moins proche de chacun.

Côté « systèmes à mémoire distribuée », on réserve parfois la dénomination vague MPP (Massively Parallel Processing) à des systèmes dotés d'une interconnexion à couplage fort, tandis que l'expression « grappe » désigne un peu tout selon les auteurs, mais surtout des systèmes faiblement couplés, voire des colonies de PC simplement reliés par un réseau local.

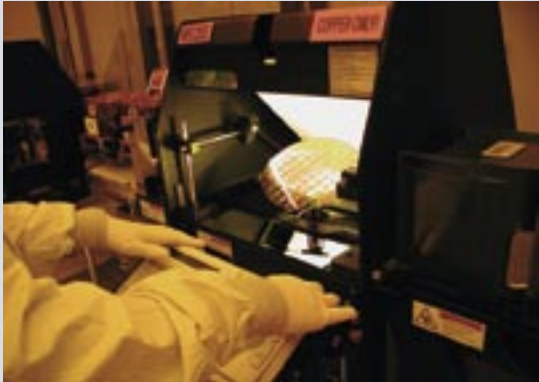
Diverses topologies de réseaux sont exploitées, depuis la plus radicalement « connexe », qu'est le « crossbar », reliant n machines *via* une matrice directe de n par n , jusqu'au bus (sur lequel on partage une bande passante commune) en passant par des réseaux impliquant une notion de voisinage, comme le cube (chaque processeur a six voisins, en x , y et z) ou l'arbre binaire.

qui maîtrise toute la filière électronique et informatique, peut encore se le permettre mais pour combien de temps ? On voit qu'un autre géant très généraliste, IBM, se contente d'adapter un dessin déjà amorti. Pour tous les autres, la question ne se pose plus : ils utilisent des microprocesseurs « normaux », non conçus pour ça et peu





DES MICROPROCESSEURS TOUJOURS PLUS PARALLÈLES



INSPECTION de processeurs Itanium 2 (Intel).

©2005 INTEL CORPORATION

« Cela fait longtemps que l'on exploite ces transistors que les progrès de l'intégration nous offrent sur un plateau pour faire du parallélisme, c'est à dire plus de choses en même temps. » André Seznec est responsable du projet Caps à l'IRISA de Rennes. *« Depuis les années 1960, par exemple, on applique le principe du travail à la chaîne en décomposant en étapes certains circuits, qui peuvent ainsi travailler simultanément sur plusieurs données progressant le long de la chaîne... »* De plus, les processeurs « vectoriels » sont équipés pour lancer d'un coup la même opération sur toutes les composantes des vecteurs.

Un microprocesseur moderne ne se contente plus d'effectuer ses instructions l'une après l'autre. Il consulte à l'avance les « prochaines » instructions et se demande s'il peut entamer leur exécution avant la fin des précédentes. L'exécution « spéculative », consiste à prédire les branchements conditionnels, pour lancer l'exécution de la « bonne » branche du programme avant d'avoir évalué la condition. C'est la spécialité d'André Seznec : *« On obtient jusqu'à 98% de succès. »*

Par ailleurs, une hiérarchie de « caches » est venue accélérer l'accès à la mémoire centrale, de plus en plus lente par rapport au processeur, en hébergeant des copies locales des données les plus souvent référencées.

Avec le « superscalaire », on a dupliqué les additionneurs pour effectuer jusqu'à six opérations par cycle. Lorsque le processeur est bloqué en attente, le « multithreading » évite l'inaction en prenant en charge sans délai une autre séquence d'instructions. *« Mais on ne sait pas trouver plus de 6 ou 8 instructions à exécuter par cycle. Désormais, les fabricants dupliquent le processeur entier sur le même composant : aujourd'hui à deux exemplaires, demain 4, puis 8, 16... »*

chers. Leur conception est en effet amortie par un vrai marché de masse, celui des serveurs. La grande majorité des machines du Top 500 sont réalisées avec des puces de ce type, fabriquées par Intel (67%) et AMD (11%).

Une autre contrainte économique pèse lourd sur la conception de ces géants du calcul : le fait qu'une entreprise aurait du mal à vivre en ne vendant que du gigantesque. Même IBM espère vendre des BlueGene de toutes tailles, jusqu'au modèle ne tenant que dans une seule armoire. Ce n'est pas pour rien que le marché est désormais « tenu » par deux fabricants... d'ordinateurs : IBM (44% du Top 500) et HP (34%), loin devant les acteurs historiques du marché du très gros que furent SGI et surtout Cray qui se retrouvent ex aequo sur la troisième marche du podium avec... Dell, le roi du PC par correspondance.

Pour avoir sa chance sur le marché du supercalculateur, il faut désormais disposer d'un gros serveur ayant trouvé sa

place sur le marché. Une armoire convaincante, contenant un nombre raisonnable (32, 64, 128...) de processeurs, plus ou moins étroitement interconnectés. Ensuite, on osera le cas échéant bâtir de grands ensembles à partir de cette pièce de Lego.

C'est bien ainsi, en passant du gros serveur au supercalculateur, que des constructeurs d'ordinateurs ont réussi à s'installer sur ce marché jadis réservé à des spécialistes. Hewlett-Packard a su se tailler une position enviable de numéro 2 du Top 500. Et c'est par une démarche similaire que Bull, s'appuyant sur sa gamme de serveurs Novascale, fait aujourd'hui son entrée sur ce marché en livrant au CEA un Tera-10

qui devrait se placer près du sommet du Top 500.

Une grande difficulté consiste de ce fait à choisir une philosophie d'interconnexion qui réponde bien, c'est-à-dire de manière rentable, à la demande initiale, tout en se prêtant également à la deuxième phase. Et qui permette de gagner de l'argent en vendant des machines à une armoire, à deux, à quatre, à huit... Dans le jargon, on dira que « pour être rentable, il faut être scalable », la « scalability » étant la capacité de décliner la technologie dans laquelle on a investi en une gamme longue et crédible.

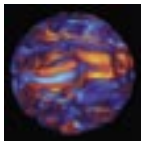
La chose est d'autant plus facile que l'on choisit une architecture à mémoire distribuée et « faiblement couplée ». C'est pourquoi on voit fleurir une offre de variétés de « grappes » à l'interconnexion allégée, dont les éléments sont même parfois simplement reliés via un simple réseau local de type Ethernet

(50% du dernier Top 500).

L'époque semble se satisfaire d'un pragmatisme un peu honteux. Ici et là, pourtant, des

chercheurs parlent de faire la révolution en enfourchant un séduisant paradigme : « Stream Processing », « Reconfigurable Computing » ou encore « Processor In Memory ». Mais outre qu'ils ne font pas l'unanimité, on ne les voit guère entrer en lice pour l'épreuve du pétaflop. Les premières machines à franchir cette barrière symbolique ressembleront-elles aux champions actuels ? C'est à craindre. Point de vue de Franck Cappello, responsable à l'Inria du projet Grand large : *« On pourrait se retrouver avec d'une part la suite de BlueGene/L, d'autre part une machine vectorielle, chez NEC par exemple, et enfin, des grappes en tous genres... »* Dont une Chinoise ? ■ P. V.

Un constructeur ne peut vivre en vendant seulement du gigantesque !



Naissance d'étoiles

La formation des étoiles reste mal comprise. Sa modélisation devrait toutefois faire un pas de géant d'ici peu avec le lancement du télescope spatial européen Herschel, prévu pour 2007. Selon le scénario généralement admis, un immense nuage turbulent de gaz de plusieurs dizaines de parsec se fragmente pour former des « cœurs » plus denses au sein desquels la gravité est suffisamment forte pour rassembler la matière. Sous l'effet de la gravité, la pression augmente, le gaz s'échauffe et commence à rayonner une partie de son énergie. Ce refroidissement permet à la contraction de se poursuivre et au gaz de continuer à chauffer, jusqu'à allumer les premières réactions nucléaires de la jeune étoile. Mais de nombreuses questions divisent encore les spécialistes, notamment celle-ci : quelle est l'origine de la turbulence qui fragmente et régule la formation d'étoiles dans les nuages ? Cette turbulence détermine en effet la masse des « cœurs » et donc des étoiles. Elle encore qui empêche une grande partie du gaz de s'effondrer, régulant ainsi le taux de formation stellaire. Cette turbulence pourrait naître de la confrontation dans les nuages de zones froides et condensées avec d'autres, chaudes et diffuses. Mais comment vérifier cette hypothèse en l'absence d'observations ? Enfouies dans des cocons de gaz et de poussières, les étoiles en formation ne sont visibles qu'en imagerie submillimétrique. Pour la première fois, le télescope spatial Herschel – le plus grand jamais construit – permettra l'observation détaillée de nuages moléculaires dans ces longueurs d'ondes. L'assemblage de son miroir (avec ses 3,5 mètres de diamètre, il est le plus grand jamais construit) vient de s'achever en septembre 2005.

➔ Télescope spatial Herschel : <http://sci.esa.int/science-e/www/area/index.cfm?fareaid=16>

Quels phénomènes

COSMOLOGIE

Les galaxies ont des formes et des tailles très différentes. D'où vient une telle diversité ? Les avis divergent...

À la base du modèle cosmologique du Big Bang se trouve une hypothèse extrêmement simple : l'Univers était, à ses débuts, globalement homogène. Cette hypothèse a été vérifiée en 1992, avec les observations du satellite Cobe puis, à nouveau, en 2003, avec celles de la sonde WMap. En mesurant le fond diffus cosmologique, cette lumière fossile datant de 380 000 ans après le Big-Bang, ces instruments ont permis de brosser le portrait de cet Univers primordial : une soupe de particules parsemée de grumeaux dont la densité ne dépasse la densité moyenne que de 0,01 %. Comment ces infimes inhomogénéités primordiales de densité ont-elles évolué pour donner naissance aux galaxies ? Deux modèles s'affrontent. Le premier, par croissance hiérarchique, suppose

que les premières galaxies, de petite taille, ont grossi à mesure que des collisions les amenaient à fusionner avec des congénères. Avec un tel processus, il a fallu plusieurs milliards d'années aux grosses galaxies qui nous entourent pour se former. Le second modèle, dit d'effondrement dissipatif, part de l'hypothèse que la croissance des grumeaux fut suivie par l'effondrement de nuages de poussières et de gaz très massifs. Lui-même à l'origine d'une galaxie très lumineuse pleine d'étoiles et de poussières qui rayonnent (c'est la dissipation). Ce processus est plus rapide : moins de un milliard d'années sont nécessaires pour que les galaxies les plus massives s'individualisent. Les collisions ultérieures n'auraient joué qu'un rôle accessoire dans leur évolution. Le modèle de croissance hiérarchique faisait jus- qu'à une date récente figure de

favori. Mais il vient d'être sérieusement ébranlé par la découverte de galaxies massives et très jeunes.

Les deux approches donnent lieu à des modélisations différentes. Si l'on suppose que les interactions entre galaxies – fusions et collisions – ont joué un rôle prépondérant dans leur évolution, il devient nécessaire de prendre en compte de gigantesques pans d'Univers riches en nébuleuses. C'est ce que fait Romain

Teyssier, astrophysicien au CEA. « C'est une caractéristique importante des galaxies : il y a celles qui subissent de nombreuses collisions et les autres qui, comme la Voie lactée, ont une

vie plus calme. » Ce mode de vie rejailit sur leur forme : les plus chahutées prennent l'apparence de boules elliptiques, tandis que les autres arborent des bras spirales.

« Pour simuler cette évolution, nous prenons comme conditions

Les calculs doivent encore gagner en complexité pour expliquer l'extraordinaire variété des galaxies

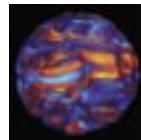
Quand les lasers testent les plasmas

Modéliser les cœurs des planètes géantes ou les phénomènes violents, comme l'explosion des supernovae ou l'accrétion de matière à la périphérie des trous noirs : c'est l'une des possibilités offertes par les lasers de très haute puissance qui testent le comportement très particulier des plasmas. Ces fluides ionisés, conducteurs, ne peuvent être produits que dans des conditions extrêmes de température et de pression.

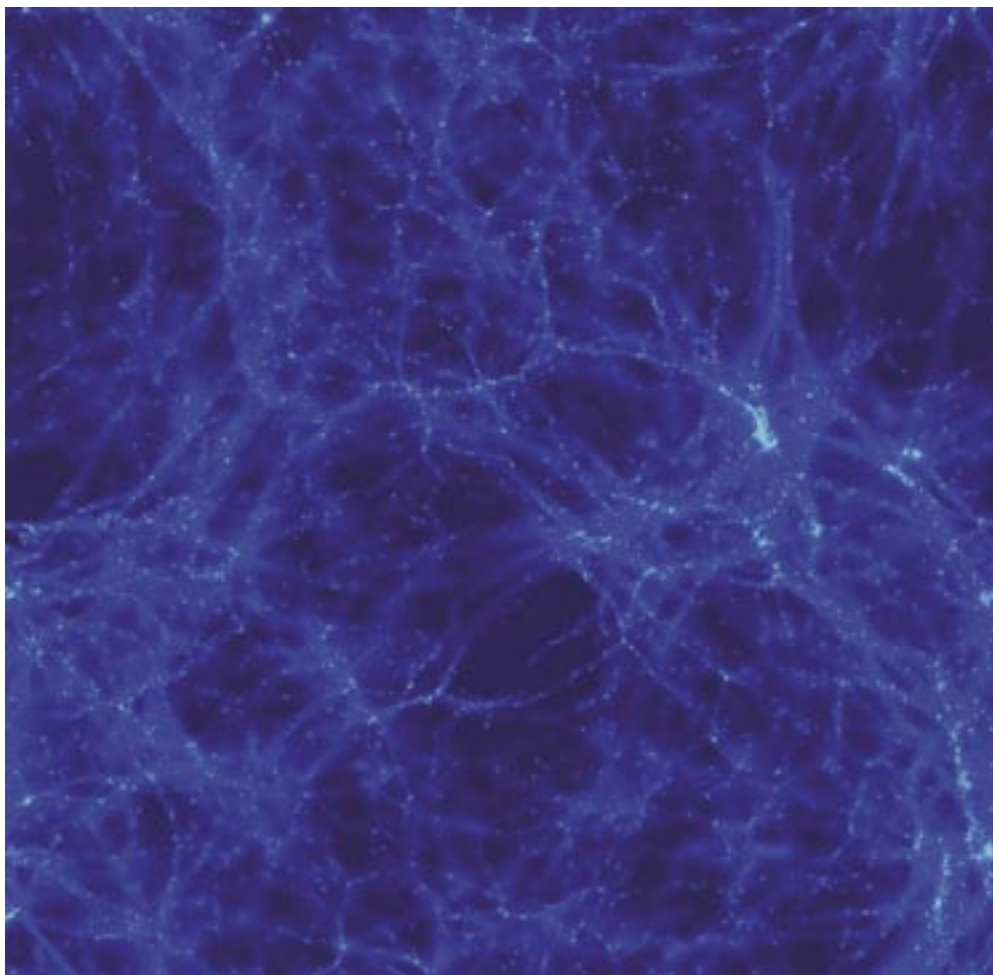
Lorsqu'un faisceau laser est focalisé sur un matériau placé dans une enceinte à vide, une partie de la matière se vaporise en plasma chaud de plusieurs dizaines de milliers de kelvins. Cette poussée du gaz comprime violemment et forttement la matière non vaporisée, produisant une onde de choc qui fait monter la pression et la température dans le matériau, reproduisant par exemple de petits morceaux de planète en laboratoire.

La ligne d'intégration laser, prototype du futur laser mégajoule installé dans la région bordelaise, et destinée essentiellement à des applications militaires, ouvre ses portes depuis la fin 2005 à des expériences civiles en astrophysique. Ces expériences permettront de déterminer l'équation d'état des gaz ionisés. Bien connue pour les gaz parfaits, cette équation, qui relie la densité, la pression et l'énergie interne des gaz, ne l'est pas pour des plasmas.

➔ www-lmj.cea.fr/index.html
➔ www.luli.polytechnique.fr/



à l'origine des galaxies ?



SUR CETTE SIMULATION HYDRODYNAMIQUE de la densité de gaz, les galaxies apparaissent en rouge, les vides en bleu. © YANN RASERA - ROMAIN TESSIER /CEA

initiales la répartition de la matière telle que nous la donne le fond diffus cosmologique. Puis nous incrémentons les pas de temps pour atteindre un univers actuel. Nous essayons de comparer le nombre, la forme, l'arrangement des galaxies obtenues par le calcul avec celles que l'on observe aujourd'hui. » Les équations tiennent compte de l'expansion de l'Univers, la force de gravité, la mécanique des fluides autogravitants, des phénomènes de physique atomique. Mais l'espace à couvrir pose problème: « Pour voir naître des galaxies, il faudrait une

maille plus petite que la plus petite d'entre elles. Nous serions vraiment satisfaits avec un million de milliards de mailles. Pour l'instant, faute de puissance numérique suffisante, nous n'en avons que quelques milliards. » La seule façon pour ces modèles de voir les galaxies consiste à faire des zooms sur une partie plus modeste de l'Univers. Mais de nombreux points restent à éclaircir, avoue Romain Teyssier. « Pour l'instant, nos modèles sont incapables de reproduire la proportion observée entre galaxies spirales et elliptiques. Par ailleurs, ils donnent plus de satellites pour

notre Voie lactée que nous n'en observons. » Autre souci: les simulations fondées sur le modèle hiérarchique prédisent que les objets de l'Univers ont tous beaucoup de masse au centre. Une règle à laquelle les galaxies naines semblent échapper. « Soit le modèle est faux, soit il nécessite des réglages bien plus fins », analyse Romain Teyssier. Et d'imaginer que la prise en compte de phénomènes tels que l'explosion des supernovae, les jets de matière crachés par les trous noirs ou l'existence de la matière noire pourrait réconcilier modèles et observations.

Le modèle d'effondrement dissipatif, s'il est moins ambitieux, colle mieux à certaines observations. Et pour cause: les simulations, qui suivent l'effondrement d'un nuage de gaz et de poussières, sont contraintes par les données des télescopes. Comme le précise Brigitte Rocca, professeur à l'Université Paris-XI, « nous disposons aujourd'hui de relevés profonds de galaxies qui remontent à la tendre enfance de l'Univers, soit un temps de regard en arrière de plus de 12 milliards d'années ». Ces observations permettent de confirmer ou d'infirmer les calculs fondés sur les hypothèses des simulations décrivant les galaxies à différentes époques. Ici, pas de limitation due à la puissance informatique. Les deux approches, complémentaires, avancent leurs pions l'une après l'autre. C'est ainsi qu'en 2004, plusieurs équipes, dont celle de Brigitte Rocca, ont mis en évidence l'existence de galaxies massives et très jeunes [1,2,3]. Même s'ils sont exceptionnels, ces objets représentent un nouveau défi pour le modèle de croissance hiérarchique, avec lequel ils cadrent mal. Il faudra que ces simulations gagnent en complexité et en puissance pour réussir à expliquer l'extraordinaire variété du bestiaire galactique qui finalement pourrait bien dépendre des deux processus d'évolution. ■ Anne Debroise

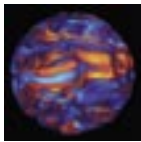
[1] Rocca-Volmerange et al., *Astronomy & Astrophysics*, vol 415, p.931, 2004.

[2] Cimatti et al., *Nature*, 430, 184, 2004.

[3] Glazebrook et al., *Nature*, 430, 181, 2004.

➤ <http://aramis.obspm.fr/HORIZON/docs/PROJET-HORIZON.doc>

➤ <http://dphs10.saclay.cea.fr/Sap/Activites/Science/Cosmologie/Simulation/index.html>



ALLAN SACHA BRUN
est astrophysicien
au service d'astrophysique
du CEA-Saclay.

©DR

Allan Sacha Brun : « Modéliser les turbulences à la surface du soleil »

Les mouvements turbulents qui animent la couche visible du Soleil restent une énigme. Pour la première fois, les astrophysiciens tentent de les simuler en trois dimensions. Entretien avec l'un d'eux.

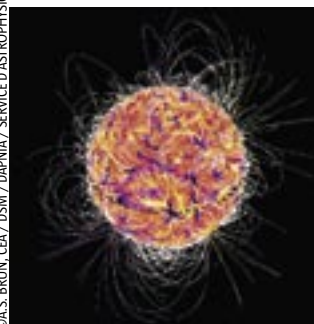
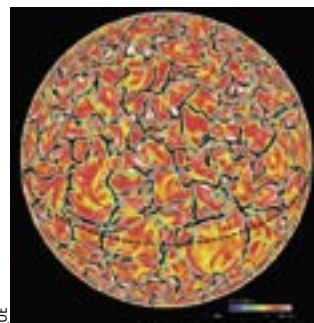
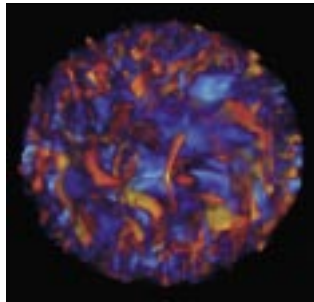
COURONNE SOLAIRE

Pourquoi modéliser le Soleil ?

ALLAN SACHA BRUN : Je m'intéresse à la modélisation du Soleil sur des temps courts, de quelques minutes/secondes à quelques années. Le but ? Comprendre tous les mouvements qui animent la surface du Soleil : les mouvements convectifs, les circulations à grande échelle, les éruptions et les éjections de plasmas solaires, etc. Car cette turbulence, et l'activité magnétique associée, a de profondes répercussions sur la Terre. Un seul exemple : en 1989, la majorité des foyers québécois ont été privés d'électricité à cause d'une éruption solaire : une bourrasque de particules chargées a perturbé le champ magnétique terrestre, créant des courants géomagnétiques induits qui ont court-circuité le réseau électrique. Et puis le Soleil est un laboratoire de physique grandeur nature où se produisent des phénomènes dynamiques complexes et extrêmes, qui restent encore mystérieux...

Comment décrivez-vous le Soleil ?

Il s'agit d'une boule de 700 000 kilomètres de rayon. Sa température s'échelonne entre 15,5 millions de degrés kelvin (°K) au centre à 5 800 °K en surface. Elle est composée de gaz ionisé, un plasma. On connaît en gros sa structure : un cœur nucléaire, qui occupe 25 % du rayon, où l'énergie nucléaire est produite puis transportée par rayonnement sous forme de lumière. Au-dessus, la zone radiative, assez homogène et très dense, couvre 70 % du rayon (incluant le



©A.S. BRUN, CEA / DSM / DAPNIA / SERVICE D'ASTROPHYSIQUE

LES SIMULATIONS NUMÉRIQUES montrent que la convection turbulente (en haut, mouvements ascendants en rouge, descendants, en bleu) génère un champ magnétique (au milieu et en bas).

cœur). Vient ensuite une zone convective qui transporte l'énergie par mouvements macroscopiques sur les 30 % de rayon restants. C'est cette convection, très turbulente, qui donne son aspect granuleux au Soleil. Mais les mouvements du plasma sont d'autant plus

difficiles à décrire qu'ils sont sous l'influence du champ magnétique et de la rotation et qu'ils s'étalent sur des échelles spatiales et temporelles qui diffèrent de six ordres de grandeur. Il est toujours impossible de modéliser l'ensemble de la turbulence magnétique solaire en trois dimensions. Mais on s'en approche, notamment grâce aux nouvelles capacités des superordinateurs...

En quoi consistent ces modèles ?

Il s'agit de décrire finement la dynamique non linéaire et dépendante du temps de plasmas turbulents (fluides conducteurs) subissant l'effet couplé de la rotation et du champ magnétique dans une sphère. C'est le domaine de la magnétohydrodynamique (MHD).

À quelles données ces simulations sont-elles confrontées ?

Aux observations des satellites Trace, SoHO par exemple, ou aux mesures du magnétisme de surface et de l'atmosphère faites par des instruments au sol comme Thémis. Mais on écoute aussi le chant du Soleil. Des ondes acoustiques se propagent en effet à l'intérieur du Soleil. Et les harmoniques sont caractéristiques de la composition et de la structure interne de l'astre.

Quels sont les mystères que ces modèles tentent d'élucider ?

Il y en a plusieurs : nous essayons de comprendre pourquoi la tachocline – la transition entre la zone radiative et la zone convective – est si fine : elle ne représente que 2 % du rayon du Soleil. Autre interrogation : pourquoi l'activité solaire (les taches et le champ magnétique global) suit des cycles d'environ onze ans et sa

polarité, des cycles de vingt-deux ans. Avec les modèles actuels en trois dimensions décrivant l'effet dynamo supposé être à l'origine de cette activité magnétique, on retrouve des cycles d'un an et demi... On essaie aussi de décrire la rotation différentielle de la zone convective et celle, en bloc, de la zone radiative du Soleil. On sait que les pôles tournent de la surface jusqu'à la base de la zone convective 30 % plus lentement que l'équateur. Mais ce phénomène est difficile à décrire dans le détail. Par ailleurs, les modèles en trois dimensions permettent d'étudier les phénomènes d'émergence et de plongée du champ magnétique à la surface à l'origine des groupes de taches solaires. On pense que la tachocline, qui est aussi une zone de cisaillement, pourrait être le lieu d'organisation du champ magnétique solaire à grandes échelles. Enfin, nous voulons décrire l'interaction entre convection, turbulence, rotation et magnétisme. Comment peut-elle déclencher des éruptions et engendrer le vent solaire rapide ? On le voit, nombre d'interrogations subsistent avant de pouvoir développer un modèle dynamique et global du Soleil, du centre à sa couronne. ■■ **Propos recueillis par Anne Deboise**

■ La lettre de l'IDRIS, décembre 2004 : « Vers une compréhension dynamique des étoiles »
www.idris.fr/docs/journal/Lettre-IDRIS-7.pdf

■ Le site d'Allan Sacha Brun :
www.colorado.edu/sabrun/index.html

PLATE-FORME 2015

Évolution des processeurs et plates-formes Intel® à l'horizon 2015.

Synthèse

Les nouveaux domaines d'application et schémas d'utilisation des ordinateurs à l'horizon de la prochaine décennie modifient les impératifs imposés aux plates-formes, en termes de performances, de réduction de la consommation électrique et de miniaturisation ainsi que d'enrichissement des fonctionnalités. Cette évolution impose de redéfinir totalement les modalités de conception des futures plates-formes informatiques pour les appréhender dans leur globalité. C'est la concrétisation de ces perspectives d'évolution à long terme qu'Intel appelle "Plate-forme 2015".

Architecture des microprocesseurs en 2015 : le calendrier Intel

Les processeurs et plates-formes Intel® se distingueront par leurs performances pures, mais aussi et surtout par des fonctionnalités de traitement et de communication, par leurs capacités en économies d'énergie, par une fiabilité, une sécurisation et une administrabilité de pointe ainsi que par une intégration transparente avec tous les autres éléments de la plate-forme.

1. Architecture multicœur

Intel continue de donner priorité à l'intensification du parallélisme de calcul. Cette action a débuté avec l'architecture superscalaire du premier processeur Intel® Pentium® et avec le traitement multiprocesseur. Elle s'est prolongée au travers de fonctionnalités comme l'"exécution dans le désordre" et, plus récemment, par la technologie Hyper-Threading du processeur Pentium 4. Ces progrès posaient les jalons pour le passage, sur une même puce, d'un seul cœur de traitement à plusieurs (architecture multi cœur). Intel propose d'ores et déjà des processeurs à double cœur (bi cœurs) pour les serveurs et pour les micro-ordinateurs. Intel prévoit de proposer au cours des dix ans qui viennent des modèles comportant plusieurs dizaines de cœurs, voire plusieurs centaines pour certains car cette architecture permet une formidable progression des performances tout en limitant la consommation électrique et l'échauffement.

L'augmentation de la fréquence d'horloge se heurte à des obstacles liés aux lois de la physique. Premièrement, les puces se miniaturisant et leur fréquence d'horloge s'élevant, la perte de courant au niveau des transistors s'amplifie, d'où une surconsommation électrique et une surchauffe. Deuxièmement, les avantages d'une fréquence d'horloge en hausse sont en partie contrebalancés par une plus grande latence de la mémoire. Troisièmement, pour certaines applications, les architectures classiques en série sont de moins en moins performantes au fur et à mesure que les fréquences progressent. Enfin, les délais de transmission du signal dus à la résistance de capacité (RC) s'allongent au fur et à mesure que la taille d'un microprocesseur diminue.

Les gains de performances devront donc s'obtenir en partageant le travail, c'est-à-dire en décomposant le traitement en toute une série d'opérations concomitantes et à confier celles-ci à autant d'unités de traitement plus petites. Ainsi, au lieu de traiter les opérations successivement et à très haute fréquence, les processeurs multicœurs parviendront à ces performances extrêmes avec des fréquences plus modestes en exécutant ces mêmes opérations non plus l'une après l'autre mais en parallèle. Les architectures multicœurs d'Intel permettront ainsi non seulement un accroissement très important des performances, mais limiteront aussi la consommation électrique et la dissipation thermique en n'activant que les unités nécessaires à l'exécution d'une fonction donnée. Les architectures multicœurs procureront par ailleurs les performances spécialisées et l'adaptabilité qu'exigeront les futures plates-formes. Outre des cœurs d'exécution généralistes, les processeurs Intel en comporteront aussi

d'autres pour différents types de traitement : gestion de l'affichage, des algorithmes de reconnaissance vocale, des protocoles de communication, etc. Certains processeurs autoriseront la reconfiguration dynamique de leurs cœurs d'exécution, interconnexions et mémoire cache en fonction des besoins.

2. Composants spécialisés

Des fonctions importantes, précédemment déléguées aux logiciels et à des puces spécialisées, seront assurées par le processeur lui-même pour un traitement plus performant, des économies d'échelle plus conséquentes et une large baisse de la consommation électrique. La rapidité de communication entre composants généralistes et cœurs d'exécution spécialisés sera critique pour atteindre les performances et fonctionnalités attendues des futures architectures de processeurs.

Ces prochaines années, les processeurs Intel incluront des organes spécialisés pour gérer les transmissions radio sans fil, le rendu vidéo en 3D, le traitement des signaux numériques, le traitement d'image évolué, la reconnaissance vocale et de l'écriture manuscrite, la gestion évoluée de la sécurité, la continuité de service et de l'administration, le traitement du langage XML et des protocoles Internet, l'extraction des connaissances ainsi que le traitement du langage naturel.

3. Organes mémoire

Pour alimenter en données de multiples cœurs d'exécution, ceux-ci disposeront à proximité, sur leur puce, d'une importante capacité en mémoire de l'ordre du gigaoctet qui remplacera la mémoire vive pour de nombreux systèmes. Leur mémoire cache sera par ailleurs reconfigurable, afin qu'une partie puisse être affectée en dynamique, en fonction des besoins applicatifs.

4. Micronoyau

Il faudra au microprocesseur une bonne dose d'"intelligence" intégrée pour jouer son rôle de chef d'orchestre (répartition des tâches entre ses multiples cœurs, leur mise sous et hors tension, leur reconfiguration lorsque le type de traitement à effectuer change, etc.) Il devra, de manière transparente pour l'utilisateur, accomplir lui-même une certaine "parallélisation" (threading) et décomposer les applications en unités d'exécution à traiter de front. Une solution consiste à utiliser un micronoyau intégré, qui déchargera les logiciels de niveau supérieur de ces tâches de gestion matérielles compliquées.

5. Virtualisation

Les futurs microprocesseurs exigeront plusieurs niveaux de virtualisation, en particulier pour "dissimuler" la complexité matérielle aux logiciels sus-jacents. Pour le système d'exploitation, son noyau et les logiciels, le processeur doit apparaître comme une ou plusieurs machines virtuelles par l'intermédiaire d'interfaces globales de virtualisation qui assurent le niveau d'abstraction nécessaire. La virtualisation pourra également servir à l'administration, à la fiabilisation et la sécurisation.

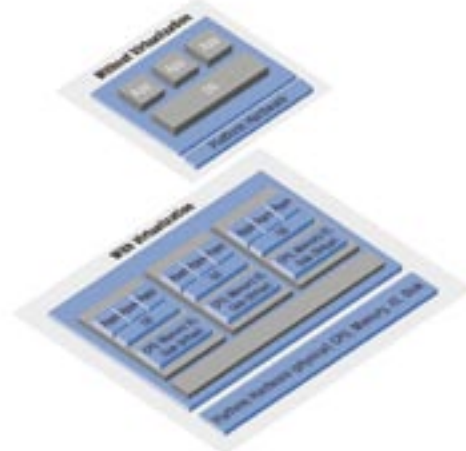


Schéma de la virtualisation selon Intel, qui interpose un niveau d'abstraction pour dissimuler aux logiciels la complexité matérielle.

6. Silicium et procédés de gravure

Doté de plusieurs milliards de transistors, le processeur disposera de matériaux et de structures nouveaux comme des matériaux à forte constante diélectrique (k) ou métalliques et des transistors tri-portes ainsi que, à plus longue échéance, de transistors III-V, de nano tubes de carbone et de nano fils de silicium. Ceux-ci permettront le maintien de la progression des fréquences de fonctionnement, la stabilisation voire la diminution de la consommation électrique ainsi qu'une miniaturisation toujours plus poussée.

7. Compatibilité et habilitation de l'écosystème

Les futurs processeurs et plates-formes fourniront aux applications et traitements nouveaux des performances de l'ordre du téraflops, similaires à celles de supercalculateurs, sans transiger sur la compatibilité avec le parc de logiciels existants et les produits du vaste écosystème dans lequel ils s'inscrivent.

Conclusion

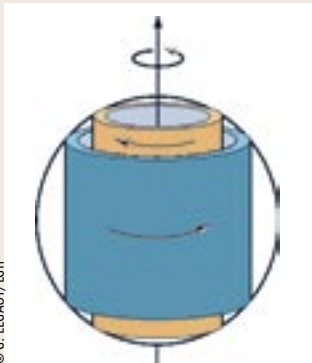
Cette "Plate-forme 2015" trace une vision ambitieuse qui procède non d'une révolution mais d'une évolution continue vers un parallélisme accru. Toutes ces innovations conjuguées conduiront à des moteurs de traitement plus puissants, adaptables et performants, ces qualités se répercutant sur les plates-formes qu'ils équiperont pour répondre aux besoins des utilisateurs. L'architecture des processeurs et des plates-formes doit s'orienter vers la virtualisation et une multiplicité de cœurs reconfigurables, une riche panoplie de fonctionnalités de traitement intégrées, une importante capacité mémoire sur la puce elle-même et un micronoyau ultraperfectionné. Cette évolution architecturale permettra le développement d'un immense éventail d'applications ultraperfectionnées qui transformeront le travail et la vie au quotidien au-delà de ce qu'il nous est possible d'imaginer aujourd'hui.



Secousses magnétiques

Le comportement du champ magnétique terrestre est très singulier. Il ne cesse de varier au fil du temps allant parfois jusqu'à s'inverser. Il connaît aussi de petites perturbations (on parle de secousses magnétiques) à l'échelle de l'année dont on ignore l'origine. Le champ magnétique naît à 2900 kilomètres sous nos pieds, dans le noyau externe. Là, le fer liquide, entraîné par la rotation de la Terre, génère des courants électriques qui, à leur tour, créent un champ magnétique par effet dynamo. Les géophysiciens s'interrogent : la propagation d'ondes d'Alfvén au cœur du noyau terrestre est-elle à l'origine de ces fameuses secousses magnétiques observées en surface ?

C'est pour tenter de le savoir que l'équipe « géodynamo » du laboratoire de géophysique interne et tectonophysique (université de Grenoble), dirigé par Dominique Jault, a entrepris de modéliser la dynamique du noyau. Leur approche est originale. Elle s'appuie sur l'un des rares dispositifs expérimentaux au monde capable de reproduire le fonctionnement de la dynamo terrestre. L'expérience, qui a démarré en 2005, consiste à faire tourner une sphère de cuivre aimantée dans une autre sphère remplie de sodium liquide, elle-même en rotation, de manière à créer les écoulements semblables à ceux qui animent le noyau de fer liquide de la Terre. La confrontation des premiers résultats expérimentaux avec ceux, numériques, obtenus grâce à un modèle théorique a permis de décrire ces écoulements. Ils s'apparentent à ceux qui seraient générés par la rotation de toute une famille de cylindres parallèles à l'axe de rotation de la Terre. Et les ondes d'Alfvén proviendraient de la rotation différentielle entre ces cylindres.



© G. LÉGAUT/LGIT

➔ www.ujf-grenoble.fr/ujf/fr/recherche/labujf/lgitfrw6.phtml
➔ www.lgit.obs.ujf-grenoble.fgr

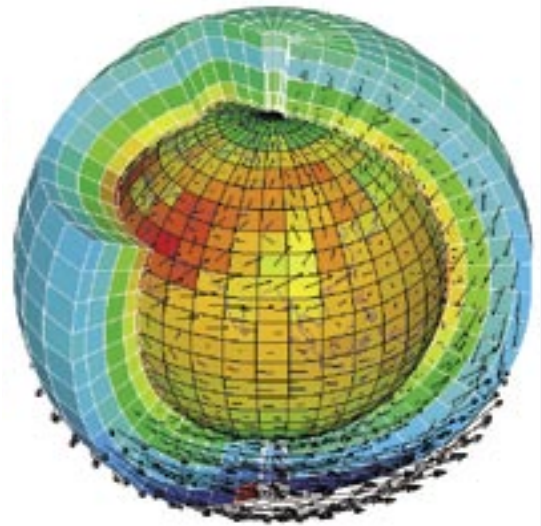
Quel climat pour demain ?

CLIMATOLOGIE

Grâce aux supercalculateurs, les climatologues anticipent les climats futurs. Mais les modèles actuels ont du mal à convaincre les décideurs de la réalité du réchauffement tant ils manquent de précision. Une précision synonyme, en grande partie, de puissance de calcul.

« La prévision climatique nécessite 10 000 à 100 000 fois plus de puissance de calcul que ce dont nous disposons en France aujourd'hui », assène Jean-Claude André. Le météorologue, qui dirige aujourd'hui le Centre européen de recherche et de formation avancée en calcul scientifique (Cerfacs), n'avance pas ce chiffre à l'aveuglette. Ce dernier provient en effet d'une analyse effectuée il y a tout juste un an par une vingtaine de spécialistes français de climatologie issus de l'Institut Pierre-Simon-Laplace, de Météo-France et du Cerfacs. Les scientifiques s'étaient alors réunis afin d'estimer les besoins informatiques de leur discipline. Le but ? En finir avec les approximations et les flous de la prévision climatique à long terme, qui constituent aujourd'hui le principal frein à la lutte contre le réchauffement climatique. L'enjeu est d'importance. « L'Europe doit pouvoir disposer de ses propres simulations et chiffres pour pouvoir négocier des accords internationaux pied à pied avec les États-Unis », poursuit Jean-Claude André.

Car le réchauffement climatique reste encore pour beaucoup, et notamment pour les décideurs, une réalité virtuelle. Les chiffres



LES CHERCHEURS DÉCOUPENT LA TERRE EN PETITS CUBES (LES MAILLES), car il est impossible de faire des calculs en tout point. Pour chacun d'eux, ils définissent la température, l'humidité, la pression, le vent, etc. C'est en faisant communiquer ces cubes entre eux que les modèles construisent des climats simplifiés. ©FAIRHEAD/LMD/CNRS

emblématiques brandis par le GIEC (Groupement intergouvernemental sur l'évolution du climat) ne sont, il est vrai, guère percutants : une hausse des températures globales de 1,4 °C à 5,8 °C d'ici la fin du XXI^e siècle... Pourquoi une telle incertitude ? Et que signifient ces valeurs au niveau régional ? La Camargue disparaîtra-t-elle sous les eaux ?

L'incertitude sur l'ampleur du réchauffement est due au manque de finesse des modèles

Les terres agricoles de Floride vont-elles s'assécher ? Les calottes glaciaires fondent de plus en plus vite ? Autant de questions qui, pour l'heure, restent sans réponses claires.

La moitié de l'incertitude sur l'ampleur du réchauffement est difficile à contrôler : elle est due à notre méconnaissance de la manière dont les différentes régions du monde vont se développer et des moyens, plus ou moins propres, qu'elles mettront en œuvre. Mais la seconde

moitié de cette incertitude provient bel et bien du manque de finesse des modèles.

Les climatologues réunis par Jean-Claude André ont identifié une dizaine de verrous scientifiques à lever (voir ci-contre). Mais pour ce faire, il faudrait multiplier la puissance actuelle des supercalculateurs européens par au moins 10 000 ! Au total, la France dispose aujourd'hui d'une puissance informatique efficace de 0,2 teraflops pour faire tourner les modèles climatiques, l'Europe de 5 fois plus (1 téraflops). Ce qui est peu en comparaison des États-Unis et du Japon (avec l'Earth Simulator) qui y consacrent chacun 4 à 5 teraflops. S'ils continuent sur leur lancée, ces deux pays parviendront à faire sauter ces fameux verrous vers 2020, avec dix à vingt ans d'avance sur les Européens... Coût estimé de l'investissement à fournir par ces derniers pour rester dans la compétition : 200 à 250 millions d'euros à renouveler sur trois ans. ■ Anne Debroise



Les dix verrous scientifiques à faire sauter

DÉTERMINER LA SENSIBILITÉ RÉELLE DU CLIMAT

à l'augmentation de la concentration en gaz à effet de serre : il s'agit essentiellement de mieux modéliser le cycle de l'eau dans l'atmosphère et de préciser le rôle des nuages. Ces derniers participent au réchauffement puisque la vapeur d'eau est un puissant gaz à effet de serre. Mais ils bloquent également les rayons solaires. Modéliser les nuages nécessite une petite maille (de l'ordre de un kilomètre contre quelques dizaines de kilomètres aujourd'hui) et une atmosphère à trois dimensions. Les modèles actuels « voient » l'atmosphère comme une superposition de couches à 2 dimensions interagissant peu.

MIEUX PRÉVOIR LES PHÉNOMÈNES TROPICAUX

(El Niño, les moussons, etc). Cela implique de modéliser les échanges de chaleur entre la surface de l'océan et l'atmosphère avec une résolution verticale de l'ordre de la dizaine de centimètres, cent fois plus fine que celle atteinte aujourd'hui.

QUANTIFIER LE RISQUE DE SURPRISE CLIMATIQUE

, par exemple le risque de ralentissement du Gulf stream. Ce courant longe la façade Nord-Ouest de l'Europe, et, via des échanges océan-atmosphère, adoucit considérablement le climat de cette zone.

SIMULER L'ÉVOLUTION DES PRÉCIPITATIONS DANGEREUSES, DES TEMPÊTES

ET DES CYCLONES

. Ces phénomènes irréguliers gagneront-ils en fréquence, en amplitude ? Une question que les modèles actuels peinent à trancher. Ces phénomènes dépendent en effet des interactions entre l'océan et l'atmosphère. Et pour cerner l'évolution, lente par nature, de l'océan, il faut pouvoir effectuer des simulations sur de longues périodes. Mais décrire des phénomènes météorologiques locaux requiert aussi une fine résolution. D'où un grand écart aujourd'hui impossible à réduire.

MODÉLISER L'ÉVOLUTION DES Puits DE CARBONE

: on suppose aujourd'hui que la capacité de l'océan et de la biosphère terrestre à absorber le gaz

carbonique restera constante. Une hypothèse hautement spéculative...

COMPRENDRE LE LIEN ENTRE OZONE ATMOSPHÉRIQUE ET CHANGEMENT CLIMATIQUE

. Cela nécessite une meilleure modélisation des échanges verticaux entre les différentes couches de la haute et moyenne atmosphère.

INSÉRER DANS LES MODÈLES LES CYCLES BIOGÉOCHIMIQUES

, par exemple le cycle du dioxyde de carbone et du méthane à travers divers compartiments (sol, végétation, océan, etc.). Il faudrait notamment inclure les cycles de développement du phytoplancton, une espèce essentielle dans l'assimilation du carbone par l'océan.

MODÉLISER L'INFLUENCE DE L'URBANISATION ET DU CHANGEMENT DE L'OCCUPATION DES SOLS SUR LE CLIMAT

. Là encore, les modèles supposent que l'occupation des sols restera constante. Une hypothèse incompatible avec les projections des démographes qui prévoient une augmentation d'un tiers de la population mondiale d'ici 2050.

CONTRÔLER LA QUALITÉ DES MODÈLES

en les confrontant à l'ensemble des données disponibles, en particulier à celles, très nombreuses, issues de l'observation spatiale.

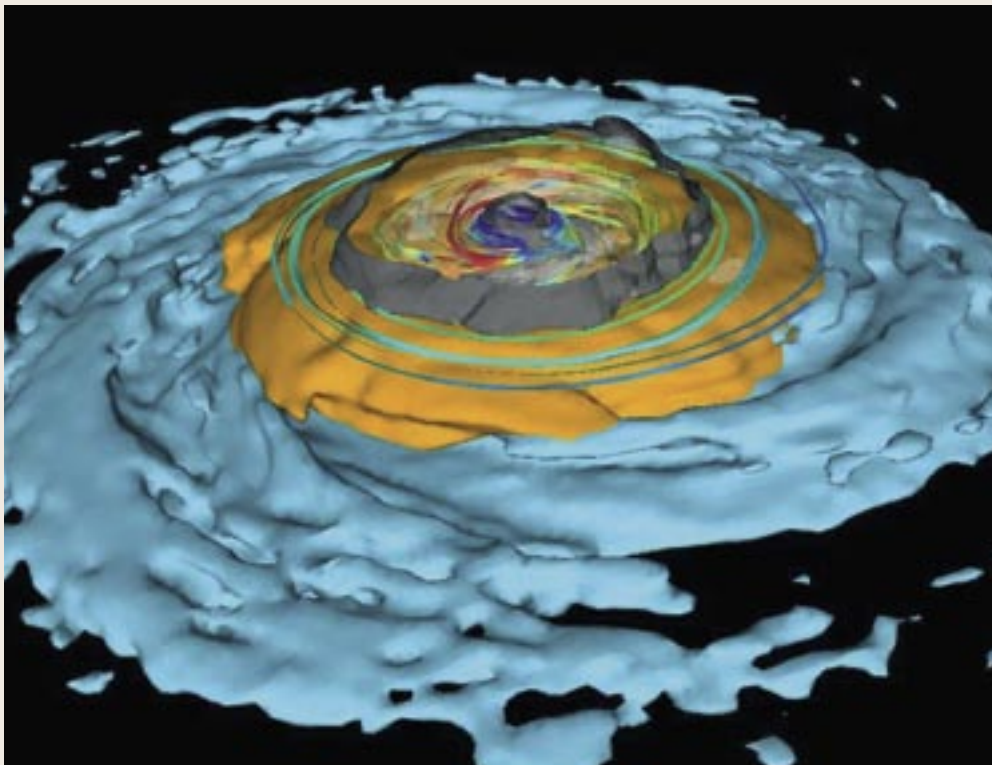
POUVOIR EFFECTUER SUFFISAMMENT DE SIMULATIONS

pour affecter une probabilité aux scénarios envisagés. ■■ A.D.

➔ Groupe intergouvernemental sur l'évolution du climat : www.ipcc.ch

➔ La description des modèles climatiques utilisés au Hadley Center : www.metoffice.com/research/hadleycentre/models/modeltypes.htm

➔ La simulation haute-résolution avec l'Earth Simulator : www.es.jamstec.go.jp/esc/eng/

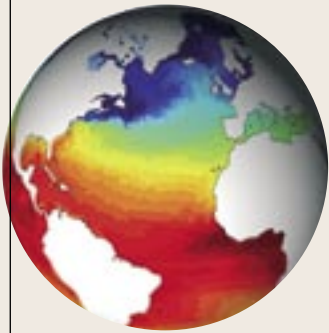


LES CYCLONES deviennent-ils plus nombreux et plus intenses avec le réchauffement planétaire ? La résolution insuffisante des modèles climatiques actuels ne permet pas pour l'instant de trancher. © COURTESY LOS ALAMOS

NATIONAL LABORATORY. IMAGE RÉALISÉE AVEC LE LOGICIEL ENSIGHT.



L'océan mondial en boîte



APRÈS DIX ANS D'EXISTENCE, LE PROJET MERCATOR ATTEINT LA MATURITÉ.

Depuis cet automne, il est possible de connaître en temps réel l'état des océans du monde entier, en surface et en profondeur. Et même d'avoir des prévisions océaniques à quatorze jours.

Les données sont fournies en permanence par les satellites altimétriques Topex/Poseidon et Envisat et par une armada de 1 900 flotteurs qui mesurent la température et la salinité entre 0 et 2 000 mètres de profondeur. Elles sont ensuite ingérées par un modèle ayant une résolution d'un quart de degré (soit 28 kilomètres à l'équateur).

Ce modèle a été mis au point par les experts de « Mercator océan », un groupe constitué par le CNES, le CNRS, l'Ifremer, l'Institut de recherche pour le développement, Météo-France et le Service hydrographique et océanique de la marine. Une cinquantaine d'équipes l'utilisent actuellement que ce soit pour la recherche, la marine, la prévision saisonnière, la pêche, les forages pétroliers ou encore le suivi de pollution, le routage en mer... Courant 2006, le modèle de prévision océanique devrait aussi prendre en compte la glace de mer aux deux pôles. Il sera alors le seul à le faire.

Autre objectif : intégrer la biologie afin de comprendre la dynamique des écosystèmes marins et des cycles biogéochimiques associés (carbone, oxygène, azote, fer, etc.).

➔ www.mercator-ocean.fr

Jean Pailleux : « Mieux utiliser les données d'observation »

MÉTÉOROLOGIE

La météorologie a été l'une des premières disciplines à utiliser les ordinateurs. Aujourd'hui, l'amélioration des modèles de prévision du temps nécessite d'intégrer un nombre croissant de données. Et donc des supercalculateurs de plus en plus puissants.

De quand datent les premiers modèles numériques en météorologie ?

JEAN PAILLEUX : De 1950. Ces modèles prédisaient le temps d'un jour sur l'autre. Ils ne comportaient qu'une variable: le vent vers cinq kilomètres d'altitude. On entrait dans l'unique équation (dite de conservation du tourbillon absolu), le paramètre du jour J, et on obtenait sa valeur à J + 1.

Ces modèles couvraient une grande partie de l'hémisphère nord, avec une maille de 400 à 500 kilomètres de large. Puis la prévision s'est affinée au rythme du développement des ordinateurs. Au milieu des années 1960, un modèle comparable a été utilisé pour la première fois aux États-Unis afin d'établir des prévisions quotidiennes du temps.

Les climatologues et les météorologues utilisent-ils les mêmes modèles ?

Oui. À partir des années 1970, les modèles ont intégré un nombre croissant d'équations classiques de la physique et de la mécanique des fluides pour faire des prévisions à quelques jours d'échéance. La prévision climatique à plus long terme s'est développée rapidement, surtout avec la prise de conscience du réchauffement climatique dans les années 1980. Les mêmes modèles



JEAN PAILLEUX est adjoint scientifique au directeur de la recherche, à Météo-France (Toulouse). © DR

servent à effectuer des prévisions climatiques sur des dizaines ou des centaines d'années, des prévisions saisonnières ou de la chimie de l'atmosphère (pour suivre le devenir des pollutions atmosphériques), et même de la prévision à l'échelle d'une ville ou d'une rue. Mais il s'agit de modèles à options : on peut choisir la taille de la maille, l'endroit du globe où elle sera la plus resserrée, ou remplacer certains paramètres par des constantes.

Le temps de calcul représente donc une contrainte forte...

En météo, nous avons besoin d'un jeu de données prévisionnelles plusieurs fois par jour. Nous sommes obligés de faire des compromis pour ne pas freiner le modèle. La prévision numérique à 24 h doit prendre 20 minutes maximum, soit à peu près une minute pour une heure de simulation.

Autre contrainte : avant de faire tourner le modèle, il faut avoir collecté les données initiales sur tout le globe et les

avoir traitées pour qu'elles soient utilisables par le modèle. La construction de l'état initial, ce que nous appelons « l'assimilation de données », est l'opération la plus coûteuse en temps. Les modèles actuels nécessitent d'entrer des dizaines de millions de paramètres. Marginale il y a trente ans, l'assimilation est aujourd'hui prépondérante.

Quels progrès sont attendus en prévision météo ?

Le progrès le plus important viendra de l'assimilation de données. On essaie d'utiliser plus et mieux les observations satellitaires. Le satellite américain NOAA18, lancé en mai dernier, fournira ainsi de nouvelles mesures, notamment du rayonnement tellurique. Ce paramètre nous donnera indirectement des informations sur la température et l'humidité de l'air.

Le passage de modèles hydros-tatiques à d'autres non-hydros-tatiques d'ici 2008-2010 nous permettra aussi de simuler plus finement l'atmosphère. Et la prise en compte de mouvements verticaux de petite échelle est indispensable pour mieux prévoir les événements extrêmes. Nous avons besoin pour cela d'une plus grosse puissance de calcul. À l'été 2007, Météo-France devrait disposer d'un calculateur 4 à 8 fois plus puissant que l'actuel, capable d'effectuer 5 000 à 10 000 milliards d'opérations par seconde. ■

Propos recueillis par Anne Debroise

➔ L'histoire de la prévision numérique du temps par Météo-France :

www.meteo.fr/meteonet/decouvr/dossier/previsionmeteo/pre3.htm

➔ L'histoire des ordinateurs et des prévisions météorologiques : www.metoffice.gov.uk/research/nwp/numerical/computers/history.html



Des protéines au bout de la souris

BIO-INFORMATIQUE

Les protéines tirent leur activité de leur structure tridimensionnelle. Une conformation très fragile, délicate à manipuler. Sauf par ordinateur...

Il y eut un temps où l'analyse structurale d'une protéine se faisait uniquement à la paillasse. C'était il y a quinze ans, avant la bio-informatique structurale. La bio-cristallographie et la résonance magnétique nucléaire (RMN) étaient alors les seuls moyens d'accéder au secret de ces molécules: leur structure tridimensionnelle, dont dépend toute leur activité. Par structure, on entend la façon dont la chaîne d'acides aminés qui constitue chaque protéine acquiert une

architecture spécifique: elle se replie en boucles, hélices ou autres motifs, eux-mêmes agencés de façon précise les uns par rapport aux autres.

La bio-cristallographie consiste à rechercher un solvant dans lequel la protéine va cristalliser. Puis à déduire sa structure en étudiant la manière dont le cristal diffracte des rayons X de haute énergie dans un synchrotron. « Déterminer la structure tridimensionnelle d'une protéine prend en moyenne un an et revient à environ 150 000 euros », précise Gilbert Deléage, directeur adjoint de l'Institut de biologie et de chimie des protéines (IBCP) et professeur à l'université de Lyon. De plus, la méthode ne marche pas à tous les coups: toutes les protéines ne cristallisent pas (c'est le cas notamment

des protéines membranaires, qui représentent 25 % des protéines du génome humain), et les cristaux ne diffractent pas forcément les rayons X avec une résolution suffisante.

La bio-informatique structurale, et en particulier la modélisation moléculaire, est venue mettre un peu d'huile dans ce processus fastidieux. Le principe est simple: on recense dans une banque de données les structures protéiques connues et, grâce à un logiciel, on compare les séquences de façon à imaginer la structure de la protéine inconnue. L'IBCP est un des laboratoires français à avoir développé un tel logiciel. « Lorsque l'on dispose de la structure linéaire de la protéine, on peut imaginer une infinité de repliements, explique Gilbert Deléage. Mais nous partons de l'hypothèse

que le nombre de ces repliements dans la nature n'est pas infini. Il y a de fortes chances pour qu'une protéine adopte des repliements connus. L'expérience montre que des séquences présentant ne serait-ce que 30% de similarités ont une architecture semblable. »

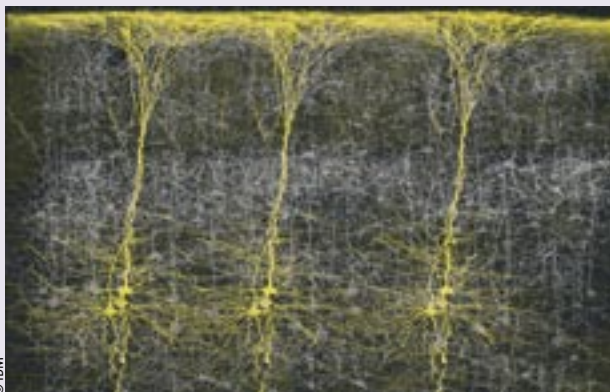
C'est ainsi que l'IBCP a construit quelque 13 000 modèles de protéines sur les 25 000 que compte le génome d'*Arabidopsis thaliana* (l'Arabette des dames), la plante modèle des généticiens. Ils ont été mis cette année à la disposition des chercheurs sur le web, qui peuvent les manipuler virtuellement en trois dimensions.

« Le problème avec les modèles, c'est qu'il faut trouver une protéine cousine germaine dont on connaît la structure pour pouvoir comparer les séquences »,



Un modèle de cerveau

Deux projets de modélisation de l'activité du cerveau ont été lancés en Europe durant l'été 2005. Le premier, baptisé Bio-i3 (pour bio-inspired intelligent information systems) fait partie du programme européen des technologies émergentes futures. Programmé pour une durée de quatre



© IBM

ans, il vise à modéliser l'activité électrique des neurones et à étudier les propriétés qui émergent de grands ensembles de neurones interconnectés, les mécanismes de plasticité et d'évolution de ces systèmes. Enfin, Bio-i3 tentera de générer et d'exploiter la conscience de l'environnement, voire la conscience de soi. Le deuxième programme, Blue Brain Project, est le fruit de la collaboration entre IBM et l'école polytechnique fédérale de Lausanne. Son ambition: modéliser les échanges d'informations dans les circuits du néocortex, la partie la plus complexe du cerveau humain. Il s'agit de décrire en trois dimensions les échanges électrochimiques entre neurones (image ci-contre). Les responsables rêvent d'ouvrir ainsi une fenêtre sur l'émergence de l'intelligence, avec l'espoir d'en savoir plus sur les désordres psychiatriques et neurologiques comme l'autisme, la schizophrénie ou la dépression. L'outil choisi est à la hauteur de ce projet ambitieux: il s'agit du Blue Gene, le supercalculateur d'IBM, avec 22,8 téraflops en vitesse de pointe. La collaboration est prévue pour deux ans.

➤ Bio-i3: http://domino.research.ibm.com/comm/pr.nsf/pages/rsc.bluegene_cognitive.html; www.cordis.lu/ist



APPLICATIONS VIE

reconnaît le chercheur. Les banques de données sont certes alimentées par les cristallographes qui y ajoutent 10 à 15 structures chaque jour. Mais la ressemblance reste parfois lointaine. Il s'agit alors de définir le seuil à partir duquel les séquences sont comparables. «*Nous travaillons sur les cas limites, ce qu'on appelle la modélisation moléculaire à bas taux d'identité.*» Cela consiste à identifier des structures secondaires (hélices, feuillettes) et à forcer le modèle avec. Résultat : des séquences présentant 10% à 35% de similarités peuvent

être comparées, et des protéines inconnues, modélisées avec 90% de fiabilité.

L'autre avantage des modèles moléculaires est qu'ils permettent de comparer la géométrie d'une protéine (notamment la répartition des charges électriques dans l'espace) avec celle de molécules connues. Ce qui nous éclaire sur sa fonction. L'IBCP a ainsi développé un logiciel original afin d'identifier des fonctions, sites actifs ou sites de fixation de ligands partagés par plusieurs protéines. Grâce à lui, une base de données de ligands

a été établie qui peut servir de base à un criblage virtuel. Criblage nettement plus rapide et abordable que celui, automatisé, réalisé aujourd'hui par tous les grands laboratoires pharmaceutiques en quête de nouveaux médicaments...

La pharmacologie virtuelle revendique d'ores et déjà quelques succès. Mohammad Afshar, l'un des fondateurs de la compagnie britannique RiboTargets, en 1997, témoigne : «*Grâce à des méthodes de criblage virtuel, nous avons identifié une molécule synthétique ayant des propriétés*

antibactériennes à large spectre.»

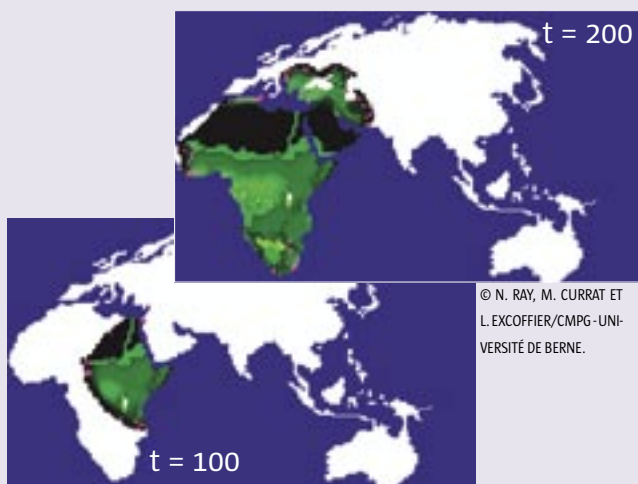
Revendue à Johnson et Johnson, cette molécule est la première à avoir été découverte par la simulation numérique. Aujourd'hui, les grands laboratoires pharmaceutiques utilisent systématiquement criblage virtuel et criblage haut débit pour tester les molécules dotées d'une structure tridimensionnelle.

Fort de ces succès, Mohammad Afshar a monté en 2003 une seconde société, cette fois-ci en France. «Ariana» intervient dans l'étape qui suit la détection d'une molécule active. «*Il est en*

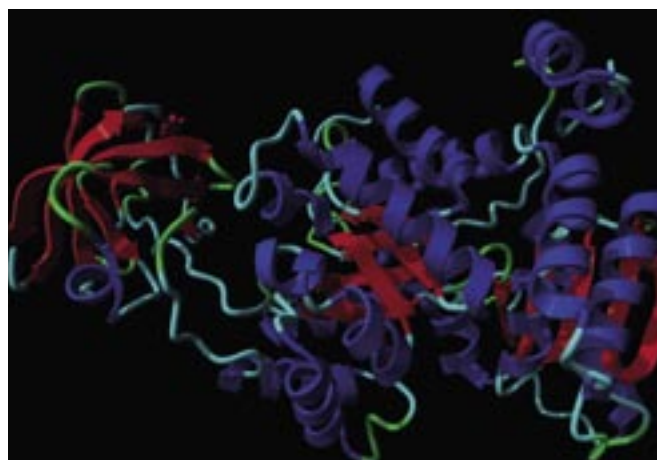
Les premières migrations humaines numérisées

Nombre d'indices génétiques et archéologiques plaident en faveur d'une origine unique des hommes modernes. Laurent Excoffier et ses collègues du laboratoire de génétique des populations de l'université de Berne, apportent aujourd'hui de nouveaux arguments [1]. Ils ont mis au point un logiciel baptisé SPLATCHE, qui simule pour la première fois la colonisation du monde par l'espèce humaine, en fonction des conditions environnementales qui régnaient à cette époque. Les données (végétation, disponibilité de l'eau et de la nourriture, paysage) sont traduites en deux paramètres : une «*capacité de charge*» (nombre maximum d'individus par localité compte tenu de ses ressources) et une «*valeur de friction*» (difficulté relative à migrer dans un certain environnement). Ces deux paramètres sont définis en chaque point d'un maillage couvrant le globe. Chacun de ces points abrite une sous-population virtuelle (ou «*dème*») dont on reconstitue l'évolution démographique et le bilan migratoire avec les dèmes voisins au fil du temps. Toutes ces données démographiques sont utilisées pour simuler la diversité génétique attendue en divers points du globe pour lesquels on a des données génétiques. Plusieurs simulations ont été effectuées avec des foyers situés en différents points de l'Ancien Monde. Chaque fois, diversité génétique simulée et observée sont comparées. Conclusion des premières études : les hommes modernes auraient bel et bien une origine unique et n'auraient pas évolué simultanément sur plusieurs continents. Et ce berceau se situerait en Afrique de l'Est, en accord avec les données archéologiques.

[1] N. Ray et al., *Genome Research*, 15, 1161, 2005.



© N. RAY, M. CURRAT ET
L. EXCOFFIER/CMPPG -
UNIVERSITÉ DE BERNE.



MODÈLE EN 3D de la protéine pyruvate kinase d'*Arabidopsis thaliana*. Les structures périodiques sont en rouge et bleu. Image réalisée avec le serveur Bioinformatique lyonnais. © INSTITUT DE BIOLOGIE ET CHIMIE DES MOLÉCULES

fait relativement facile de trouver une première molécule active dans un projet thérapeutique. Mais elle doit ensuite être absorbée, stable et non-toxique! Les chercheurs passent donc plusieurs années à synthétiser et à tester des molécules répondant au mieux à ces critères tout en conservant le principe actif.»

Ariana commercialise un outil d'aide à la décision fondé lui aussi sur l'utilisation de bases de données. «*Notre but est d'extraire le maximum d'informations des données existantes pour que les chimistes ne testent que de nouvelles hypothèses et qu'ils évitent de synthétiser des molécules déjà connues ou au comportement prévisible. Notre outil suggère*

également les structures susceptibles d'optimiser les multiples caractéristiques pharmacologiques de la molécule.»

Même si la bio-informatique intervient de plus en plus dans la mise au point de médicaments, et limite les tests cliniques sur l'homme, elle ne pourra jamais les remplacer. Car elle ne rend pas compte de l'extrême complexité et variabilité des réponses de l'organisme humain à l'ingestion d'une molécule active... ■■

Anne Debroise

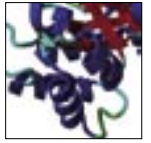
➤ Geno3D, logiciel de modélisation moléculaire : <http://geno3d-pbil.ibcp.fr>

➤ Les logiciels de l'IBCP :

<http://sumo-pbil.ibcp.fr>

<http://modeome3d-pbil.ibcp.fr>

www.arianapharma.com



Olivier Gascuel : « Observer le bricolage de l'évolution »

PHYLOGÉNIE MOLÉCULAIRE

L'irruption conjointe des données génomiques et de l'informatique a bouleversé notre manière de voir l'évolution des espèces vivantes. Explications.

Qu'a apporté l'informatique à la reconstruction des liens de parenté entre espèces vivantes, ce que l'on appelle la phylogénie ?

OLIVIER GASCUEL : Depuis la fin des années 1960, l'accroissement spectaculaire de la puissance de calcul des ordinateurs et les séquençages des génomes ont permis la naissance d'une nouvelle discipline : la phylogénie moléculaire. On ne suit plus l'évolution des caractères morphologiques des espèces, mais celle de leurs gènes et de leurs génomes. Les calculs effectués grâce à des logiciels nous permettent de reconstituer l'histoire et les séquences passées à partir des séquences (ADN ou protéines) que l'on connaît aujourd'hui. On a ainsi pu décrire l'évolution des plantes et des bactéries pour lesquelles les traces fossiles



OLIVIER GASCUEL est responsable de l'équipe méthodes et algorithmes pour la bio-informatique (LIRMM, CNRS/université de Montpellier). © DR

sont trop rares pour pouvoir utiliser les méthodes paléontologiques classiques. Nous avons aussi progressé sur l'histoire des mammifères.

Quels principes dirigent la reconstruction de séquences ancestrales ?

On commence par chercher dans différentes espèces des gènes homologues : similaires du point de vue de la séquence, ils codent pour des protéines présentant la même structure et la même fonction. Tout indique que ces gènes dérivent d'un ancêtre commun, et on cherche à établir par quelles transformations un gène ancestral a pu donner les formes actuelles du gène. On construit ainsi un arbre, dont les feuilles correspondent aux séquences contemporaines et les nœuds ancestraux représentent les séquences ancestrales. Pour élaborer cet arbre, la plupart des spécialistes utilisent les méthodes probabilistes, apparues dans les années 1980. En suivant le principe du maximum de vraisemblance, elles évaluent la probabilité d'avoir un plus ou moins grand nombre de transformations en fonction du temps écoulé entre les séquences ancestrales et actuelles.

Quelles difficultés rencontrez-vous ?

Le temps de calcul en est une. Pour traiter des jeux de données impliquant des centaines d'espèces et des dizaines milliers de sites, il faut trouver des algorithmes qui évitent d'explorer « tous » les arbres et « tous » les scénarios évolutifs.

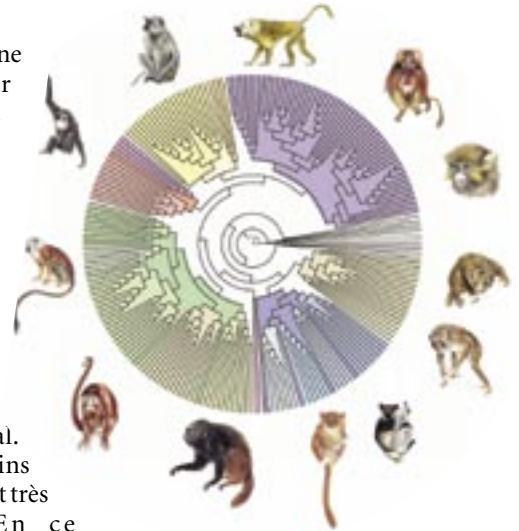
Une deuxième difficulté tient au fait que les différents sites d'un même gène n'évoluent pas toujours à la même vitesse au cours du temps. Il y a des

moments où le gène évolue très vite car l'environnement change. Mais tous les sites n'y sont pas sensibles de la même manière. Ceux qui sont essentiels pour la structure ou la fonction de la protéine correspondante évoluent très peu en général.

Ceux qui sont moins contraints évoluent très rapidement. En ce moment, notre équipe met en place des modèles qui intègrent non seulement les variations de vitesse et de mode évolutif d'un site à l'autre mais aussi le fait qu'un même site peut avoir plusieurs comportements au cours du temps.

Peut-on tester la validité des modèles ?

Difficilement, car les rares séquences ancestrales dont nous disposons sont dégradées. Ce sont, par exemple, quelques fragments du génome de l'homme de Neandertal, guère plus. On procède le plus souvent par recoupement. Un bon indice de fiabilité est par exemple de retrouver, dans une reconstruction obtenue *in silico*, une période d'évolution rapide cadrant bien avec un changement de climat ou d'habitat connu des paléontologues. Les virus évoluant très vite fournissent d'autres indices. On a fait évoluer en laboratoire des populations de virus de manière artificielle, en les séparant en sous-populations, et ce plusieurs fois de suite. Au bout d'un an, on a récupéré les séquences de ces virus et on a appliqué les méthodes de reconstruction



CET ARBRE PHYLOGÉNÉTIQUE inclut 21 des 23 espèces de primates actuelles. Il a été élaboré, avec le logiciel PHYML, à partir de séquences d'ADN représentant plus de 900 000 nucléotides

© E. DOUZERY ET P. H. FABRE/INSTITUT DES SCIENCES DE L'ÉVOLUTION, MONTPELLIER

phylogénétique. Elles ont parfaitement fonctionné et délivré l'histoire des divisions successives. Nos modèles ne sont donc pas trop mauvais...

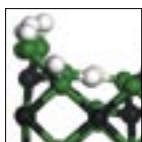
Quel est l'intérêt de retracer l'histoire des génomes et d'étudier leur évolution ?

On entre au cœur des processus d'évolution. La nature n'a pas exploré toutes les possibilités du monde physico-chimique. Elle a combiné des éléments existants, par exemple des séquences protéiques. Elle a aussi transformé et adapté les protéines existantes, pour leur donner des fonctions différentes. Comme l'a si bien dit François Jacob, elle a « bricolé ». ■■

Propos recueillis par A. D.

➤ *Mathematics of Evolution and Phylogeny*, Ed. Olivier Gascuel, Oxford University Press, 2005.

➤ Projet américain Tree of Life. <http://tolweb.org/tree/phylogeny.html>



La simulation, un outil incontournable !

Les simulations ont changé notre manière de faire de la physique des matériaux. Pour preuve ? Le calcul permet aujourd'hui de prévoir à quelques pour cent près certaines propriétés mécaniques, optiques, électroniques ou chimiques des matériaux. Les modèles utilisés reposent le plus souvent sur des calculs *ab initio*. Pourtant, la simulation de l'échelle macroscopique reste hors de portée des calculateurs les plus puissants : un micron cube de matière (un bout de cheveu) comporte déjà cent milliards d'atomes qu'il faudrait modéliser des secondes durant alors qu'ils oscillent à toute vitesse (une fraction de picoseconde, 10^{-12} seconde) ! Heureusement, le plus souvent, une telle précision n'est pas indispensable. On cantonne les calculs *ab initio* à de petites cellules de 100 à 200 atomes, caractéristiques de zones homogènes. Et on les couple à des modèles, moins précis, à plus grande échelle. Ces simulations multi-échelle à la fois d'espace et de temps rendraient compte de la plupart des phénomènes.

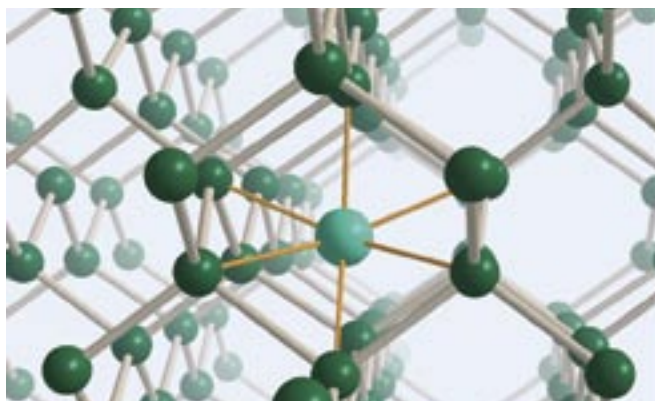
L'industrie microélectronique change d'échelle

ATOMISTIQUE

Toujours plus petit ! Telle pourrait être la devise des concepteurs de composants microélectroniques. Mais passer à la nanoélectronique nécessite de réduire mille fois la taille des composants. Un seuil difficile à franchir...

On oppose souvent recherche appliquée et recherche fondamentale. « Les démarches sont pourtant complémentaires. L'industrie microélectronique, en quête de miniaturisation, nous sollicite pour développer des méthodes de modélisations pour leurs futurs produits, constate Frédéric Lançon, responsable du laboratoire de simulation atomistique (L_Sim) du CEA, à Grenoble. Et pour ce faire, ils embauchent même des physiciens. » Ce qui rapproche ces deux communautés ? Une convergence d'intérêt autour... du nanomètre 10^{-9} m) : l'ordre de grandeur à modéliser pour les chercheurs, l'échelle de taille des composants à maîtriser pour les industriels. D'ailleurs, la simulation « atomistique », royaume des calculs de structures électroniques et de mécanique quantique, est

inscrite depuis 2001 dans l'*International Technology Roadmap for Semiconductors*. Un document de référence de l'industrie microélectronique qui fixe les objectifs industriels et les barrières technologiques à franchir. De fait, les modèles numériques utilisés pour dimensionner les transistors, contrôler leur dopage... deviennent inadaptés à l'échelle nanométrique. « Nous travaillons par exemple sur l'insertion d'atomes de germanium dans le silicium », explique Frédéric Lançon. Les industriels y ont recours pour accroître la mobilité des électrons dans les canaux des transistors. « Le problème est de maîtriser cette insertion d'atomes sans créer de défauts de structures, en faisant le minimum d'expérimentations, précise-t-il. Nous arrivons à prévoir le comportement des défauts en simulant les mécanismes élémentaires de mécanique quantique (calculs *ab initio* et dynamique moléculaire) couplés à des méthodes statistiques (celles de Monte-Carlo par exemple). » Des structures sont calculées pour des centaines de cellules d'une certaine d'atomes chacune, leurs évolutions cinétiques sont étendues au million d'atomes, grâce aux outils de calcul du CEA. Le laboratoire a lancé un projet



LES INDUSTRIELS ont recours à la simulation pour accroître la mobilité des électrons dans les canaux de transistors. La difficulté est d'insérer des atomes de germanium dans du silicium sans créer de défauts de structures. © CEA

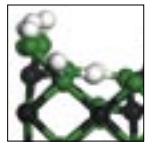
(« OsiGe_Sim ») avec le soutien de l'Agence nationale de la recherche pour coupler ce sujet à celui de l'oxydation du silicium avec le LAAS (CNRS, Toulouse) le CRMCN (CNRS, Marseille), le Leti (CEA, Grenoble) et STMicroelectronics. La plupart des recherches sont plus prospectives. Le projet européen BigDFT coordonné par L_Sim, qui a démarré début 2005, rassemble des mathématiciens et des physiciens. L'objectif ? Simuler des nano-objets fonctionnalisés par une molécule greffée. « Ici aussi, nous allons tirer parti de différents degrés de précision

dans la description du système pour le modéliser, explique Thierry Deutsch, coordinateur du projet : nous ne décrirons précisément la structure électronique du nano-objet, que là où elle varie le plus, en utilisant la théorie des ondelettes. Cette démarche intégrée dans Abinit, logiciel libre international piloté par un laboratoire belge, devrait nous permettre de simuler *ab initio* des milliers d'atomes au lieu de centaines aujourd'hui. »

■ Isabelle Bellin

➔ Laboratoire L_Sim : www.drifmc.cea.fr/sp2m/L_Sim

➔ BigDFT : www.drifmc.cea.fr/sp2m/L_Sim/BigDFT/



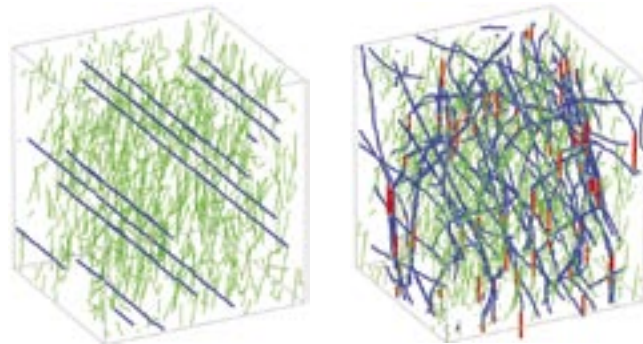
Fabriquer des matériaux virtuels

PHYSIQUE DES SOLIDES

Les propriétés mécaniques d'un solide, sa plasticité ou sa résistance à la cassure, par exemple, sont intimement liées à la dynamique des innombrables défauts de structure. En les modélisant, les physiciens arrivent à prédire les caractéristiques des matériaux.

Pour concevoir et dimensionner les objets qu'ils fabriquent, les industriels utilisent des codes macroscopiques fondés sur des données empiriques qu'ils ajustent grâce à des mesures expérimentales. « À terme, notre objectif est de remplacer certaines de ces données expérimentales par des résultats issus de simulations atomistiques, affirme Gilles Zérah du département de physique théorique et appliquée au CEA (Bruyères-le-Châtel). Ces logiciels du futur réuniront les outils en cours de développement dans différents laboratoires : des logiciels de simulation à l'échelle atomique, des simulations dynamiques de défauts, des codes de structure des industriels... »

Comment ces modèles peuvent-ils décrire le comportement mécanique d'un métal, par exemple sa résistance à une déformation ? Si les simulations fondées sur la dynamique moléculaire (à savoir les interactions directes entre les atomes) sont capables de suivre 10 millions d'atomes pendant quelques nanosecondes, elles deviennent inopérantes lorsque les déformations concernent des dizaines de milliards d'atomes sur des temps de l'ordre de la seconde. De fait, les phénomènes à modéliser ici sont les défauts de structure – des atomes



POUR PRÉVOIR LES PROPRIÉTÉS D'UN MATÉRIAU, les physiciens tentent de suivre, par le calcul, le mouvement des défauts. Comme on peut le voir sur ces images, deux types de dislocations (lignes bleues et vertes) dans un matériau sous contrainte peuvent interagir et s'annihiler localement aux intersections (en rouge). Les brins les plus courts ne sont plus mobiles. © CEA

manquants (lacunes) ou au contraire en sus (interstitiels) –, et surtout les dislocations, de longues lignes de défauts. Autant de maillons faibles qui vont contrôler, via leurs mouvements et leurs interactions, les propriétés macroscopiques.

« Pour simplifier, on peut considérer ces défauts comme des objets à part entière et développer des modèles d'évolution propres au comportement de chacun d'eux sur des échelles de temps et d'espace bien plus grandes que celles des simulations atomistiques », explique Gilles Zérah. Pour les défauts linéaires, les chercheurs développent des modèles de dynamique des dislocations. Ils ont ainsi montré que l'annihilation mutuelle entre dislocations influence la dureté, un effet jusque-là ignoré. Et c'est tout l'intérêt de ces simulations : comprendre le comportement des matériaux et, surtout, prédire leurs propriétés alors que les modèles empiriques des industriels seront toujours cantonnés aux seules expériences sur lesquelles ils sont appuyés. Dès lors, associées aux expériences, les

simulations numériques élargissent le domaine de validité des modèles.

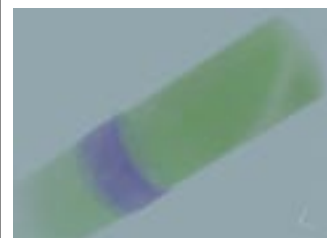
« Notre équipe développe plusieurs outils logiciels, adaptés à cette approche multi-échelle, précise Gilles Zérah. L'un d'eux, Abinit, développé depuis 1995, avec l'université catholique de Louvain (Belgique) est aujourd'hui un code de référence mondiale pour la simulation ab initio des matériaux. Nous avons aussi mis au point un modèle de dynamique moléculaire distribué au laboratoire d'électronique et de techniques d'instrumentation (Leti, CEA). Et, plus récemment, en collaboration avec le laboratoire d'études des microstructures (LEM, CNRS-Onera), un modèle de dynamique des dislocations (« MicroMegas ») distribué depuis deux ans à l'échelle internationale. » Ces logiciels sont autant de candidats pour être intégrés dans la plate-forme informatique générique étudiée dans le cadre du projet IOLS du nouveau pôle de compétitivité System@tic. ■ I. B.

↳ Logiciel Abinit : www.abinit.org
↳ Code de dislocations MicroMegas : www.zig.onera.fr/mm_home_page

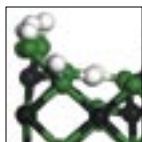
Nanofils semi-conducteurs

Les nanofils semi-conducteurs seront peut-être les futurs composants de base de l'électronique. « Mais ces minuscules structures de quelques nanomètres de diamètre restent très difficiles à caractériser finement », explique Yann-Michel Niquet, du laboratoire de simulation atomistique, du CEA, à Grenoble. « Les simulations sont un excellent moyen de comprendre et d'optimiser leurs propriétés – en particulier le transport d'électrons et les propriétés optiques. Elles permettent aussi d'orienter les expériences, choisir les gammes de diamètre à tester. » Des structures d'un million d'atomes (soit une section de nanofil de 10 nm de diamètre et 250 nm de long) peuvent être simulées en une nuit. « Nos méthodes sont semi-empiriques, précise le chercheur. De tels calculs ab initio sont hors de portée des calculateurs. On simule donc précisément les interactions entre les atomes d'un cristal parfait de silicium massif et on transfère ces paramètres physiques au nanofil. » Ce raccourci est en accord avec les expériences. Ces simulations sont faites dans le cadre d'un projet national théorique (TransNanoFils) et d'un vaste projet européen NODE, à finalité expérimentale et technologique. Commencé en octobre, il réunit treize partenaires (dont Philips, Infineon et IBM) coordonnés par l'université suédoise de Lund.

↳ <http://cmliris.harvard.edu/research/overview/index.php>



LES SIMULATIONS permettent d'optimiser les propriétés des nano-fils et, in fine, d'orienter les expériences. Ici, une boîte quantique d'arséniure d'indium (InAs) incluse dans un nano-fil d'arséniure de gallium (GaAs). Les atomes de gallium sont en vert, ceux d'indium en bleu et ceux d'arsenic en gris. Le diamètre du fil de GaAs est de 10 nm, de InAs, 6 nm. © CEA



Des aciers irradiés vieillissent artificiellement

VIEILLISSEMENT

Comment modéliser le comportement mécanique d'une cuve de réacteur nucléaire à partir de sa microstructure? En conjuguant la modélisation physique et l'algorithme...

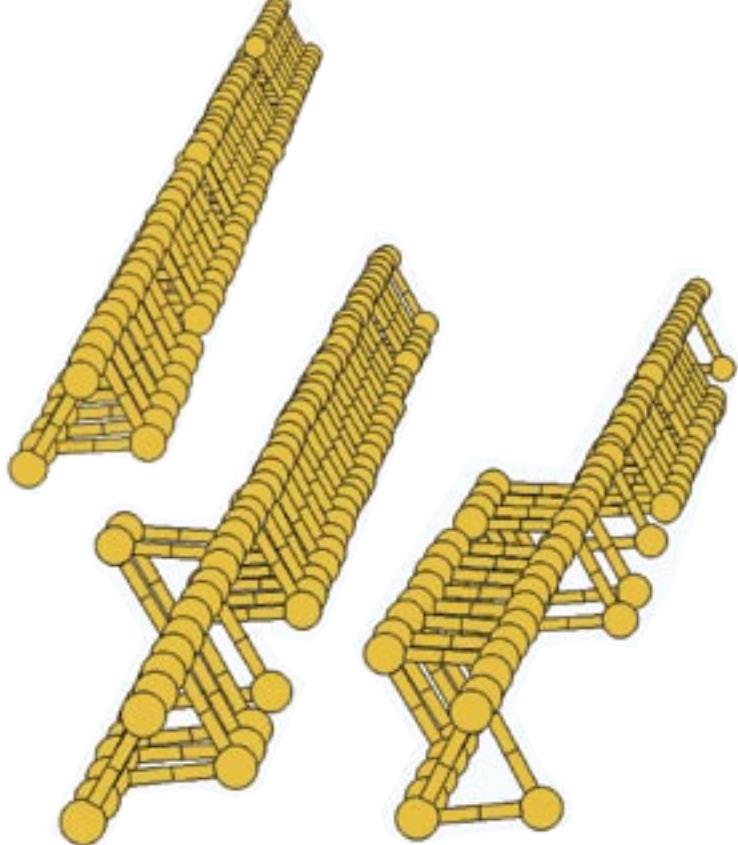
La cuve d'un réacteur nucléaire et ses composants sont soumis à rude épreuve, « bombardés » par des flux de neutrons et portés à des températures parfois supérieures à 340 °C! De leur tenue mécanique dépend pourtant la sûreté de l'installation et sa durée de vie. Rien d'étonnant à ce que le vieillissement des aciers dont ils sont constitués soit suivi de près par les exploitants.

Comment modéliser l'évolution sur le long terme (cinquante ou soixante ans) du comportement mécanique d'objets aussi imposants (une cuve de réacteur mesure plus de 13 mètres de haut sur 20 centimètres d'épaisseur, soit plus de 300 tonnes d'acier)? Pour l'instant, on utilise des réacteurs expérimentaux ou des modèles empiriques dans lesquels des échantillons sont plongés dans le réacteur. « Toutefois, depuis cinq ans, grâce aux nouveaux moyens de calcul, nous avons pu relancer avec le CEA les modélisations de l'irradiation des aciers à l'échelle atomique, se félicite Pascal Mialon, chef du département matériaux et mécanique des composants à EDF. Par ailleurs, de nouveaux outils d'expérimentation,

comme la sonde atomique tomographique, permettent de confronter la simulation à l'expérience, à l'échelle des atomes. On peut voir les impuretés, suivre leur réarrangement dans la structure. »

L'objectif est désormais de simuler l'évolution de la microstructure à l'échelle atomique, en particulier des défauts dus à l'irradiation. Un vaste projet européen a été lancé en janvier 2004 pour une durée de quatre ans: « Perfect », qui rassemble 28 partenaires coordonnés par EDF. Ces efforts doivent déboucher sur la création d'une plate-forme intégrant différents modèles de simulation numérique multi-échelle. Deux simulateurs (l'un de la cuve, l'autre de ses structures internes) devraient ainsi être construits.

« L'effort scientifique est énorme, explique Pascal Mialon. Les phénomènes en jeu sont complexes. » Simuler le bombardement neutronique revient en effet à modéliser un véritable jeu de billard atomique: sous l'effet des neutrons, les atomes se déplacent, des défauts sont créés (atomes manquants ou au contraire en surplus...). La structure complète se réarrange progressivement et se fragilise. « Nous utilisons des modèles de physique quantique, fondés sur des calculs *ab initio* à l'échelle atomique, explique Pascal Mialon. La première difficulté est d'adapter ces calculs à la microstructure de l'acier en question de façon simplifiée mais représentative.



LES CHERCHEURS ONT ICI CALCULÉ le mouvement relatif des atomes sous l'effet d'une déformation (dislocation « vis »). © DOMAIN ET MONNET/EDF

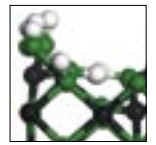
Puis, nous développons des codes de dynamique moléculaire pour simuler les interactions entre défauts, leur migration. L'évolution de la microstructure sur le long terme est modélisée grâce à des méthodes statistiques (Monte-Carlo cinétique). Des codes de dynamique des dislocations (mobilité des lignes de glissement) nous permettent ensuite de passer à l'échelle macroscopique puis à la structure totale avec nos propres codes par éléments finis. » Un tel simulateur de comportement mécanique devrait voir le jour d'ici fin 2007.

« Parallèlement, nous améliorons les méthodes algorithmiques et leur programmation afin d'intégrer les énormes changements d'échelles spatiales et temporelles en jeu, ajoute Jean-Louis Vaudescal, chef du département SINETICS à EDF. Par exemple, pour les matériaux métalliques, nous développons des méthodes numériques pour les calculs *ab initio*, pour lesquelles le temps de calcul varie linéairement avec le nom-

bre d'électrons N (on parle de calcul d'ordre N). Avec les méthodes actuelles, les temps de calcul varient avec son cube (calcul d'ordre N^3). » Les métaux sont particulièrement délicats à manier car ils sont conducteurs et leurs atomes interagissent à longue distance. Avec les machines actuelles, on sait faire des calculs d'ordre N sur des milliers d'atomes avec des matériaux isolants ou semi-conducteurs (en négligeant cette interaction). Mais pour les métaux, ces méthodes restent cantonnées à une centaine d'atomes. Or le but est, avec ces calculs *ab initio*, de simuler des ensembles d'environ 10 000 atomes. Un objectif qui sera un jour à portée de main grâce à ces évolutions de méthodes numériques, à l'accroissement constant des puissances de calcul et aux méthodes de parallélisation sur lesquelles travaillent aussi les chercheurs.

■ Isabelle Bellin

➤ Projet européen Perfect : <http://coscient.edf-labs.net/site/index.htm>



Michel Guttman : « Des modèles pour garantir la sûreté des réacteurs »

RADIATIONS

Depuis les années 1960, le service de recherche de métallurgie physique du CEA cherche à comprendre et à modéliser les effets à long terme de l'irradiation sur les métaux et les isolants, cristallins ou non. État des lieux avec son directeur actuel.

Comment vos travaux de recherche fondamentale sont-ils connectés aux enjeux de l'industrie électronucléaire ?

MICHEL GUTTMANN : Ils sont tout simplement essentiels : la modélisation prédictive du comportement à long terme des matériaux est indispensable pour assurer la sûreté des réacteurs, l'allongement de leur durée de vie, le stockage des déchets irradiés, le développement de nouveaux réacteurs... Tout cela exige une capacité d'extrapolation qui ne peut pas être fondée sur le seul retour d'expérience. Seule une modélisation s'appuyant sur la description physique des mécanismes élémentaires à partir de l'échelle atomique, paradoxalement mais incontestablement la plus sûre, peut la garantir. La simulation numérique est un outil central de cette physique en construction. Elle permet de suivre l'évolution de la structure intime du matériau bouleversée par les cascades de déplacements atomiques provoquées par l'irradiation, jusqu'à l'échelle macroscopique. Sous l'effet des mécanismes de déplacement des atomes – diffusion thermique et collisions nucléaires – les défauts ponctuels du cristal se déplacent et interagissent, conduisant à la



MICHEL GUTTMANN est directeur de recherche, chef du SRMP (service de recherche de métallurgie physique) au CEA. © D. R.

formation d'amas de défauts, de cavités, de bulles de gaz, d'amas atomiques d'éléments d'alliages ou d'impuretés puis de précipités, etc.

Où en êtes-vous dans cette modélisation multi-échelle ?

La modélisation complète, jusqu'à l'altération du comportement macroscopique qu'elle provoque, est encore utopique : il y a en effet douze ordres de grandeur à couvrir pour l'espace et vingt-quatre pour le temps, de la structure électronique des atomes jusqu'au vieillissement décennal des cuves ou millénaire des déchets ! Nous n'en sommes encore qu'au pavage de l'espace et du temps avec des dalles qui sont en cours d'élaboration... mais progressent très vite grâce à des méthodes telles que le calcul quantique *ab initio* des propriétés atomiques élémentaires, la dynamique moléculaire pour le dommage balistique initial et, pour les évolutions plus lentes, diverses méthodes de simulation fondées sur des algorithmes de type Monte Carlo, sur la cinétique chimique homogène, les méthodes de « champ moyen », etc. À titre d'exemple, nous avons récemment réussi, en

couplant le calcul *ab initio* avec un code Monte-Carlo original développé au CEA, à reproduire avec exactitude l'évolution des défauts dans du fer irradié pendant environ une heure.

La modélisation pourra-t-elle un jour remplacer l'expérimentation ?

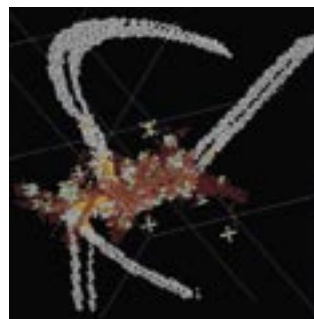
Bien au contraire ! Elles sont indissociables : l'expérimentation ciblée est le seul moyen de découvrir et d'analyser les phénomènes physiques à modéliser puis de perfectionner et valider les modèles. Les outils actuels nous permettent de produire et d'étudier les dommages causés par l'irradiation par des particules chargées à la même échelle que nos modélisations. C'est pourquoi nous avons lancé le projet Jannus (jumelage d'accélérateurs pour les nanosciences, le nucléaire et la simulation),

en collaboration avec l'IN2P3 (Institut national de physique nucléaire et de physique des particules) : deux groupes d'accélérateurs, l'un à Orsay, l'autre à Saclay, permettront de soumettre des échantillons à plusieurs modes d'endommagement simultanés, comme dans la réalité, tout en les observant *in situ* par microscopie électronique en transmission.

Quels sont vos partenaires ?

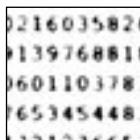
Nous appliquons nos modèles atomiques jusqu'au comportement des dislocations individuelles, longs défauts linéaires qui régissent la plasticité et la rupture du matériau. Au-delà, nos collègues du service de recherche de métallurgie appliquée du CEA prennent le relais. Partant des modèles de dynamique des dislocations qui décrivent leur comportement collectif à l'échelle d'un cristal élémentaire, ils modélisent le polycristal à l'aide de codes de plasticité cristalline en éléments finis et de techniques d'homogénéisation qui leur permettent d'intégrer toutes les échelles jusqu'au comportement mécanique macroscopique. Les besoins en ressource de calcul sont donc sans cesse plus importants. Toutes ces études sont en outre menées en coopération avec le CNRS et nos partenaires industriels EDF et Framatome, dans le cadre de programmes européens – Perfect pour les réacteurs de fission, l'European Fusion Development Agreement pour les futurs réacteurs de fusion – et de trois « contrats programmes de recherche » CNRS-Industrie. ■■ **Propos recueillis par I. B.**

➤ **Projet européen Perfect :** <http://coscient.edf-labs.net/site/index.htm>



CETTE « EXPÉRIENCE NUMÉRIQUE » DE DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE simule à l'échelle atomique le dommage induit par une cascade de déplacements produite par l'irradiation et son impact sur les dislocations. Atomes déplacés (en rouge), éjectés de leurs sites ou « interstitiels » (en orange), sites cristallins laissés vacants ou « lacunes » (en vert), atomes dont l'environnement est perturbé, « cœur » des dislocations, voisinage de défauts (en gris)...

© N.V. DOAN/CEA



Crypter avec des objets mathématiques abstraits

THÉORIE DES GROUPES

L'extension de la notion de multiplication à des objets mathématiques plus abstraits et plus généraux que les simples nombres permet de renforcer la sécurité des méthodes de cryptage et de faciliter leur utilisation.

Coder un texte pour le rendre illisible par des tiers, c'est tout l'art de la cryptographie. Sa longue histoire, qui remonte au moins à Babylone, est une suite de progrès donnant l'avantage tantôt au « bouclier » (des codes de plus en plus inviolables), tantôt à l'« épée » (les casseurs de codes).

Longtemps, les méthodes de cryptographie ont requis une « clé secrète ». Clé sans laquelle il était impossible de décoder et qui était donc censée constituer une bonne protection. L'avènement, dans les années 1970, des systèmes de cryptographie dits « à clé publique » a révolutionné la discipline. Car même en disposant de tous les outils nécessaires, le casseur de code ne peut déterminer la

fameuse clé qu'après un temps de calcul démesurément long. Le système de chiffrage à clé publique le plus connu est le système RSA, imaginé en 1977 par Ronald Rivest, Adi Shamir et Leonard Adelman, du Massachusetts Institute of Technology, aux États-Unis. Il repose sur un constat essentiel : le produit n de deux grands nombres premiers p et q (nombres divisibles uniquement par eux-mêmes et par 1) est très facile à calculer. En revanche, il est extrêmement long de retrouver les valeurs de p et q en ne connaissant que n . Si p est la clé secrète permettant de décoder le message crypté, ce nombre peut ainsi être camouflé dans le nombre n qui, lui, pourra être divulgué.

Parfois présentée comme le parangon des méthodes de cryptographie, la méthode RSA présente toutefois des inconvénients. Le principal étant qu'il est coûteux d'obtenir les grands nombres premiers p et q nécessaires à son fonctionnement : à l'heure actuelle, la puissance des ordinateurs est telle qu'il faut chercher des nombres premiers à plus de 150 chiffres pour disposer d'une clé sûre !

Des méthodes alternatives ont été proposées pour contourner ce problème et renforcer encore

la sécurité. L'une d'elles consiste à troquer le point de vue arithmétique de la multiplication entre nombres au profit d'un point de vue « symbolique ». On travaille alors avec des objets mathématiques abstraits dont l'ensemble constitue ce qu'on appelle un « groupe ». Par certains aspects, ces objets ressemblent aux nombres : on peut notamment les multiplier entre eux (mais on parle plutôt de « composition »). Mais par d'autres,

ils sont quelque peu exotiques. Ils peuvent en particulier présenter un « défaut de commutativité » : la composition de deux éléments a et b du groupe peut dépendre de l'ordre dans lequel on les prend. En d'autres termes, le produit ab n'est pas toujours égal au produit ba . Se placer dans le cadre des groupes permet donc de rendre la situation plus complexe que chez les nombres. Par conséquent, le message crypté est en principe plus difficile à démêler par un tiers. Mais on ne peut se contenter de se placer dans un groupe compliqué sous prétexte que cela compliquerait la tâche d'un éventuel espion : il faut aussi

que les utilisateurs légitimes soient en mesure de crypter (pour l'émetteur) et de décrypter (pour le récepteur) de façon rapide.

Vladimir Shpilrain, du City College de New York, et Alexander Ushakov, de l'université de la ville de New York, proposent pour cela d'utiliser un groupe particulier dit de Thompson. Dans une prépublication parue en mai dernier, ils expliquent en quoi la structure

Pour renforcer la sécurité, on peut troquer le point de vue arithmétique de la multiplication entre nombres au profit d'un point de vue symbolique

mathématique de ce groupe, connu et utilisé depuis fort longtemps dans d'autres branches des mathématiques, leur semble adaptée à la cryp-

tographie [1]. L'idée générale de la méthode évoque, sur le fonds, celle initiée par les concepteurs de RSA : il est facile de composer deux éléments a et b mais compliqué de retrouver a et b si l'on ne connaît que le résultat de leur composition. L'intérêt du groupe de Thompson est que l'on sait y trouver facilement des éléments a et b ayant des caractéristiques adaptées à une problématique de cryptage, contrairement aux nombres premiers qui sont requis dans la méthode RSA. ■ **Benoît Rittaud**

[1] V. Shpilrain et A. Ushakov, <http://fr.arxiv.org/math.GR/abs/0505487>



© BEINECKE LIBRARY/ YALE UNIVERSITY

Le code Voynich

Ce texte codé reste indéchiffrable. Les plus éminents spécialistes des codes secrets se sont cassés les dents dessus. Il n'a pas été conçu par un cryptologue diabolique assisté d'un ordinateur surpuissant. Il s'agit en fait d'un manuscrit vieux de plus de quatre siècles, le « manuscrit Voynich ». Ce texte montre une succession de mots d'une langue étrange et inconnue. Certains l'ont comparé avec des langues étrangères exotiques, d'autres ont passé ses lettres au crible de la statistique. En vain. Et si, finalement, il n'y avait rien à trouver ? Tel est l'avis de Gordon Rugg, de l'université de Keele, au Royaume-Uni. Il s'est servi des techniques cryptographiques disponibles au XVI^e siècle afin de singer la langue du manuscrit. Pour lui, le manuscrit ne serait qu'un canular. Tout le monde n'est pas convaincu. Des tests statistiques menés par ordinateur indiquent que la méthode du Britannique singe le manuscrit de façon un peu trop grossière. Mais quand bien même Rugg aurait raison, les nombreux *aficionados* du manuscrit seront difficiles à convaincre...

➔ G. Rugg, *Cryptologia*, 28, 31, 2004.

Antoine Joux :

« La cryptanalyse ne peut que progresser »

CRYPTANALYSE

L'évolution des supercalculateurs permet de mener des calculs autrefois impossibles, affaiblissant les codes de sécurité. La cryptographie repose en effet sur la complexité des calculs à mener pour décoder. Récemment, une équipe française s'est attaquée, avec succès, à l'un des protocoles les plus utilisés.

Quel est le principe du hachage ?

ANTOINE JOUX : En cryptographie, une fonction de hachage est un procédé permettant de « résumer » un message de taille arbitraire à un message plus court, de taille prédéfinie, de sorte qu'à deux messages initiaux différents correspondent deux résumés différents. Comme il existe plus de messages que de résumés, cet objectif ne peut être atteint : quelle que soit la méthode employée, il y aura toujours des messages qui seront résumés de la même façon. On parle alors de collision. En pratique, on cherche le moyen d'empêcher de trouver facilement deux messages qui seront résumés de façon identique. Et ce, pour éviter qu'un message puisse être remplacé par un autre.

Ce risque est-il important ?

Supposons que le résumé de n'importe quel message soit codé sur 160 bits, c'est-à-dire sur une succession de 160 zéro et un. Le nombre total de résumés possibles est de 2^{160} : en prenant $2^{160} + 1$ messages, on est sûr de trouver une paire de



ANTOINE JOUX est conseiller scientifique à la Direction générale de l'armement, à Issy-les-Moulineaux. Il est aussi professeur associé à l'université de Versailles-Saint-Quentin. © DR

messages se résumant de la même façon. Mais en raisonnant ainsi, on ne tient pas compte du paradoxe dit « des anniversaires ». Ce dernier a été nommé ainsi parce que la probabilité que, dans une classe de 23 élèves, deux soient nés le même jour est, de façon inattendue, supérieure à une chance sur 2. Dans un même ordre d'idées, le nombre de messages à tester pour avoir une chance sur deux d'en trouver deux ayant des résumés identiques est de l'ordre de 2^{80} (la racine carrée du nombre de résumés possibles). Un nombre qui reste hors de portée des calculateurs actuels.

Peut-on faire mieux ?

En 1998, nous avons trouvé, avec Florent Chabaud, un moyen de réduire ce nombre pour un protocole appelé SHA-0. En utilisant une technique appelée cryptanalyse différentielle, nous avons montré qu'il est possible de construire deux messages différents ayant le même résumé en 2^{61} opérations seulement. En 2004, Eli Biham

et Rafi Chen, de l'institut Technion de technologie d'Haïfa, en Israël, ont amélioré ces résultats pour atteindre 2^{56} . En reprenant ces recherches, j'ai pu descendre à 2^{51} et, pour la première fois, réaliser effectivement une collision. Il m'a fallu pour cela utiliser le supercalculateur Teranova installé par Bull sur le site de Ter@tec. Un pareil dispositif n'est pas à la disposition de n'importe quel pirate, mais la jonction n'en est pas moins faite entre la théorie et la pratique.

Quelles sont les conséquences concrètes de ces développements ?

Pour l'instant, la collision ne concerne que le protocole SHA-0. Et celui-ci est dépassé depuis dix ans par le protocole SHA-1. Mais la cryptanalyse ne peut que progresser : une équipe de chercheurs chinois, à laquelle appartient Xiaoyun Wang, de l'université Shandong, a livré en 2005 une méthode d'attaque de SHA-1. Ils l'ont encore améliorée tout récemment. La méthode reste théorique, mais les progrès actuels doivent être pris au sérieux. D'ailleurs, la NIST (National Institute of Standards and Technology), l'organisme américain qui a élaboré le standard SHA, ne s'y trompe pas : il a organisé fin octobre 2005 une rencontre sur le sujet. Même si elle n'est pas critique, la situation actuelle impose une réflexion pour préserver l'avenir. ■

propos recueillis par B. R.

[1] E. Biham *et al.*, Collisions of SHA-0 and reduced SHA-1, Eurocrypt 2005.

Premier ou pas ?

Certaines méthodes de cryptographie - dont la RSA - exploitent la difficulté de factoriser les grands nombres. La sécurité des protocoles diminue à mesure que les mathématiques progressent. Manindra Agrawal, Neeraj Kayal et Nitin Saxena, de l'institut indien de technologie de Kampur, ont trouvé un moyen théoriquement rapide et infaillible pour savoir si un nombre donné possède, ou non, des diviseurs autres que lui-même et 1. Certes, on ne résout pas le problème de la factorisation, mais il s'agit d'une percée dans une question apparentée. Une mauvaise nouvelle pour les nombreuses techniques de cryptage ? Pour l'instant non. Les ressorts des techniques exploitant l'arithmétique des nombres premiers à des fins de cryptographie demeurent en effet plus complexes que le problème résolu par les Indiens.

➔ www.cse.iitk.ac.in/users/manindra/primality_v6.pdf

225 964 951 - 1

Les nombres premiers constituent un lien entre mathématiques théoriques, calcul de haute précision et cryptographie. Tout progrès dans les premiers est donc susceptible d'avoir des répercussions dans la dernière. Les nombres de Mersenne, qui sont de la forme $2^n - 1$, figurent parmi les nombres premiers les plus prisés des théoriciens. Mal connus on doit se contenter de chercher les plus grands. Le dernier record est celui de Martin Nowak, un ophtalmologiste allemand : il a démontré que $2^{25964951} - 1$ est un nombre premier. Cette découverte a été réalisée grâce au programme de calcul partagé du groupe Internet de recherche de grands nombres de Mersenne premiers. Ce programme permet, en prêtant au groupe une partie de la puissance de calcul de son ordinateur personnel, d'apporter sa contribution aux énormes calculs requis pour trouver ces perles rares. Et d'être l'heureux propriétaire de l'ordinateur qui débusera le prochain nombre de Mersenne...

➔ www.mersenne.org



Humains virtuels

L'Inrets (Institut national de recherche sur les transports et leur sécurité) travaille à la mise au point de modèles du corps humain toujours plus réalistes et versatiles. Avec des os, des muscles et un peu plus. Cela afin de permettre des simulations fiables de toutes sortes d'accidents de la circulation. « L'Inrets pilote le projet européen Humos 2, financé par la Commission européenne, explique Philippe Vezin, l'un des chercheurs impliqués dans ces recherches. Entre 1997 et 2000, Humos ("HUMAN MODEL for Safety"), avait permis de créer un modèle numérique d'homme "moyen", en position de conduite. Humos 2 (septembre 2002 à février 2006) a permis de lui adjoindre une femme petite et un homme grand et de doter les trois d'une version debout. » Des outils permettent de créer des modèles de stature intermédiaire et de les positionner. Les chercheurs s'attaquent maintenant à des problèmes plus délicats, comme celui de la tonicité des muscles, qui peut influencer le comportement du corps au moment du choc.

➔ <http://humos2.inrets.fr>

Désenfumage au Grand Palais

« Nous développons depuis vingt ans des outils numériques pour étudier les incendies, explique François Demouge, ingénieur de recherche en sécurité incendie au CSTB (Centre Scientifique et Technique du Bâtiment). Ce qui est nouveau, c'est que la simulation est désormais impliquée dans la démarche réglementaire. » Ainsi, tandis que la grande nef du Grand Palais de Paris s'apprêtait à rouvrir ses portes après de longs travaux, une équipe du CSTB procédait à la simulation numérique du dispositif de désenfumage prévu par le maître d'ouvrage. « Nous avons pu constater son efficacité. Les ouvrants initiaux ont été élargis de façon suffisante pour respecter les objectifs de sécurité de la réglementation. » Ce genre de simulation est courant au CSTB. Divers types de bâtiments accueillant du public, ou encore des tunnels, sont désormais testés de cette manière. Ainsi le futur Zénith de Strasbourg, ou encore le parc des expositions d'Angoulême, ont subi la même épreuve virtuelle. Avec succès.



SIMULATION d'un choc frontal sur la Citroën C6. © PSA PEUGEOT/CITROËN

Collisions très calculées

CRASHS AUTOMOBILES

Froisser de la tôle numériquement est devenu chez PSA-Peugeot-Citroën une activité banale. L'objectif : améliorer la sécurité passive en jouant sur l'ensemble du véhicule.

« Tous modèles confondus, nous réalisons quelque 20 000 simulations de choc par an, précise Laurent Di Valentin, responsable de la modélisation-synthèse-sécurité passive chez PSA-Peugeot-Citroën. Cela permet d'optimiser la sécurité passive des nouveaux véhicules en intervenant très tôt dans le processus de conception. Bien sûr, on effectue encore de temps à autre un véritable "crash" (environ un pour dix numériques). Mais désormais on sait d'avance ce qu'il va démontrer, l'essai n'est plus une surprise. » L'exercice n'est pas trivial, l'automobile étant un objet fort complexe. Elle réunit en effet un grand nombre de pièces obéissant à des « lois matériaux » très diverses, et l'accident provoque une grande variété de phénomènes physiques difficiles à simuler. Il y a des « grandes déformations », des ruptures, plus généralement des phénomènes non

linéaires, des contacts... Au-delà des pièces, il faut encore simuler le comportement de multiples modes d'assemblage : boulons, soudures, collages...

Après les chocs classiques (frontal, latéral sur barrière et sur poteau, arrière), on s'intéresse désormais au « choc piéton », qui fait partie de la batterie de tests du processus d'homologation depuis octobre 2005. Les logiciels modélisent donc des impacts de jambes sur des pare-chocs et de têtes sur des capots. Et lorsqu'il s'agit d'un véhicule très avant-gardistes à ce sujet, comme la toute nouvelle Citroën C6 dotée d'un détecteur accélérométrique sur son pare-chocs et d'un capot actif pyrotechnique, la simulation gagne en subtilité.

« Les modèles numériques que nous employons, indique Laurent Di Valentin, comportent souvent 600 000 à 700 000 éléments. Un choc dure typiquement 140 millisecondes, mais l'essentiel se déroule pendant les 110 premières. » Le « pas de temps » utilisé dépend de la vitesse de propagation du son dans les matériaux et de la taille des plus petites mailles (10 mm). « En l'occurrence, nous utilisons un pas de une microseconde, qui devrait dimi-

nuer lorsque nos maillages deviendront encore plus fins. »

Une simulation occupe en général quatre processeurs pendant quelque 48 heures. Mais il est banal de lancer en même temps cinq ou six, ou même dix calculs destinés à tester tout une gamme d'hypothèses. Les ingénieurs disposent d'un « cluster » de serveurs Fujitsu totalisant quelque 700 processeurs.

Près de vingt ans après les premiers essais de simulation de crash, l'impact de cette technologie sur l'évolution de la sécurité passive des véhicules est devenu considérable. « Nous commençons à tester numériquement un nouveau modèle, précise Laurent Di Valentin, à peu près un an avant la réalisation du prototype. » Ce qui permet de tenter bien des choses... « Comme nous simulons le véhicule entier, très tôt, nous pouvons obtenir un compromis global en jouant sur de multiples sous-ensembles. À ce stade, on peut remettre en cause même un organe important, puisqu'on est loin de l'avoir figé. » Et tout cela en cassant des automobiles numériques presque gratuites, au regard du million d'euros que coûte un « vrai » crash de prototype. ■

Pierre Vandeginste

➔ www.psa-peugeot-citroen.fr



Amerrissages et explosions numériques... pour éviter le pire

AÉRONAUTIQUE

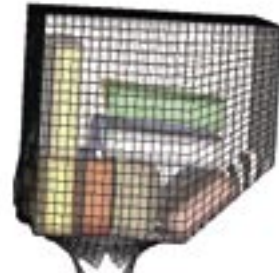
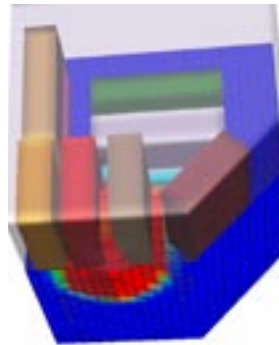
L'aviation utilise désormais la simulation numérique pour étudier toutes sortes de situations dramatiques. C'est l'une des spécialités de l'Onera de Lille.

L'aéronautique fut l'une des premières industries à exploiter les possibilités de la simulation numérique. L'expression « soufflerie numérique » résumait cette petite révolution : on faisait voler un nouvel avion par le calcul avant même de tester sa maquette en soufflerie. Depuis, l'usage de la simulation n'a cessé de s'étendre à de nouveaux aspects de l'aviation. Ainsi, Éric Deletombe, à l'Onera de Lille, fait amerrir des avions de ligne. Sur mer d'huile ou démontée, c'est selon. Notamment dans le cadre du programme européen CRAHVI (Crashworthiness of Aircraft for High Velocity Impact).

« Un amerrissage dure une seconde, pour ce qui est de la phase initiale déterminante. Un quart de seconde pendant lequel la queue de l'appareil entre en contact avec l'eau. Un second quart de seconde pendant lequel le nez plonge. Après, cela dépend... »

Sur le calculateur parallèle dont dispose l'Onera de Lille (24 processeurs), chaque quart de seconde est simulé, en quinze jours de calculs, sur 4 processeurs.

Pourquoi ces amerrissages pour de faux ? Pour s'assurer de l'intégrité de l'avion, mais aussi vérifier la tenue des coffres à bagages intérieurs ou des sièges : les modèles futurs d'appareils pourraient



profiter de ces observations. À propos de bagages, Éric Deletombe et son équipe travaillent aussi sur les explosions dans les soutes. Pour cela, les bagages sont simulés dans le détail : une valise ne réagit pas comme un sac à dos ou une cantine métallique. Chacun peut absorber une partie de l'énergie mais aussi devenir un projectile. Le conteneur à bagages est également simulé : il peut bien sûr jouer un rôle protecteur. Enfin l'avion lui-même doit être modélisé dans le moindre détail et il ne s'agit pas ici d'étudier simplement son comportement aérodynamique, mais la résistance à l'arrachement de chaque rivet. N'oublions pas une dernière créature difficile à simuler : l'explosion elle-même, qui nécessite d'ailleurs un modèle de plus de un million d'éléments.

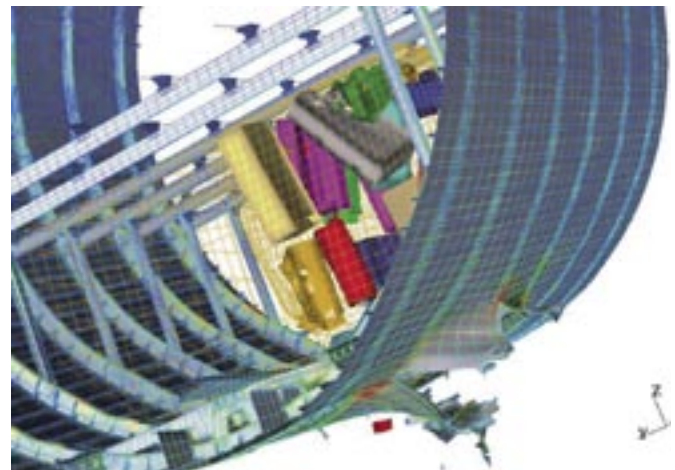
Ces calculs permettent d'étudier des « scénarios de ruine », de visualiser par exemple où

et comment la peau de l'avion va se « déboutonner » le long des pointillés que sont ses lignes de rivetage, plus généralement d'évaluer les ravages dans un contexte donné et les conséquences sur la survie de l'appareil.

Quelles leçons peut-on tirer de ce genre de simulations ? Des idées sur la façon de mieux répartir les bagages de différents types dans les soutes. Des indications pour la conception des containers. Enfin, elles permettent d'étudier dans une situation extrême l'apport éventuel de nouvelles techniques d'assemblage.

La liste des scénarios à risque étudiés par l'équipe d'Éric Deletombe ne s'arrête pas là. Mentionnons encore les atterrissages en catastrophe et les impacts de volatiles. Que la SPA se rassure : les oiseaux numériques sont bien traités. ■ P.V.

➔ www.onera.fr



EXPLOSION NUMÉRIQUE dans le conteneur à bagages d'un avion commercial. © ONERA



Jean-Jacques Thibert :

« La difficile maîtrise des turbulences »



Adaptez-moi ce maillage, et plus vite que ça !

Impossible d'aborder la simulation numérique sans parler de maillage. Les méthodes par éléments finis, au cœur de nombreuses modélisations, supposent des calculs... sur un nombre fini d'éléments, à savoir les polyèdres du maillage. « Pour modéliser les écoulements autour d'un avion, nous "maillons" son volume extérieur en quelques millions de tétraèdres en quelques minutes seulement. Il fallait 4 heures en 1990 ! », précise Paul-Louis George, responsable du projet Gamma à l'Inria (Institut national de recherche en informatique et automatique). Cette équipe de réputation mondiale développe des algorithmes de génération automatique de maillage. Un de leur logiciel, GHS3D, est intégré dans de nombreux codes industriels utilisés en aéronautique ou par l'aérospatial. « Notre meilleur est générique : la taille des mailles est définie automatiquement en fonction du champ métrique du problème, puis adaptée grâce à des modèles mathématiques (des estimateurs d'erreurs). » Chaque calcul dure quelques heures. Il est en général réitéré plusieurs fois avec de nouvelles instructions d'adaptation de maillage. « Nous cherchons à améliorer ces adaptations, à mieux définir les champs métriques, à faire des maillages anisotropes (tétraèdres non réguliers) ou très gros (100 millions de tétraèdres) voire des maillages hexaédriques... »

➔ www.inria.fr/recherche/equipes/gamma.fr.html
➔ Le Maillage facile, P J Frey et P L George, Hermes Lavoisier, 2003.

AÉRODYNAMIQUE

Aussi surprenant que cela puisse paraître, les phénomènes de turbulence restent difficiles à simuler numériquement, même avec les plus gros calculateurs...

Où en est la simulation numérique de l'aérodynamique des avions ?

JEAN-JACQUES THIBERT : Mieux prévoir les performances aérodynamiques est bien sûr une préoccupation constante des industriels. Optimiser les formes permet en effet d'accroître les performances en vol et de diminuer la consommation de carburant, donc la pollution. Avec la simulation, nous réduisons les multiples étapes nécessaires à la définition d'une nouvelle géométrie et surtout le nombre d'essais en soufflerie. De gros progrès ont été faits ces dernières années, en particulier grâce à l'évolution des calculateurs. Preuve que la simulation en aérodynamique est désormais bien entrée dans les mœurs, notre plateforme de référence, elsA (ensemble logiciel pour la simulation en aérodynamique), transférée à l'industrie en 1998, est de plus en plus utilisée : par Airbus en France et à l'étranger, la Snecma, Turbomeca, Eurocopter, le CNES... elsA reste néanmoins aussi un véritable outil de recherche, évolutif.

Sur quelles bases scientifiques reposent ces simulations ?

La prévision des écoulements autour d'un aéronef repose sur la résolution des équations de la mécanique des fluides, dites de Navier-Stokes. Celles-ci permettent de calculer certai-



JEAN-JACQUES THIBERT est directeur du département d'aérodynamique appliquée de l'Onera, à Châtillon. © DR

nes données physiques fondamentales pour valider la géométrie d'un avion (pressions sur les parois, traînée, portance...). Notre gros problème en aéronautique est qu'au voisinage des parois, l'écoulement n'est ni laminaire ni régulier mais s'apparente à des tourbillons chaotiques. Et ceux-ci sont difficiles à simuler numériquement. On ne peut les aborder que d'un point de vue statistique. Ces turbulences sont pourtant essentielles : en influant directement sur la traînée par exemple, elles conditionnent la consommation de l'avion.

Peut-on espérer améliorer la modélisation de ces turbulences ?

Bien sûr. C'est d'ailleurs l'un des principaux axes de développement de notre code elsA. Conjointement, d'autres recherches visent à augmenter la rapidité des calculs par des techniques numériques et des méthodes de parallélisation. Pour l'instant, la turbulence

à l'échelle de l'avion complet est prise en compte grâce à des approximations. L'objectif est de s'en affranchir progressivement. La résolution complète des équations de Navier-Stokes instationnaires (on parle de DNS ou simulation directe) reste hors de portée des calculateurs actuels : elle nécessite des mailles et un pas de temps trop petits. Elle est néanmoins possible pour des géométries simples. On commence aussi à calculer précisément les turbulences à une grande échelle (approche dite « LES » pour Large Eddy Simulation). Mais, nous sommes encore loin de pouvoir faire un tel exercice sur un avion complet : cela coûterait 20 millions de dollars, contre seulement 30 dollars avec les modèles actuels...

Y a-t-il vraiment intérêt à tenter d'améliorer la précision de ces calculs ?

Oui. C'est la seule façon d'améliorer l'aérodynamique tout en limitant au maximum le nombre d'essais en soufflerie. Or, à l'heure actuelle, plusieurs points de certification et les frontières de l'enveloppe de vol (phases d'atterrissage ou de décollage par exemple) ne sont pas simulés avec assez de précision. Seuls les essais en soufflerie parviennent à les reproduire. Il en va de même pour les efficacités des gouvernes ou certains phénomènes instationnaires naturels comme les tremblements. ■

Propos recueillis par Isabelle Bellin

➔ Site du département d'aérodynamique appliquée de l'Onera : www.onera.fr/daap
➔ Quelques belles images de simulation numérique : www.onera.fr/photos/simulations.html



Plongée au cœur des réacteurs d'avions

MOTEURS

Comment modéliser les phénomènes énergétiques se produisant au cœur d'un moteur d'avion ? Les scientifiques travaillent activement à la mise au point de nouveaux codes couplant aérodynamique, thermique, chimie ou encore thermodynamique.

Chaud devant... Dans la chambre de combustion d'un moteur d'avion, l'ambiance est pour le moins brûlante et agitée : air et kérosène s'y mélangent et y brûlent à près de 2000 °C. À la sortie, l'air chaud entraîne les aubes de turbine... Or celles-ci ne résistent pas au-delà des quelques 1500 °C, la température de fusion des alliages de nickel ou titane dont elles sont faites... Leur tenue conditionne pourtant la durée de vie du moteur. La solution ? Percer des canaux afin de refroidir le cœur de l'aube et créer un matelas d'air froid à sa surface. « Dans des cas aussi complexes, la simulation numérique nous permet de déduire les profils de température, de comprendre l'apparition de points chauds et finalement de définir les géométries optimales de répartition des canaux, leur forme... », explique François Vuillot, adjoint au directeur du département simulation numérique des écoulements et aéroacoustique de l'Onera. « En étudiant les interactions thermiques entre l'aube et les gaz chauds issus de la chambre de combustion, nous avons pu prévoir leur efficacité. »

De telles simulations ne sont possibles que depuis quelques années. Et pour cause : elles

supposent en effet de savoir modéliser les contraintes thermiques des aubes en fonction d'écoulements aérodynamiques variables d'un mélange de gaz et parfois de gouttelettes. « Avant, chaque spécialité avait son modèle. Les uns concernaient la thermique du solide, les autres la physique des écoulements », raconte François Vuillot. Les

l'université Stanford dans le cadre du vaste programme sur la simulation numérique ASCI (pour Accelerated Strategic Computing Initiative) font la part belle aux calculs multiphysique.

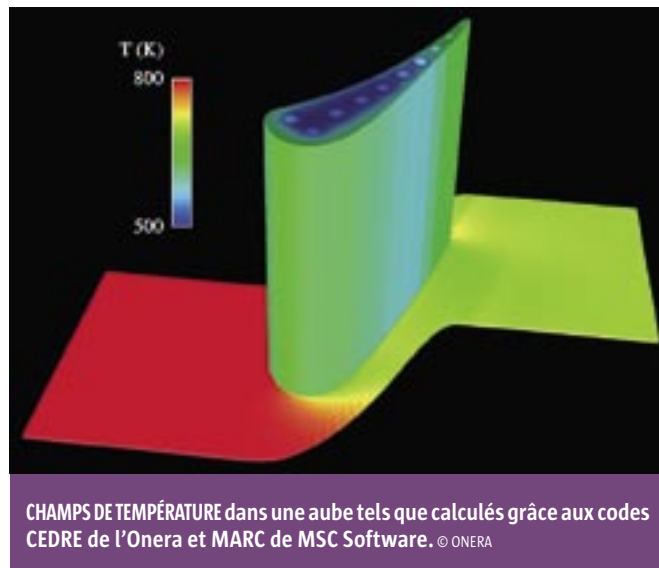
Rien de comparable en Europe pour l'instant. Côté français, l'Onera a livré en avril 2004 la seconde version de son code

solide – sont fonctionnelles, précise François Vuillot. Nous couplons actuellement les calculs d'aérothermie (aérodynamique et thermique). » Concrètement, il s'agit de mener simultanément un calcul associant ces différents aspects et d'échanger des informations sur les quantités physiques calculées, par exemple le flux de chaleur transmis par le fluide au solide, jusqu'à atteindre un état stationnaire.

« On cherche aussi à faire interagir CEDRE avec des codes externes, comme les codes thermomécaniques utilisés par les industriels (ZeBuLoN de l'Onera, Abaqus de Dassault Systèmes ou Marc de MSC Software). Cette fois, il s'agit de partager les données tout en maintenant chaque code dans son environnement. On imagine des sortes de "prises" sur lesquelles les codes seraient branchés. Prises qui permettraient de construire les données à échanger et de les échanger. » poursuit le chercheur. C'est

l'objet de plusieurs programmes nationaux comme ARCAE (Onera, Snecma, Turbomeca, CNRS, IVK, DGA, DPAC) pour l'aérothermique des aubes de turbine.

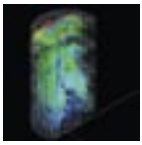
Au-delà, il s'agit aussi de simuler les phases transitoires – les changements de régime des moteurs – plus complexes et plus exigeantes sur le plan numérique. Cette problématique est au cœur du programme national Atran, associé Airbus, Snecma et l'Onera. Ce dernier investit aussi dans des couplages plus complexes afin de prendre en compte les déformations des parois. ■ I. B.



CHAMPS DE TEMPÉRATURE dans une aube tels que calculés grâce aux codes CEDRE de l'Onera et MARC de MSC Software. © ONERA

différents calculs fournissaient les conditions aux limites de nos modélisations de phénomènes énergétiques. Or nos résultats dépendaient en grande partie de ces codes acquis indépendamment les uns des autres. » Prenons le cas simple d'une plaque plane placée dans un écoulement froid. Et bien, le flux thermique calculé peut varier d'un facteur 5 suivant le mode de couplage retenu et la conductivité thermique du matériau ! L'idée de coupler les modèles dans une seule et même plate-forme a fait son chemin. Outre-Atlantique, il s'agit même de simuler un réacteur complet d'avion. Ces travaux, menés à

dédié à l'énergétique, CEDRE® (Calcul d'écoulements diphasiques réactifs pour l'énergétique). Les destinataires ? Des entreprises et des laboratoires de recherche (Snecma, SPS, EADS, MBDA, Cnes, ENS Cachan...). CEDRE est commun aux différents départements de l'Onera impliqués dans la physique des écoulements avec combustion (écoulements de gaz, de liquides ou de solides, phénomènes thermiques, de rayonnement, de conduction, réactions chimiques, turbulence, etc.). « Pour l'instant, nos modélisations des écoulements diphasiques – mélanges gaz/liquide ou gaz/



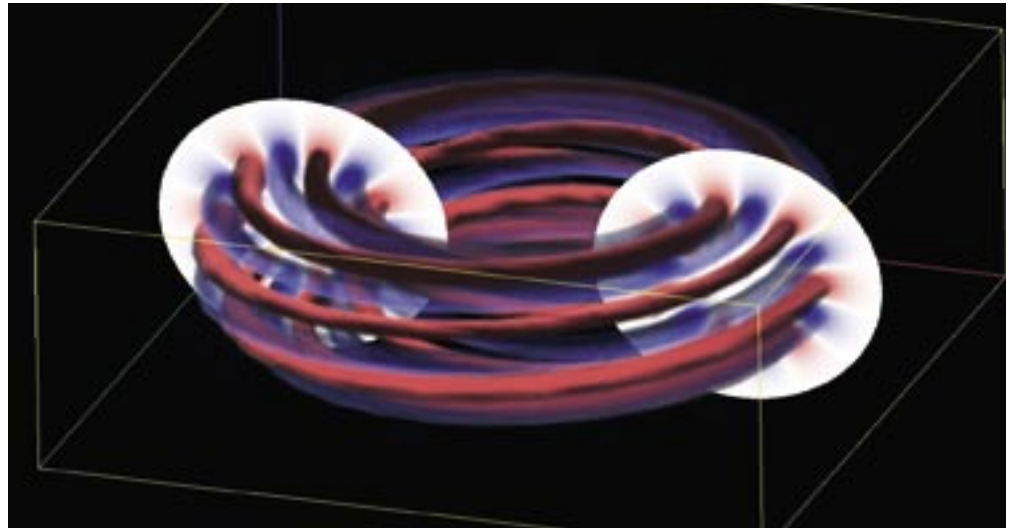
Fusion contrôlée : vers des modèles à 5 dimensions

ITER

Produire de l'énergie grâce à la fusion contrôlée. De nombreuses recherches sont encore nécessaires avant que ce rêve devienne réalité. Il faut en particulier comprendre, simuler et visualiser les phénomènes physiques en jeu dans les plasmas.

La décision est tombée voici quelques mois : le réacteur de recherche international sur la fusion contrôlée (ITER) sera construit à Cadarache, dans les Bouches-du-Rhône. Mais plusieurs décennies s'écouleront avant qu'un réacteur industriel ne voit le jour tant les phénomènes physiques en jeu sont complexes. Il faut calculer la topologie magnétique idéale dans le réacteur pour assurer la meilleure stabilité du plasma d'un point de vue magnétohydrodynamique (MHD). Mais aussi comprendre les interactions entre le plasma et les parois du réacteur, entre le plasma et les ondes électromagnétiques... Sans parler de l'insaisissable physique de la turbulence qui contrôle le confinement de l'énergie dans le réacteur ! « Nous développons deux stratégies complémentaires, explique Xavier Garbet, responsable du groupe transport, turbulence et MHD au CEA (Cadarache), une modélisation intégrée et une modélisation de premiers principes, dite *ab initio*. »

La première permet de construire un simulateur de



PLASMA SIMULÉ. Les fortes valeurs de potentiel électrostatique apparaissent en rouge. © CEA/INRIA

tokamak à l'instar des simulateurs d'avions sur lesquels s'entraînent les pilotes. On peut, grâce à cette modélisation intégrée, à la fois préparer les expériences (prévoir les profils de plasma) et les interpréter à partir des mesures expérimentales, le tout dans un temps de calcul raisonnable (quelques heures pour une simulation).

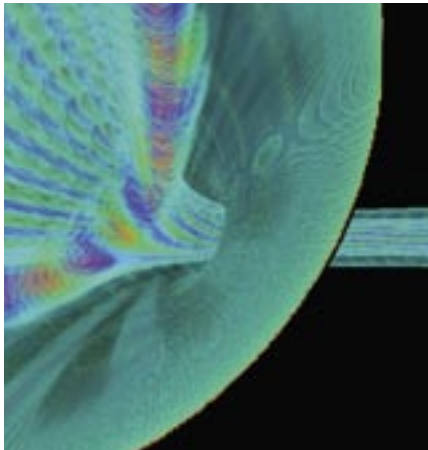
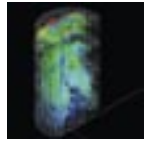
C'est aussi un outil de conception des futurs tokamaks. Seuls les phénomènes physiques essentiels y sont décrits, de façon simplifiée. « Une action programmatique européenne de modélisation intégrée a été lancée en 2003 avec les pays de l'Union européenne de façon à coordonner les efforts et développer des logiciels en commun, précise Xavier Garbet. Néanmoins, modéliser les plasmas d'ITER et valider cette simulation intégrée néces-

site aussi de reproduire par le calcul les phénomènes à petite échelle. » Il faut en particulier tenir compte de la cinétique du plasma : des modèles gyrocinétiques en 5 dimensions sont utilisés pour décrire localement la distribution des particules selon leur vitesse transverse et parallèle aux lignes de champ magnétique. « Par exemple, nous devons modéliser des turbulences millimétriques dont le temps caractéristique est d'environ 20 millisecondes. Et ce, dans un plasma de taille métrique qui reste confiné pendant parfois 500 secondes », poursuit le chercheur. « La puissance de calcul nécessaire est évidemment phénoménale, de l'ordre de celles que requièrent les études de climatologie ou de physique théorique. »

Contrairement aux États-Unis, où la fusion bénéficie

d'un soutien financier spécifique pour le développement de codes et d'un centre de calcul dédié, l'Europe n'a pas encore mis en place une telle structure de recherches. Les chercheurs de Cadarache utilisent les machines les plus puissantes (environ 1 téraflop) du centre de calcul, recherche et technologie (CCRT) du CEA, à Bruyères-le-Châtel. Au printemps 2006, ils devraient pouvoir profiter des quelque 60 téraflops de Tera-10. « Une seule simulation partielle du plasma d'ITER mobilisera la capacité complète de cette machine environ huit jours, souligne Xavier Garbet, beaucoup plus encore pour simuler une décharge complète. Il nous faudrait alors des puissances de l'ordre de la centaine de téraflops, voire plus. » ■■

Isabelle Bellin



Montrez-moi ce plasma !

« Nous sommes probablement la première équipe au monde à développer des outils spécifiques de visualisation des plasmas », affirme Éric Sonnendrücker, enseignant-chercheur à l'université de Strasbourg, responsable du projet Calvi sur le calcul et la visualisation des plasmas qui regroupe l'Inria, le CNRS et les universités de Nancy et de Strasbourg. « L'originalité ? C'est qu'il faut traiter un continuum d'une énorme masse de points (de l'ordre de plusieurs téraoctets), en 5 ou 6 dimensions. » De fait, la distribution dynamique des particules est décrite par les équations de Vlasov ou les modèles gyrocinétiques. Les chercheurs mettent au point des algorithmes pour les simplifier, les rendre programmables sur ordinateur et choisir les points à visualiser. Ils travaillent avec le CEA pour le confinement magnétique et avec le Lawrence Berkeley National Laboratory aux États-Unis pour le confinement inertiel. « Nos logiciels de visualisation devraient être opérationnels d'ici trois ans », espère-t-il. L'Inria travaille par ailleurs sur des outils de réalité virtuelle pour des visualisations en 5 ou 6 dimensions.

Visualisation du potentiel électrostatique d'un plasma dans un tokamak © CEA/INRIA

Jean-Pierre Chièze : « De fabuleux moyens de recherche fondamentale »

LASERS

Créé en mars 2003, l'Institut lasers et plasmas (ILP), qui associe le CEA, le CNRS, l'université de Bordeaux et l'École polytechnique, met l'accent sur les applications civiles du confinement inertiel.

Quelle est la vocation de cet institut ?

JEAN-PIERRE CHIÈZE : L'ILP fédère les recherches françaises menées dans plus d'une vingtaine de laboratoires sur la physique des lasers de haute énergie et sur les plasmas denses et chauds qu'ils permettent de créer. Grâce à lui, la communauté scientifique peut aussi bénéficier des fabuleux outils développés pour la fusion inertielle : la LIL (ligne d'intégration laser), le laser ultra-intense multi petawatt qui y sera couplé ou encore le futur laser mégajoule. Une aubaine pour

l'astrophysique, et, plus généralement, la physique en conditions extrêmes...

Dans le domaine de la fusion contrôlée, quelles sont les solutions étudiées ?

Elles ont en commun l'implosion (par effet fusée) d'une capsule d'environ 2 mm de diamètre contenant un mélange de deutérium/tritium. Les variantes portent sur la façon d'apporter l'énergie à la cible – en l'irradiant directement ou en la plaçant dans un four porté à plusieurs millions de degrés par des faisceaux lasers (attaque indirecte) – et sur la façon d'allumer les réactions thermonucléaires : soit grâce à la température élevée atteinte au terme de la compression, soit en « aidant » l'ignition à l'aide d'un faisceau laser ultra-intense.

Quelle est la place de la modélisation à l'ILP ?

Elle est évidemment essentielle ! Elle s'appuie sur des études fondamentales et l'expérimentation et conduit plusieurs commu-



JEAN-PIERRE CHIÈZE est directeur de la Fédération de recherche « ILP - Recherche » et directeur adjoint de l'Institut lasers et plasmas. D.R.

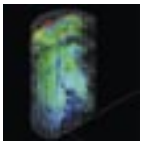
nautés à tisser des liens étroits. C'est aussi une plate-forme d'interaction privilégiée entre les thématiques de la fusion pour l'énergie et les recherches en physique fondamentale menées sur les grandes installations laser. ■■ **Propos recueillis par I. B.**

Une affaire de confinement

DANS LE SOLEIL, les gaz à l'état de plasmas, ionisés, sont confinés par gravité naturelle. Sur Terre, deux possibilités existent : le confinement magnétique ou inertiel. Dans le premier cas, un plasma très chaud et très dilué (10^{14} ions par cm^3) est piégé pendant environ une seconde dans une grande structure magnétique en forme d'anneau (un tokamak, tel le futur réacteur de recherche ITER).

LE CONFINEMENT INERTIEL résulte quant à lui d'une compression très rapide du plasma, elle-même induite par l'énergie de puissants lasers comme les futurs laser mégajoule, en France, ou NIF (National Ignition Facility), aux États-Unis. Le plasma, très dense (10^{26} ions par cm^3) et très chaud, n'est maintenu que durant quelque 10^{-11} secondes.

POUR LE CONFINEMENT MAGNÉTIQUE, la modélisation de ces turbulentes particules chargées est fondée sur les équations de Vlasov dans l'« espace des phases » en 6 dimensions (3 coordonnées de l'espace, 3 de vitesses). La forme torique des tokamaks permet de considérer des modèles en 5 dimensions, dits « gyrocinétiques ». L'hydrodynamique en 3 dimensions tient quant à elle une large place dans la modélisation du confinement inertiel.

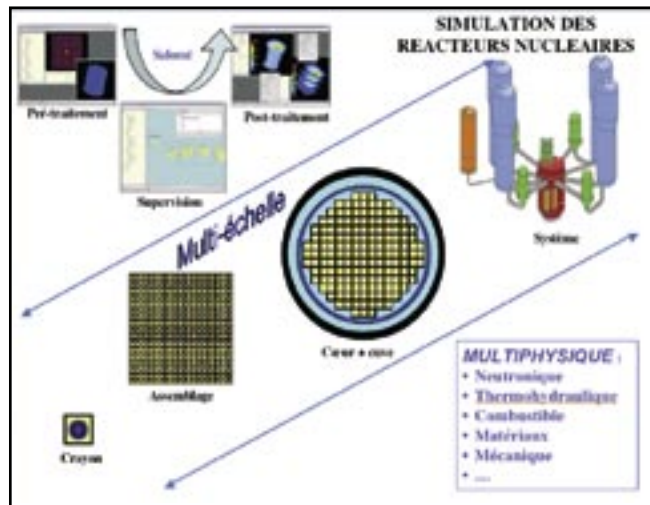


Une plate-forme logicielle pour les installations nucléaires

INDUSTRIE

L'industrie et la recherche nucléaires françaises développent actuellement une plate-forme logicielle d'un genre particulier. L'objectif ? Une simulation intégrée des réacteurs nucléaires actuels ou futurs, des installations de stockage ou d'entreposage de déchets.

C'est une question de performance et de sûreté : concevoir et piloter un réacteur nucléaire est avant tout une affaire de simulation... Simulation de physique neutronique, de thermo-hydraulique mais aussi de mécanique des structures, de science des matériaux, etc. Les logiciels doivent être précis, rapides, conviviaux et robustes. « Pourtant, rappelle Christian Chauillac, chef du projet simulation de la direction de l'énergie nucléaire du CEA, jusqu'en 2000, ces compétences se sont développées sans cohérence globale, avec des logiciels conçus par les spécialistes de chaque domaine. » Mais avec le lancement du projet simulation (lire « Daniel Verwaerde : "Pérenniser la dissuasion nucléaire française sans essais" », p. 90) et de la plate-forme Salomé, tout bascule et la construction d'un véritable système intégré démarre. Un vrai changement de mentalité ! Comme le souligne Christian Chauillac : « Avant, il nous arrivait de développer des logiciels concurrents. Désormais, les travaux de recherche fondamentale ou appliquée des acteurs du nucléaire français



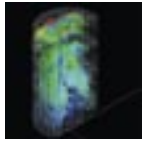
DANS LA PLATE-FORME DE SIMULATION SALOMÉ des réacteurs nucléaires, l'ensemble des processus physiques seront, à terme, couplés et abordés de la plus petite à la plus grande échelle : du crayon combustible (en bas, à gauche) jusqu'au réacteur dans son ensemble (en haut, à droite). © EDF/CEA

(chercheurs, industriels, spécialistes de la sûreté) sont partagés. Cette démarche intégrée, difficile à entreprendre, reste unique au monde. Et elle a d'ores et déjà valeur d'exemple. » Pas moins d'une trentaine de logiciels sont en cours d'intégration dans Salomé ! Cette plate-forme logicielle open source est développée dans le cadre d'un projet RNTL (réseau national des technologies logicielles) qui réunit une vingtaine de partenaires : des laboratoires de recherche (Irisa, Ensam...), des acteurs du nucléaire (CEA, EDF), de l'aéronautique (EADS) ou de l'automobile (Renault), et la société OpenCascade (éditeur du logiciel). De fait, quelles que soient les applications industrielles, les besoins informatiques restent les mêmes : Salomé est générique, elle offre des services communs de pré et post-traitement de données, permet de coupler des logiciels spécia-

lisés dans différents domaines de la physique et offre la possibilité de les piloter dans un environnement unique avec un format commun d'échange de données. Elle est l'une des solutions proposées comme plate-forme informatique dans le cadre du nouveau pôle de compétitivité system@tic (lire « IOLS : une boîte à outils générique », p. 90). « Prenons l'exemple d'une des briques connectées à Salomé : la thermo-hydraulique, modélisée avec la plate-forme Neptune, propose Olivier Marchand, chef de département à EDF/R&D. Depuis 2001, nous développons cette plate-forme avec le CEA, Framatome-ANP et l'IRSN (Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire). Le but est de modéliser avec plus de précision que les logiciels existants, à la fois sur les plans physique et géométrique, les écoulements diphasiques – faisant

intervenir de l'eau sous forme liquide et vapeur – dans des composants comme le générateur de vapeur, le cœur du réacteur, voire l'ensemble de la centrale. » Parmi les avancées majeures, on peut citer la modélisation tridimensionnelle à l'échelle la plus fine qui soit, de l'ordre du millimètre cube. L'objectif est de réaliser des zooms sur certaines zones d'intérêt au sein de structures complexes (un assemblage combustible par exemple), le reste de l'écoulement étant simulé à une échelle plus grossière.

« Cette approche devrait être opérationnelle d'ici quatre ans. Mais il faudra une dizaine d'années pour disposer de l'ensemble de la plate-forme Neptune et de sa nouvelle génération de logiciels à l'échelle d'un composant ou de l'installation complète », affirme Olivier Marchand. « Comme en thermo-hydraulique, ajoute Christian Chauillac, chaque discipline (matériaux, neutronique, stockage des déchets...) est abordée avec une vision multi-échelle. Elle seule permet de coupler une approche macroscopique et une autre microscopique (pouvant aller jusqu'aux calculs ab initio) tout en fournissant le meilleur compromis précision/temps de calcul. » Il s'agit aussi de coupler ces différents codes entre eux pour optimiser les interactions entre disciplines. Appliquée à la thermo-hydraulique et la neutronique, cette approche multi-physique permet par exemple d'intégrer l'effet de la température du fluide environnant au calcul des réactions neutroniques. Reste à rendre ces couplages automatiques... ■■ Isabelle Bellin



Un fort besoin en outils de calcul

DÉFIS

Comme nous l'explique Jean-Pierre Chièze, de nombreux obstacles doivent encore être levés avant d'arriver à reproduire par le calcul les phénomènes de fusion par confinement inertiel.

La modélisation numérique est un élément déterminant des recherches sur les plasmas de fusion par confinement inertiel. On attend qu'elle permette l'analyse des expériences et l'interprétation des mesures, bien sûr. Mais surtout, qu'elle soit prédictive. Toutefois, les difficultés sont nombreuses. D'abord, quelle que soit l'approche retenue (attaque directe ou indirecte), il faut traiter simultanément des échelles spatio-temporelles très différentes : depuis celles des processus microscopi-

ques (l'interaction des faisceaux laser avec le plasma par exemple), de l'ordre de la femtoseconde et du dixième de micron, jusqu'à celles des phénomènes hydrodynamiques de l'implosion de la capsule renfermant le mélange deutérium-tritium, un million de fois plus grandes (quelques nanosecondes et quelques millimètres). Les codes d'implosion contiennent donc des modèles approchés pour décrire les phénomènes de petite échelle.

Seconde difficulté : l'extrême variété des mécanismes physiques mis en jeu. Il faut en effet modéliser puis intégrer les divers phénomènes contrôlant l'interaction laser-plasma, l'implosion de la capsule et la combustion thermonucléaire. Des phénomènes qui sont en outre étroitement imbriqués : le défi consiste à reproduire correctement leur couplage mutuel

dans une simulation intégrée, dans un espace à trois dimensions.

Certains phénomènes, comme le transfert d'énergie, doivent être décrits en détail, ce qui exige bien souvent le calcul de la fonction de distribution des vitesses des particules. La simulation de l'implosion de la capsule demande de résoudre simultanément ces équations de transfert d'énergie, les équations de l'hydrodynamique et celles régissant les populations des niveaux atomiques du plasma : ces codes d'hydrodynamique radiative constituent un modèle physique hybride, qui couple une description fluide et une description cinétique de la matière.

L'étape hydrodynamique consiste à représenter par le calcul les multiples ondes de choc et de détente dues à l'implosion de la cible. Elle est cruciale et particulièrement

complexe. En particulier parce que plusieurs types d'instabilités apparaissent qui amplifient les défauts de la cible. Cela peut entraîner sa rupture ou altérer les conditions d'allumage des réactions thermonucléaires. L'évaluation quantitative de ces effets repose sur des codes d'hydrodynamique tridimensionnels, qui mobilisent les ressources de calcul les plus importantes, de l'ordre d'une centaine de téra-flops.

Enfin, la simulation de l'allumage des réactions par une source laser ultra-intense annexe soulève également des problèmes spécifiques, touchant à la génération de particules et à la physique des plasmas relativistes. ■

Jean-Pierre Chièze

- www-fusion-magnetique.cea.fr/
- Sur la modélisation intégrée : www.efda-taskforce-itm.org
- Sur JET : www.jet.efda.org/
- Sur ITER : www.iter.org

Réacteurs nucléaires numériques

NEUTRONIQUE

La simulation numérique permet aujourd'hui d'optimiser la conception et la gestion des réacteurs nucléaires. Mais la puissance actuelle des ordinateurs reste insuffisante pour décrire leur évolution sur le long terme.

Piloter un réacteur nucléaire demande du doigté. Les composés radioactifs enfermés en son cœur évoluent en permanence, sous l'effet du bombardement de neutrons. Sous leur impact, les noyaux d'uranium ou de plutonium se scindent en libérant d'autres neu-

trons – qui entretiennent la réaction en chaîne – et des produits de fission, qui s'accumulent à mesure que le combustible s'use. Vue la difficulté des mesures directes, gérer ce flux de neutrons et ajuster la puissance du réacteur en fonction des besoins énergétiques demande de faire appel à la simulation. C'est elle aussi qui permet de répartir au mieux l'apport de combustible neuf, tous les un ou deux ans. Pour sa cinquantaine de réacteurs à eau sous pression, EDF utilise ainsi certains des logiciels de neutronique développés par le CEA, comme ceux inclus dans le système de codes de calcul Saphyr (Système avancé pour la physique des réacteurs). « On a déjà de bons outils, mais les

industriels nous demandent des modèles plus précis pour réduire les marges et les incertitudes », explique Anne Nicolas, ingénieur à la direction des études nucléaires du CEA, à Saclay. Objectif : diminuer les coûts et augmenter encore la sûreté des centrales. « On cherche notamment à réduire l'incertitude sur la puissance produite localement dans le combustible, même si celle-ci est déjà calculée avec une bonne précision, de l'ordre de quelques pour cent. L'enjeu économique est important : un gain de 1 % sur la puissance maximale se traduit par une augmentation de 1 % de la capacité de puissance du réacteur », assure Robert Jacqmin, directeur de recherche en neutronique au centre de

Cadarache. Autres demandes des industriels : pouvoir accroître la durée de vie des centrales et augmenter le taux de combustion au sein des réacteurs. « Aujourd'hui, les logiciels sont qualifiés jusqu'à des taux de combustion de 45 Gigawatts-jours par tonne, or l'industriel souhaiterait aller jusqu'à 60 Gigawatts-jours par tonne et même au-delà », précise le chercheur.

En pratique, les simulations reposent principalement sur les équations de Boltzmann, qui décrivent le comportement des neutrons, et sur les mesures faites dans les réacteurs d'essais fonctionnant à une puissance quasi nulle, comme Éole, Minerve et Masurca, sur le site de Cadarache. Reste qu'avec



⇒ capacités de calcul actuelles, il n'est pas envisageable de décrire directement l'évolution détaillée de l'ensemble du réacteur sur plusieurs années. Les modèles sont donc construits en deux temps. On travaille d'abord sur un composant élémentaire (un assemblage constitué de quelques centaines de crayons de combustible par exemple), en y décrivant toutes les réactions nucléaires dans une représentation géométrique et énergétique très détaillée. Par réduction des données, on extrait ensuite un résultat moyen, appliqué à un modèle 3D du réacteur entier. « L'idée est de ne plus utiliser ces simplifications, mais d'aller vers un calcul direct de l'ensemble du réacteur avec un maillage très fin », précise Anne Nicolas. Outil de pilotage et de conception des centrales, la modélisation neutronique doit aussi s'adapter aux nouvelles géométries des réacteurs actuellement à l'étude. Le combustible des réacteurs français actuels, à eau sous pression, est constitué d'un réseau régulier de dizaines de milliers de crayons, contenant des empilements de pastilles d'oxyde d'uranium et disposés

verticalement. Ils peuvent donc être représentés simplement par une géométrie cartésienne. Mais la France s'intéresse également à des réacteurs dits de quatrième génération : par exemple des réacteurs à très haute température, refroidis au gaz et avec des particules de combustible réparties de façon aléatoire au sein d'une matrice. « Cela pose un défi de traitement de géométrie stochastique », explique Anne Nicolas. « Ces nouvelles filières nous obligent à repenser la modélisation. »

Le développement des combustibles des réacteurs futurs représente de fait un défi majeur pour les simulations en neutronique, thermo-hydraulique et thermo-mécanique. Un défi que pourrait aider à relever le futur réacteur expérimental Jules Horowitz, en cours d'étude à Cadarache, et prévu pour couvrir les besoins en connaissances sur les nouveaux matériaux et combustibles pour les cinquante ans à venir. ■ **Laure Schalchli**

➔ Site du centre de Cadarache : www-cad.cea.fr
 ➔ « Physique nucléaire et sûreté », *Clés CEA*, n° 45, automne 2001 : www.cea.fr/fr/Publications/clefs45/sommaire.html

IOLS : une « boîte à outils » générique

Simuler une installation nucléaire, le trafic aérien, les transactions monétaires, les risques climatiques, l'aérodynamisme d'un avion ou encore un crash automobile... À chaque fois, des calculs scientifiques complexes reproduisent les phénomènes de la plus petite à la plus grande échelle grâce à divers modèles physiques ou mathématiques. « De fait, on peut simuler la conception de produits ou l'optimisation de systèmes complexes avec des outils génériques de modélisation multi-physique, multi-échelle », affirme Jean-Yves Berthou, chef du groupe Informatique scientifique appliquée à EDF, un des partenaires du projet IOLS (Infrastructures et outils logiciels pour la simulation), thème fédérateur du pôle de compétitivité mondiale system@tic labellisé en juillet 2005. « Il s'agit de développer des outils logiciels transverses et de les valider sur des applications concernant dans un premier temps les matériaux et des problématiques fluide-structure. Deux gammes d'outils complémentaires seront développés : d'une part en open-source selon la logique de la plate-forme logicielle Salomé développée autour du CEA et EDF, d'autre part avec des outils propriétaires à l'instar de la démarche PLM (Product lifecycle management) de développement de produits de Dassault Systèmes. » Le projet IOLS rassemble 24 partenaires (12 groupes industriels, 9 labos, 3 PME).

➔ www.systematic-paris-region.org/



APPLICATIONS
DÉFENSE

Daniel Verwaerde : « Pérenniser la dissuasion »

ARMES

La capacité de dissuasion nucléaire de la France repose aujourd'hui sur le programme « simulation » de la direction des applications militaires du Commissariat à l'énergie atomique. Le point avec celui qui en a été le premier directeur.

Quand le programme « simulation » est-il né ?

DANIEL VERWAERDE : En 1996, lorsque le président de la République a décidé l'arrêt définitif et complet des essais nucléaires. La direction des applications militaires du CEA a alors été chargée de mettre en place un programme destiné à pérenniser la capacité de dissuasion française en l'absence de nouveaux essais. Financé par la Défense, ce programme s'étale sur quinze ans et court jusqu'en 2010. Souvenons-nous qu'en 1996, la France a décidé de réduire significativement et unilaté-

ralement le nombre de composants de la dissuasion, notamment en fermant le « Plateau d'Albion » puis son centre d'expérimentation nucléaire. Le programme « simulation » a donc été conçu afin de pouvoir remplacer les systèmes d'armes actuels, lorsqu'ils arriveront en fin de vie. Mais aussi pour rester au meilleur niveau scientifique et être capable de garantir la fiabilité et la sûreté des systèmes actuels et futurs.

En quoi consiste-t-il ?

Il s'articule autour de trois volets : la modélisation des phénomènes physiques, la simulation numérique, la validation par des expériences de laboratoire et la restitution des essais passés. En effet, il nous a d'abord fallu lister l'ensemble des phénomènes physiques impliqués dans le fonctionnement d'une arme nucléaire, étudier la façon dont ils s'enchaînent et se couplent et, enfin, dresser l'inventaire des équations mathématiques susceptibles de les représenter. Celles qui régissent la mécanique des fluides (équations de Navier-Stokes), le transport des neutrons (équations de Boltzmann) ou encore l'évolution de la population de photons ou d'ions (équations de diffusion et de transport). Mais ce n'est pas tout. Car une fois le système d'équations posé, il reste à déterminer les bonnes « lois de comportement » de la matière (équations d'état, sections efficaces neutroniques, coefficients de transport, etc.) dans les domaines pertinents du fonctionnement des armes. Ensuite, il faut résoudre le système d'équations sur le domaine réel et évolutif. Et,



AIRIX, la machine à radiographe qui permet de valider les calculs correspondant à la première étape de fonctionnement d'une arme. © CEA

nucléaire française sans essais »



© CEA



DANIEL VERWAERDE est le directeur des armes nucléaires au sein du CEA. Ingénieur-mathématicien, il y a dirigé le département de mathématiques appliquées, en charge de la simulation numérique et de l'informatique pour la dissuasion. Il est aussi professeur d'analyse numérique à l'École centrale de Paris. © DR

enfin, valider l'ensemble de la solution par rapport à nos références passées et aux résultats des expériences acquises.

Comment procédez-vous alors ?

La modélisation des phénomènes physico-chimiques nécessite la résolution de très grands systèmes d'équations couplées et non linéaires. Personne ne sait les résoudre, si bien que l'on a recours à l'analyse numérique afin de les transformer (par dérivées) en une suite de systèmes linéaires qui, eux, peuvent être résolus à l'aide de supercalculateurs. En gros, on découpe le domaine de calcul en millions, voire en milliards, de petites zones (les « mailles ») et sur chacune d'elles, les numériciens vont remplacer les équations que l'on ne sait pas résoudre par d'autres, approchées, mais « digestes » pour les ordinateurs.

Toute la puissance de l'analyse numérique réside dans la capacité à prouver que la solution

approchée acquise grâce à l'ordinateur est la plus proche possible de la solution exacte du problème réel. Laquelle ne sera jamais connue. Bien sûr, on s'en approche d'autant mieux que les mailles sont plus nombreuses. Par exemple, simuler l'état d'un système implique des dizaines voire des centaines de millions de mailles. Les systèmes d'équations associés ont alors des milliards d'inconnues !

Cela nécessite évidemment de grosses puissances informatiques...

Oui. Dès 1996, au démarrage du programme, nous savions que pour faire tourner des modèles plus prédictifs, donc plus complexes, avec des maillages plus fins, il nous fallait multiplier à terme la puissance de nos ordinateurs et leur mémoire par dix mille ! Tera-1 nous a permis de gagner un facteur cent sur la taille des maillages. Avec l'arrivée de Tera-10, notre puissance de calcul va encore être multipliée par dix (60 mille milliards d'opérations par seconde). Puis, à nouveau par dix à l'horizon 2010. Pour le CEA, chacune de ces étapes est associée à une capacité bien définie de garantie. Ainsi, le « simulateur d'armes » (à l'instar des simulateurs d'entraînement utilisés pour la formation des pilotes d'avion ou des conducteurs de centrales) devrait être mis en exploitation en 2010. Bien entendu, cette date ne marque pas la fin de la simulation : nous devons nécessairement adapter notre capacité de garantie aux évolutions qui ne manqueront pas de se produire. Ce qui nous conduira certainement à multiplier encore la puissance des ordinateurs...

Comment être sûrs que les résultats acquis par la simulation sont les bons ? Autrement dit, comment validez-vous vos logiciels ?

Je voudrais tout d'abord insister sur le fait que la validation ne consiste pas seulement à qualifier les logiciels mais, plus fondamentalement, à s'assurer que ceux qui les utilisent les maîtrisent parfaitement et en connaissent les limites. Ainsi la simulation intègre la formation et l'homologation des utilisateurs, qu'au CEA nous appelons les « concepteurs ».

Pour en revenir à la question de départ, il faut distinguer la validation par parties de la validation globale. La première concerne un phénomène physique ou plusieurs phénomènes couplés. La seconde évalue la capacité des logiciels à restituer l'ensemble des mesures recueillies lors des essais nucléaires passés.

La validation par parties s'appuie sur l'expérimentation. Les expériences les plus importantes font appel aux deux outils phares du programme simulation : la machine à radiographe « Airix » et le laser mégajoule. Installée depuis 1999, à Moronvilliers, en Champagne, Airix permet de valider les calculs correspondant à la première étape de fonctionnement d'une arme. Cet appareil radiographie en effet la matière lorsqu'elle est comprimée. Rappelons que la compression est la condition initiale du fonctionnement nucléaire d'une arme. Dans ces expériences, les matières fissiles sont bien entendu remplacées par des matériaux inertes au comportement mécanique et thermique très similaire (on parle d'« expériences froides »).

Le deuxième instrument clé du programme simulation est le laser mégajoule, en construction près de Bordeaux (photo ci-dessus)...

Ce laser permet, en laboratoire, de reconstituer des conditions de pression et de température voisines de ce qu'elles sont lors du fonctionnement d'une arme ou encore... dans les étoiles. Il sera possible, par utilisation de la théorie des similitudes, d'étudier des phénomènes physiques intervenant lors du fonctionnement nucléaire d'une arme. Le laser mégajoule est au concepteur d'armes ce qu'est la « soufflerie » au constructeur d'avion. Jamais un avion ne volera dans une soufflerie. De même, jamais une arme ne sera expérimentée avec un laser. En utilisant ses 240 faisceaux identiques, puis en concentrant leur énergie (7,5 kJ) sur quelques millimètres cubes de matière pendant quelques milliardièmes de seconde, le laser mégajoule permettra en revanche de recréer à échelle réduite les conditions extrêmes qui règnent au cœur des étoiles ou au centre de la Terre.

Depuis 2002 un prototype fonctionne qui comprend quatre faisceaux. Son énergie reste insuffisante pour recréer les conditions qui nous intéressent pour la validation par parties des logiciels. Le laser mégajoule devrait voir le jour au début de la prochaine décennie, ce qui clôturera la phase de construction de la Simulation. Les premières expériences de fusion prévues pour 2012-2013 ouvriront l'ère nouvelle d'exploitation... ■

Propos recueillis par Fabienne Lemarchand



Des virus informatiques aux virus grippaux

ÉPIDÉMIES

Peut-on prévoir les trajets de propagation d'une épidémie? Plusieurs équipes planchent sur cette question avec des concepts différents. L'un des plus novateurs s'inspire du comportement des virus informatiques...

Mieux vaut se préparer au pire. D'un jour à l'autre, une nouvelle souche du virus de la grippe aviaire, capable de se transmettre d'homme à homme, peut apparaître. Et déclencher une pandémie faisant des millions de morts. Comment la maladie se propagera-t-elle? Les mesures de contrôle – quarantaine, traitements antiviraux, vaccination – seront-elles efficaces? Pour le savoir, les simulations vont bon train. « C'est un domaine très actif en ce moment, même si l'entrée de l'ordinateur en épidémiologie est un phénomène assez nouveau », observe Marc Barthélemy, du département de physique théorique et appliquée du CEA.

Dans la plus vaste étude menée à ce jour, le groupe de Neil Ferguson, à l'Imperial College de Londres, vient ainsi de modéliser rien moins que la population thaïlandaise, soit 85 millions d'individus [1]. Composition des foyers, taille moyenne des écoles, distance des lieux de travail, répartition de la population sur le territoire ont été prises en compte. Objectif: tester l'effet des mesures locales de contrôle, une fois le premier cas détecté. Le résultat? Tout dépend de la

capacité du virus à se transmettre d'une personne à l'autre. S'il se comporte comme celui de la grippe actuelle, trois millions de traitements antiviraux devraient suffire à éviter la pandémie. Depuis, le même groupe s'est lancé dans un projet encore plus ambitieux: modéliser tous les États-Unis, avec le soutien financier des National Institute of Health américains. Évidemment, l'avalanche de données demande des moyens informatiques considérables. Pour la Thaïlande, la simulation a mobilisé 10 supercalculateurs, dotés chacun de deux processeurs, pendant un mois; pour les États-Unis, il faudra des machines avec 8 processeurs ou plus.

Une telle force de calcul n'élimine pas les critiques. « Ces modèles sont tellement spécifiques, comment extrapoler à d'autres pays? », s'interroge Marc Barthélemy. Avec d'autres, le chercheur mise sur une approche concurrente, née de l'explosion récente de la physique des réseaux [2] et de l'observation... des virus informatiques. Par un étonnant retour d'ascenseur, leur étude profite en effet à celle des maladies réelles. « On a compris comment ces virus se propagent si vite sur le web et y survivent si longtemps, ce qui était un mystère total pour l'épidémiologie classique » [3], explique le chercheur. La raison? La toile Internet contient des nœuds de très forte connectivité ou « hubs », qui jouent un rôle clé dans la dissémination. Il en serait de même pour les vraies épidémies, où quelques individus agiraient comme des « superpropagateurs » [4,5]. Une



DE MÊME QUE LES NŒUDS DE FORTE CONNECTIVITÉ présents sur Internet jouent un rôle clé dans la dissémination des virus, certains individus agiraient comme des superpropagateurs. © THE OPTE PROJECT

vue totalement opposée aux simulations classiques, comme celles de Ferguson, pour lesquelles les réseaux sociaux sont homogènes et les individus équivalents...

En s'appuyant sur ces nouveaux concepts, l'équipe du CEA peaufine un modèle de propagation des épidémies sur le réseau aérien. Construit en collaboration avec le laboratoire de physique théorique de l'université d'Orsay et l'université de l'Indiana, aux États-Unis, il utilise les données de l'International air transport association sur les connexions entre les 4 000 principaux aéroports de la planète, la fréquence des vols, le nombre de passagers. Encore en phase de calibration et de validation, le modèle a déjà permis de simuler l'épidémie de

SRAS et il est maintenant testé sur la grippe. L'idée est à terme de l'élargir en incluant les réseaux de transport urbain des villes desservies par ces aéroports. « C'est dans ce cadre que le passage sur Tera-10 sera vraiment important », juge Marc Barthélemy. *Un calcul qui dure aujourd'hui une semaine ne prendra plus qu'une heure ou deux.* ■■ Laure Schalchli

- [1] N. Ferguson et al., *Nature*, 437, 209, 2005
- [2] A. Barrat et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 101, 3747, 2004
- [3] R. Pastor-Satorras et A. Vespignani, *Internet: structure et évolution*, Belin, 2004.
- [4] M. Barthelemy et al., *Phys. Rev. Lett.*, 92, 178701, 2004
- [5] M. Barthelemy et al., *Journal of Theoretical Biology*, 235, 275, 2005.

➔ www2.cnrs.fr/presse/thema/373.htm

Jean Yves Blanc :

« Connaître le sous-sol pour forer au bon endroit »



Jean-Yves Blanc est architecte Informatique à l'unité « traitement et réservoir », de la Compagnie générale de géophysique. © DR



GÉOPHYSIQUE

Les pétroliers ne forent pas au hasard. Ils s'appuient sur des cartes de plus en plus précises du sous-sol, elles-mêmes réalisées grâce à des modèles numériques très complexes.

La Compagnie générale de géophysique intervient à la demande des compagnies pétrolières. Pour quelles missions ?

JEAN YVES BLANC : Il s'agit en premier lieu de recueillir des données géologiques et géophysiques (mesures sismiques en particulier) dans les régions susceptibles d'abriter des gisements pétroliers. Puis de les traiter afin de dresser des cartes en trois dimensions du sous-sol. L'objectif est bien évidemment d'avoir une idée aussi précise que possible de la géométrie des réservoirs souterrains ou sous-marins et de leur volume. Sur la base de ces cartes, les pétroliers décident ou non de les exploiter.

Comment ces cartes sont-elles établies ?

De façon très schématique, deux camions de données nous arrivent que nous résumons en deux DVD double couches... Cette réduction s'opère grâce à la simulation et la mise en œuvre d'un grand nombre de séquences de traitement. Certains d'entre elles permettent de « nettoyer » les données brutes : enlever les bruits (lié par exemple à des activités industrielles), accroître le rapport signal/bruit, prendre en compte les effets de surface (les roches superficielles n'ont pas

l'élasticité acoustique des roches profondes), de géométrie (la présence de failles par exemple), éliminer l'influence des courants marins, etc. On construit ensuite un modèle mathématique du sous-sol. Proche de celui que l'on cherche à imager, ses résultats sont comparés à ceux acquis avec nos algorithmes. Le modèle est progressivement affiné par itérations successives. On considère qu'il est proche de la réalité lorsque les résultats du modèle et ceux de calculs effectués sur les données réelles sont très voisins.

Quelle est la précision des cartes que vous livrez aux pétroliers ?

Elle est en moyenne de quelques mètres. L'objectif est de l'améliorer encore. L'enjeu est d'importance pour les pétroliers, surtout lorsque les couches pétrolières sont fines et d'allure torturée ! Plus elles sont mal positionnées, plus le risque de forer à côté est en effet élevé. Et la facture salée !

Rappelons qu'un puits d'exploration coûte plusieurs millions de dollars, un puits en *offshore* profond bien plus encore. Les erreurs sont toutefois de plus en plus rares. D'abord parce que nos algorithmes sont de plus en plus précis. Ensuite, en raison des campagnes de mesures, plus denses que par le passé.

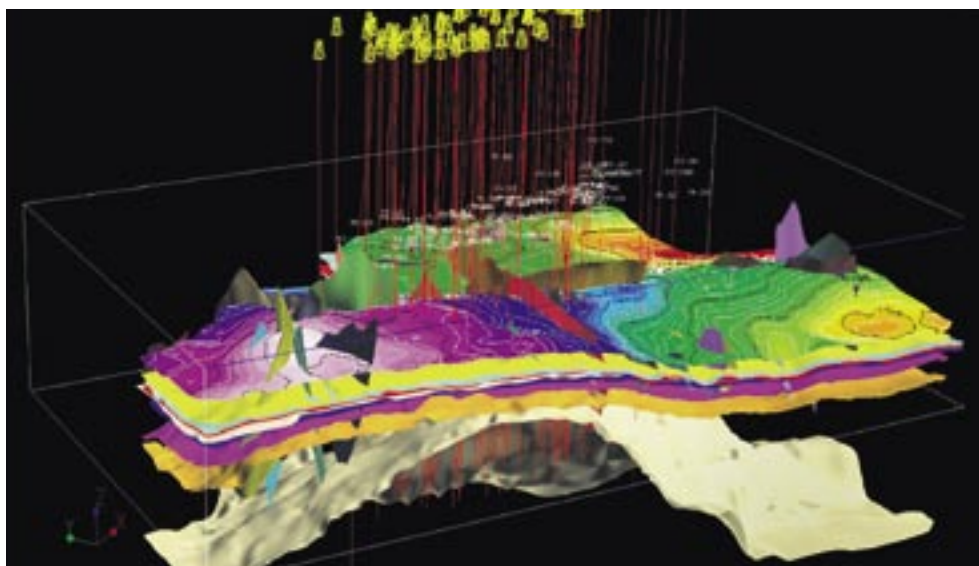
Vos modèles sont-ils perfectibles ?

Bien sûr. Le problème est en premier lieu d'ordre économique. Les données que nous recueillons sont suffisantes pour mettre en œuvre des algorithmes plus sophistiqués. Mais les résultats doivent être disponibles dans un laps de temps compatible avec les exigences des pétroliers, en quelques mois seulement. Faire « tourner » des modèles plus complexes dans ce temps réduit nécessiterait des moyens informatiques 10 à 100 fois plus importants qu'aujourd'hui, et donc des budgets plus élevés...

Intervenez-vous au niveau de la production ?

De plus en plus. Avec l'avènement de la « cartographie 4D » (des cartes sismiques en 3 dimensions, répétées dans le temps), les pétroliers disposent sur place des dispositifs permanents ou semi-permanents capables de recueillir régulièrement des données (toutes les semaines par exemple). Le but est d'avoir une vision la plus exacte possible du champ pétrolier à mesure que la production avance. C'est un outil essentiel pour décider d'installer des puits additionnels, d'injecter de la boue ou encore d'augmenter de quelques pour cent le taux de récupération... Le traitement des données est le même que celui que je viens de décrire. De même que la précision des cartes obtenues. ■■ Propos recueillis par Fabienne Lemarchand

➔ www.cgg.com



LES CARTES EN 3D du sous-sol permettent aux compagnies pétrolières de forer au bon endroit. © CGG



Téléphones portables et cerveau

SANTÉ PUBLIQUE

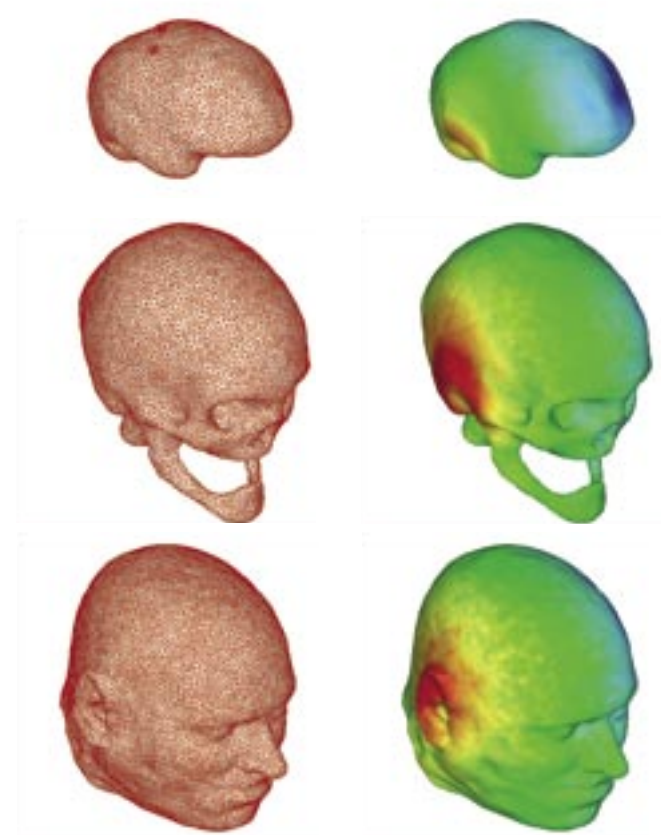
La question a fait, et fera encore, couler beaucoup d'encre : les ondes électromagnétiques des téléphones portables agissent-elles sur le cerveau ? La simulation permet d'ores et déjà d'évaluer les effets « thermiques ».

Les ondes électromagnétiques des téléphones portables sont-elles dangereuses pour la santé ? La question divise la communauté scientifique depuis plusieurs années. En l'absence de mesures directes, les scientifiques recourent de plus en plus à la simulation numérique. Mais la modélisation d'un système aussi complexe que le cerveau est loin d'être simple. « La construction de modèles géométriques de la tête est particulièrement difficile. Tout l'enjeu est de représenter le plus précisément possible les tissus, le liquide céphalorachidien, le cerveau, le crâne et la peau », explique Stéphane Lanteri, Directeur de recherche à l'Inria de Sophia-Antipolis. Le plus souvent, les simulations numériques reposent sur des modèles directement issus des images IRM. La tête est alors représentée à l'aide de cubes. La méthode numérique capable de résoudre ces modèles est très simple. Elle a en outre l'avantage d'être peu coûteuse en temps de calcul. « Mais représenter correctement une interface – entre le crâne et le liquide céphalorachidien par exemple – à l'aide de cubes n'est guère facile », poursuit le chercheur. Pour pallier ce manque de précision, l'Inria a lancé en janvier 2003, et pour une durée de deux ans, une action de recherche coopérative baptisée « HeadExp » dans laquelle

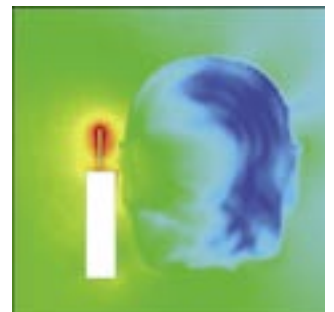
étaient impliquées différentes équipes de l'Inria, l'École nationale supérieure des télécommunications de Paris, l'Ineris et France Telecom Recherche & Développement. L'objectif : mettre au point des outils de modélisation géométrique et des méthodes numériques afin de représenter de la façon la plus réaliste possible l'interaction entre un champ électromagnétique et les tissus de la tête. « Nous avons extrait d'images médicales des représentations surfaciques des tissus. Lesquelles nous ont permis de construire des maillages volumiques tétraédriques raffinés (constitués en moyenne d'un million de sommets) », précise Stéphane Lanteri (voir l'illustration ci-contre).

Les simulations faites à l'aide de ces modèles géométriques sont bien évidemment beaucoup plus gourmandes en temps de calcul : de l'ordre d'une centaine d'heures sur un PC équipé d'un processeur de fréquence 2 GHz. Mais les méthodes numériques sous-jacentes se prêtent au calcul haute performance et la parallélisation des algorithmes mis en jeu permet de ramener ce temps à trois heures sur une ferme de PC du même type. Outre la propagation des ondes électromagnétiques dans les tissus de la tête de l'utilisateur, ces modèles permettent aussi de calculer l'élévation de température dans les différents tissus. « Ces effets « thermiques » sont connus depuis longtemps. Nos simulations permettent de les chiffrer. En revanche, elles ne sont d'aucune utilité pour évaluer l'incidence sur le système nerveux ou sur le développement de tumeurs. »

Ces modèles géométriques et les méthodes numériques



associées sont en constante évolution. « Notre objectif est de les rendre « adaptables » pour affiner localement la représentation des phénomènes – par exemple autour de l'oreille exposée – de façon à réduire les temps de calcul tout en ayant une précision maximale là où c'est utile », poursuit Stéphane Lanteri. Lequel envisage déjà d'autres applications, médicales cette fois-ci. « Par exemple, le traitement par hyperthermie micro-onde des tumeurs cancéreuses nécessite de concentrer un rayonnement sur la zone malade afin de la nécroser par échauffement. L'un des enjeux est de concevoir un système d'antennes pour focaliser correctement le rayonnement en épargnant autant que faire se peut les tissus sains voisins. C'est là que peut inter-



LES SIMULATIONS faites à l'aide des modèles géométriques (à gauche) permettent de calculer l'absorption des ondes électromagnétiques (à droite) et du champ électrique local (en bas). © INRIA

venir la simulation sur ordinateur. Elle nécessite là encore de modéliser la propagation du champ électromagnétique dans les tissus et les effets thermiques induits. » ■■

Fabienne Lemarchand



WEB

Sites généraux

COMMISSARIAT A L'ÉNERGIE ATOMIQUE

www.cea.fr/

Sur le site principal du CEA, des dossiers sur le nucléaire, la fusion contrôlée, les nanotechnologies, le climat, quelque cent pages sur le thème « Recherche et simulation » publiées en 2002, ainsi qu'une description des grands thèmes de recherche de l'organisme.

CEA - DIRECTION DES APPLICATIONS MILITAIRES

www-dam.cea.fr/dynamique/accueil.asp

Pour mieux connaître la technopole de simulation haute performance Ter@tec et le programme simulation mis en place par le CEA pour garantir la sûreté et la fiabilité des armes nucléaires.

INRIA

www.inria.fr/

Des dossiers thématiques sur la modélisation du vivant, les neurosciences et l'algorithmique, le Grid-computing, et une description des programmes de l'Institut national de recherche en informatique liés à la simulation haute performance (Clime, Gamma...)

CERFACS

www.cerfacs.fr/

Une présentation en anglais des recherches du Centre européen de recherche et de formation avancée en calcul scientifique, à Toulouse, sur les algorithmes parallèles et le traitement de l'image et du signal. Et un vaste tour d'horizon de leurs applications: climat, dynamique des fluides, électromagnétisme, aviation et environnement.

IBM

www.research.ibm.com/

Une mine d'informations en anglais sur le calcul haute performance et ses applications, les programmes de recherche d'IBM et ses supercalculateurs.

Moyens de calcul

TOP 500 DES SUPERCALCULATEURS

www.top500.org/

Pour consulter la liste complète des 500 supercalculateurs les plus puissants établie par les universités de Mannheim (Allemagne) et du Tennessee (États-Unis) et le Lawrence Berkeley National Laboratory, et connaître les futurs candidats, en cours de développement. Site en anglais.

BULL

www.bull.com/fr/fr/novascale/hpc.html

Sur le site du constructeur français, une description de sa gamme de serveurs Novascale et un livre blanc à télécharger sur les nouveaux enjeux du calcul haute performance.

ADVANCED SIMULATION AND COMPUTING

www.llnl.gov/asci/

Une présentation détaillée, et en anglais, du méga-programme Advanced simulation and computing du DOE américain (la continuation de l'Advanced Scientific Computing Initiative) et du supercalculateur BlueGene/L, en tête du Top 500.

ORAP

www.irisa.fr/orap/ACCUEIL/ACCUEIL1.html

Développer et diffuser le calcul parallèle: tel est l'objectif de l'Organisation associative du parallélisme (Orap), qui regroupe le CEA, le CNRS et l'INRIA. Sur son site, un agenda des manifestations sur le calcul haute performance, un bulletin d'information trimestriel, les programmes européens et une liste de liens vers les constructeurs et fournisseurs.

GROUPE CALCUL

<http://calcul.math.cnrs.fr/>

Ce site du CNRS propose une liste des acteurs du calcul haute performance en France et une introduction grand public aux supercalculateurs.

PRISM

www.prism.uvsq.fr

Le laboratoire de recherche en informatique de l'université de Versailles –Saint-Quentin est centré sur le parallélisme, les réseaux, les systèmes et la modélisation. On trouve ici une description de l'ensemble de ses thèmes de recherche.

PROJET CAPS

www.irisa.fr/caps

Regroupant l'INRIA, le CNRS, l'université de Rennes 1 et l'INSA de Rennes, le projet Compiler and Architecture for Superscalar and embedded Processors vise à développer des systèmes informatiques haute performance. Les différents axes du projet et des publications à télécharger. En anglais.

LE GRID COMPUTING

www.minefi.gouv.fr/minefi/ministere/documentation/revue_sdeweb/grid.htm

Une revue de web très fournie sur la technologie des grilles de calcul, compilée par le centre de documentation du ministère de l'Économie, des Finances et de l'Industrie – et mise à jour fin 2004.

Astrophysique

CEA - SERVICE D'ASTROPHYSIQUE

<http://dphs10.saclay.cea.fr/Sap/Activites/Science/>

Simuler la structure de l'Univers et la formation des galaxies, modéliser la dynamique et l'activité magnétique du soleil: deux domaines de recherche –parmi d'autres- du service d'astrophysique du CEA présentés ici au grand public, illustrations à l'appui.



La RECHERCHE, toute l'actualité scientifique dans vos domaines de prédilection



**11 NUMÉROS
DONT 4 NUMÉROS
SPÉCIAUX**

**52€⁶⁰
AU LIEU DE 86€¹⁰
SOIT 40%
D'ÉCONOMIE**

+ PRIVILÈGE ABONNÉ
L'accès **GRATUIT** aux archives de La Recherche depuis 1996 sur www.larecherche.fr

+ Votre cadeau :
la clé USB La Recherche
Véritable concentré de design et de technologie !

Retrouvez chaque mois, dans *La Recherche*, un panorama rigoureux de toute l'actualité scientifique et un éclairage sur les grands débats de la science et les dernières avancées technologiques. Magazine scientifique de référence, les meilleurs spécialistes internationaux y exposent avec clarté et rigueur leurs derniers travaux.

Oubliez vos disquettes et CD pour transférer vos fichiers informatiques !

Petit bijou high-tech, très pratique, la clé USB *La Recherche* vous permet de sauvegarder vos fichiers importants et de transférer vos données entre votre bureau, votre école et votre domicile.

D'une capacité de 64 Mo, elle équivaut à plus de 40 disquettes !



Vous ne vous en séparerez plus !



Caractéristiques techniques

- Pas d'installation préalable (sauf pour Windows 98 : un mini-CD d'installation est fourni)
- Compatible PC/MAC/Linux
- Utilisation illimitée
- Garantie du fabricant de 1 an
- Fournie avec une courroie de cou (peut également s'attacher à votre porte-clés) et un câble de raccord USB...

Photos non contractuelles

ET POUR 19€⁴⁰ DE PLUS, offrez-vous les Dossiers de La Recherche, 4 numéros par an.

À retourner sous enveloppe affranchie à La Recherche - Service Abonnements - B604 - 60732 Ste-Geneviève Cedex

OUI, je souhaite m'abonner et recevoir en cadeau la clé USB La Recherche, je choisis :

- 1 an : 11 numéros dont 4 spéciaux pour **52€⁶⁰ seulement** au lieu de 86€¹⁰ soit une économie de 33€³⁰.
Je suis étudiant(e) ou enseignant(e)*, je ne paie que 46€.
- 1 an : 11 numéros dont 4 spéciaux + 4 numéros des Dossiers de La Recherche pour **72€ seulement** au lieu de 112€⁴⁰, soit une économie de 40€⁷⁰.
Je suis étudiant(e) ou enseignant(e)*, je ne paie que 65€.

*Pour bénéficier de ce tarif préférentiel, merci de nous envoyer un justificatif de votre statut.

Je préfère profiter de la formule « 4 fois sans frais » :

- 1 AN : 11 numéros dont 4 spéciaux**
Je règle dès maintenant **13€15** par chèque ou carte bancaire, ce qui correspond au quart du montant de l'abonnement.
- 1 AN : 11 numéros dont 4 spéciaux + 4 Dossiers de La Recherche**
Je règle dès maintenant **18€** par chèque ou carte bancaire, ce qui correspond au quart du montant de l'abonnement.

Puis je recevrai par courrier l'autorisation de prélèvements qui me permettra de régler les trois autres versements sans aucun frais supplémentaire par prélèvement automatique trimestriel.

J'indique ci-dessous mes coordonnées :

Nom : _____
Prénom : _____
Adresse : _____
Code Postal : _____
Ville : _____
E-mail : _____

Règlement à l'ordre de La Recherche par :

chèque carte bancaire

Numéro CB : _____

Notez aussi les 3 derniers chiffres du numéro inscrit au dos de votre carte bancaire, au niveau de la signature _____

Expire fin : _____

Signature obligatoire : _____

Il peut acquiescer séparément les numéros normaux au prix de 5€90, les numéros spéciaux au prix de 6€20, Les Dossiers de La Recherche au prix de 6€30 et la clé USB La Recherche au prix de 20€. Offre réservée à la France métropolitaine, valable uniquement jusqu'au 31/12/2006 et dans la limite des stocks disponibles. Loi informatique et libertés : vous disposez d'un droit d'accès et de rectification vous concernant et vous pouvez vous opposer à leur cession.



Terre

METEO-FRANCE

www.meteo.fr/meteonet/decouvr/dossier/previsionmeteo/pre.htm

Un dossier grand public sur la prévision météorologique, son histoire et les méthodes de simulation numérique, avec une présentation du modèle Arpege et des animations.

BUREAU DE METEOROLOGIE DE GRANDE-BRETAGNE

www.meteoffice.gov.uk/research

Une somme impressionnante d'informations sur la prévision météorologique, la modélisation numérique du climat et la simulation des océans, avec une présentation des outils informatiques utilisés, en anglais.

EARTH SIMULATOR CENTER

www.es.jamstec.go.jp/esc.eng/

Aujourd'hui numéro 7 du Top 500, l'Earth Simulator japonais est dédié à la climatologie et à la géophysique. Une description du supercalculateur, les projets de recherche, publications et communiqués de presse.

Vie

POLE BIOINFORMATIQUE LYON GERLAND

http://pbil.ibcp.fr/htm/index.php?page=pbil_ibcp_welcome.html

La simulation appliquées aux protéines : destiné plutôt aux spécialistes, ce site recense les projets de modélisation moléculaire du groupe lyonnais, les logiciels utilisés, les publications, les manifestations sur le thème.

Matériaux

LABORATOIRE DE SIMULATION ATOMISTIQUE

www-drfmtc.cea.fr/sp2m/L_Sim/index_fr.html

Objectifs du laboratoire L_Sim du CEA, à Grenoble : développer des méthodes numériques et effectuer des simulations au niveau des atomes pour étudier la

structure et les propriétés de nouveaux matériaux. Les recherches en cours et les publications.

LABORATOIRE D'ETUDE DES MICROSTRUCTURES

<http://zig.onera.fr/>

Nanostructures tubulaires, microstructure et transition de phase, défauts cristallins et plasticité... Une présentation des thèmes de recherche de ce laboratoire mixte CNRS-ONERA et des outils expérimentaux et numériques utilisés.

Cryptographie

BIBMATH

www.bibmath.net/crypto/index/index.php3

Ce site encyclopédique de mathématiques propose une bonne introduction à l'histoire de la cryptographie et aux méthodes actuelles de codage.

Aéronautique

ONERA

www.onera.fr/index.html

Écoulement autour des ailes d'un avion, champs de pression, propagation acoustique : l'Office national d'études et de recherches aérospatiales met en ligne une série d'images et d'animations, ainsi qu'une description des outils et méthodes de simulation numérique en aéronautique.

Nucléaire



CEA- CENTRE DE CADARACHE

www-cad.cea.fr/

C'est au centre de Cadarache que s'effectue la qualification de codes de calcul et une grande partie des expérimentations nécessaires à la simulation des réacteurs nucléaires. Son site propose plusieurs dossiers sur les générateurs du futur et la fusion contrôlée.

DOSSIER FUSION MAGNETIQUE

www-fusion-magnetique.cea.fr/

Un dossier très complet sur la fusion nucléaire, proposé par le département de recherche sur la fusion contrôlée du CEA.

Sécurité

INSTITUT NATIONAL DE RECHERCHE SUR LES TRANSPORTS ET LEUR SÉCURITÉ

www.inrets.fr/ur/lbmc/

Les axes de recherche du laboratoire de biomécanique et mécanique des chocs de l'Inrets, qui développe entre autres des modèles humains mécaniques et numériques pour la simulation d'accidents.

Gestion des risques

INRIA - PROJET CAIMAN

www-sop.inria.fr/caiman/index.html

Améliorer la simulation numérique d'écoulements complexes et de phénomènes liés à l'électromagnétisme : tel est l'objectif du projet Caiman. Une description de ses applications, dont la modélisation de l'effet des téléphones portables sur le cerveau.

CEA - SCIENCES DE LA TERRE ET DE L'ENVIRONNEMENT

www-dase.cea.fr/

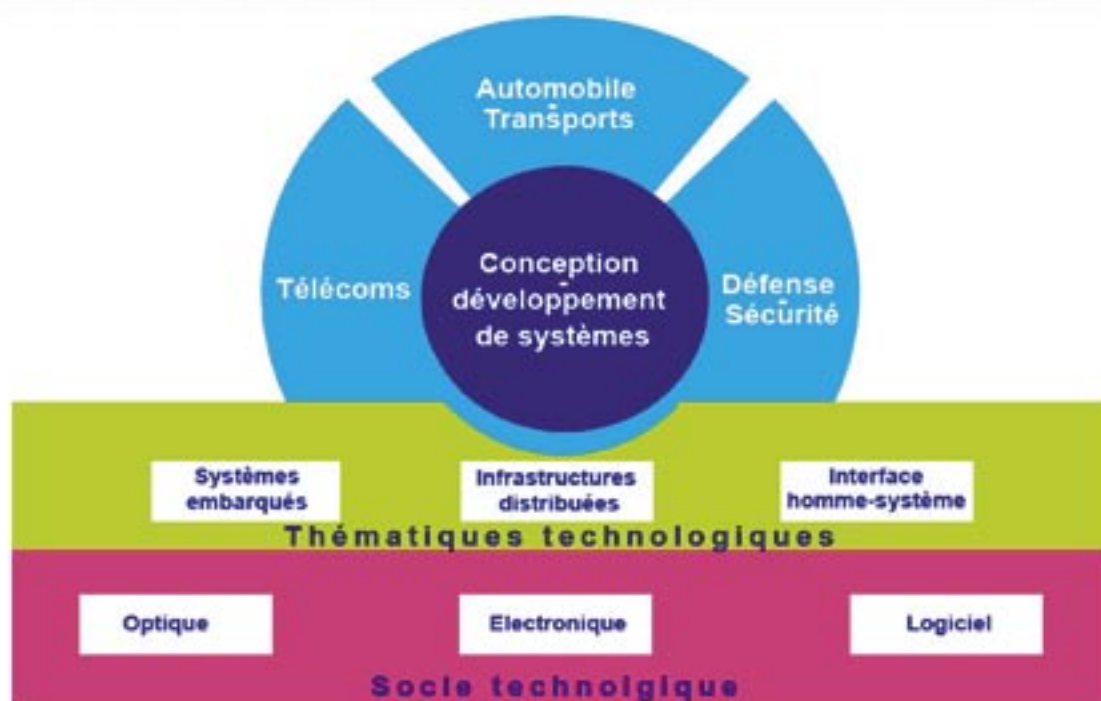
Un site largement dédié aux séismes, avec les dernières alertes en France et dans le monde, mais pas seulement : on y trouve aussi des documents sur la simulation du transport atmosphérique des radio-nucléides.

PÔLE DE COMPÉTITIVITÉ



SYSTEM@TIC
PARIS - REGION

Concevoir et maîtriser les systèmes complexes



Cluster de l'innovation labellisé par le gouvernement français "pôle de compétitivité mondial",
SYSTEM@TIC PARIS-REGION, avec le soutien de l'Etat et de 14 collectivités territoriales,
réunit à ce jour plus de 300 acteurs :

- de grands Intégrateurs internationaux leaders sur leurs marchés respectifs
- une cinquantaine de PME-PMI innovantes
- une vingtaine d'organismes de recherche et d'enseignement
- de nombreux organismes de développement économique

Ces acteurs sont déjà mobilisés sur une douzaine de projets coopératifs recherche-industrie.

Pour nous rejoindre
www.systematic-paris-region.org

Teratec



PÔLE EUROPÉEN DE COMPÉTENCE EN SIMULATION NUMÉRIQUE HAUTE PERFORMANCE

Une opportunité pour la compétitivité des entreprises et
pour la réalisation des grands challenges scientifiques et technologiques.

- Un campus regroupant industrie, recherche et entreprises informatiques
- Des projets communs de R&D entre les différents partenaires
- Un accès à des moyens de calcul et de traitement des données parmi les plus puissants au monde
- Le développement des compétences par des actions de formation, des séminaires...



RECHERCHE

Faire progresser les connaissances



ILS SONT PARTENAIRES DE TERATEC :

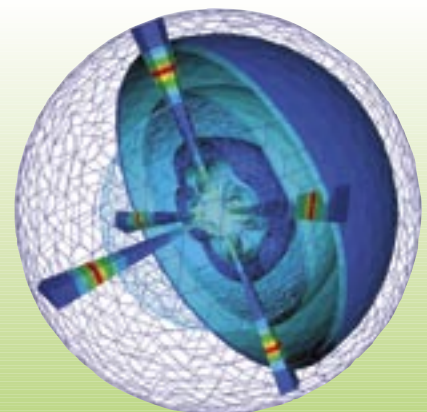
Bull, CEA, Communication et Systèmes, Dassault Aviation, Distène, Ecole centrale Paris, EDF, Ecole normale supérieure de Cachan, Hewlett-Packard France, Institut français du pétrole, Institut national des télécom d'Evry, Safran, Université de Versailles Saint-Quentin
Communauté de Communes de l'Arpajonnais, communes de Bruyères-le-Châtel et d'Ollainville.

ENTREPRISES INFORMATIQUES

Concevoir,
développer, optimiser

INDUSTRIELS

Accroître la compétitivité



Teratec participe activement au pôle de compétitivité
System@tic Paris-Région.

Contact : Teratec – domaine du grand rué – 91 680 Bruyères-le-Châtel
Christian Saguez - Président de l'association Teratec
Tél : 01 41 13 12 86 - christian.saguez@ecp.fr