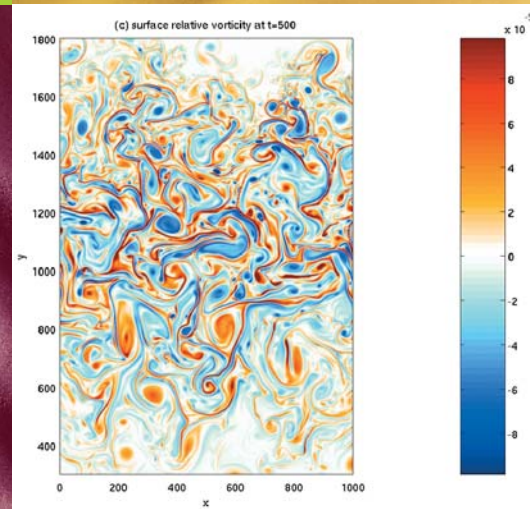


le calcul intensif : technologie clé pour le futur

Les Cahiers de l'ANR - n° 3

Janvier 2010

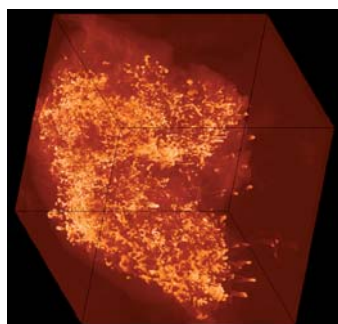
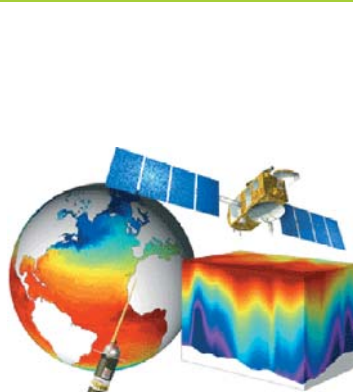


Les Cahiers de l'ANR traitent de questions thématiques transverses aux différents appels à projets de l'ANR. Cette collection met en perspective les recherches, les innovations et les avancées technologiques en cours dans un domaine spécifique. Quels sont les enjeux technologiques, sociétaux, économiques, prospectifs? Quelles sont les actions de l'ANR?

Sans prétention d'exhaustivité, l'objectif est d'explicitier les grandes problématiques. Il est fait référence à différents projets de recherche financés par l'ANR. Une présentation synthétique des projets est proposée.

Chaque Cahier permet donc d'approfondir la connaissance scientifique du domaine choisi. Il est utile pour les chercheurs, les décideurs mais aussi pour un large public. L'importance et la diversité des projets de recherche et des équipes scientifiques sont ainsi mises en lumière.

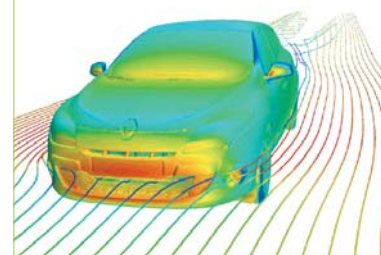
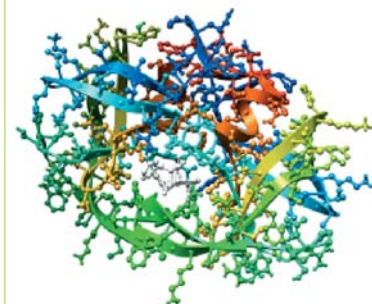
Une version en ligne est également disponible : www.agence-nationale-recherche.fr



Ce Cahier n°3 a été conçu et réalisé par Patrick-Yves Badillo et Franck Tarrier avec le concours efficace de Maly Sy et Florence Cong

Nous exprimons toute notre reconnaissance envers Catherine Rivière, Christian Saguez et Olivier Pironneau, pour leurs contributions et l'aide qu'ils nous ont apportée.

Nous remercions également Franck Barbier, Bertrand Braunschweig, Marie-Ange Folacci, les membres du Comité scientifique sectoriel STIC et l'ensemble des responsables de programmes. Nos remerciements vont également aux porteurs de projet qui ont accepté la responsabilité de remplir les fiches.



Mettre en perspective les avancées scientifiques et les résultats obtenus par les projets de grande qualité qu'elle soutient constitue un des rôles majeurs de l'ANR. En complément des colloques de bilan des programmes financés, la collection des Cahiers a pour objectif de présenter l'action de l'ANR sur des grands domaines thématiques transverses.

Ce Cahier présente un ensemble de près de 120 projets sur la thématique du calcul haute performance et de la simulation. Ces projets couvrent trois aspects essentiels de ce vaste domaine, technologie clé pour le futur : les architectures matérielles et logicielles pour le calcul intensif, les méthodes et outils pour la simulation numérique, et les applications, elles-mêmes réparties entre ingénierie des systèmes complexes, grands défis scientifiques et grands défis sociétaux.

À l'heure où la barrière du calcul pétaflopique a été passée par les plus grands supercalculateurs mondiaux et où la communauté se prépare à être confrontée au seuil du calcul exaflopique (un milliard de milliards d'opérations par seconde) d'ici dix ans, vers 2020, il est important que la recherche soit portée au meilleur niveau par les acteurs nationaux académiques et industriels.

L'ANR y contribue de manière multiple et pluridisciplinaire, dans des appels à projets « STIC », mais aussi dans des appels à projets relevant des grands domaines d'application – notamment Matériaux et Procédés, Villes Durables, Catastrophes Telluriques et Tsunami, Biologie Systémique, systèmes complexes, etc. – et à l'évidence dans les programmes non-thématiques qui constituent une part importante des projets figurant dans ce Cahier.

Je me réjouis donc particulièrement de la publication de ce Cahier, qui poursuit avec succès une collection qui a vu le jour au printemps 2009. Cet ouvrage de référence doit permettre aux scientifiques et aux décideurs impliqués dans le développement et les applications du calcul intensif et de la simulation de disposer d'une vision synthétique du rôle qu'ils jouent dans les projets de recherche en cours.

Jacques STERN

*Président de l'Agence Nationale
de la Recherche*

3 visions prospectives d'acteurs du calcul intensif

Le Calcul Intensif et la simulation numérique sont des outils stratégiques pour le soutien de la recherche scientifique ou pour la compétitivité industrielle. Ils contribuent également à l'efficacité des politiques publiques comme la prévention des risques naturels et la prise en compte des risques climatiques, mais aussi la sécurité et la souveraineté nationale.

Dans les sciences fondamentales, la simulation de phénomènes complexes, dont les composantes du vivant, permettra des percées scientifiques spectaculaires, comparables aux progrès réalisés en moins d'une décennie par les applications de la biologie génomique. Parmi les questions en jeu, on peut citer la maîtrise des technologies des nouvelles énergies, dont la fusion contrôlée (ITER), les nanosciences et les nanotechnologies, la compréhension des phénomènes climatiques et la biologie « in silico ». Pour l'industrie, ils sont un élément essentiel de productivité, en réduisant considérablement le temps de cycle de conception/mise sur le marché et en contribuant de manière inégalable à l'innovation et à l'optimisation des produits. Enfin pour les services à toute la société, ils offrent des possibilités nouvelles d'amélioration de la vie au quotidien (distribution d'énergie, aide au diagnostic médical, prévisions météorologiques...). En ce qui concerne la défense et la sécurité nationales, le calcul intensif et la simulation ont un rôle central dans le concept de dissuasion nucléaire dans le cadre des accords de suppression des essais ainsi que dans le contrôle associé aux accords de non prolifération. Ils sont également requis pour s'assurer de la maîtrise de nombreuses technologies, notamment dans l'aérospatial.

Ils sont dès aujourd'hui des outils clefs et ils le seront encore plus demain car le calcul intensif est amené à être de plus en plus utilisé, la démocratisation du calcul intensif est en route. Elle sera certainement accompagnée d'améliorations et de ruptures technologiques significatives.

Sur le plan des architectures matérielles et logicielles, l'Exaflop à l'horizon 2020 est un vrai challenge. Non seulement il faudra lever des verrous

technologiques difficiles mais il faudra aussi repenser complètement l'utilisation de telles architectures pour en tirer le meilleur parti. Cela nécessitera des efforts importants d'adaptation pour les applications existantes, mais aussi de conception tout aussi essentiels pour les applications à venir. Cela passera surtout par des femmes et des hommes formés, non seulement très tôt dans leur cursus scolaire et universitaire, mais aussi tout au long de leur vie professionnelle ; ils travailleront en équipe multi disciplinaire, pour mettre chacun leurs compétences au service des enjeux de demain, sociétaux, scientifiques ou économiques. Le soutien de l'ANR sera à ce titre un facteur clé de succès.

Catherine Rivière

Président-directeur général du Grand Équipement National de Calcul Intensif (GENCI)

L'ANR est un acteur très important de la recherche sur le calcul intensif, d'abord par ses programmes spécifiques comme COSINUS mais aussi par le programme blanc. Toutefois, de même que les mathématiques sont utilisées par tous, le fait que la simulation soit utilisée par tous ne signifie pas que tous contribuent de la même manière au progrès de cette science.

Rappelons que le calcul intensif a été jusqu'à présent un laboratoire pour la mise au point de techniques qui, tôt ou tard, finiront dans les ordinateurs grands publics. Ainsi tous les ordinateurs de bureau sont vectoriels, comme le Cray du début des années quatre-vingt. Que ferez-vous des milliers de cœurs de votre PC dans quelques années si les chercheurs d'aujourd'hui ne se penchent pas sur ce problème ?

Les grands domaines confrontés au problème - car leurs avancées scientifiques en dépendent - sont l'astrophysique et la physique des particules, la chimie et la biologie. Les sciences de l'univers et l'ingénierie obtiendront aussi d'importants résultats par la simulation mais les coûts d'adaptation des programmes sont élevés.

Actuellement les points durs des calculs à haute

performance concernent l'utilisation optimale des ressources informatiques (machines, bibliothèques, mémoires de masse...).

L'apprentissage du parallélisme a été douloureux pour beaucoup et pourtant il faut persévérer car les machines de la prochaine génération auront peut-être un million de cœurs. Elles seront aussi sans doute hybrides, c'est-à-dire avec des GPU. Leur programmation est un vrai défi et ceux qui savent mélanger le MPI avec des bibliothèques GPU se comptent sur les doigts de la main.

Pourtant au CSCI nous pensons que sur le long terme l'industrie est un acteur majeur du calcul intensif. Il faut donc que ces outils se démocratisent, qu'il y ait plus de thèses, plus de projets et de recherches, en espérant que les langages de programmation seront plus simples, que la tolérance aux pannes sera résolue ainsi que la scalabilité des algorithmes. Mais de toute façon les sciences de la simulation n'ont pas fini de nous étonner : les progrès attendus sont considérables !

Olivier Pironneau

*Président du Comité Stratégique
pour le Calcul Intensif*

La Simulation Haute Performance : une chance et une nécessité pour la France et l'Europe.

La modélisation et la simulation sont aujourd'hui un élément fondamental pour la compétitivité des entreprises, le développement des capacités d'innovation et l'étude des grands défis scientifiques et technologiques. Grâce à l'accroissement rapide des capacités de traitement, de stockage et de transmission et aux progrès dans le domaine logiciel, tous les secteurs (économie, industrie, services et recherche) sont fortement impactés. Ainsi concevoir un avion sans simulation est impossible. Traiter les grandes masses d'informations, concevoir la ville durable, découvrir les futurs médicaments, étudier les évolutions du climat, optimiser la gestion des ressources naturelles ou maîtriser les nouveaux matériaux sont également autant de défis inaccessibles sans le HPC. Ce secteur est devenu, comme le prouvent les décisions fédérales américaines, un élément stratégique de base pour tous les grands États. Par ailleurs, les technologies HPC préfigurent très souvent celles utilisées ensuite dans de nombreux secteurs des TIC.

Si la France et l'Europe disposent de compétences reconnues, l'évolution des technologies rend indispensable l'intensification des efforts de R&D. Le HPC doit apparaître comme un axe prioritaire des grands programmes nationaux et européens et pas uniquement au travers d'axes applicatifs. Les challenges scientifiques et technologiques sont très nombreux : conception des futures architectures avec la généralisation du parallélisme, des technologies GPU ou du cloud computing ; maîtrise du passage à l'échelle ; nouvelles approches de modélisation intégrant les techniques probabilistes ; recherches mathématiques et algorithmiques avec la conception de bibliothèques de calcul adaptées ; traitement de grandes masses d'informations... Face à ces défis, il est urgent de lancer une grande initiative européenne, réunissant l'ensemble des acteurs. Elle pourra s'appuyer sur les initiatives nationales comme en France l'association TERATEC créée dès juillet 2005. Réunissant les principaux acteurs du HPC elle a permis le lancement de grands projets collaboratifs ainsi qu'un master dédié au HPC. Toutes ces actions se matérialisent par la construction de la première technopole européenne dédiée au HPC réunissant sur un même site un Très Grand Centre de Calcul, des laboratoires industrie-recherche, des industriels et une pépinière d'entreprises, des plateformes de services... Le HPC est un élément fondamental pour le développement économique, la création de valeur et d'emplois et la maîtrise des technologies de demain. La France et l'Europe doivent relever ce défi par une initiative majeure industrie - recherche. C'est une chance mais surtout une nécessité stratégique pour nous maintenir au plus haut niveau et garantir notre indépendance face aux défis mondiaux. Je me réjouis que l'ANR participe activement à ce défi.

Christian Saguez

*Président du Comité de pilotage du programme
Conception et Simulation de l'ANR*



résumé

Une révolution puissante est en marche. Cette révolution est celle du calcul intensif. Technologie clé, stratégique pour le futur, le calcul intensif concerne non seulement la puissance de calcul des supercalculateurs mais aussi une très large gamme d'applications.

Un ordinateur « pétaflopique » a aujourd'hui une capacité de calcul équivalente à 100 000 exemplaires de l'ordinateur portable le plus rapide. La puissance des microprocesseurs est sans cesse accrue et, dans le même temps, les recherches en informatique permettent d'atteindre des performances de plus en plus élevées. Ces recherches sont à la base de la mise en œuvre du calcul intensif : elles concernent, par exemple, les architectures de calcul, les langages de programmation, les logiciels, etc.

La rencontre du calcul intensif et de la simulation a fourni, à travers le calcul scientifique, un formidable outil d'accélération de la connaissance dans de nombreux domaines scientifiques. À l'origine de l'essor du calcul intensif figure la simulation nucléaire qui a permis de faire cesser les essais réels. Aujourd'hui, les applications du calcul intensif favorisent découvertes et innovations dans des disciplines scientifiques aussi variées que la physique, la mécanique des fluides... en passant par la biochimie.

Elles profitent également aux secteurs de l'énergie, de la santé, des transports, de l'environnement. La compréhension du fonctionnement de notre planète, notamment des phénomènes climatiques ou géologiques, a réalisé des progrès considérables grâce au calcul scientifique.

Le calcul intensif se développe également dans l'industrie pour la conception de systèmes complexes. Par exemple, dans le secteur de l'aéronautique, la simulation permet d'optimiser l'aérodynamisme des ailes, la performance des turbines, ou encore la durabilité des matériaux utilisés. En intégrant toutes les contraintes de développement, de production, et d'utilisation, la simulation numérique permet d'accélérer les phases de conception de produits tout en maîtrisant les risques associés.

« Les possibilités technologiques peuvent être comparées à une mer dont la carte n'a pas été dressée », écrivait Schumpeter. Le présent Cahier vise à apporter différents points de repères sur les recherches scientifiques contribuant au développement du calcul intensif et sur les apports de cette technologie.

Vision prospective de 3 acteurs du calcul intensif

Partie 1: Le Calcul Intensif, technologie clé

Une révolution puissante est en marche. Cette révolution est celle du Calcul Intensif, technologie clé, stratégique pour le futur.

Ce cahier approfondira l'analyse des enjeux de ce domaine moins « visible » par exemple que celui des télécommunications ou de la robotique, mais essentiel pour la compétitivité de la France.

Partie 2: 123 Projets financés par l'ANR

Quelles sont les actions de l'ANR dans ce domaine ?

Est présentée ici une liste non exhaustive de 123 projets financés par l'ANR sur la période 2005-2008, soit un montant d'aide de 66 M€.

Ces projets sont issus de 18 appels à projets thématiques ou non-thématiques et contribuent au financement de 15 pôles de compétitivité.

Les projets ont été classés en trois volets

1
Architectures
pour le calcul
intensif

2
Méthodes
et outils pour
la simulation
numérique

3
Une large gamme d'applications

- Ingénierie des systèmes
- Défis scientifiques
- Défis sociétaux

sommaire

Avant-propos	1
3 visions prospectives d'acteurs du calcul intensif	2
Résumé	4
Plan général du Cahier	5
Sommaire	6
PARTIE 1 Une technologie clé pour la recherche, l'industrie et la société	7
1 L'INTELLIGENCE ET LA PUISSANCE DE CALCUL	7
• Définitions : supercalculateurs et calcul intensif	7
• L'ordinateur dépassera-t-il le cerveau humain ?	8
• 1997, une année symbole : la défaite de Kasparov face à Deep Blue	8
• Une dynamique favorable aux machines ?	8
• Les progrès exponentiels de la puissance des ordinateurs	8
• Loi de Moore : la puissance à l'œuvre	9
• Loi d'Amdahl, loi de Gustafson : l'influence de l'architecture	10
• La construction des supercalculateurs marquée par la domination des États-Unis et du Japon : un enjeu stratégique	10
• L'intelligence au cœur du calcul intensif : modélisation-simulation, mathématiques, méthodes, algorithmes et bibliothèques	13
• Modélisation-expérience-simulation (m-e-s)	13
• La simulation	13
• Mathématiques et calcul intensif	13
• Les outils logiciels au confluent des architectures et des applications	15
2 UN DÉFI RELEVÉ PAR LA FRANCE ET L'EUROPE : INFRASTRUCTURES, ACTEURS ET APPLICATIONS	17
• Infrastructures et acteurs	17
• Du retard français et européen...	17
• ... au rattrapage	18
• Les infrastructures et les principaux acteurs	18
• Les applications	21
• L'incertitude réduite grâce au calcul intensif	24
• Cloud computing	25
• Les challenges du futur : les coûts, la consommation d'énergie et la programmation	25
3 LES ACTIONS DE L'ANR	26
Partie 2 123 projets de l'ANR	29
1 ARCHITECTURES POUR LE CALCUL INTENSIF	30
2 MÉTHODES ET OUTILS POUR LA SIMULATION NUMÉRIQUE	48
3 APPLICATIONS DU CALCUL INTENSIF	78
• Ingénierie des systèmes complexes	79
• Grands challenges scientifiques	108
• Grands challenges sociétaux	135

Partie 1

Une technologie clé pour la recherche, l'industrie et la société

Certains auteurs ont annoncé que les progrès cumulés des ordinateurs finiraient par donner l'avantage aux machines sur l'homme¹. Cet angle d'approche a avant tout une vertu illustrative. Les progrès exponentiels de la puissance des machines pourraient conforter cette hypothèse selon laquelle la machine dépasserait son créateur. Pour mieux cerner les enjeux, il est indispensable de définir non seulement le calcul intensif, mais aussi les unités de mesure corrélées. Lorsqu'on annonce qu'on est en route vers les ordinateurs exaflopiques, qu'est-ce que cela signifie ? Plus que jamais, la puissance des ordinateurs, le calcul intensif, la simulation deviennent des enjeux stratégiques pour des pans entiers de la recherche et de l'innovation. La compétition mondiale, traditionnellement marquée par la domination des États-Unis au niveau du calcul intensif est de plus en plus exacerbée. Cependant, derrière la course à la puissance, l'intelligence humaine est indispensable pour définir de nouvelles architectures de supercalculateurs, pour s'appuyer sur les mathématiques afin de proposer de nouveaux modèles, des simulations et des outils pour les physiciens, les ingénieurs... qui à leur tour s'appuieront sur des avancées en termes d'algorithmes, de bibliothèques logicielles... Le défi du calcul intensif est essentiel pour les avancées scientifiques mais aussi pour les applications industrielles, qui couvrent un très large éventail. La France et l'Europe ont relevé depuis quelques années ce défi. Les infrastructures sont en place et mettent aujourd'hui des capacités de calcul importantes à la disposition des acteurs d'un secteur très dynamique.

L'INTELLIGENCE ET LA PUISSANCE DE CALCUL

Définitions : Supercalculateurs et calcul intensif

Un supercalculateur est un ordinateur conçu pour atteindre les performances les plus hautes possibles en termes de vitesse, de capacité mémoire et de puissance de calcul grâce aux technologies maîtrisées au moment de sa conception. Le domaine de recherche relatif aux supercalculateurs et à leur usage est dénommé calcul intensif, ou en anglais *High Performance Computing (HPC)*. Cette science est née dans les années 1970 avec le développement des calcula-

teurs Cray : la simulation numérique par le calcul intensif, à la croisée des chemins entre informatique, modélisation physique et mathématique s'est affirmée. « Depuis, le calcul intensif a pris une place essentielle dans la plupart des domaines de la recherche et de l'industrie. C'est désormais un secteur capital, voire stratégique, pour certains pays qui soutiennent des politiques à long terme »².

Les supercalculateurs ont été développés pour répondre au besoin des scientifiques et des ingénieurs. La modélisation de phénomènes complexes aboutit en effet à des systèmes d'équations ne pouvant être résolus que de manière approchée, en réalisant un grand nombre de calculs.

¹ Des auteurs comme Vernor Vinge ou Ray Kurzweil développent l'idée de singularité technologique et affirment que John von Neumann aurait, parmi les premiers, évoqué une telle hypothèse (mais ce point reste en débat selon les interprétations)

² Pierre Leca, « Course à la puissance de calcul : trois révolutions en marche », La Recherche, Les défis de supercalculateurs, Mai 2007, n°408, pp 6-9.

Si l'ambition n'est pas de réaliser des machines pensantes, la comparaison des supercalculateurs avec le cerveau humain donne un ordre de grandeur illustratif des progrès réalisés.

L'ORDINATEUR DÉPASSERA-T-IL LE CERVEAU HUMAIN ?

1997, une année symbole : la défaite de Kasparov face à Deep Blue

1997 est une date symbole pour le grand public qui découvre alors la puissance des ordinateurs. En effet, cette année-là, le champion du monde d'échecs, Gary Kasparov, est battu par l'ordinateur Deep Blue conçu par IBM. Il apparaît que la supériorité de la machine sur l'homme aux échecs est acquise, et ce, dans un jeu représentant la tactique et la stratégie à l'état pur ! Deep Blue était une machine titanesque avec une capacité de calcul considérable pour l'époque : elle est capable d'évaluer quelques 200 millions de coups par seconde³. À titre de comparaison, les micro-ordinateurs contemporains peuvent atteindre une puissance de 20 millions d'opérations par seconde. Le jeu de Go est l'un des derniers où l'intelligence humaine continue d'affirmer sa supériorité sur des logiciels. Cette barrière est peut-être toutefois sur le point de tomber, comme en témoignent les performances du supercalculateur Huygens lors de l'Open 2009 à Taïwan⁴.

Une dynamique favorable aux machines ?

Depuis plus d'une décennie, différentes méthodes ont été utilisées pour estimer la « puissance de calcul » d'un cerveau humain⁵. La puissance d'un cerveau humain se situerait en équivalent « ordinateur » entre 10^{13} et 10^{19} instructions par seconde. Bien entendu, en ce qui concerne les capacités du cerveau, comme l'a montré Pierre Changeux, la « puissance » intègre des élé-

ments chimiques et la plasticité du cerveau en fait un outil bien plus complexe et probablement toujours bien plus puissant que l'ordinateur.

Des projets, tels que le *Blue Brain Project* de l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne, visent toutefois à élaborer une simulation complète d'un cerveau humain. Selon Vernor Vinge, professeur d'informatique et de mathématiques à l'Université de San Diego, mais surtout connu du grand public pour ses œuvres de science-fiction, l'évolution exponentielle de la technologie informatique est telle qu'en 2035 l'homme sera dépassé par les machines. C'est ce que l'on appelle la théorie de la singularité technologique. Elle trouve un certain crédit lorsqu'on observe les progrès exponentiels de la puissance des ordinateurs.

LES PROGRÈS EXPONENTIELS DE LA PUISSANCE DES ORDINATEURS

L'unité de mesure de la vitesse de traitement d'un processeur est le Flops (*Floating Point Operations per second*), exprimant le nombre d'opérations en virgule flottante exécutées par seconde.

Le tableau ci-après indique l'évolution de la puissance de calcul des ordinateurs au cours du temps. L'histoire démarre en 1938 avec Konrad Zuse qui assemble sa première machine, strictement mécanique, le Z1. Colossus, conçue en 1943 par Alan Turing, repose sur des machines installées près de Londres. Elle est l'équivalent d'une calculatrice spécialisée, capable de traiter 5000 opérations par seconde : elle permettait de casser les codes secrets des nazis. Alors qu'IBM et Control Data franchissent au début des années 60 la barre du MegaFlops, la révolution "Cray" se met en route à la même époque, sous l'impulsion d'un co-fondateur de Control Data : Seymour Cray.

³ Pierre Nolot, « Les ordinateurs sont-ils venus à bout de l'homme aux échecs ? », LEMONDE.FR Mis à jour le 29.09.09

⁴ <http://www.hpcwire.com/offthewire/Dutch-Supercomputer-Establishes-New-Record-in-Go-45094962.html?viewAll=y>

⁵ Sur cette thématique voir par exemple : Jean-Paul Delahaye, « L'intelligence et le calcul », Belin, Paris, 2002 ou Pierre Changeux « L'homme de vérité », Odile Jacob, Paris, 2004

Évolution et mesure de la puissance de calcul			
Préfixe	Abréviation	Signification	Ordinateur et année de référence
		1 Flops	ZI de K. Zuse, 1938
Kilo	K	1 000 Flops	Colossus, 1944
Mega	M	1 000 000 Flops	IBM 7030, Los Alamos, 1961
Giga	G	1 000 000 000 Flops	Cray-2, 1985
Tera	T	1 000 000 000 000 Flops	Asci Red, Intel, 1997
Peta	P	1 000 000 000 000 000 Flops	Roadrunner, IBM, 2008
Exa	E	1 000 000 000 000 000 000 Flops	2019 ?

Le principe du « pipe line vectoriel » : en 1975, le célèbre Cray 1 s'impose comme la référence dans le monde des supercalculateurs. Le concept sur lequel repose alors la puissance des ordinateurs est le principe du « pipe line » qui applique aux calculs la logique du travail à la chaîne sur des vecteurs de données. En 1985 le Cray-2 atteint le GigaFlops.

Le parallélisme : dès le début des années 1980 le parallélisme devient incontournable. Le rapport performance prix des microprocesseurs est avantageux, car ils sont désormais produits sur une très large échelle. Il convient donc de faire collaborer un grand nombre de processeurs entre eux. C'est Intel qui, parmi les premiers, développe efficacement ce type d'architecture. Dans les années 90, le parallélisme devient la règle. La question qui se pose est de savoir comment mettre en œuvre un nombre de processeurs de plus en plus grand qui vont partager ou non des mémoires communes.

Dans le passé il a fallu 12 années pour passer du GigaFlops (Cray2 en 1985) au TeraFlops (Intel ASCI Red en 1997), puis 11 années pour passer au PetaFlops (IBM Roadrunner en 2008), soit une multiplication par 1 000 de la puissance crête par période d'environ 11 ans. Les très nombreuses applications escomptées dans le domaine (voir infra) ne seront possibles qu'avec des systèmes fonctionnant autour des « peta », qui deviennent donc accessibles dès à présent tandis que l'exa pourrait voir le jour en 2019.

Cette succession de sauts technologiques a permis une progression exponentielle de la puissance des ordinateurs. Elle a été rendue possible grâce à la loi de Moore.

Illustration de la puissance des supercalculateurs « petaflopiques »

Le PetaFlops a été atteint en 2008. On parle du supercalculateur « petaflopique ». La prochaine génération sera celle des supercalculateurs « exaflopiques ».

Loi de Moore : la puissance à l'œuvre

La technologie des semi-conducteurs a été bouleversée par l'émergence des microprocesseurs au début des années 1970 (la première « puce » a été le 4004 d'INTEL en 1971). L'évolution de la puissance des microprocesseurs suit la loi de Moore – énoncée par Gordon Moore, l'un des fondateurs d'INTEL –, qui stipule, dans sa version réévaluée de 1975, que le nombre de transistors susceptibles d'être placés sur une puce de silicium double tous les deux ans (une première version de 1965 postulait que la complexité des semi-conducteurs proposés en entrée de gamme doublait tous les 18 mois).

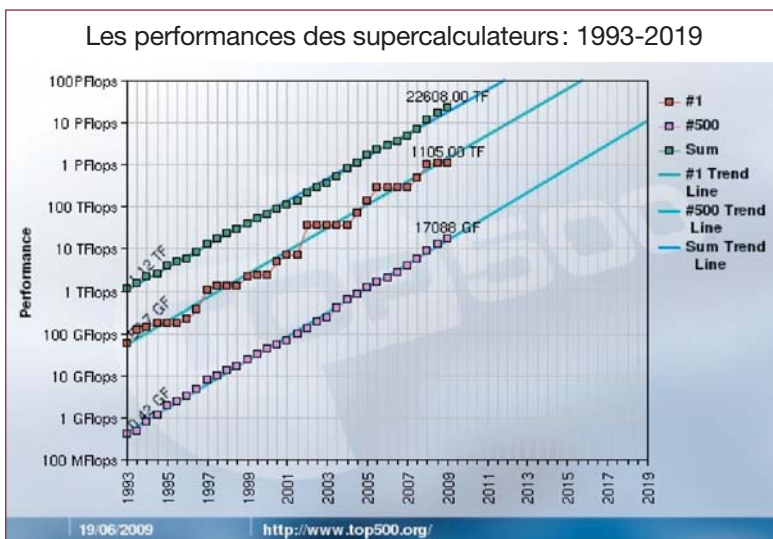
Le rythme de croissance exponentielle prévu par cette loi empirique est toujours observé en ce début de XXI^e siècle et devrait se poursuivre jusqu'à ce que les limites de la physique amènent à privilégier d'autres architectures.

Cette puissance croissante des microprocesseurs non seulement permet une baisse spectaculaire des coûts, mais aussi un développement de nouvelles applications. C'est la combinaison de la numérisation et de l'accroissement des capacités de compression et décompression, codage et décodage, transmission et stockage qui induit des changements extrêmement rapides dans l'ensemble formé par les télécommunications, l'informatique et l'audiovisuel.

Loi d'Amdahl, loi de Gustafson : l'influence de l'architecture

Il y a environ 40 ans, l'informaticien Gene Amdahl a édicté différentes « lois » sur l'élaboration des architectures d'ordinateurs. Elles sont toujours utiles pour appréhender la conception des systèmes informatiques. Ces lois concernent le parallélisme, les systèmes équilibrés, la mémoire et les entrées/sorties. Elles ont été complétées par les travaux de John Gustafson. Il est à noter que si la loi de Moore explique l'augmentation de la performance des ordinateurs, il apparaît que les travaux sur l'architecture et sur la programmation permettent des gains de performance de plus en plus importants, et supérieurs à ceux enregistrés grâce à la loi de Moore. Cependant, une loi d'Amdahl montre que le gain en performance obtenu en multipliant le nombre de processeurs est limité, pour un problème donné, par la fraction parallélisable du code de calcul que l'on souhaite exécuter.

Le graphique ci-dessous, avec l'échelle logarithmique, illustre la progression exponentielle de la puissance des supercalculateurs. Il a été établi par le « top 500 project » qui est l'une des références dans le domaine (<http://www.top500.org/project>). Le supercalculateur le plus puissant au monde (carrés rouges) avait en 1997 une capacité de 1 TeraFlops, il dépasse aujourd'hui 1 105 TeraFlops. Le groupe des 500 ordinateurs les plus puissants (le 500^e est représenté par des carrés roses) évolue au même rythme, et la somme (carrés verts) atteint aujourd'hui 22 600 TeraFlops.



Les tendances du top 500 (lignes bleues) situeraient l'arrivée du premier ordinateur « exaflopique » en 2019. Si un ordinateur « petaflopique » peut se représenter comme l'équivalent de 100 000 ordinateurs portables les plus rapides à l'heure actuelle, soit un ensemble d'ordinateurs portables d'une hauteur de 2 500 m, la capacité d'un ordinateur « exaflopique » est quant à elle absolument vertigineuse.

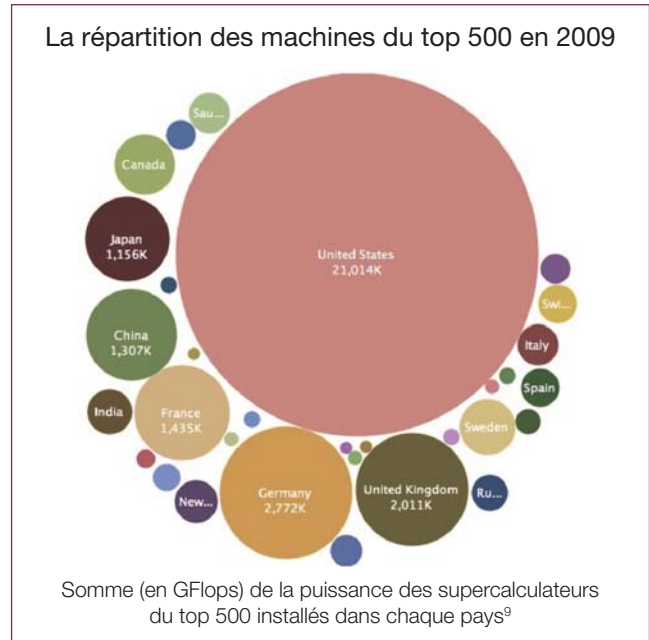
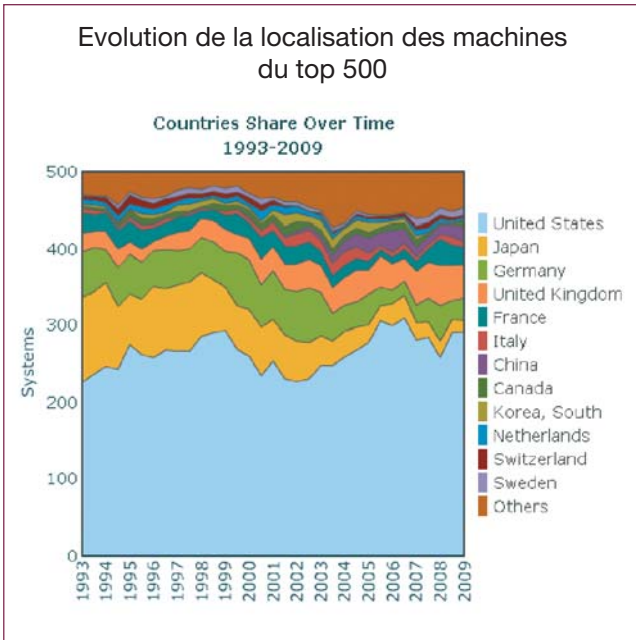
Sur le chemin vers l'ordinateur exaflopique, IBM prévoit de livrer en 2012 un supercalculateur, Sequoia, d'une capacité de 20 000 TeraFlops. Il sera équipé de 1,6 million de cœurs, avec 1,6 PetaOctets de mémoire et sera constitué de 96 armoires de calcul. Il ne s'étalera cependant que sur 380 mètres carrés contre les 480 mètres carrés du RoadRunner et sera bien plus efficace énergétiquement avec une puissance moyenne de 6 Megawatts, soit l'équivalent de 500 foyers américains. Il sera d'abord utilisé pour les travaux de la National Nuclear Safety Administration.

Ces exemples illustrent la signification de la puissance des supercalculateurs d'aujourd'hui et du futur, mais quels sont les enjeux de tels investissements ? Quelle est la situation au niveau mondial dans ce secteur ?

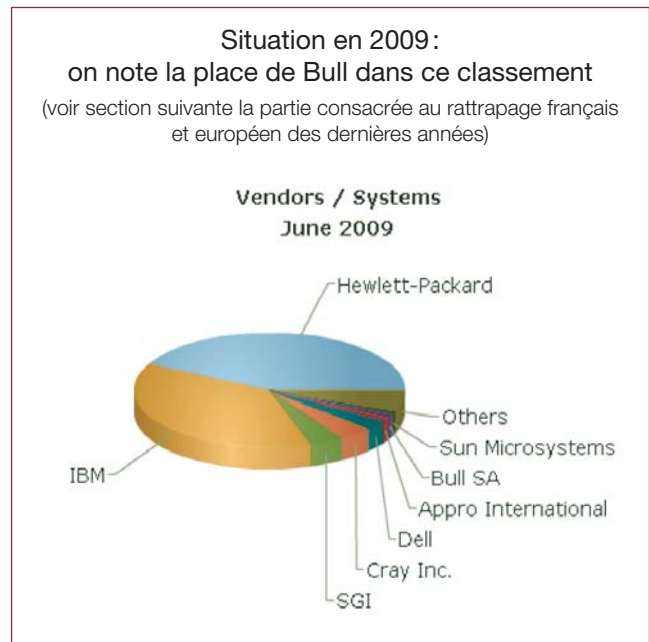
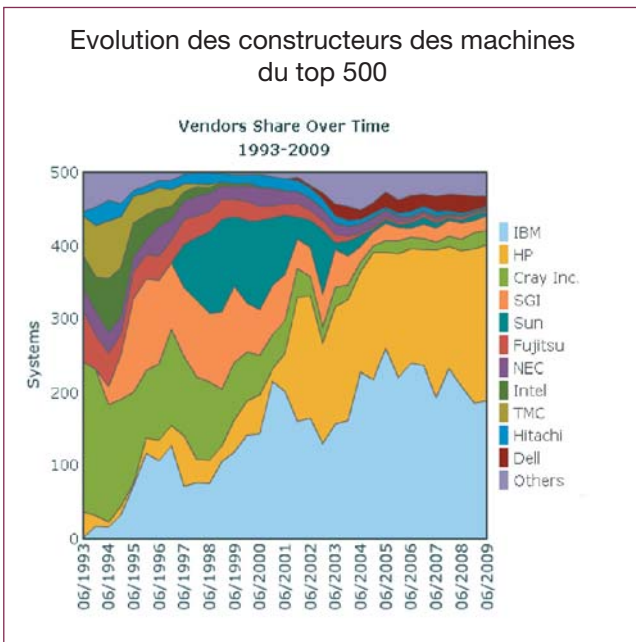
LA CONSTRUCTION DES SUPER-CALCULATEURS MARQUE PAR LA DOMINATION DES ETATS-UNIS ET DU JAPON : UN ENJEU STRATEGIQUE

Les États-Unis, tout au long des dernières décennies, ont concentré en permanence environ 60 % de la puissance de calcul mondiale. Depuis la signature du traité d'interdiction complète des essais nucléaires en 1996, les scientifiques américains, suivis des Français, ont cherché à tester et développer de nouvelles armes sans pouvoir les déclencher réellement.

Les États-Unis contrôlent depuis plusieurs décennies une part dominante des capacités de calcul intensif au niveau mondial, source top 500⁶.



La domination américaine a trait aussi aux constructeurs de supercalculateurs dont le marché est dominé par IBM et HP.



Le Japon est également un acteur incontournable sur la scène internationale dans le domaine du calcul intensif.

Le supercalculateur Earth Simulator construit par NEC est entré dans le top 500 en 2002

en première position, place qu'il a ensuite conservée pendant trois ans, avec une puissance de 35,86 TeraFlops. Ce supercalculateur était en particulier approprié pour des simulations atmosphériques et océaniques, et

⁶ <http://insidehpc.com/2009/09/30/pictures-of-technical-imbalance-via-the-top500/>

Bull est aujourd'hui le seul constructeur européen de supercalculateur

Ce groupe, pionnier dans l'histoire de l'informatique, accumule les difficultés dans les années 80. En particulier, il ne réussit pas à s'imposer sur le marché des ordinateurs de bureau, face à la prédominance américaine et à l'intensification de la concurrence asiatique. Il se recentre, au début des années 90, sur le marché des serveurs moyen et haut de gamme pour les entreprises, ainsi que sur des activités de services.

En 1998, Bull opère un virage stratégique en décidant de bâtir une offre de serveurs basés sur des processeurs Intel. Il s'assure ainsi de disposer d'une source de processeurs à prix réduit, régulièrement renouvelés. Il accroît également l'ouverture de ses architectures puisqu'il devient possible d'y installer des applications sous Windows.

Cette évolution s'accompagne du développement d'une architecture multi-processeurs symétriques (SMP) à mémoire partagée flexible et multi-environnement. Celle-ci permet à Bull d'élaborer, en partenariat avec l'Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines, l'INRIA, le CEA et Dassault Aviation, une plateforme de calcul intensif adaptée aux besoins des centres de recherche pour le calcul scientifique.

La collaboration entre les équipes R&D de Bull et la recherche scientifique française pour le développement du calcul intensif se poursuit notamment à travers plusieurs projets financés par l'ANR (NUMASIS, PARA, SCOS, TELEDOS, etc.), les projets FAME2 (2006) et POPS (2007) du pôle de compétitivité System@TIC, ou encore le projet ParMA (2007) dans le cadre d'ITEA2.

Japon la suprématie des supercalculateurs les plus puissants⁸.

Les enjeux sont tels que la compétition mondiale est montée en puissance. Un rapport de la National Science Foundation (NSF) de 2006⁹ souligne cette concurrence exacerbée au point de formuler quelques inquiétudes par rapport à la domination américaine : *"There is strong evidence that our nation's leadership in computational engineering and science, particularly in areas key to Simulation-Based Engineering Science, is rapidly eroding. Because competing nations worldwide have increased their investments in research, the U.S. has seen a steady reduction in its proportion of scientific advances relative to that of Europe and Asia. Any reversal of those trends will require changes in our educational system as well as changes in how basic research is funded in the U.S."*

Aujourd'hui, les États-Unis, avec notamment l'Advanced Simulation and Computing Program, et le Japon, à travers le programme "Next Generation Super Computer", se livrent à une véritable compétition. De son côté, l'Europe a aussi progressé (voir section suivante).

il a joué un rôle majeur dans les recherches sur le changement climatique.⁷ Il a également permis des simulations sur des phénomènes de nature géologique ou sismique. Son successeur, Earth Simulator 2, est entré en service en mars 2009, avec une puissance de 122,4 TeraFlops.

Le Japon ambitionne d'affirmer à nouveau sa maîtrise des technologies les plus pointues en mettant en service en 2012 le supercalculateur « Kei-soku » d'une puissance de 10 PetaFlops (« Kei » est l'unité de mesure japonaise indiquant 10^{16} , et « Soku » signifie vitesse). Ce projet lancé en 2006 et doté d'un budget de 820 M€ pourrait redonner au

Le calcul intensif est donc un enjeu stratégique du plus haut niveau. Se pose aussi la question de la maîtrise de la construction des supercalculateurs. Siemens en Allemagne et Philips aux Pays-Bas ont disparu de ce marché. Bull est le seul opérateur européen sur un marché dominé par les américains et les japonais. Cette question est d'autant plus délicate que les supercalculateurs sont souvent fabriqués à perte. La rentabilité et les retombées technologiques sont à situer à long terme dans une optique d'intérêt général.

⁷ <http://www.spectrosciences.com/spip.php?breve390>

⁸ http://www.bulletins-electroniques.com/rapports/2006/smm06_013.htm

⁹ Simulation Based Engineering Science, National Science Foundation, 2006, http://www.nsf.gov/pubs/reports/sbes_final_report.pdf

L'INTELLIGENCE AU CŒUR DU CALCUL INTENSIF : MODELISATION-SIMULATION, MATHEMATIQUES, METHODES, ALGORITHMES ET BIBLIOTHEQUES

Modélisation-Expérience-Simulation (M-E-S)

En 2005, le rapport de l'Académie des Technologies¹⁰ citait trois extraits du rapport de 1992 du Comité des Applications de l'Académie des Sciences (CADAS) :

« Nous avons atteint aujourd'hui une étape dans la croissance des performances où beaucoup de problèmes cruciaux pour les applications deviennent modélisables ».

« On peut tester directement la validité des modèles en les comparant à des expériences car la complexité des deux approches (le nombre de dimensions prises en compte) est devenue la même. »

« Parallèlement, l'idée qu'on ne peut plus créer de produit industriel complexe sans disposer d'un modèle de comportement est maintenant acceptée par toutes les industries, dans la limite des coûts et de qualité des modèles sur ordinateur. »

Ces trois phrases illustrent l'importance des trois éléments que sont la modélisation, l'expérience et la simulation. Elles sont d'autant plus pertinentes que plus la puissance des supercalculateurs s'accroît plus le triptyque M-E-S s'affirme dans des champs d'applications diversifiés.

La simulation

« *La simulation est une extension ou une généralisation de l'expérience.* » Michel Serres¹¹

La simulation « 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 mon-

tée en puissance va de pair avec celle des ordinateurs est aujourd'hui un outil indispensable de la recherche »¹⁵. « Comme on ne peut pas simuler à l'aide de nombres sans modèle mathématique, modélisation et simulation vont toujours de pair »... « 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 numérique pour les prévisions météorologiques qui ont conduit l'informaticien américain Seymour Cray à concevoir les ordinateurs vectoriels dans les années 1980. »... « 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 de longues périodes d'essais. 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 ». ¹²

La simulation intervient dans un grand nombre de domaines comme la mécanique céleste, la physique nucléaire, la prévision météorologique, l'aéronautique, l'automobile, la physique théorique, etc. Plus récemment, la finance, la biologie, ainsi que de nombreux autres secteurs, sont devenus de gros utilisateurs de temps de calcul.

Mathématiques et calcul intensif

La France est d'autant mieux placée dans ce domaine que l'une des disciplines fondamen-

¹⁰ Rapport de l'Académie des Technologies, enquête sur les frontières de la Simulation, Paris, Juin 2005.

¹¹ Michel Serres, « La simulation, technique nouvelle, ancienne tradition », numéro spécial sur le calcul haute performance, N° 393, janvier 2006.

¹² J.-M. Ghidaglia et B. Rittaud, in La Recherche N° 396, op. cit., p. 14-16.

tales est constituée par les mathématiques, « seule discipline où la France figure en second rang au Web of Science, derrière les États-Unis »¹³. Le rapport de la Stratégie nationale de recherche et d'innovation (SNRI) 2009 souligne en effet l'excellente position de la France dans ce domaine.

Or, le défi « numérique, calcul intensif, mathématiques » de la SNRI recouvre¹⁴ : les mathématiques et leurs interactions ; la modélisation, la simulation numérique, le calcul intensif ; les sciences du numérique, entendues au sens des sciences du traitement de l'information.

« Les sciences du numérique et les mathématiques font référence à un ensemble de méthodes, d'algorithmes et de techniques dites calculatoires ou *computationnelles* qui permettent la création et l'exploration de nouveaux concepts et outils, ainsi que l'élaboration de modèles, leur identification, leur programmation et leur exploitation en systèmes effectifs. Ces modèles opérationnels sont au cœur de la plupart des avancées scientifiques et des progrès de l'ingénierie. Ils permettent de mieux concevoir, de prototyper virtuellement, de réaliser et de fabriquer des infrastructures et des artefacts de plus en plus complexes, efficaces et sûrs. Ils sont intégrés à ces artefacts et les prolongent en capacités sensorimotrices, en autonomie de fonctionnement ou de décision et en richesse d'interaction avec les humains (...).

A la jonction des mathématiques et de l'informatique, le calcul intensif et la simulation illustrent bien le triptyque scientifique fondateur « théorie-expérience-simulation » qui a considérablement modifié la manière de travailler des scientifiques et de certaines industries. Dans le secteur de l'automobile et de l'aéronautique, la simulation a remplacé la plupart des essais. Les défis sont scientifiques mais aussi technologiques, tout en faisant appel

aux avancées les plus récentes en mathématiques ou en informatique. Pour illustrer ce dernier point, observons que des changements d'échelle considérables sont en cours : en calcul intensif, la haute performance va s'obtenir par d'énormes concentrations de (cœurs de) processeurs atteignant bientôt la centaine de milliers pour atteindre d'ici cinq ans le million voire beaucoup plus. Il est intéressant de constater que de telles infrastructures seront utiles non seulement au calcul scientifique mais aussi à toutes les applications qui viseront à extraire de l'information pertinente de très grandes masses de données complexes. »¹⁴

L'informatique parallèle et distribuée, les réseaux, les grilles, le *cloud computing*, les processeurs multi-cœurs, ainsi que les architectures hybrides intégrant des GPU¹⁵, constituent des enjeux importants pour le futur par rapport aux questions de performance et de sûreté. Mentionnons ici différents projets en cours dans ces domaines, comme :

◆ l'Institut des Grilles (IdG) du CNRS créé en août 2007¹⁶,

◆ le projet LCG : l'objectif du projet LCG (LHC Computing Grid) est de satisfaire les énormes besoins de calcul générés par l'activité du LHC (grand collisionneur de hadrons ou Large Hadron Collider) en déployant un service informatique mondial de grille, intégrant la capacité de centres de calcul scientifiques dispatchés à travers l'Europe, l'Amérique et l'Asie dans une organisation de calcul virtuelle¹⁷.

◆ le Projet Européen EGI (European Grid Initiative) s'appuie sur des grilles nationales. Le Comité de Pilotage National a confié à l'IdG la mission de mettre en place une structure nationale GIS "France-Grille" en cours de finalisation¹⁸.

¹³ « SNRI 2009 - Rapport du groupe de travail « numérique, calcul intensif, mathématiques » http://media.enseignementsup-recherche.gouv.fr/file/Defi_de_connaissance_pluridisciplinaire/97/5/SNRI2009_rapport_groupe_de_travail_Nummath_65975.pdf

¹⁴ Nous reprenons ici des éléments du rapport du groupe de travail SNRI 2009, op.cit.

¹⁵ Graphics Processing Unit, microprocesseur présent sur les cartes graphiques des ordinateurs

¹⁶ <http://www.idgrilles.fr> : un travail important de prospective nationale sur les grilles de production a été fait, voir notamment : <http://www.idgrilles.fr/al/Prosl/DG08/index.html> ainsi que le livre blanc : http://idgrilles.fr/IMG/pdf/livre_blan_draft1_8final.pdf Ces documents présentent en détail l'intérêt et la stratégie de développement des grilles

¹⁷ <http://cc.in2p3.fr/rubrique163.html>

¹⁸ <http://web.eu-egi.eu/>

◆ le projet Grid 5000, initié en 2003 par le ministère de la recherche, l'INRIA, le CNRS et les conseils régionaux, a atteint son objectif en 2009 : exploiter la puissance de calcul de plus de 5 000 "cœurs" de processeurs pour former une plateforme de recherche unique en son genre. La plateforme en comptait à la mi 2009 5 026 cœurs, répartis sur 9 sites français.

Au fur et à mesure que le calcul intensif devient plus puissant et permet de traiter de nouveaux types d'applications, la complexité, la taille (en nombre de processeurs) et la hiérarchisation croissante des super ordinateurs rendent de plus en plus cruciales des recherches sur l'optimisation des performances. L'INRIA et l'Université de l'Illinois ont d'ailleurs récemment annoncé (en juillet 2009) la mise en place d'un laboratoire commun qui a pour objectif de modéliser et d'optimiser des bibliothèques numériques, essentielles pour les principales applications de simulation. En particulier, « la programmation parallèle, née dans les années 1960, reste beaucoup trop complexe pour permettre à des programmeurs non-experts d'exploiter le potentiel de ces calculateurs Peta-ExaScale. Ce laboratoire commun étudiera les approches de programmation hybrides associant plusieurs langages de programmation ainsi que des approches totalement nouvelles »¹⁹.

Les outils logiciels au confluent des architectures et des applications

Le développement d'architectures de calcul de plus en plus parallélisées soulève des questions de passage à l'échelle pour les applications. Il s'agit notamment d'adapter les codes de calcul aux architectures multi-cœurs, ou aux processeurs couplés à des accélérateurs de calcul. La levée des verrous scientifiques à ce niveau est cruciale pour la mise en œuvre des applications les plus exigeantes en ressources de calcul, telles que les simulations

multi-physiques, multi-échelles ou les modélisations « hybrides » (mêlant des états de type continu, échantillonné, et discret).

De même, l'évolution des architectures s'accompagne d'un accroissement de la complexité de la programmation. Afin de conserver une accessibilité de ces technologies pour les différentes communautés scientifiques, et pérenniser les applications qui ont été développées, il est important de développer des outils permettant de maîtriser ou de masquer cette complexité.

Il s'agit en particulier de concevoir ou de faire évoluer les bibliothèques destinées aux méthodes numériques, et éventuellement spécialisées par domaine d'application, en fonction des nouvelles architectures. Les outils de pré-traitement ou de post-traitement, accompagnant le code proprement dit, doivent également être adaptés à ces nouvelles architectures.

Il s'agit également de faciliter le travail des programmeurs d'applications, grâce à des supports d'exécution adaptés. Les programmeurs ont par exemple besoin d'outils de débogage et d'analyse de performance masquant la complexité des nouvelles architectures.

Les interfaces de programmation les plus répandues, MPI pour le calcul parallèle sur des nœuds à mémoires distribuées, et OpenMP pour les nœuds à mémoires partagées, montrent leurs limites dans le cas d'architectures massivement parallèles ou hétérogènes. De nouveaux outils sont donc nécessaires, à l'image de nouveaux langages comme UPC (Unified Parallel C) ou l'architecture « CUDA » du constructeur américain NVIDIA pour le calcul parallèle sur processeurs graphiques. Enfin, l'évolution des architectures vers des milliers de cœurs rend de plus en plus complexe leur maintenabilité et la gestion de la tolérance aux pannes. De plus, l'accès partagé à des supercalculateurs, dans un contexte par exemple

¹⁹ Voir <http://www.inria.fr/saclay/actualites/creation-laboratoire-commun-calcul-intensif>

de *cloud computing*, soulève des questions essentielles de fiabilité et de sécurité.

Les outils de conception et d'optimisation

Les outils d'aide à la conception, à la décision, au contrôle et au suivi représentent un domaine d'application majeur du calcul intensif. Des verrous de recherche majeurs restent à lever dans ce domaine. Ainsi, les méthodes d'optimisation restent un domaine de recherche ouvert. Des travaux concernent par exemple l'optimisation multidisciplinaire, les méthodes évolutionnaires, les méthodes de type « surface de réponse » ou encore les méthodes d'optimisation hiérarchique.

La prise en compte des incertitudes est également un élément fondamental pour la conception de systèmes robustes. Il peut s'agir par exemple d'incertitudes sur les propriétés des systèmes ou sur leur environnement opérationnel. Les techniques correspondantes sont de type probabiliste, stochastique, arbre de défaillance, approche markovienne, etc.

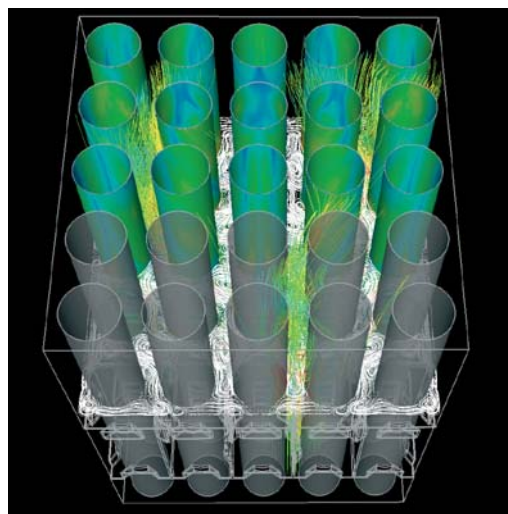
Dans le cas de systèmes complexes ne pouvant se prêter de manière réaliste à des tech-

niques de simulation, en raison du volume de calcul qui serait nécessaire, des techniques de réduction de modèle peuvent être mises en œuvre. Elles visent à produire des modèles simplifiés, performants en exécution tout en fournissant le niveau de précision requis.

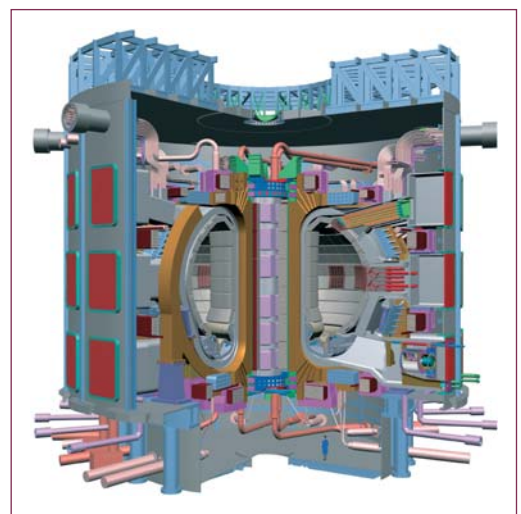
L'expression des modèles par des spécifications formelles ouvre la voie à l'exécution directe des modèles. Elle permet de travailler dans une approche globale à la fois sur la définition et le comportement d'un système complexe.

Enfin, un défi important consiste à pouvoir manipuler dans un même environnement des types de représentation très variés : modèles *ab initio* et approches particulières, équations algèbro-différentielles et aux dérivées partielles, modélisations comportementales et multi-agents, approches probabilistes, modèles à base d'information...

Ainsi le calcul intensif permet de simuler des phénomènes particulièrement complexes, faisait partie intégrante de systèmes eux-mêmes très difficiles à appréhender. Les réacteurs de centrale nucléaire, représentés ci-dessous, en sont un bon exemple.



Simulation d'écoulements dans un assemblage de centrale nucléaire (© EDF)



Vue éclatée du réacteur ITER (© CEA)

UN DÉFI RELEVÉ PAR LA FRANCE ET L'EUROPE : INFRASTRUCTURES, ACTEURS ET APPLICATIONS

INFRASTRUCTURES ET ACTEURS

Alors que la France connaissait jusqu'en 2007 un retard alarmant dans le domaine du calcul intensif, différentes initiatives importantes lui ont permis de retrouver une place qu'elle n'aurait jamais dû quitter.

Entre 2007 et 2010, « grâce à la nouvelle dynamique impulsée par GENCI, la France aura multiplié la puissance de calcul disponible pour la recherche française par 30 et est passée du 5^e rang au 3^e rang dans le classement des 500 ordinateurs les plus puissants »²². Comment une telle évolution positive a-t-elle pu voir le jour ?

Du retard français et européen...

La France mène depuis la fin des années 1990 un programme de simulation pour la Défense, caractérisé par la mise en place fin 2001, de TERA-1 (1 TeraFlops) puis par la mise en service de TERA-10 en 2006. Ce supercalculateur était alors le plus puissant d'Europe (60 TeraFlops). Conçu par le constructeur européen Bull, il occupait en juin 2006 la cinquième place du top 500. Mais deux ans plus tard TERA-10 n'est plus qu'à la 32^e place. La concurrence est particulièrement rude à l'échelle mondiale car quelques pays leaders, dont les États-Unis ont parfaitement appréhendé, depuis longtemps, le rôle de technologie clé du calcul intensif et investissent des sommes considérables dans ce secteur.

En 2005, le rapport de l'académie des technologies²³ pointe le retard européen et fran-

« 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 »²⁰. Cette affirmation de Bernard Bigot, haut-commissaire à l'énergie atomique résume l'importance stratégique du calcul intensif. Cette technologie clé est une brique de base fondamentale des recherches dans un grand nombre de champs scientifiques variés et débouche sur un très large éventail d'applications, comme le souligne également la NSF : « *SBES [Simulation Based Engineering Science] constitutes a new paradigm that will be indispensable in meeting the scientific and engineering challenges of the twenty-first century. (...) SBES is a discipline indispensable to the nation's continued leadership in science and engineering. It is central to advances in biomedicine, nanomanufacturing, homeland security, microelectronics, energy and environmental sciences, advanced materials, and product development. There is ample evidence that developments in these new disciplines could significantly impact virtually every aspect of human experience. Formidable challenges stand in the way of progress in SBES research. These challenges involve resolving open problems associated with multiscale and multi-physics modeling, real-time integration of simulation methods with measurement systems, model validation and verification, handling large data, and visualization* ».²¹

çais. Il apparaissait que l'Europe ne représentait que 15 à 20 % de la puissance installée au niveau mondial en 2004, la France étant seulement 4^e en Europe derrière le Royaume-Uni, l'Allemagne et l'Espagne.

A cette même époque le rapport, réalisé par M. Héon et E. Sartorius, constate également le retard important pris par la France et par l'Europe, dans le domaine du calcul intensif. Ce rapport souligne la répartition de la recherche entre le CEA (avec le CCRT), le CNRS (avec l'IDRIS) et les universités (avec le CINES) et le manque de coordination entre les trois centres nationaux. Ce rapport souhaite la mise en place d'une structure assurant coordination et synergie et propose la création d'un comité stratégique pour le calcul intensif (CSCI).

²⁰ Bernard Bigot, « Les fulgurants progrès du calcul intensif », éditorial de la Recherche, numéro spécial sur le calcul haute performance, n° 393, janvier 2006

²¹ Simulation Based Engineering Science, National Science Foundation, op.cit.

²² SNRI 2009, op. cit.

²³ Op. cit.

... au rattrapage

Suite à cette prise de conscience, les pouvoirs publics et les grands acteurs industriels et académiques ont mis en place les organisations nécessaires.

Des initiatives pour la recherche publique.

« Le Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche a mis en place (...) un dispositif exceptionnel comprenant :

- ◆ une programmation dans le cadre de l'Agence Nationale de la Recherche (ANR), visant « à promouvoir l'utilisation du calcul intensif dans les domaines applicatifs en s'attaquant à des grands défis ou en favorisant le développement de grands codes disciplinaires et de développer la recherche informatique nécessaire pour réaliser de telles actions »²⁴. En particulier, l'appel à projet « Calcul Intensif et Simulation » a financé, de 2005 à 2007, 36 projets de recherche dans le domaine du calcul intensif en leur apportant un financement de plus de 20 M€. Depuis 2008, il est intégré dans l'appel à projets « Conception et Simulation »²⁵.

- ◆ la société civile Grand Equipement National de Calcul Intensif (GENCI), maîtrise d'ouvrage nationale, a pour objectif de mettre au service de la recherche française des moyens de calcul au meilleur niveau mondial. Créée en janvier 2007, GENCI est détenue à 49 % par l'État représenté par le Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche, 20 % par le CEA, 20 % par le CNRS, 10 % par les Universités, et 1 % par l'INRIA. Un budget annuel²⁶ de 25 M€ a permis de doubler, à partir de 2007, les moyens mobilisés par la France pour le calcul intensif, et ainsi de rattraper le retard face à d'autres grands pays européens, comme l'Allemagne.

- ◆ le Comité Stratégique du Calcul Intensif (CSCI)²⁷, placé auprès du ministre de l'enseignement supérieur et de la recherche, est chargé de conduire des réflexions et d'expri-

mer des avis sur l'acquisition et le renouvellement des supercalculateurs nationaux, sur leur utilisation dans les meilleures conditions par toute la communauté scientifique, ainsi que sur la participation française aux coopérations internationales et européennes. »²⁸

Le CSCI a tenu sa séance inaugurale en octobre 2007. Le Comité, formé de 22 spécialistes académiques et industriels, est présidé par le Professeur Olivier Pironneau, de l'Académie des Sciences²⁹. Il a publié en décembre 2008 un rapport qui propose un panorama très complet du secteur et des enjeux³⁰.

Les infrastructures et les principaux acteurs

Les 3 centres nationaux de GENCI :

- ◆ le CCRT (Centre de Calcul Recherche et Technologie) est une des composantes du complexe de calcul scientifique du CEA localisé sur le site de Bruyères-le-Châtel (*Centre DAM-Ile de France*, Direction des Applications militaires³¹ qui gère notamment le programme simulation après l'arrêt des essais nucléaires),³²

- ◆ l'IDRIS (Institut du développement et des ressources en informatique scientifique), fondé en novembre 1993, et basé à Orsay, est le centre majeur du CNRS pour le calcul numérique intensif de très haute performance,³³

- ◆ le CINES (Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur) est un établissement public national, basé à Montpellier (France) et placé sous la tutelle du Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche. Il met à disposition des enseignants-chercheurs des moyens de calcul pour relever de grands défis scientifiques.³⁴

En quelques années, la France s'est dotée d'une infrastructure de premier plan. En effet, « le plan mis en œuvre par GENCI (...), a conduit à :

- ◆ l'installation au CINES en juillet 2008 d'une

²⁴ Discours de François d'Aubert, lors de sa visite au CEA/DAM Ile de France le 13 mai 2005, en compagnie de François Fillon.

²⁵ Tous les détails sur le serveur de l'ANR : <http://www.agence-nationale-recherche.fr/AAPProjets-Clos?NodId=18&IngAAPId=163>

²⁶ Communiqué de presse de Monsieur François Goulard du 25 janvier 2007.

²⁷ Arrêté du 28 juin 2007 portant création du Comité Stratégique du Calcul Intensif, Arrêté du 2 août 2007 portant nomination au CSCI. Communiqué de presse de Madame Valérie Pécresse du 22 octobre 2007 à l'occasion de la séance inaugurale du CSCI.

²⁸ Document du Genci « La Politique Française en Calcul Intensif », Catherine Rivière, 2009.

²⁹ <http://www2.enseignementsup-recherche.gouv.fr/discours/2007/cpscsci.htm>

³⁰ http://calcul.math.cnrs.fr/Documents/DocOfficiels/CSCI_Rapport2008.pdf

³¹ <http://www-dam.cea.fr/dynamique/accueil/accueil.asp>

³² <http://www-ccrt.cea.fr/>

³³ <http://www.idris.fr/>

³⁴ <http://www.cines.fr/>

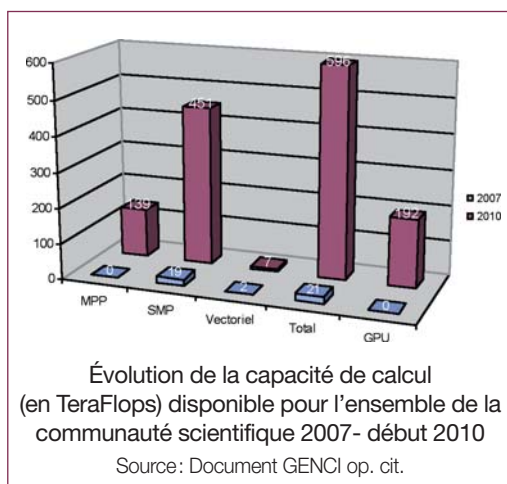
machine SGI ICE 8200 de type SMP³⁵ (à nœuds fins) pour une puissance de 147 TeraFlops,

◆ l'installation au CCRT en avril 2009 par extension du calculateur BULL existant d'une machine de type SMP (à nœuds fins) hybride dotée d'accélérateurs graphiques (GPU), pour une puissance respective de 103 et 192 TeraFlops,

◆ l'installation au CCRT en avril 2009 de 3 nœuds vectoriels NEC SX9 d'une puissance de 5 TeraFlops. Cette installation permettra ainsi à la communauté des climatologues de tenir les engagements pris par la France dans le cadre du 5^e programme du Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat (GIEC).

Aux investissements réalisés par GENCI, il convient d'ajouter ceux réalisés par le CNRS, consistant en l'installation en avril 2008 d'une machine de type MPP³⁶ pour une puissance de 139 TeraFlops (IBM Blue Gene/P) et en octobre 2008 d'une machine de type SMP (nœuds larges) pour une puissance de 68 TeraFlops (IBM Power 6). »³⁷

Le graphique ci-après montre l'évolution de la capacité de calcul (en TeraFlops) disponible pour l'ensemble de la communauté scientifique entre 2007 et début 2010. Les progrès sont considérables puisque l'on est passé d'une puissance totale de l'ordre de 20 TeraFlops à 596 TeraFlops.



A partir de 2010, le site de Bruyères le Châtel, à 37 km au sud de Paris, devrait accueillir le Très Grand Centre de Calcul (TGCC). Cette infrastructure hébergera l'un des supercalculateurs du projet européen PRACE (voir infra), les architectures de calcul du CCRT devraient également y être transférées. Avec une capacité de plusieurs PetaFlops, le TGCC sera l'un des centres les plus puissants au niveau mondial.

De nombreux autres acteurs français de recherche dans le domaine du calcul intensif apparaissent dans les projets figurant dans ce Cahier (voir partie 2).

Concernant l'animation et la structuration de la recherche dans ce secteur, outre GENCI et le CSCI, il est possible de mentionner quelques acteurs qui ont un rôle intéressant :

◆ ORAP : A la suite du rapport rédigé à leur demande par J.-L. Lions, le CEA, le CNRS et l'INRIA ont convenu, en 1994, de créer une structure de collaboration pour le développement et la diffusion du calcul parallèle : ORAP (ORganisation Associative du Parallélisme). L'objectif de cette organisation est le renforcement des collaborations entre les partenaires et la promotion des projets cohérents au plan national, européen et international³⁸.

◆ Le GDR Calcul qui, par l'organisation de séminaires et une liste de diffusion très active, participe à la promotion du calcul intensif au sein des méso centres français.

◆ Le CERFACS³⁹ (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique) est une organisation de recherche constituée par le CNES, EDF, Météo France, l'ONERA, EADS, SAFRAN et TOTAL. Basé à Toulouse, il a comme principal objectif de développer des méthodes avancées pour le calcul scientifique et la simulation numérique sur les supercalculateurs les plus puissants.

³⁵ Symetric Multi-Processor

³⁶ Massively Multi-Processor

³⁷ Document du Genci, op. cit.

³⁸ http://www.irisa.fr/ORAP/ACCUEIL/intro_fr.html

³⁹ <http://www.cerfacs.fr/>

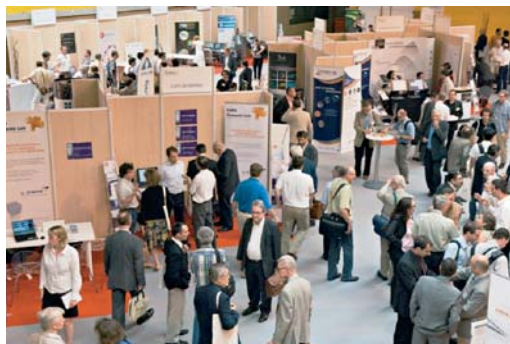
Les initiatives pour le développement économique.

Créée dès juillet 2005 à l'initiative du CEA, l'association Ter@tec réunit les principaux acteurs du calcul intensif, industriels et académiques, offreurs et utilisateurs. Acteur majeur en Europe de la haute performance, Ter@tec est implantée sur la zone de communes de l'Arpajonnais, dans l'Essonne. Au cœur d'une technopole labellisée zone R&D, Ter@tec est membre du pôle de compétitivité mondial System@TIC simulation Paris-Région.

Ter@tec, dont la principale mission est de contribuer au développement de la simulation numérique haute performance et du calcul intensif, a pour objectif :

- ◆ de participer à l'émergence et à la mise en place de grands projets de R&D collaboratifs entre les différents membres,
- ◆ de favoriser l'accès à des moyens de traitement parmi les plus puissants au monde,
- ◆ d'assurer le développement des compétences par des actions de formation, des séminaires et des conférences.

Ainsi, Ter@tec organise tous les ans les journées Ter@tec qui, en juin 2009, ont réuni plus de 600 personnes.

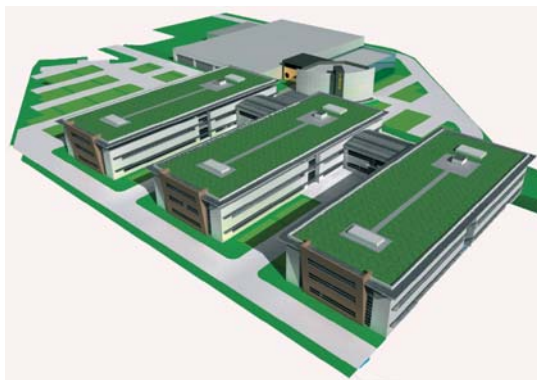


Journées Ter@tec 2009

Pour atteindre ces objectifs, Ter@tec réalise la première technopole européenne totalement dédiée à la simulation et au calcul haute performance. Sur le même site que le TGCC, le campus Ter@tec regroupera 1 000 per-

sonnes sur 1 500 m² de laboratoires et bureaux. Il abritera en 2010 :

- ◆ de grands acteurs industriels du calcul intensif (constructeurs, éditeurs, offreurs de service),
- ◆ une pépinière d'entreprises spécialisées en calcul intensif,
- ◆ des laboratoires de recherche publics et privés,
- ◆ des plates-formes de services associés,
- ◆ un institut de formation dédié au calcul intensif.



Le campus Ter@tec

Par ailleurs, les pôles de compétitivité jouent un rôle important pour le montage de projets de R&D dans ce domaine.

En particulier, le pôle System@TIC Paris Région inclut un groupe thématique « Outils de Conception et Développement de Systèmes » (OCDS), qui vise, à partir de projets de R&D fédératifs, à élaborer les outils numériques qui vont permettre de concevoir, développer, fabriquer et maintenir des produits physiques ou logiciels, et ceci mieux, plus vite, et à moindre coût qu'aujourd'hui. Ces outils et méthodes font notamment appel à la simulation des caractéristiques des produits eux-mêmes, mais aussi à la simulation des moyens et processus à mettre en œuvre pour les produire. Les retombées concernent de nombreux domaines : aéronautique et systèmes embarqués, automobile et transports, télécommunications, sécurité et défense, réseaux de distribution, etc.

De nombreux autres pôles de compétitivité contribuent à l'émergence de projets dans le domaine du calcul intensif : MINALOGIC, Mov'eo, ASTech, Advancity, Cap Digital Paris Region, etc.

Les initiatives européennes.

L'Europe a également pris en charge ce dossier important du calcul intensif⁴⁰. Les Allemands ont adopté une démarche similaire à celle des Français, en créant une structure du même type que GENCI. Par ailleurs, prenant conscience de l'importance grandissante de la simulation numérique, l'Europe a créé, dans le cadre du 7^{ème} PCRD, une nouvelle ligne budgétaire intitulée « calcul intensif ». Le projet PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) prépare le déploiement en Europe, à partir de 2010, d'une infrastructure de calcul intensif de classe mondiale composée de centres équipés de supercalculateurs d'une puissance supérieure ou égale au PétaFlops. Il s'agit de disposer en Europe de trois à cinq centres de calcul intensif qui, par rotation, permettraient d'en classer au moins un par an parmi les cinq premiers du top 500.

18 pays européens sont impliqués dans PRACE. Les "partenaires principaux", France, Allemagne, Angleterre, Espagne, Hollande et Italie, ont déclaré leur intention d'accueillir sur leur territoire un des éléments de l'infrastructure. Ces positions doivent être confirmées dans les 6 mois à venir. Le CEA et le CNRS, via le centre commun Jacques Louis Lions qu'ils ont créé en 2008, ont déposé officiellement un dossier de candidature auprès de GENCI qui a abouti à la décision d'installer fin 2010, au TGCC, la seconde machine pétaflopique du projet PRACE après celle de Juelich en Allemagne installée mi 2009 et qui sera accessible aux scientifiques européens dès le démarrage de l'infrastructure.

LES APPLICATIONS

Comme le rappelle le CSCI⁴¹, la garantie de la fiabilité et de la sûreté des armes nucléaires dépend depuis 1996 de la simulation. « Le problème posé est à la fois multi-physiques et multi-échelles. Il faut en premier lieu disposer de la meilleure modélisation physique de l'ensemble des phénomènes contribuant au fonctionnement : détonique, fission nucléaire, transfert d'énergie, fission, fusion ; ensuite représenter l'objet d'une manière parfaite allant jusqu'aux imperfections de fabrication (les réactions intervenant dans le fonctionnement étant à seuils, de très faibles écarts peuvent entraîner d'importantes variations sur le résultat). Les échelles de temps vont de la nanoseconde à plusieurs dizaines de microsecondes. Dès le problème posé, il est apparu que sa solution nécessitait des puissances de calcul allant très au-delà de ce que le marché pourrait raisonnablement fournir à échéance de 15 ans. Deux pays se sont ouvertement lancés dans un programme de garantie par la simulation : les États-Unis avec le « Stockpile Stewardship Program » piloté par le DOE et réalisé dans les laboratoires de Lawrence Livermore, Los Alamos et Sandia et la France avec le programme « Simulation » piloté et réalisé par le CEA/DAM. Ces deux programmes comportent une part importante de recherche fondamentale sur les modèles, le développement des codes de simulation correspondants et le développement, la conception et la mise en service des moyens de calcul nécessaires ».

De façon connexe on trouve la question de l'énergie et du nucléaire civil qui draine des investissements importants notamment avec ITER.

Dans le domaine scientifique plusieurs disciplines sont mentionnées par le CSCI. Il faut évidemment développer :

- ◆ la physique corpusculaire,

⁴⁰ http://www.bulletins-electroniques.com/ti/146_01.htm

⁴¹ http://calcul.math.cnrs.fr/Documents/DocOfficiels/CSCI_Rapport2008.pdf

Utilisation de la puissance de calcul pour différents secteurs au niveau mondial

(source Top 500)

Application Area	Count	Share	Rmax Sum (GFlops)
Research	78	15.60 %	8 545 654
Finance	47	9.40 %	1 267 612
Information Service	34	6.80 %	993 626
Geophysics	31	6.20 %	899 325
Logistic Services	30	6.00 %	834 971
Semiconductor	22	4.40 %	577 740
Information Processing Service	18	3.60 %	630 036
Defense	16	3.20 %	873 812
Software	16	3.20 %	432 657
Telecomm	11	2.20 %	277 880
Service	10	2.00 %	242 332
Database	9	1.80 %	226 633
Aerospace	7	1.40 %	369 031
Energy	7	1.40 %	235 760
WWW	7	1.40 %	228 485
Weatherand Climate Research	6	1.20 %	386 309
Retail	5	1.00 %	126 834
Hardware	5	1.00 %	205 923
Weather Forecasting	3	0.60 %	130 457
Medicine	3	0.60 %	141 706
Automotive	3	0.60 %	85 477
Media	3	0.60 %	80 711
Entertainment	3	0.60 %	96 474
Gaming	2	0.40 %	49 340
Benchmarking	2	0.40 %	67 795
Digital Media	2	0.40 %	46 576
LifeScience	1	0.20 %	97 071
Digital Content Creation	1	0.20 %	22 507
Consulting	1	0.20 %	43 001
Not Specified	117	23.40 %	9 761 765
Totals	500	100 %	27 977 501

- ◆ la chimie ab initio et la dynamique moléculaire permettent d'effectuer des simulations aux échelles atomique et moléculaire,
- ◆ la chimie et la biochimie progressent également grâce aux simulations de dynamique moléculaire.

Le tableau ci-dessus, établi en novembre 2009 par le top 500, donne une idée de la répartition de l'utilisation de la puissance de calcul par différents secteurs.

Ce tableau met en évidence la consommation de quelques secteurs pour lesquels on ne soupçonnait pas, a priori, une telle importance du calcul intensif. Avec la recherche, où le calcul intensif trouve un débouché naturel, les secteurs suivants représentent la moitié de la puissance de calcul :

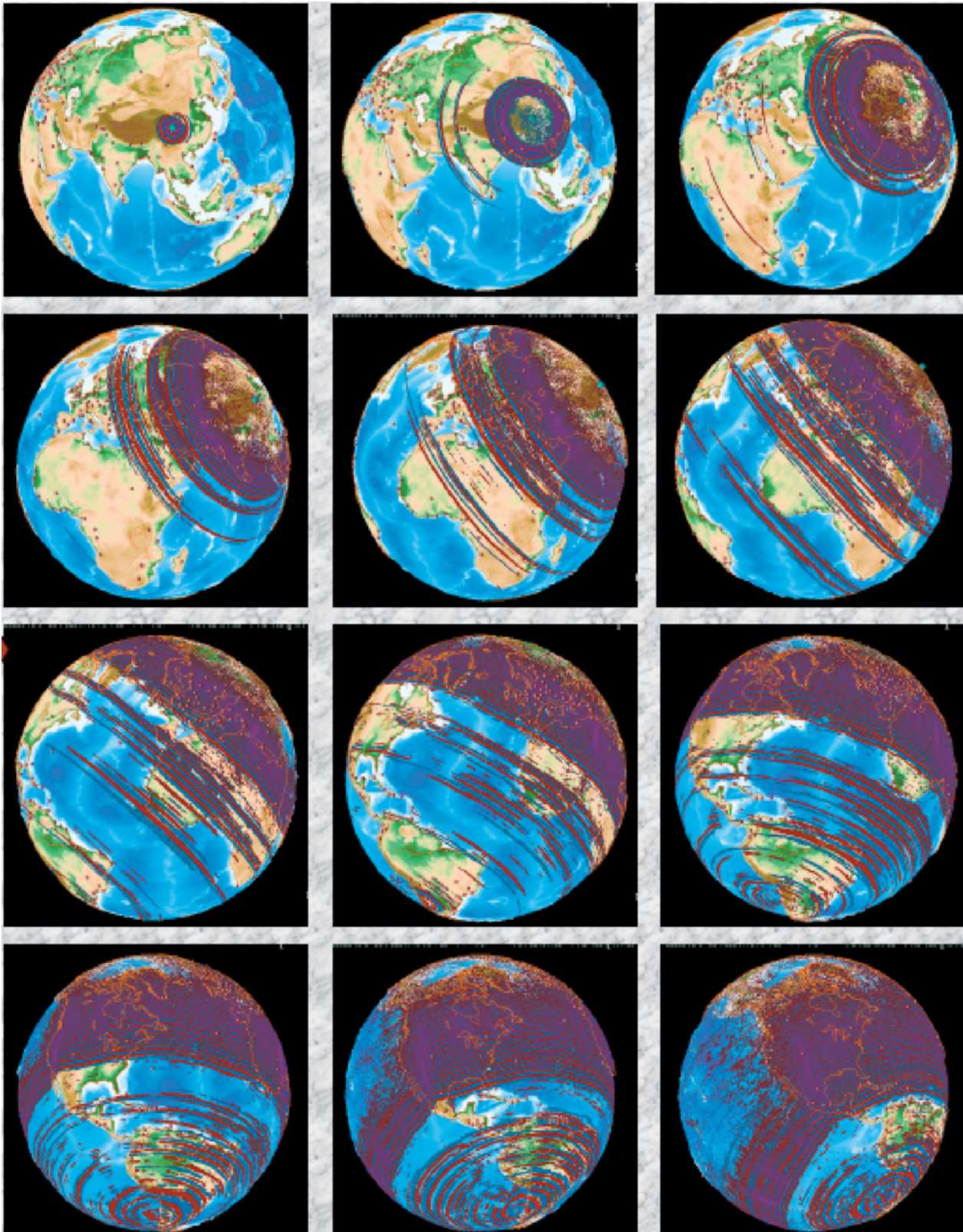
- ◆ la finance,
- ◆ les services d'information,
- ◆ la géophysique,
- ◆ les services de logistique,
- ◆ les semiconducteurs.

Dans le domaine industriel et appliqué, on peut citer :

- ◆ la géophysique, avec la prospection sismique pour les compagnies pétrolières, ou encore l'hydrogéologie (simulation d'écoulement de l'eau) ou la simulation de réservoirs pétroliers qui permet d'optimiser l'extraction de pétrole,
 - ◆ l'automobile ou l'aéronautique avec des simulations de mécanique des fluides pour l'aérodynamique ou la combustion des moteurs/turbines,
 - ◆ les matériaux avec des simulations en modélisation moléculaire et mécanique quantique,
 - ◆ la finance avec la simulation de calcul de risques sur produits dérivés, le trading à haute fréquence ou le pricing de l'électricité.
- Mais le calcul intensif recouvre aussi de nouvelles applications de plus en plus importantes dans les domaines tels que la santé et l'environnement.

Le diagramme, page 24, résume la grande gamme d'applications permises par le calcul intensif.

Simulation de la propagation d'ondes sismiques suite au tremblement de Terre du Sichuan en Chine, le 12 mai 2008, magnitude 8.0

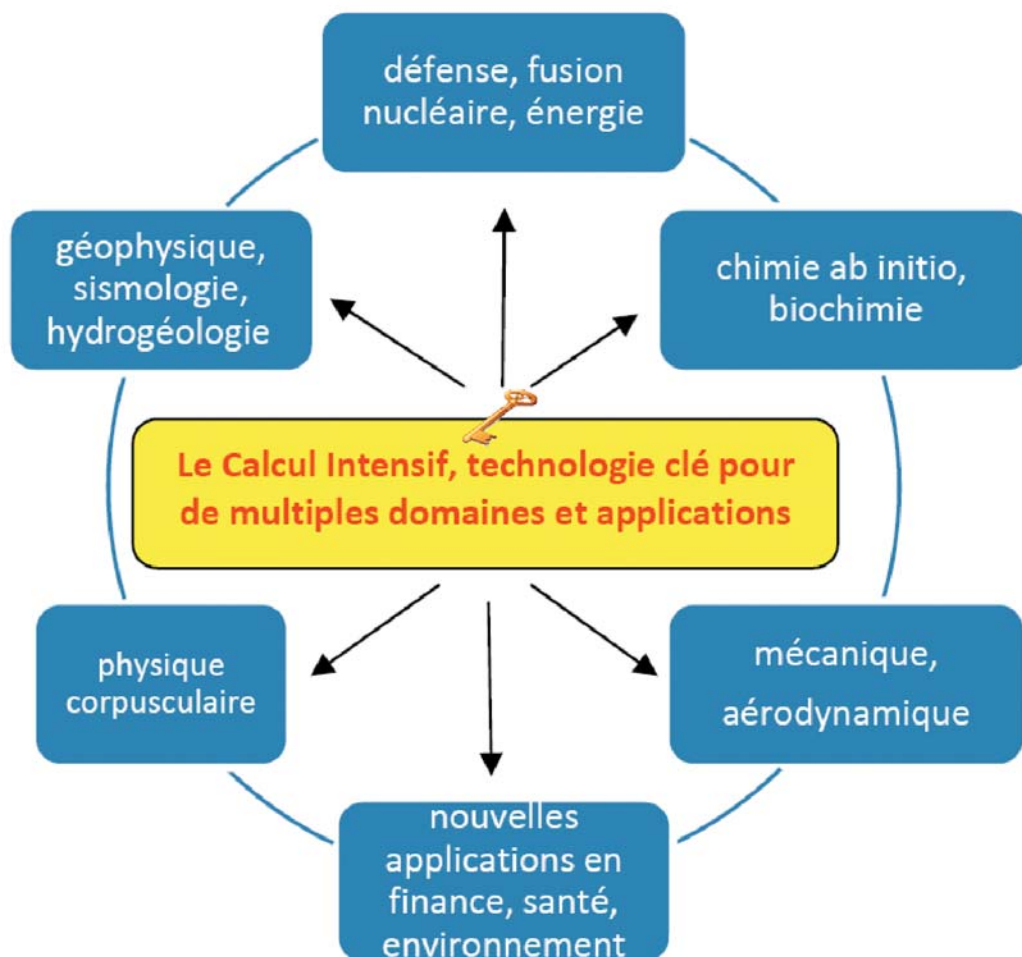


L'INCERTITUDE REDUITE GRACE AU CALCUL INTENSIF

Complexité, parallélisme, articulation des mathématiques et de la modélisation, mise en œuvre de la simulation, etc. témoignent de la richesse du domaine comme véritable support fondamental de la science au service d'applications multiples. Il est à noter que ces recherches s'efforcent aussi de traiter l'un des problèmes qui a toujours préoccupé les hommes : comme réduire l'incertitude ? La meilleure réponse est certainement d'accroître la connaissance. La simulation sert de plus en plus à concevoir des systèmes complexes, jusqu'à son intégration complète dans des environnements industriels par exemple pour la fabrication d'avions. De tels

progrès ont été rendus possibles grâce à la maîtrise des niveaux d'incertitudes à chaque étape du processus.

Dans un autre domaine, on commence grâce à ce type de recherche à mieux cerner l'évolution du climat. La société se pose des questions cruciales sur le réchauffement climatique, suite à l'augmentation des gaz à effet de serre. Les réponses sont très largement dépendantes de l'accès à des moyens de calcul intensif : « Réduire les incertitudes, quantifier la probabilité d'événements extrêmes, dénombrer les puits de carbone et leur possible évolution suite au changement du climat, étudier les impacts sur les écosystèmes nécessite une augmentation de la puissance de calcul d'un facteur de 10 à 1 000 par rapport aux moyens actuels. »⁴²



⁴² Voir le document « Le CNRS donne à la recherche française une puissance inégalée de calcul et étend ses horizons avec l'aide d'IBM », http://www2.cnrs.fr/sites/communiqu/fichier/dp_calculateur.pdf, janvier 2008.

Cloud computing

Le *cloud computing* – ou « informatique dématérialisée » - consiste, pour un utilisateur, à ne plus accéder à ses infrastructures informatiques propres mais à utiliser, à distance, des ressources distribuées et virtualisées à travers le réseau. Ces ressources peuvent être mises à dispositions par un fournisseur, qui en facture l'accès sous forme de service. Ce concept peut s'appliquer dans certains cas au calcul intensif, les réseaux très haut débit permettant de relier les utilisateurs aux grandes centrales de calcul qui hébergent les supercalculateurs.

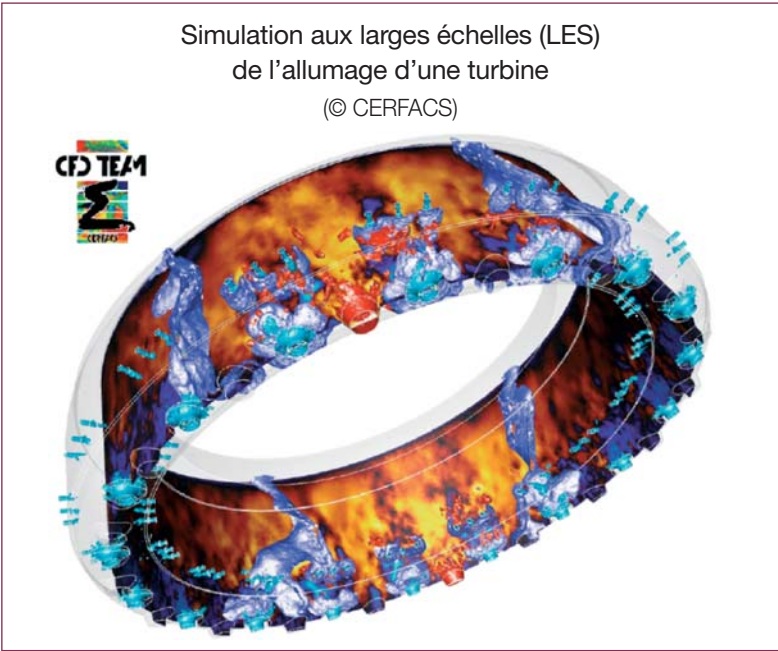
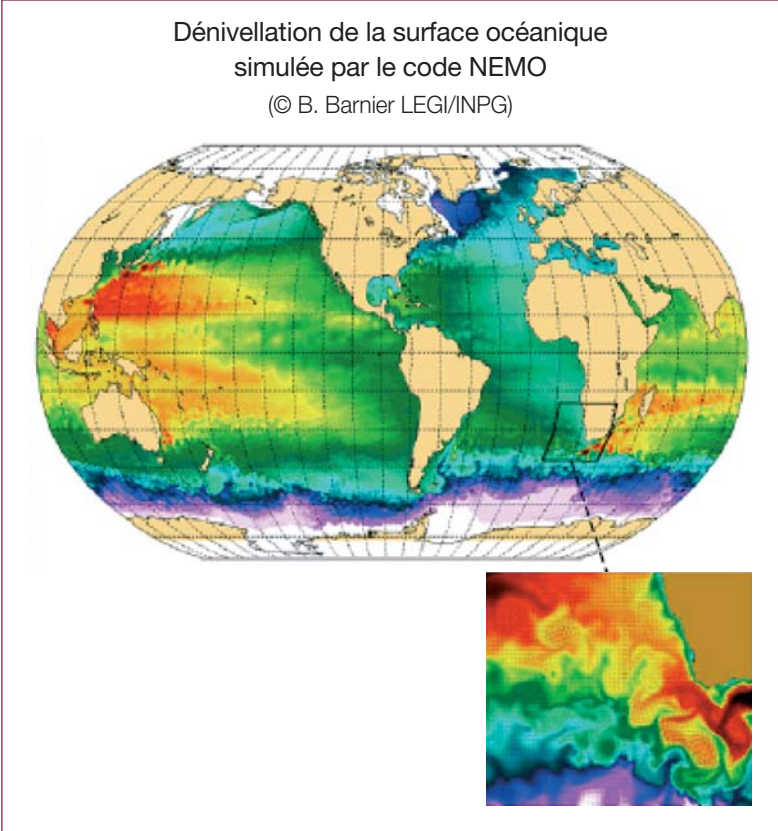
Par ailleurs, la concentration de moyens de calcul pour la prestation d'applications de *cloud computing* de diverse nature est un débouché pour le calcul intensif.

Les challenges du futur : les coûts, la consommation d'énergie et la programmation

Les principaux challenges du futur dans le domaine du calcul intensif portent sur la question des coûts (un super ordinateur a un coût qui s'évalue en dizaine de millions d'euros). Par ailleurs, leur consommation est très élevée, et plus la puissance augmente, plus la question de la consommation électrique devient importante, même si des progrès sont réalisés. La tolérance aux pannes d'architectures incluant des millions de microprocesseurs et des centaines de millions de cœurs soulève également de nouvelles questions de recherche.

Du point de vue du logiciel, la capacité à programmer les futures architectures massivement parallèles est un enjeu décisif. Ainsi, de très nombreux sujets doivent être revisités au regard de la croissance exponentielle du nombre de cœurs de calcul : systèmes d'exploitations, environnements d'exécution, modèles de programmation, compilateurs, bi-

bliothèques numériques, etc. Une liste de verrous de recherche sur le chemin vers l'exascale a fait l'objet d'une roadmap, élaborée par le « *International Exascale Software Project* »⁴³. ⁴³ <http://www.exascale.org>



3 LES ACTIONS DE L'ANR

Les 123 projets détaillés dans la partie suivante ont été financés dans le cadre de différents appels à projets de l'ANR, et sont issus des éditions 2005 à 2008.

Les projets retenus sont transverses aux domaines scientifiques et proviennent d'une grande diversité d'appels à projets 2005 à 2008

L'Agence Nationale de la Recherche organise chaque année des appels à projets thématiques, visant à favoriser la production de nouvelles connaissances ainsi que le déve-

loppement de partenariats entre laboratoires publics et laboratoires d'entreprise. Elle joue un rôle d'accélération et d'amplification en fonction de priorités ayant fait l'objet d'une large concertation. Par ailleurs, les projets de recherche ne correspondant pas à l'un de ces thèmes peuvent être financés dans le cadre du Programme Blanc.

Ce cahier présente une image de l'action de l'ANR à travers le prisme d'une technologie clé, le calcul intensif. Il expose à la fois la contribution des sciences au perfectionnement de cet outil, la contribution de cet outil

Départements et programmes ANR finançant les projets figurant dans ce cahier	
APPELS À PROJETS	PROJETS FINANCÉS
Sciences et Technologies de l'Information et de la Communication	
Calcul Intensif et Grilles de Calcul (2005)	10
Calcul intensif et simulation (2006 - 2007)	23
Conception et Simulation (2008)	10
RNTL - Technologies logicielles	10
Nanosciences et nanotechnologies	7
Systèmes complexes et modélisation mathématique	3
Systèmes Embarqués et Grandes Infrastructures	3
Architectures du Futur	2
Domaines Emergents	1
Non-thématique	
Blanc	18
Jeunes Chercheurs Jeunes Chercheuses	8
Chaires d'excellence	2
Ingénierie, procédés et sécurité	
Matériaux et procédés	13
Concepts systèmes et outils pour la sécurité globale	1
Energie durable et environnement	
Vulnérabilité : climat et milieux	3
Catastrophes Telluriques et Tsunamis	2
Habitat Intelligent et Solaire	1
Villes Durables	1
Biologie - Santé	
Biologie Systémique	4
Ecosystèmes et Développement Durable	
Agriculture et Développement Durable	1

au progrès scientifique, et ses usages au service de l'industrie, du citoyen, de la planète.

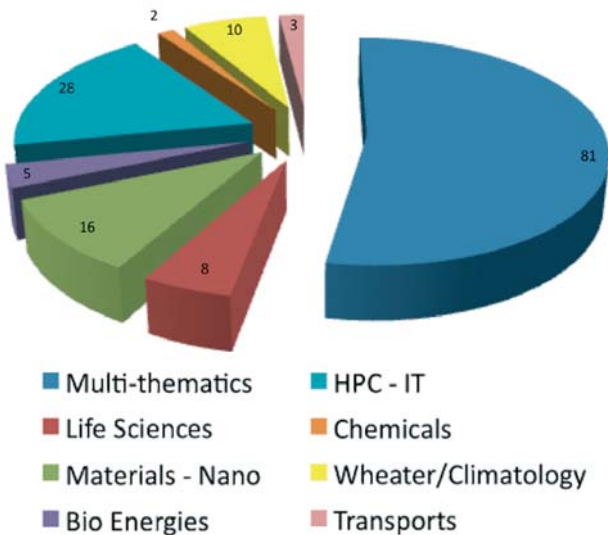
Différents projets s'inscrivent dans la logique des pôles de compétitivité

Les projets labellisés par les pôles de compétitivité et figurant dans le présent cahier sont présentés dans le tableau ci-contre. L'ANR finance ainsi une partie des projets des pôles.

Utilisation des moyens de calcul de GENCI par les projets ANR

Au-delà des projets mentionnés dans ce Cahier, un total de 150 projets financés par l'ANR ont obtenu en 2009 des heures de calcul auprès de GENCI. Ils représentent 28 % des utilisateurs d'heures de calcul, et 11 % des heures de calcul disponibles sur les infrastructures de GENCI. La répartition de ces projets entre domaines était, d'après GENCI, la suivante :

Projets labellisés par les pôles de compétitivité et retenus dans le présent cahier	
Pôle	Nombre de projets labellisés
SYSTEM@TIC Paris région	9
Materialia	5
Aerospace Vallée	4
AXELERA	2
Fibres Grand Est	2
Gestion des risques et vulnérabilité des territoires	2
Mer PACA	2
MINALOGIC	2
Images & Réseaux	1
IMAGINOVE	1
Mer Bretagne	1
MOV'EO	1
TECHTERA	1
TRIMATEC	1
VIAMECA	1



Partie 2

123 projets financés par l'ANR

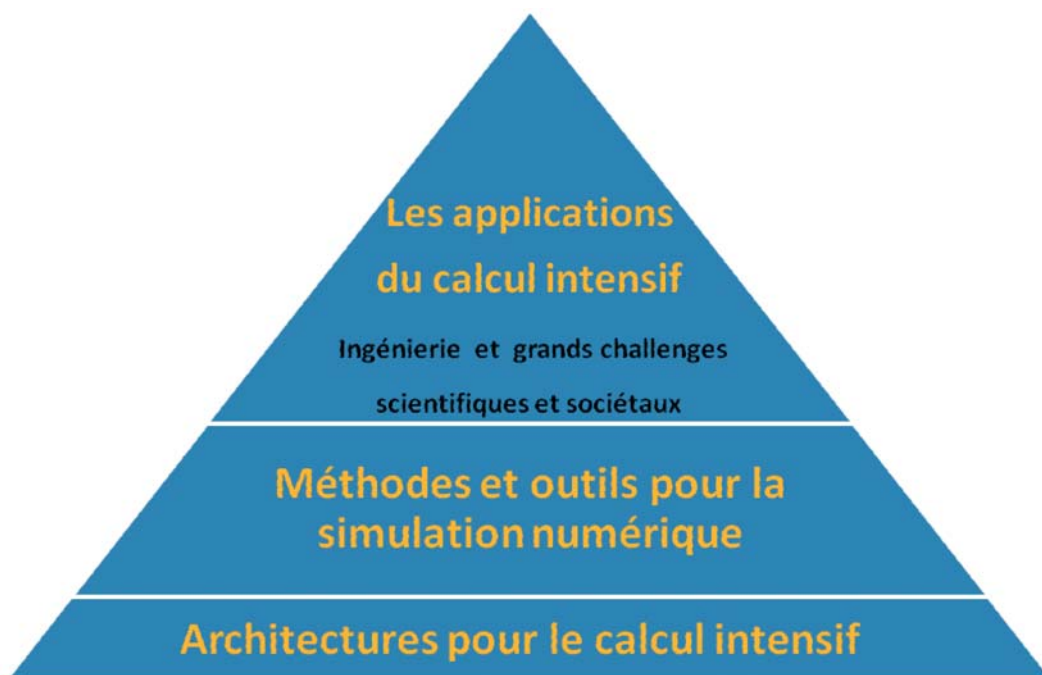
Le calcul intensif repose sur les avancées scientifiques les plus pointues dans différents domaines. L'un des premiers objectifs est de construire les supercalculateurs eux-mêmes. En ce sens est engagée une compétition à l'échelle mondiale pour définir les architectures les plus performantes possibles. Dans le même temps les enjeux se situent au niveau logiciel. C'est sur la base de ces développements du calcul intensif que pourront être mis en œuvre les méthodes et les outils pour la simulation numérique. Alors, grâce à ces bases solides, une large gamme d'applications du calcul intensif pourra être développée. Ces applications se situent au niveau de l'ingénierie de systèmes complexes et permettent de relever des grands challenges tant scientifiques que sociétaux.

ORGANISATION DE LA PARTIE 2

Le Cahier est organisé selon la logique de couches, progressant depuis la base. A la base de la pyramide se retrouve la question des technologies (avec les questions de matériel et de logiciel) : ce sera l'objet de la section 1 de cette deuxième partie (II.1). A un deuxième niveau interviennent les méthodes et les outils pour la simulation numérique

(II.2). Enfin (II.3) la large gamme d'applications du calcul intensif est présentée avec une large gamme d'applications en aéronautique, bâtiment, métallurgie...

De nombreuses applications répondent à des challenges scientifiques (en chimie, nano matériaux etc.), à des challenges sociétaux ayant trait à la biologie et à la santé, au climat, à l'océanographie, aux transports, à la sismologie...



1

ARCHITECTURES POUR LE CALCUL INTENSIF

La conception de calculateurs de plus en plus performants repose sur différents facteurs, dont :

- ◆ la performance intrinsèque des composants matériels utilisés,
- ◆ la mise en œuvre d'architectures matérielles innovantes,
- ◆ l'optimisation des logiciels de base exploitant ces architectures.

Le choix des composants matériels réalisant les opérations de calcul élémentaires est un premier paramètre de la performance des architectures. Des composants couramment utilisés sont, par exemple, des processeurs produits par Intel (Xeon, Itanium, etc.) ou IBM (PowerXCell, PowerPC, etc.).

Architectures matérielles

Dans certains domaines d'applications, des composants spécialisés ont été développés et optimisés pour des traitements spécifiques, par exemple pour des dispositifs de rendu visuel, du traitement du signal ou la cryptographie. La réutilisation de ces composants peut permettre, à l'aide d'architectures matérielles et logicielles innovantes, de concevoir des outils de calcul innovants.

Ainsi, les processeurs graphiques GPU (Graphic Processing Unit) sont de plus en plus utilisés à des fins de calcul scientifique. Le projet BLOWIC s'intéresse à l'utilisation des processeurs graphiques pour des applications de bio-informatique, l'exploitation des données génomiques pouvant nécessiter de grandes puissances de calcul. De même, le projet PROHMPT étudie la manière dont des processeurs graphiques peuvent être utilisés dans des architectures de calcul afin de réaliser des simulations dans le domaine des nanosciences. Si les applications intégrées dans les systèmes embarqués ne nécessitent pas autant

de capacité de traitement que le calcul scientifique, des questions d'optimisation des architectures de calcul se posent toutefois, compte-tenu des contraintes en ressources. Par exemple, le projet ROMA vise à définir une architecture matérielle embarquée à base de processeur reconfigurable pour des traitements d'image sur système embarqué. La mise en œuvre d'architectures matérielles innovantes s'accompagne d'expérimentations et de simulations. La prévision de performances des architectures envisagées est donc également un sujet d'étude en soi. Ces nouvelles architectures peuvent également impliquer le développement de nouveaux modes de programmation ou de nouvelles approches algorithmiques. L'appropriation des architectures nouvelles, notamment grâce à la mise de disposition de méthodes et de logiciels, est un volet important de valorisation de ces travaux.

Des architectures spécifiques sont également développées, conjointement aux grands calculateurs, afin de permettre l'exploitation des données issues des grandes simulations. Elles permettent d'accéder rapidement à ces données afin d'opérer des post-traitements et de réaliser une visualisation des résultats pour le chercheur. Ces architectures s'appuient en général sur la mise en œuvre d'un parallélisme important.

Logiciels de base pour les architectures

Enfin, l'optimisation des logiciels de base exploitant les architectures de calcul, notamment les logiciels systèmes et les environnements de programmation, contribue à améliorer continuellement les performances des architectures de calcul. Les domaines de recherche sous-jacents sont par exemple les techniques de compilation et d'optimisation de programmes, les supports d'exécution multitâches, l'intégration des communications dans les programmes et leur optimisa-

tion, ou les systèmes de fichiers distribués. Ainsi, le projet PARA vise à obtenir des gains en performance grâce au couplage entre le code des applications et les architectures matérielles sur lesquelles elles sont exécutées, par exemple grâce à des outils d'analyse de code en vue de détecter le parallélisme caché dans des applications. Le projet PETAL traite des méthodes de préconditionnement, permettant d'optimiser le temps d'exécution de codes de simulation, pour des machines petaflopiques. Le projet USS-SimGrid vise à améliorer le passage à l'échelle (scalability) d'un environnement de simulation existant, afin par exemple de le rendre utilisable dans des configurations pair à pair. Le calcul intensif distribué sur réseau pair à pair est le thème central du projet CIP, qui propose des outils à cet effet. Enfin, le projet DISC s'intéresse quant à lui aux grilles de calcul en proposant un modèle hiérarchique de programmation.

L'administration des grands calculateurs et centres de calcul requiert également la conception d'outils logiciels spécifiques, afin notamment de mesurer les performances, d'améliorer la tolérance aux pannes, de détecter et d'identifier d'éventuels défauts matériels ou logiciels.

Plusieurs projets figurant ci-après contribuent à fiabiliser, avec divers angles d'attaques, le comportement des architectures de calcul. Ainsi, le projet EVA-Flo vise à maîtriser les erreurs d'arrondis inévitablement commises lors de l'évaluation numérique d'une formule mathématique. Le projet FOST développe quant à lui des méthodes formelles pour vérifier que les codes utilisés en analyse numérique s'exécutent de manière normale. La sécurisation des infrastructures de calcul partagées est traitée par le projet HIPCAL, en offrant à chaque utilisateur une infrastructure privée virtuelle, dont les caractéristiques et

performances peuvent être administrées de manière dynamique. Le projet PARTOUT utilise des techniques formelles pour fiabiliser la programmation des architectures parallèles, notamment dans le cas d'applications déployées sur l'internet telles que le « cloud computing ». Enfin, le projet SPADES propose des outils d'administration pour les architectures Petascale, incluant des mécanismes de réservation de ressources fortement dynamiques.

Les grilles représentent un apport important, notamment pour le stockage, la distribution et la mise à disposition des données issues des grandes simulations. Une grille de calcul est un ensemble de machines parfois très éloignées les unes des autres, qui coopèrent, via un réseau de communication pour obtenir un résultat numérique. Le développement de l'Internet ne fait que renforcer l'intérêt de cette architecture qui permet de répartir les coûts et de multiplier la puissance, lorsque c'est nécessaire et adapté à la nature du problème.

Les grilles sont en particulier bien adaptées aux opérations de post traitement sur les données issues de simulations. En France, la recherche sur les grilles bénéficie de l'architecture Grid'5000, cet instrument scientifique regroupant 5 000 cœurs répartis sur 9 sites géographiques.

Les principaux sujets de recherche sous-jacents concernent par exemple l'amélioration des performances, soit en améliorant la performance de composants critiques dans les architectures de grilles existantes, soit en développant de nouveaux concepts architecturaux. Ils concernent également la maîtrise des communications au sein des grilles de calcul, l'optimisation de l'utilisation des ressources, la fiabilisation des applicatifs et des systèmes, ainsi que la programmation de grandes applications distribuées.

Architectures pour le calcul intensif

Acronyme et nom du projet

Le projet résumé en un titre

Architectures matérielles

BIOWIC	Workflow pour les traitements intensifs en bioinformatique	La puissance des cartes graphiques au service de la bioinformatique
GCPMF	Le parallélisme, un outil pour évaluer le risque financier	Grilles de Calcul appliquées à des Problèmes de Mathématiques Financières
PROHMPT	Programmation des technologies multicœurs hétérogènes	Maîtriser de nouvelles sources de puissance de calcul pour simuler le monde à l'échelle de l'atome
ROMA	Reconfigurable operators for Multimedia Applications	Vers des applications multimédia plus performantes grâce aux processeurs reconfigurables

Logiciels de base pour les architectures

PARA	Parallélisme et Amélioration du Rendement des Applications	Une problématique centrale, des logiciels grand public aux simulations scientifiques.
PETAL	Préconditionnement pour des applications scientifiques sur les machines petascale	La puissance de calcul des machines pétaflopiques au service des simulations numériques
USS-SimGrid	Simulation extrêmement extensible avec SimGrid	«Simulation extrêmement extensible avec SimGrid »: la simulation d'application à l'échelle des plates-formes modernes
CIP	Calcul Intensif Pair à Pair	L'Internet du futur au service du calcul intensif
DISC	DIStributed objects and Components for high performance scientific computing on the GRID'5000 test-bed	Maîtriser la puissance des grilles de calcul pour la simulation numérique intensive
LEGO	Solutions algorithmique et logiciel pour les architectures à large échelle	League for Efficient Grid Operations

Fiabilité des architectures de calcul

EVA-Flo	Evaluation et Validation Automatique pour le calcul Flottant New Automatic Tools for Validated Floating-point Computations	Maîtrisez les erreurs d'arrondi commises par votre ordinateur
FOST	Formal proOfs of Scientific compuTation programs	Sûreté des logiciels numériques : mon ordinateur me donne-t-il la bonne réponse ?
HIPCAL	Performances prévisibles et sécurité des communications dans un contexte de clusters virtuels dynamiques. Application aux domaines biomédical et bio-informatique.	Partagez vos infrastructures informatiques et vos réseaux en toute sécurité!
PARTOUT	PARallélisme parTOUT	Une programmation parallèle efficace et sûre, sans "bug" ni problème de sécurité
SPADES	Plateforme de Services Pour Architecture Petascale et Distribuées	Une plateforme de services pour les architecture Petascale et distribuées.

Programme « Systèmes embarqués et grandes infrastructures », édition 2008

Projet BLOWIC

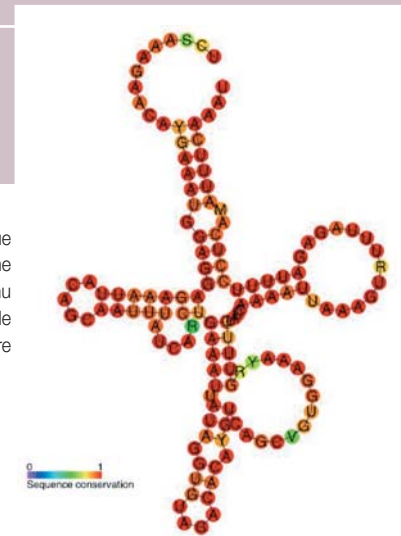
La puissance des cartes graphiques au service de la bioinformatique

Des données génomiques qui croissent plus vite que la puissance des machines

La bioinformatique se caractérise par le traitement de très grandes masses de données issues de l'information génétique contenue dans les cellules de chaque être vivant. Au cours des deux dernières décennies, la production de données a plus ou moins suivi l'évolution des performances des processeurs. Aujourd'hui, la situation est bouleversée. D'une part, les avancées spectaculaires des biotechnologies, et les nouvelles techniques de séquençage associées, décuplent la production de données génomiques. D'autre part, les performances des processeurs n'évoluent plus aussi rapidement : les contraintes thermiques empêchent la fréquence d'horloge de croître au même rythme que par le passé. Les bioinformaticiens sont donc confrontés au problème de traiter une masse croissante de données génomiques en un temps toujours plus bref avec des ressources en calcul qui n'évoluent pas en conséquence. Le projet BioWIC a pour objectif de répondre aux besoins actuels et futurs pour accélérer les traitements des données génomiques des grands projets de bioinformatiques. Le principal levier est l'usage d'accélérateurs matériels avec, notamment l'exploitation de cartes graphiques de dernière génération.

Les cartes graphiques : des machines parallèles puissantes mais pas si faciles à programmer

Les cartes graphiques sont des machines parallèles très puissantes. Elles contiennent une ou plusieurs puces intégrant un très grand nombre d'unités spécialisées dans le traitement des images. Cependant, depuis quelques années, leur domaine applicatif évolue progressivement vers d'autres horizons grâce à une flexibilité de programmation accrue. En effet, des langages de haut niveau, non nécessairement ciblés vers l'image, permettent maintenant de programmer cette ressource pour d'autres applications gourmandes en calcul. Ceci dit, toutes les applications ne sont pas systématiquement aptes à une mise en œuvre sur ce matériel. Les algorithmes doivent posséder de bonnes propriétés de parallélisme pour que leurs exécutions puissent être dispatchées efficacement sur les nombreuses unités de calcul. La difficulté, mais aussi le challenge, réside donc dans la manière d'exprimer les calculs sous une forme compatible avec l'architecture des puces graphiques. A l'heure actuelle, cela suppose à la fois une connaissance fine de leur structure interne et une programmation exigeante pour tirer parti de toute leur puissance.



Représentation graphique du repliement 2D d'une séquence d'ARN obtenu à l'aide d'algorithmes de prédiction de structure

Le projet « BLOWIC Workflow pour les traitements intensifs en bioinformatique » est un projet de recherche industrielle coordonné par l'EPI INRIA Symbiose (IRISA Rennes). Il associe aussi l'EPI INRIA Cairn (IRISA Rennes), la Plateforme de Bioinformatique GenOuest à Rennes, le MIG INRA à Jouy en Josas et ELIAUS (Université de Perpignan). Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 633k€ pour un coût global de l'ordre de 2,2 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Un programme de bioinformatique particulièrement coûteux en calculs, UnaFold (prédiction de repliement d'ADN), a été parallélisé sur carte graphique, puis validé par une application bioinformatique conséquente. Sommairement, il s'agissait d'estimer la pertinence du repliement 2D d'une famille de séquences d'ADN par rapport à un échantillon de plusieurs milliers de séquences aléatoires de même composition. L'intégration de deux cartes graphiques dans une même machine a fournit une accélération d'un facteur 50. Ainsi, le temps de calcul pour traiter une séquence d'ADN de 5000 nucléotides passe de 15 jours sur un serveur standard (dual-core Intel Xeon 2.66 GHz) à quelques heures sur le même serveur équipé de deux cartes graphiques.

Production scientifique et brevets

Un papier décrivant la parallélisation de l'algorithme UnaFold sur cartes graphiques a été publié dans les actes de l'International Conference on Computational Science en mai 2009. Il relate, entre autre, une expérimentation menée avec une équipe de biologistes de l'INRA pour détecter les microARNs sur la base de leur structure 2D dans le génome du puceron. Il montre également qu'un cluster de 32 nœuds est un peu plus rapide qu'un serveur de base équipé d'une carte graphique de dernière génération.

Programme « Calcul Intensif et Grilles de Calcul », édition 2005

Projet GCPMF

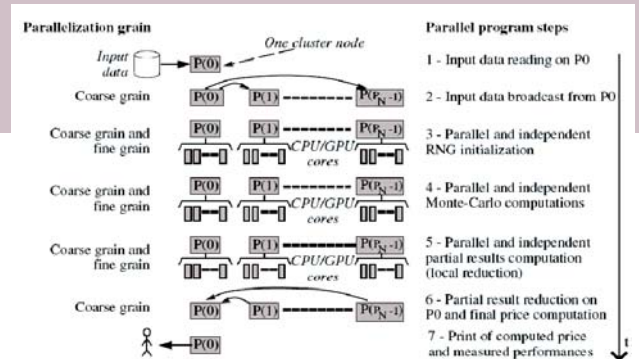
Le parallélisme, un outil pour évaluer le risque financier

Peut-on contrôler les risques financiers ?

La crise actuelle met en évidence le développement des produits dérivés dans la finance moderne. Ces produits, complexes, sont aujourd'hui sujet à débat, mais quoi qu'il arrive, la finance continuera à jouer un rôle décisif dans nos sociétés et restera, par essence, une industrie "du contrôle du risque". Les procédures de contrôle de risque utilisent des modélisations qui conduisent à des calculs à la limite des possibilités des ordinateurs actuels. Le recours au parallélisme massif est indispensable et déjà souvent réalisé dans les banques. Ce projet de recherche visait à mettre à disposition des institutions financières et des entreprises de logiciels spécialisés des outils nouveaux : nouvelles architectures hardwares (GPU, Graphic Processing Units ; nouvelles machines massivement parallèles ; Grille de Calcul), nouveaux systèmes d'exploitation des grilles, nouveaux algorithmes de calcul.

Des architectures de machines et des logiciels adaptés

On utilise, essentiellement, deux classes de machines parallèles. D'une part de nombreuses machines de type plus ou moins classiques (des PCs) interconnectées par un réseau dont le débit est adapté aux besoins (on appelle ce type d'architecture des "clusters"). D'autre part, des architectures plus spécialisées, qui exécutent le même programme sur une multitude de processeurs peu puissants. Un bon exemple de ce dernier type d'architecture est donné par la carte graphique qu'utilise un PC classique. Paradoxalement, aujourd'hui, ces cartes graphiques ont une puissance de calcul brute bien supérieure à celle de l'ordinateur lui-même et l'on cherche à détourner cette puissance pour faire des calculs numériques classiques essentiellement pour des questions économiques (coût du hardware). Les contraintes imposées par ces machines font qu'il n'est pas toujours simple de les exploiter au mieux pour un problème donné. Pour convaincre les utilisateurs potentiels, dans les institutions financières, de l'intérêt de ces nouvelles architectures il est indispensable de leur proposer des outils logiciels, adaptés à leurs besoins, leur permettant de les exploiter sans trop d'effort.



Distribution d'un calcul "Monte-Carlo" sur un cluster de machines utilisant des GPUs.

Le projet « GCPMF Grilles de Calcul appliquées à des Problèmes de Mathématiques Financières » est un projet de recherche industrielle coordonné par l'Ecole des Ponts ParisTech. Il associe aussi l'INRIA, Supélec, l'Université Pierre et Marie Curie, l'Ecole Centrale Paris, EDF, Pricing Partners, Calyon et Natixis. Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 42 mois. Il bénéficie d'une aide ANR de 590 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,17 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

La présence dans le projet d'équipes spécialistes de grille, d'algorithme probabiliste ou parallèle a débouché sur la réalisation d'outils logiciels et d'algorithmes adaptés à la finance.

- ◆ Des innovations et implémentations parallèles ont été proposées pour des techniques de calcul d'options américaines et d'algorithmes de programmation dynamique, difficile à résoudre numériquement, utiles en particulier à EDF.
- ◆ Une startup, utilisant la technologie ProActive, "Activeeon" est née pendant la durée de ce projet.
- ◆ Des tests intensifs ont été menés sur des architectures innovantes (GPU et Clusters de GPU) démontrant leur intérêt.
- ◆ La collaboration d'équipes d'informaticiens et de spécialiste du numérique probabiliste a conduit à des benchmarks disponibles sur le Web.
- ◆ Des logiciels existants ont été valorisés (ProActive, NSP, Premia), de nouveaux logiciels écrits (PicsouGrid, NSP/Premia "parallèle", Mariva "parallèle").

Production scientifique et brevets

- ◆ Publications (acceptées et soumises) : 8
- ◆ Colloques et workshops internationaux : 18

Programme « Conception et Simulation », édition 2008

Projet PROHMPT

Maîtriser de nouvelles sources de puissance de calcul pour simuler le monde à l'échelle de l'atome

Simuler le comportement des matériaux à l'échelle atomique

Le facteur fondamental conditionnant le développement et la valorisation des nanotechnologies réside dans la connaissance. La compréhension de l'infiniment petit, de ses propriétés, des interactions entre ses constituants, de l'impact de caractéristiques nanoscopiques sur les propriétés macroscopiques, les conséquences sanitaires et environnementales, est encore très parcellaire. Du progrès de cette connaissance dépend donc le progrès du domaine des nanotechnologies et de ses débouchés dans leur ensemble.

La nature même de l'infiniment petit rend l'expérimentation directe difficile et coûteuse. La simulation informatique est, de fait, la source principale de connaissance du nanomonde dans les étapes prospectives et revêt une grande importance dans les étapes de validation. La nanosimulation est donc au cœur des enjeux des nanotechnologies. Elle est aussi un vrai challenge.

Afin de donner des résultats exploitables, la nanosimulation doit être précise, à l'échelle de l'atome. Une telle précision est forte consommatrice de puissance de calcul, même pour quelques unités à quelques dizaines d'atomes (environ 10 000 heures de CPU pour une picoseconde de dynamique moléculaire à 100 atomes). La nanosimulation est donc extrêmement dépendante des progrès du calcul intensif.

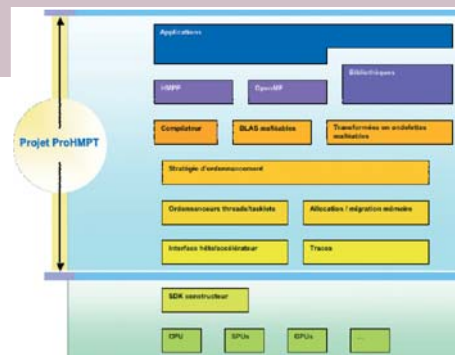
Exploiter la puissance brute des processeurs graphiques pour les nanosimulations

Le domaine du calcul intensif est actuellement le théâtre d'une mutation profonde. Le problème de la dissipation thermique bloque l'augmentation de la fréquence des processeurs et l'on préfère désormais associer plusieurs cœurs avec une fréquence modérée.

La notion de processeur multicœur intègre également les processeurs des cartes graphiques (GPU). Affichant une puissance de plusieurs centaines de Gflops, ces GPU deviennent très intéressants pour des calculs généralistes, d'autant qu'ils sont particulièrement adaptés à l'exécution d'applications régulières.

De nouvelles approches hybrides devront donc être proposées au niveau algorithmique et exécutif pour intégrer ces GPU dans des architectures de type grappes de machines multiprocesseur. Dans ce contexte, le projet ProHMPT propose de s'appuyer sur la dynamique qui anime la communauté des nanotechnologies et la volonté forte de celle-ci de collaborer avec le domaine du calcul intensif, afin de concevoir, mettre en œuvre, évaluer et diffuser les outils adéquats pour exploiter les architectures émergentes de façon efficace, pérenne, et économiquement supportable.

Architecture
logicielle
du projet
ProHMPT.



Le projet « PROHMPT Programmation des technologies multicœurs hétérogènes » est un projet de recherche industrielle coordonné par l'INRIA Bordeaux – Sud-Ouest. Il associe aussi le CEA INAC, l'UVSQ/PRISM, l'INRIA Grenoble Rhône-Alpes, Bull et le CEA CESTA. Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 777 k€ pour un coût global de l'ordre de 2,9 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Le projet ProHMPT escompte des résultats à deux niveaux. En premier lieu, l'effort coordonné des partenaires sur la compilation, les support exécutifs, les langages, les bibliothèques et algorithmes appliqués à l'exploitation des multicœurs hétérogènes et accélérateurs permettra de délivrer une plus grande puissance de calcul à machine équivalente, pour un coût de développement maîtrisé. En second lieu la capacité accrue en nanosimulation ainsi obtenue aura par nature un impact général sur le développement et la valorisation des nanotechnologies, nanosciences, sciences des matériaux et biologie, du fait d'un calcul plus rapide des configurations atomiques.

Production scientifique et brevets

Plusieurs articles esquissent d'ores et déjà les contributions majeures du projet ProHMPT, notamment :

- Adaptation d'un code de nanosimulation aux GPU : L. Genovese, M. Ospici, T. Deutsch, J.-F. Méhaut, A. Neelov, S. Goedecker, L. Sim; ESRF; Laboratoire d'Informatique de Grenoble; Universität Basel. Density functional theory calculation on many-cores hybrid central processing unit-graphic processing unit architectures Journal of Chemical Physics, Vol. 131, p. 034103 (2009).
- Support exécutif de programmation des CPU+GPU : Cédric Augonnet, Samuel Thibault, Raymond Namyst, and Pierre-André Wacrenier. StarPU : A Unified Platform for Task Scheduling on Heterogeneous Multicore Architectures. In Proceedings of the 15th International Euro-Par Conference, Lecture Notes in Computer Science, volume 5704 of Lecture Notes in Computer Science, Delft, The Netherlands, August 2009. Springer.

Programme « Architectures du Futur », édition 2006

Projet ROMA

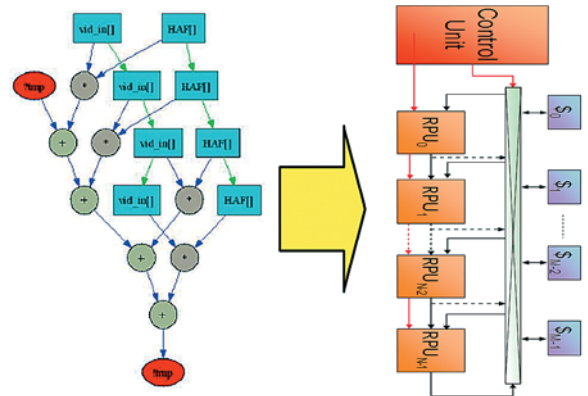
Vers des applications multimédia plus performantes grâce aux processeurs reconfigurables

Permettre une puissance de calcul élevée tout en satisfaisant une exigence de faible consommation d'énergie propre aux systèmes embarqués

Dans le domaine des applications multimédia, le traitement d'images est le challenge principal auquel les systèmes embarqués sont confrontés. Il s'agit d'une part d'appréhender des traitements intensifs et, d'autre part, d'avoir des dispositifs consommant le moins possible afin de prolonger la durée de fonctionnement d'appareils mobiles autonomes en énergie. Les algorithmes de traitement d'images mis en œuvre dans les applications actuelles requièrent un nombre considérable de calculs et doivent être accélérés. Pour cela, le projet ROMA ambitionne de développer un processeur reconfigurable, mettant en avant des propriétés telles la densité d'intégration et la faible consommation, capable d'adapter sa structure de traitement aux motifs de calcul qui permettent d'envisager une accélération des traitements ou un gain en terme de consommation d'énergie.

Dimensionner au plus juste l'architecture en fonction des traitements à réaliser

Pour mener à bien le projet ROMA, deux axes sont considérés : le premier axe, au niveau algorithmique, concerne l'extraction, de manière automatique afin de permettre une réduction du temps de conception, de motifs de calculs dans l'application à intégrer, le second axe, au niveau matériel, s'intéresse à la définition d'une architecture matérielle du processeur sur lequel sera exécutée l'application. Il s'agit de considérer ces deux axes de manière conjointe, à savoir, d'une part, identifier des motifs récurrents de l'application, optimisables tant en surface qu'en consommation, d'autre part, définir une architecture matérielle implémentant de manière optimale ces motifs. Un environnement logiciel permettra d'automatiser la projection de l'application sur le processeur. L'objectif consiste à associer efficacement les motifs de calculs (niveau algorithmique) et les opérateurs (niveau matériel) afin d'optimiser la consommation et les performances des systèmes embarqués. Pour cela, des opérateurs de calculs spécifiques au domaine d'application vidéo sont développés. Le codage utilisé pour la représentation des données manipulées ainsi que leur dimensionnement sont optimisés.



Projection d'une application sur le processeur reconfigurable.

Le projet « ROMA Reconfigurable operators for Multimedia Applications » est un projet de recherche industrielle coordonné par l'IRISA-Université de Rennes 1. Il associe aussi le CNRS-LIRMM, le CEA, et Thomson R&D France. Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 649 k€ pour un coût global de l'ordre de 1 479 k€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Un premier résultat de ce projet est la conception d'un opérateur matériel capable de traiter la plupart des calculs mis en œuvre dans les applications multimédia. Cet opérateur réalise en même temps plusieurs opérations de même type avec des tailles de données variables dédiées aux traitements vidéo. La conception du processeur reconfigurable constitue un résultat essentiel du projet, qui explore un moyen innovant de créer dynamiquement des chemins de données flexibles au sein d'un processeur. Enfin, pour exploiter efficacement ce processeur, un résultat important est le développement d'un environnement logiciel permettant de projeter l'application considérée sur le processeur en tirant partie des spécificités de ce processeur.

Production scientifique et brevets

Dans le cadre de ce projet, 6 présentations à des conférences internationales ont été réalisées. Deux de ces présentations concernent la conception d'opérateurs de calculs multimédia hautes performances. Une des présentations traite du principe de l'architecture du processeur. Les trois autres présentations mettent en avant l'intérêt d'utiliser une représentation particulière des données et une méthode de calcul selon les opérations à effectuer.

Programme « Calcul Intensif et Grilles de Calcul », édition 2005

Projet PARA

Une problématique centrale, des logiciels grand public aux simulations scientifiques

Des besoins fortement croissants en puissance de calcul

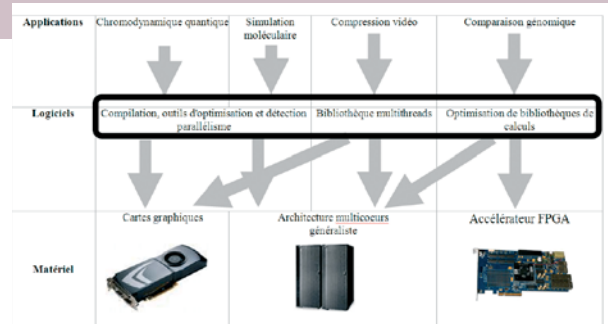
Dans de nombreux domaines aussi bien scientifiques, industriels que grand public, les progrès à venir sont liés aux avancées des capacités de calcul de l'outil informatique. La communication vidéo temps-réel et haute définition, utilisant le standard MPEG4-AVC, la simulation moléculaire utilisée par l'industrie pétrolière, la chromodynamique quantique pour l'exploration de la matière ou le séquençage de génome pour la bio-informatique sont autant d'exemples de ces applications de calcul intensif.

Les gains en performance de telles applications sont dépendants d'une part de l'architecture matérielle parallèle et d'autre part du couplage entre le code applicatif et cette architecture. Les logiciels et outils de développement pour réaliser ce couplage, trop généralistes, ne savent prendre en compte qu'une partie des spécificités des applications et/ou de l'architecture. Cela conduit à des performances instables et sous-optimales. L'évolution actuelle des architectures (augmentation du nombre de cœurs, complexification des accès mémoire, accélérateurs matériels) va aggraver cette situation, creusant l'écart entre les performances spécifiées par les constructeurs et celles réellement observées.

Optimisations de code pour architectures parallèles et accélérateurs matériels

En associant des communautés de développeurs des applications précitées, des spécialistes de la compilation et des systèmes d'exploitation, des évaluateurs des performances et concepteurs de systèmes, l'objectif du projet PARA est d'étudier et développer des méthodes d'optimisation pour exploiter au mieux toutes les formes de parallélisme inhérentes aux architectures modernes actuelles et à venir.

Du point de vue matériel, les architectures cibles étudiées sont les systèmes bâtis autour des nouvelles générations de processeurs généralistes ou plus spécialisés, comme des accélérateurs matériels. D'un point de vue logiciel, le projet s'attache à étudier les méthodes et outils d'analyse de code en vue de détecter le parallélisme caché dans des applications en apparence séquentielles. Ces méthodes d'optimisation et de compilation du code seront associées à des techniques de génération adaptative de programmes et de microbenchmarking pour les mesures de performances. Conjointement, des travaux sur la conception de systèmes de gestion de processus légers extrêmement efficaces permettant de gérer un niveau de parallélisme le plus fin possible seront étudiés.



Le projet se focalise, pour quatre applications de calcul intensif, sur les logiciels permettant d'optimiser les performances et de mettre en œuvre le parallélisme de ces applications sur les architectures matérielles à venir.

Le projet « PARA Parallélisme et Amélioration du Rendement des Applications » est un projet de recherche industrielle coordonné par l'Université de Versailles St Quentin. Il associe aussi l'IRISA / CAPS, l'INRIA Sud Ouest – LaBRI, CAPS Entreprise, Bull, l'IFP, l'INT, l'IRISA / Symbiose, le LPT Paris XI et l'INRIA Saclay. Le projet a commencé en janvier 2005 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 967 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Des améliorations très significatives de performances ont été obtenues sur les applications étudiées, grâce à des avancées algorithmiques, à l'utilisation de nouvelles méthodes d'optimisation de code et à la mise en œuvre d'architectures parallèles modernes, notamment des accélérateurs matériels comme les cartes graphiques, non initialement prévus au projet. Les méthodes proposées d'analyse, d'optimisation et d'exécution du code parallèle ont démontré qu'il était possible de générer des codes performants et de grande efficacité automatiquement.

Production scientifique et brevets

Les résultats du projet ont donné lieu à de nombreuses publications réalisées par plusieurs partenaires du projet (deux articles publiés dans des journaux internationaux et 4 conférences internationales dont Supercomputing) ou un seul partenaire (15 conférences internationales, dont PLDI, CGO, 2 articles de journaux internationaux). Plusieurs logiciels d'analyse et d'optimisation de code ont par ailleurs été développés dans le cadre du projet : Astex (CAPS Entreprise), HMPP (CAPS Entreprise), MAQAO (UVSQ), Xlanguage (UVSQ) et Letsee (INRIA). Une carte accélératrice FPGA a été réalisée et testée pour la comparaison de séquences génomiques (Bull/IRISA Symbiose).

Programme « Conception et Simulation », édition 2008

Projet PETAL

La puissance de calcul des machines pétaflopiques
au service des simulations numériquesOrdinateurs du futur au service des problèmes
sociétaux

Les simulations numériques sont importantes pour de nombreux domaines, car il y a beaucoup de problèmes trop compliqués pour être résolus par la théorie, et trop lents ou coûteux pour être mesurés en laboratoire. Prédire l'impact des gaz à effet de serre sur le climat dans 50 ans en est un exemple.

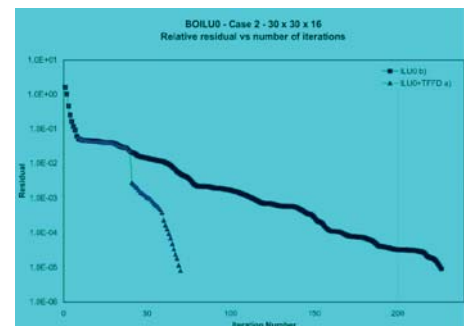
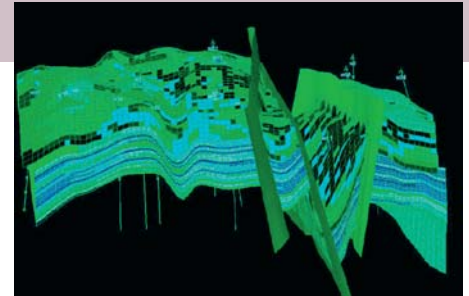
Ces simulations nécessitent fréquemment la résolution de très grand systèmes d'équations linéaires, souvent avec des millions d'inconnues. Leur résolution est très coûteuse en temps, et nécessite l'utilisation de plateformes de calcul parallèle. Le parallélisme massif est un des défis technologiques d'aujourd'hui. Chaque ordinateur, de nos ordinateurs portables jusqu'aux supercalculateurs, dépendra du calcul parallèle.

L'objectif de ce projet est la conception de meilleurs algorithmes. Il est motivé par les points suivants. Tout d'abord, la taille des problèmes à résoudre augmente car les simulations utilisent une résolution de plus en plus fine. Ensuite, même si les ordinateurs sont de plus en plus rapides, leur architecture est de plus en plus complexe et les méthodes actuelles ne sont plus adaptées pour résoudre ces grands problèmes efficacement.

Algorithmes performants pour une étape coûteuse
des simulations numériques

L'approche utilisée dans ce projet pour diminuer le temps d'exécution de simulations numériques repose sur le développement des méthodes dites de préconditionnement. Ces méthodes accélèrent la résolution de systèmes linéaires qui se trouvent au cœur des simulations numériques. Nous étudions des préconditionneurs qui sont adaptés au calcul parallèle et qui sont efficaces pour un grand nombre de simulations décrites sous forme d'équations aux dérivées partielles. Les algorithmes parallèles sont développés pour les modèles émergents des supercalculateurs composés de milliers de processeurs multi-cœurs.

Les techniques développées sont génériques pour pouvoir être utilisées dans de nombreuses applications scientifiques. Dans le cadre de ce projet, elles sont validées sur plusieurs simulations numériques complexes. Une de ces simulations considère l'écoulement dans des milieux poreux hétérogènes, utile pour évaluer les risques du stockage profond de déchets nucléaires, le stockage géologique du CO₂, ou encore simuler des modèles de réservoirs.



La première image présente une simulation de réservoir. On peut observer des puits et des plans de faille. La seconde image présente des améliorations obtenues par des nouveaux algorithmes « ILU+TFFD » considérés dans le projet par rapport à un algorithme existant « ILU ».

Le projet « PETAL Préconditionnement pour des applications scientifiques sur les machines petascale » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'INRIA Saclay - Ile de France. Il associe aussi le Laboratoire J. L. Lions de l'Université Pierre et Marie Curie, l'IFP, l'INRIA Bordeaux Sud-Ouest et le CEA. Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 24 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 304 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,35 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Le premier résultat de ce projet est le développement des algorithmes efficaces pour une classe de simulations, qui réduisent considérablement leurs temps d'exécution sur un ordinateur. La majeure partie des algorithmes étudiés dans ce projet seront disponibles dans un logiciel qui sera utilisable sur des supercalculateurs pétaflopiques.

Ce projet a deux collaborateurs aux États-Unis, U.C. Berkeley et Argonne National Laboratories.

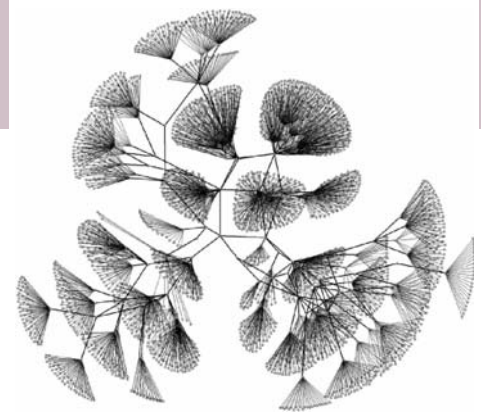
Production scientifique et brevets

Trois articles ont été soumis dans des journaux internationaux. Ces documents décrivent nos premiers résultats proposant des algorithmes efficaces pour des systèmes linéaires provenant d'une classe de simulations.

Programme « Systèmes embarqués et grandes infrastructures », édition 2008

Projet USS-SimGrid

La simulation d'application à l'échelle des plates-formes modernes



Exemple de plateforme distribuée moderne : la grille de calcul LCG fédère plus de 170 centres de calcul répartis dans 34 pays. Elle permettra le stockage et l'analyse de toutes les données produites dans le cadre du Large Hadron Collider (LHC) au CERN.

Permettre l'étude des applications distribuées modernes en simulant leur exécution

La compréhension du comportement sous charge des systèmes distribués à grande échelle est un enjeu majeur d'un point de vue scientifique (optimisation des performances), opérationnel (dimensionnement des services), et applicatif (accélération du développement, prévision des performances et identification des problèmes). Bien que des plates-formes de production et des infrastructures dédiées à la recherche soient opérationnelles aujourd'hui, l'expérimentation en vraie grandeur reste difficile voire parfois impossible pour certains cas. Le principal frein à de telles expérimentations est la non reproductibilité des mesures.

Il est donc nécessaire de disposer d'un environnement contrôlé mais reproduisant fidèlement le comportement de tels systèmes à large échelle. La simulation offre le cadre idéal pour la réalisation d'un tel environnement à condition de satisfaire quelques exigences : les modèles utilisés doivent être validés ; l'outil doit s'adapter aux différentes infrastructures (cluster, grilles, calcul pair-à-pair, clouds) ; et un degré minimal d'abstraction concernant les applications est nécessaire.

Vers un instrument scientifique reconnu pour l'étude par simulation d'applications distribuées

L'informatique diffère des autres sciences, comme la biologie ou la physique, entre autres par la façon dont les résultats expérimentaux sont présentés dans les articles. Dans les autres disciplines, les protocoles expérimentaux sont minutieusement décrits en s'appuyant sur des outils reconnus. En informatique, et particulièrement lors de l'étude d'applications distribuées à l'aide de simulations, les informations sur le protocole expérimental se résument souvent à une description succincte reposant sur des outils ad-hoc, disponibles pour leurs seuls auteurs. Cela empêche de reproduire les expériences présentées ainsi que toute comparaison objective entre de nouveaux résultats et ceux présents dans la littérature. Pour réduire cet écart, des outils et méthodes reconnus et validés sont nécessaires.

Le projet USS-SimGrid vise à fournir un tel environnement pour la simulation d'applications parallèles ou distribuées. Nous nous appuyons sur SimGrid, reconnu comme l'un des simulateurs majeurs pour le HPC, pour l'étendre à la communauté du calcul distribué à grande échelle. L'originalité de notre approche repose sur une réflexion méthodologique permettant aux utilisateurs de mener facilement de "bonnes expériences" grâce à des simulations réalistes et des outils d'accompagnement simplifiant la réalisation de campagnes d'expériences.

Le projet « USS-SimGrid Simulation extrêmement extensible avec SimGrid » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'Université de Nancy. Il associe aussi l'INRIA (Grenoble, Saclay, Bordeaux), le CNRS (CC IN2P3) et l'université de Reims Champagne-Ardennes. Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 839k€ pour un coût global de l'ordre de 3 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Nous visons à produire un instrument scientifique utilisable par une large communauté d'utilisateurs académiques. Pour cela, il convient d'assurer l'extensibilité des simulations sans compromettre leur réalisme en proposant des modèles adaptés aux différents cas d'étude. De plus, quand le nombre d'expériences croît, il devient indispensable de disposer d'outils associés pour la planification des tests, la génération des conditions expérimentales, l'exécution des tests, la visualisation et l'analyse des résultats. Enfin, nous nous assurons que ces évolutions répondent pleinement à des besoins avérés en associant des utilisateurs au projet.

Production scientifique et brevets

Un article publié dans la conférence SIMUTools'09 porte sur la validation et l'amélioration des modèles réseau de SimGrid. Un article portant sur la tomographie réseau a été publié dans la conférence IDC'S'09. Cette technique permet d'obtenir des informations topologiques sur une plateforme à simuler. Nous avons été invité à présenter le projet SimGrid à la conférence P2P'09. Enfin, un article démontrant la capacité de SimGrid à simuler très efficacement des systèmes de calcul bénévole à très large échelle vient d'être soumis à SIMUTools'10.

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2007

Projet CIP

L'Internet du futur au service du calcul intensif

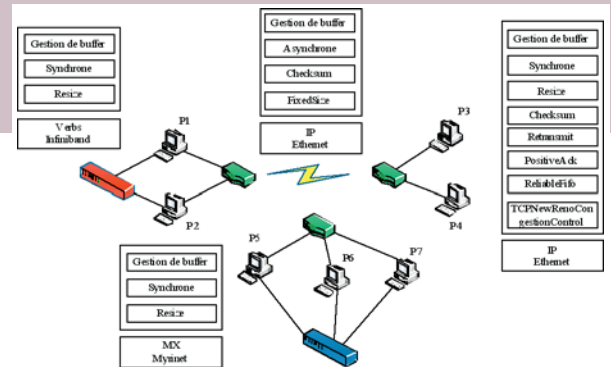
Conception d'un environnement décentralisé pour le calcul intensif pair à pair avec application à la simulation numérique et la recherche opérationnelle

Le concept de pair à pair a connu de grands développements dans le domaine du partage de fichiers. L'application de ce concept au calcul intensif permet d'envisager de rassembler des milliers sinon des millions de nœuds pour des applications concurrentes de calcul. En ce sens, le calcul distribué pair à pair représente une approche économique et attractive pour le calcul intensif massivement parallèle. Le projet CIP a pour objectif de proposer des outils et environnements pour la mise en œuvre de calculs intensifs sur réseau pair à pair à large échelle. Cette proposition s'articule autour de trois sous-projets complémentaires. Elle repose premièrement sur la simulation de calculs intensifs pair à pair à grande échelle à l'aide de l'outil P2Pperf développé par l'Université de Franche-Comté, ensuite sur l'environnement décentralisé P2Pdc pour la mise en œuvre de calculs intensifs sur réseau pair à pair, qui est développé par l'équipe CDA du LAAS-CNRS et enfin sur l'ensemble de démonstrateurs P2Pdem pour des applications en mathématiques financière, génie des procédés et en logistique, qui sert à illustrer la diversité des grands défis applicatifs que peut permettre de relever le calcul pair à pair et qui est développé à l'IRIT-ENSEEIH, l'Université de Picardie et au LAAS-CNRS.

Optimisation croisée de protocoles de communication auto adaptatifs et d'outils de simulation de calcul pair à pair à grande échelle

L'environnement décentralisé P2Pdc est conçu autour d'un protocole de communication auto-adaptatif dédié au calcul. Le protocole auto-adaptatif combine divers micro protocoles afin d'optimiser les performances de l'application de calcul distribué intensif pair à pair. La sélection des micro-protocoles relève de choix algorithmiques effectués au niveau de la couche application comme par exemple le choix de schémas de calcul synchrones, asynchrones ou hybrides ainsi que de paramètres relatifs à la couche réseau comme par exemple la topologie générale du réseau ou l'appartenance à un cluster particulier. La simulation de calculs à grande échelle permet d'évaluer les performances des algorithmes et d'améliorer l'efficacité de l'application.

Les grands défis applicatifs que peut permettre de relever le calcul intensif pair à pair sont illustrés au travers de deux types d'applications: la simulation numérique et la recherche opérationnelle. Dans le premier domaine, on s'intéresse aux mathématiques financières avec des problèmes de Black-Scholes pour des options américaines ou européennes et au génie des procédés avec des problèmes d'électrophorèse à flot continu. En recherche opérationnelle, on traite des problèmes de logistique relevant du transport de fret.



CIP développe un protocole de communication auto-adaptatif ainsi qu'un environnement décentralisé de calcul intensif pair à pair.

Le projet « CIP Calcul Intensif Pair à Pair » est un projet de recherche fondamentale coordonné par le LAAS-CNRS. Il associe aussi l'ENSEEIH-IRIT, l'Université de Franche-Comté et l'Université de Picardie ainsi que l'Association Euromedtextile, basée en Ile de France. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois: il bénéficie d'une aide ANR de 464 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,08 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

A ce stade, nous souhaitons mettre en avant le protocole de communication auto-adaptatif à base de micro-protocoles qui est très innovant. L'environnement décentralisé pour le calcul intensif distribué pair à pair sera basé sur ce protocole. Nous signalons aussi les modèles mathématiques et méthodes pour les applications en mathématiques financières, en génie des procédés et en logistique ainsi que les travaux en cours sur le simulateur de calculs pair à pair.

Production scientifique et brevets

Nous avons présenté le projet CIP sur le stand de l'ANR lors de Ter@tec 2009 à Supélec ainsi qu'un poster sur une première version de l'environnement lors de RemPar'19 à Toulouse. Un article paraîtra sur le protocole de communication auto adaptatif dans les actes de PDP 2010, Pise. Un article a été publié dans les actes de CIE 39, Troyes, sur le modèle mathématique adaptatif pour des problèmes de transport de fret ainsi que sur leur résolution parallèle. Un article a été présenté à COSI'2009, Annaba, sur les problèmes de mathématiques financières et leur résolution.

Programme « Calcul Intensif et Grilles de Calcul », édition 2005

Projet DISC

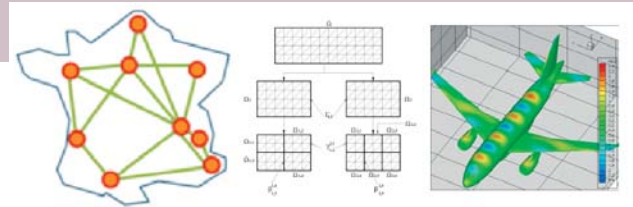
Maîtriser la puissance des grilles de calcul pour la simulation numérique intensive

Modèle de programmation hiérarchique pour la parallélisation d'applicatifs de simulation numérique

Une grille de calcul est généralement présentée comme un ensemble de ressources de calcul localisées en divers sites géographiques et interconnectées par des réseaux à différentes échelles. Un exemple est l'infrastructure nationale Grid'5000 organisée autour de clusters distribués sur 9 sites interconnectés par des liens RENATER 10 Gb/s dédiés. Un cluster est composé de nœuds de calculs bi-processeurs/multi-cœurs interconnectés par un réseau local (Gigabit Ethernet, Myrinet et Infiniband). Le développement d'applicatifs mettant en jeu la résolution numérique d'équations aux dérivées partielles (EDP) par des méthodes numériques basées sur des maillages (différences finies, éléments finis, etc.) et capables de tirer profit des capacités de calcul d'une grille nécessite de prendre en compte au mieux les caractéristiques matérielles de ce type de plate-forme. Dans ce contexte, l'objectif général du projet DiscoGrid est d'étudier et promouvoir un modèle SPMD (Single Program Multiple Data) hiérarchique pour la programmation de tels applicatifs sur une grille de calcul.

Techniques modernes de calcul distribué pour le calcul numérique intensif

On entend par SPMD hiérarchique un modèle de programmation parallèle reposant sur une distribution hiérarchique des données à traiter et une programmation dans un modèle par échange de messages. Il s'agit de prendre en compte l'architecture hiérarchique d'une grille de calcul dans la gestion des communications globales et point à point, en optimisant les communications inter sites. Ce modèle doit aussi faciliter la prise en compte de l'hétérogénéité des nœuds de calcul et des réseaux d'interconnexion. La mise en œuvre d'un tel modèle peut difficilement se faire uniquement sur la base d'un environnement comme MPI. L'originalité du projet DiscoGrid est d'aborder cette problématique par la combinaison d'environnements et méthodologies modernes de calcul distribué (objets distribués, composants parallèles) et du standard MPI en visant plusieurs objectifs : la minimisation des modifications à apporter aux logiciels de calcul existants, l'optimisation des performances parallèles, la facilité de déploiement de l'application sur un grand nombre d'unités de calcul distribuées géographiquement et la flexibilité vis à vis de l'adaptation dynamique de l'algorithmique numérique.



Sites géographiques de l'infrastructure Grid'5000. Partitionnement hiérarchique (multi-niveaux). Calcul en électromagnétisme numérique.

Le projet « DISC DIStributed objects and Components for high performance scientific computing on the GRID'5000 test-bed »

est un projet de recherche coordonné par l'INRIA Sophia Antipolis-Méditerranée. Il associe aussi des équipes académiques, informaticiens spécialistes du calcul distribué (équipes OASIS de l'INRIA Sophia Antipolis-Méditerranée, PARIS de l'IRISA à Rennes, MOAIS de l'ID-IMAG à Grenoble et SOD du LABRI à Bordeaux) et mathématiciens appliqués spécialistes du calcul scientifique intensif (équipes CAIMAN et SMASH de l'INRIA Sophia Antipolis-Méditerranée), et un partenaire industriel (EADS Innovation Works à Toulouse). Le projet a commencé en janvier 2005 pour une durée de 42 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 583 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,8 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Dans une première phase, le projet a conduit à la formalisation d'une API adaptée au modèle SPMD hiérarchique, qui s'inspire du standard MPI et propose un certain nombre de nouveautés motivées par les caractéristiques d'une grille de calcul. Dans une seconde phase, la mise en œuvre de cette API a donné lieu à l'adaptation ou au développement d'environnements de calcul distribué (Dhico, GCM/ProActive, Kappi/Athapascan et CoAsCa) pour la gridification d'applicatifs de simulation numérique. Enfin, un applicatif en électromagnétisme numérique a été gridifié et des simulations 3D ont été déployées sur des configurations de la grille Grid'5000 comprenant des centaines de cœurs de calcul.

Production scientifique et brevets

Les travaux réalisés dans le projet et les résultats obtenus ont donné lieu à plusieurs communications dans des conférences internationales du domaine (SBAC-PAD 2007, 19th International Symposium on Computer Architecture and High Performance Computing - Grids@work workshop of the CoreGRID Systems, Tools and Environments Institute - 14th European PVM/MPI User's Group - PASCO'07, 2007 ACM Conference on Parallel Symbolic Computation).

Programme « Calcul Intensif et Grilles de Calcul », édition 2005

Projet LEGO

Solutions algorithmique et logiciel pour les architectures à large échelle

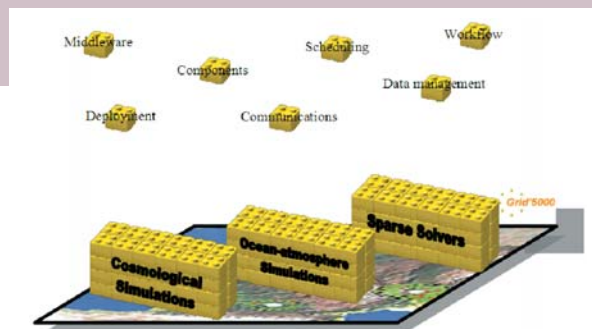
Modèle de programmation multi-paradigmes pour les grilles de calcul

Les infrastructures ainsi que les intergiciels d'accès aux grilles de calcul deviennent matures. Cependant, malgré l'existence de nombreux travaux, la programmation et l'utilisation des grilles demeurent excessivement complexes, car ces travaux ne prennent en compte qu'un paradigme de programmation (MPI, appel de service, workflow, maître-esclave, partage de données non modifiable, modèle de composant...). Ainsi, pour chaque type d'application, un nouveau modèle devrait être appris. Cette approche se heurte au fait que les applications de calcul intensif, comme les applications de couplage de codes, commencent à devenir multi-paradigmes. Ainsi, bien qu'il existe un grand nombre de technologies, à des degrés divers de maturité, leurs interactions et leur mise en œuvre collaborative est un réel défi qu'il est important de relever afin de permettre la mise en œuvre simple d'application efficace sur des infrastructures de type grilles.

Intégration de briques de bases pour l'utilisation simple et efficace des grilles

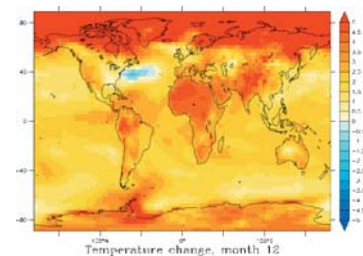
LEGO a mis en œuvre et validé un modèle de programmation multi-paradigmes pour les grilles de calcul, qui intègre les avancées majeures en recherche de ces dernières années, afin de permettre simplement la création d'applications qui exploitent efficacement les grilles. Il s'agit d'offrir les grandes capacités de calcul et de stockage des grilles aux applications en remontant le niveau d'abstraction de la programmation des grilles. Le projet LEGO a rempli cet objectif en offrant un modèle intégré supportant les caractéristiques suivantes :

- ◆ l'intégration d'un modèle de composant avec un modèle d'accès transparent aux données ;
- ◆ l'ajout de dynamique dans les modèles de composant, en particulier via le paradigme maître-travailleur/GridRPC et les workflows ;
- ◆ l'intégration de composants patrimoniaux basée sur leur description sémantique ;
- ◆ un ordonnancement et un déploiement efficace des composants et des données sur les ressources pour des applications statiques et dynamiques ;
- ◆ un support des interfaces de communication travaillant au niveau des flux de communication des applications multi-paradigmes ainsi que l'optimisation dynamique de la transmission des messages.



Les briques de LEGO

Cycle saisonnier du changement climatique (différence de température entre les climatologies de température de surface du XXe et XXIe Siècles).



Le projet « LEGO League for Efficient Grid Operations » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'École Normale Supérieure de Lyon. Il associe aussi les laboratoires LIP et CRAL de l'ENS Lyon, l'IRISA, le LaBRI, l'IRIT, et le CERFACS. Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 490 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,5 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

LEGO a permis l'émergence du modèle de composant ULCM supportant le partage de données – en particulier au niveau grille grâce à JuxMem, les applications paramétriques – en particulier via DIET – et la dynamique. LEGO a également contribué à la composition sémantique d'application – notamment dans Grid-TLSE – ainsi qu'à l'amélioration du déploiement d'applications – du point de vue de l'ordonnancement, du placement et du support d'applications multi-technologiques. Ces avancées ont été validées sur les applications de cosmologie et de météorologie via des expériences sur Grid5000 qui ont également produit des données utiles.

Production scientifique et brevets

Le projet LEGO a produit 44 publications, dont 9 publications multipartenaires dans des journaux internationaux, des conférences et ateliers internationaux. Il a contribué au développement de logiciels existant comme DIET, JuxMem et Madeleine et il a également permis le développement de nouveaux logiciels tels que ULCMi – une implémentation d'ULCM – et ADAGE, un outil de déploiement automatique qui permet de déployer des applications multi-technologiques. Ces logiciels sont diffusés en licences ouvertes sur la forge INRIA.

Programme « BLANC », édition 2006

Projet EVA-Flo

Maîtriser les erreurs d'arrondi commises par votre ordinateur

Une exigence de qualité pour les calculs numériques en arithmétique flottante

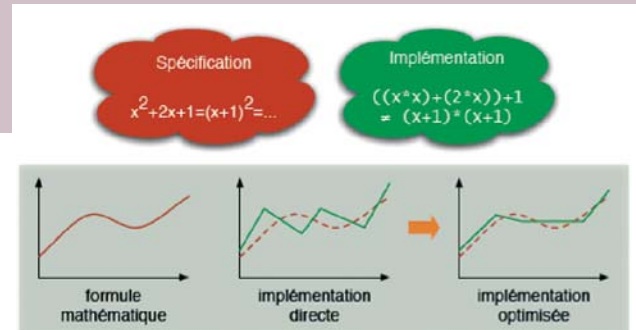
Lors du passage d'une formulation mathématique à un calcul numérique sur ordinateur, on aimerait que les résultats calculés soient proches des valeurs exactes. Or les ordinateurs calculent le plus souvent en arithmétique flottante : ils utilisent une représentation de taille finie et fixée pour les nombres et commettent donc, entre autres, des erreurs d'arrondi. Le premier objectif du projet EVA-Flo est d'évaluer numériquement une formule mathématique, de façon rapide et précise. On veut pouvoir spécifier la qualité du résultat calculé, par exemple une erreur absolue ou relative entre le résultat calculé et le résultat exact, ou la garantie qu'aucun débordement ne se produit (nombres trop grands, arrondis en €, ou trop petits...).

Le deuxième objectif est que cette qualité soit quantifiée (exemple : « erreur relative $\leq 10^{-14}$ ») et garantie, le dernier objectif étant que ce processus d'évaluation et de validation soit automatisé.

Les formules mathématiques visées s'expriment à l'aide d'opérations arithmétiques ou algébriques et de fonctions mathématiques (exp, sin, atanh...), ainsi que de branchements conditionnels et de boucles. Il s'agit typiquement de petites portions critiques de plus gros codes numériques.

Automatiser, automatiser, automatiser l'expertise acquise

De nombreux exemples ont été traités à la main par le passé, le stade actuel est d'automatiser l'expertise ainsi acquise pour chacune des étapes. Tout d'abord, il s'agit de définir précisément le résultat mathématique cherché et de construire de bons approximations (faible erreur relative) qui conduisent à une implantation adaptée à un calcul sur ordinateur, typiquement des polynômes à coefficients flottants. Ensuite, on détermine des schémas d'évaluation rapides et précis pour ces approximations, par exploration exhaustive ; il faut ici tenir compte des contraintes architecturales. Pour atteindre une précision satisfaisante, différentes techniques sont envisageables : utilisation de double-double, de schémas compensés... La mise au point de la preuve de la qualité du résultat ainsi calculé fait appel à des propriétés fines de l'arithmétique flottante, à des calculs en arithmétique par intervalles et en arithmétique à précision étendue... Ces preuves sont établies de façon à pouvoir être vérifiées par un assistant de preuve (Coq dans notre cas) : en effet ces preuves, impliquant beaucoup de cas particuliers, sont sujettes aux oublis et erreurs, d'où l'importance de les vérifier automatiquement.



La formulation mathématique, par exemple une fonction (à gauche), peut donner lieu à une implantation qui en est une mauvaise approximation (au centre). On aimerait obtenir une meilleure implantation (à droite) et de façon la plus automatisée possible.

Le projet « EVA-Flo Evaluation et Validation Automatique pour le calcul Flottant - New Automatic Tools for Validated Floating-point Computations » est un projet de recherche fondamentale coordonné par Arénaire (LIP, ENS Lyon). Il associe aussi Dali (Eliass, U. Perpignan), MeASI (LIST, CEA Saclay), et Tropics (INRIA Sophia Antipolis – Méditerranée). Le projet a commencé en novembre 2006 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 130 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,5 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Notre objectif d'automatisation s'est concrétisé par la création de logiciels :

- ◆ Sollya : recherche d'un bon approximant ;
- ◆ Gappa : preuve de qualité numérique, vérifiable par Coq ;
- ◆ CRlibm : fonctions mathématiques avec arrondi correct, à l'origine de la recommandation de la norme IEEE 754-2008 d'inclure les fonctions mathématiques avec arrondi correct ;
- ◆ Flip : arithmétique flottante sur certains DSP ;
- ◆ Calcul numérique sur GPU ;
- ◆ Fluctuat : analyse de la qualité numérique de codes scientifiques (pré-existant au projet) ;
- ◆ Projet Sardanes : analyse et amélioration de la qualité d'expressions mathématiques.

Production scientifique et brevets

Outre les logiciels déjà cités, six thèses ont été soutenues. Une quinzaine d'articles de revues et une vingtaine de présentations lors de conférences internationales ont été produits. Enfin, l'expertise du groupe sur l'arithmétique flottante a donné lieu à un livre collectif, *The Handbook of Floating-Point Arithmetic*, à paraître à l'automne 2009. À noter aussi, la participation active et la présidence du groupe IEEE de normalisation de l'arithmétique par intervalles.

Programme « BLANC », édition 2008

Projet FOST

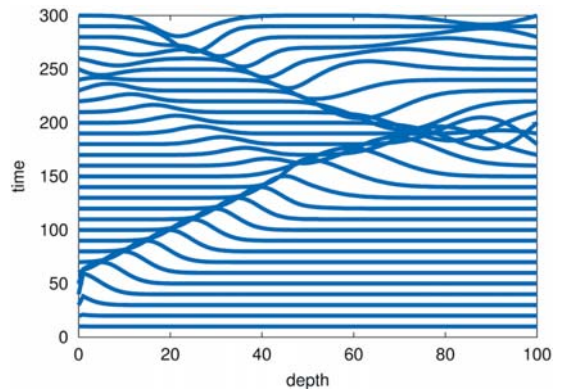
Sûreté des logiciels numériques : mon ordinateur me donne-t-il la bonne réponse ?

Les programmes numériques sont partout

Les programmes dits numériques, c'est-à-dire utilisant des calculs sont partout : finance bien sûr, mais également météo et simulations. En effet, avant de construire une centrale nucléaire, un avion ou un pont, on construit et on calcule un modèle numérique complet de l'objet. Ainsi, on peut savoir à l'avance le temps qu'il fera, l'épaisseur minimale d'une aile d'avion ou quel matériau choisir pour que la voiture soit à la fois légère et résistante. Malgré cette omniprésence, la sûreté de ces logiciels est rarement mise en cause (on ajoute des marges). Dans ce projet, nous allons prouver que des programmes numériques donnent une réponse acceptable, et chiffrer précisément leur erreur. Les exemples choisis sont liés au calcul scientifique et à la résolution d'équations aux dérivées partielles, utilisés notamment dans la prévision météo et la simulation nucléaire. Les exemples étudiés sont pour l'instant bien plus simples, mais nous visons à prouver complètement un tel programme.

La sécurité par les preuves formelles

Être sûr que ce que l'on écrit, que ce que l'on démontre est vrai, quel rêve pour des millions d'élèves ! Ils pourraient savoir au fur et à mesure de leur calcul, de leur démonstration, si ce qu'ils écrivent est juste ou pas. Bien sûr, il y a le professeur, qui va vérifier a posteriori leur copie et la noter. Cette méthode de relecture et de vérification de la preuve est habituelle en science, mais est-elle suffisante ? Confieriez-vous votre numéro de carte bleue, de sécurité sociale, votre mot de passe de messagerie ou votre vie à une machine qui se base sur un résultat mathématique relu par 1 personne ? 3 personnes ? 100 personnes ? En fait, si la démonstration est suffisamment détaillée, elle ne nécessite pas un humain pour la regarder, elle peut être vérifiée par un ordinateur. Chaque pas de calcul, chaque application de théorème va être comparée au comportement attendu. Cette tâche serait pénible pour un humain, mais est tout-à-fait adaptée à une machine. On peut ainsi garantir qu'il n'y a pas d'erreur de raisonnement ou de calcul dans une preuve vérifiée formellement.



Le premier exemple étudié est la résolution de l'équation des ondes : étant donnée une corde élastique attachée aux deux bouts avec une position et une vitesse initiales, on regarde comment elle oscille.

Le projet « FOST Formal proOfs of Scientific compuTation programs »

est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'INRIA Saclay - Île-de-France. Il associe aussi l'INRIA Paris - Rocquencourt et le LIPN (CNRS, Université Paris 13). Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 116 k€ pour un coût global de l'ordre de 503 k€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Durant ces six premiers mois du projet, nous avons développé la preuve formelle complète de l'erreur flottante du programme de résolution de l'équation des ondes (7 000 lignes de spécification et 4 000 lignes de preuves). Nous avons également avancé la preuve formelle de l'erreur de méthode de ce programme (actuellement 700 lignes de spécification et 1 300 lignes de preuves, mais voué à augmenter). Enfin, nous avons développé une tactique Coq permettant d'automatiser des preuves numériques en utilisant l'outil Gappa développé par G. Melquiond. La preuve automatique étant vérifiée par Coq, la sûreté est maintenue mais la praticité est notablement augmentée.

Production scientifique et brevets

Une publication a été acceptée à la conférence très sélective ICALP (36th International Colloquium on Automata, Languages and Programming) sur l'erreur de calcul du programme de résolution de l'équation des ondes. Une publication a été acceptée à la conférence Calculemus (16th Symposium on the Integration of Symbolic Computation and Mechanised Reasoning) sur l'automatisation des preuves formelles liées à l'erreur de calcul.

Programme « CIS », édition 2006

Projet HIPCAL

Partagez vos infrastructures informatiques et vos réseaux en toute sécurité !

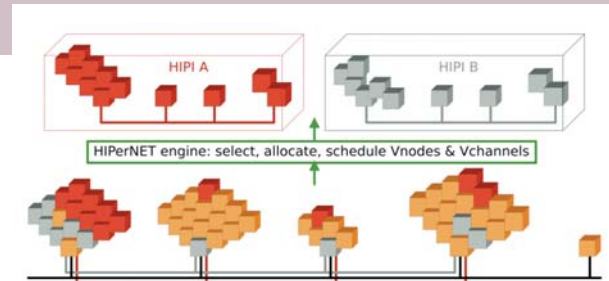
Accroître sa puissance de traitement en invoquant et interconnectant dynamiquement de nouvelles ressources informatiques

Pour faire face à l'augmentation exponentielle des besoins en puissance de calcul et de communication, les communautés scientifiques et industrielles souhaitent de plus en plus recourir à la mutualisation, au partage ou à l'externalisation de leurs infrastructures informatiques. Néanmoins, le déploiement facile des applications, l'obtention de performances prévisibles et la sécurité de la chaîne de traitement restent des points délicats freinant l'adoption de telles approches pourtant prometteuses.

Le projet HIPCAL a pour but d'étudier et de développer un nouveau paradigme d'agrégation de ressources hétérogènes basé sur la virtualisation d'infrastructures pouvant se déployer incrémentalement dans le contexte du futur internet. Cette approche vise à apporter aux applications intensives des solutions en termes de portabilité, de prédiction de performance et de sécurité. Dans ce cadre, HIPCAL propose et implante un nouveau mode de partage de bande passante pour améliorer la qualité de service et le valide sur des applications exigeantes issues des domaines de la biomédecine et de la génomique.

La virtualisation combinée des réseaux et des machines au service de la transparence, de la sécurité et de la performance

HIPCAL définit le concept d'infrastructure privée virtuelle et le langage de description associé : VXD. Une infrastructure privée virtuelle (VPXI) est une agrégation organisée de machines virtuelles reliées par des canaux virtuels. Les VPXIs allouées pour un temps limité à un utilisateur ou à un groupe sont isolées, protégées et multiplexées dans le temps et dans l'espace. Ce modèle intègre de nouvelles approches pour le partage de bande passante et de ressources. En particulier, il est basé sur la virtualisation combinée du réseau et des systèmes d'exploitation, la réservation de ressources et le concept d'identification cryptographique. HIPerNet est le logiciel développé par le projet HIPCAL implantant ce nouveau paradigme de partage. HIPerNet expose et partitionne dynamiquement un substrat global composé d'ordinateurs distribués, de ressources réseaux et d'espaces de stockage pour répondre aux requêtes d'allocation d'infrastructures virtuelles, composées à la demande. Ce logiciel est validé sur la plateforme nationale Grid5000 avec des applications d'imagerie médicale et de génomique.



Principe de création et d'allocation d'infrastructures virtuelles à l'aide du logiciel de virtualisation HIPerNet.

Le projet « HIPCAL Performances prévisibles et sécurité des communications dans un contexte de clusters virtuels dynamiques. Application aux domaines biomédical et bio-informatique » est un projet exploratoire coordonné par l'INRIA. Il associe aussi l'INRIA (RESO, PLANETE, GRAND LARGE) et le CNRS (I3S, OBCP). Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 861 k€ pour un coût global de l'ordre de 1 456 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Une première version d'HIPerNET a été validée, déposée à l'APP et diffusée sur la plateforme nationale Grid5000. Des logiciels applications supports aux expérimentations sont validés et disponibles sur le site du projet. Le logiciel HIPerNet est en cours de transfert vers la startup LYaTiss lauréate du concours OSEO émergence 2009.

Les travaux d'HIPCAL font l'objet d'un très grand intérêt de la part de la communauté académique et industrielle internationale et serviront de base à de futures recherches industrielles dans des projets du 7^e programme cadre européen.

Production scientifique et brevets

Un article a été accepté pour le numéro special de la revue International Journal of Network Management, Wiley et sera diffusé via le portail ACM en 2010. Une publication a été présentée lors de la conférence internationale IEEE/ACM on Cluster Computing and the Grid (CCGrid2009), à Shanghai en mai 2009. Un papier, présenté à la conférence Internationale ICNS 09, International Conference on Networking and Services, en avril 2009 y a obtenu un best paper award. Un autre a été publié au 20th ITC Specialist Seminar on Network Virtualization en mai 2009.

Programme « Domaines Emergents », édition 2008

Projet PARTOUT

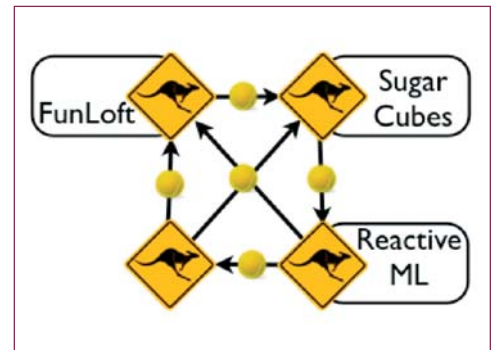
Une programmation parallèle efficace et sûre, sans "bug" ni problème de sécurité

Le parallélisme est partout et nécessite de nouvelles techniques de programmation

Le parallélisme couvre désormais tout le spectre de l'informatique, des architectures multicœurs, en passant par les systèmes multiprocesseurs et distribués, jusqu'aux applications déployées sur le Web. Les nouveaux paradigmes en train d'émerger, tels le « diffuse computing » ou le « cloud computing », expriment fondamentalement cette généralisation du parallélisme. La complexité de la programmation parallèle, déjà difficile à maîtriser dans un contexte de calcul traditionnel, s'en trouve encore accrue et les sources d'erreurs de programmation deviennent de plus en plus nombreuses. De plus, de nouveaux problèmes de sécurité surgissent, en particulier dans le cadre du Web. Enfin, les architectures multicœurs s'avèrent extrêmement difficiles à programmer avec les techniques actuelles, sauf dans certains cas très spécifiques. L'objectif du projet PARTOUT est d'étudier l'impact de la globalisation du parallélisme et de proposer de nouvelles techniques adaptées à ce cadre. Pour ce faire, nous adoptons une approche « langage » et proposons un ensemble de primitives de programmation conçues pour maîtriser le flux de contrôle dans les nouveaux contextes de calcul parallèle.

Pour une programmation parallèle sûre

Depuis plusieurs années, les membres du projet ont proposé une approche du parallélisme appelée programmation réactive. La programmation réactive possède une sémantique plus simple et plus claire que les approches usuelles (par exemple, que celle de Java) fondées exclusivement sur des mécanismes préemptifs. Nos travaux antérieurs répondaient à la question : comment programmer de manière modulaire, parallèle et efficace sur des architectures mono-processeur ? Aujourd'hui, la question se pose dans un cadre « multithreadé », multicœur, multiprocesseur et distribué, avec un souci majeur concernant la sécurité. Nous pensons que les solutions logicielles que nous proposons s'avèreront utiles pour une programmation sûre des systèmes parallèles et distribués, en particulier dans le cadre du Web. Nous utilisons pour nos développements logiciels des techniques formelles (règles de sémantique, systèmes de types, sécurité « basée sur le langage ») qui en assurent la correction. Par ailleurs, nous avons l'objectif d'obtenir une grande efficacité d'exécution de nos logiciels.



Le « kangourou » HOP vu comme « proxy » pour interfacier des systèmes distribués programmés dans divers langages considérés dans le projet.

Le projet « PARTOUT PARAllélisme parTOUT » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'INRIA (projet INDES). Il associe aussi le CNAM (laboratoire Cédric) et le CNRS (LRI, Université d'Orsay). Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 403 k€ pour un coût global de l'ordre de 1 587 k€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

L'objectif principal du projet est de concevoir des outils logiciels permettant une programmation parallèle sûre et efficace, adaptée aux architectures multicœurs, aux multiprocesseurs, aux architectures distribuées et au Web. Deux thèmes d'application principaux sont considérés : les jeux en réseau et les serveurs Web distribués.

Production scientifique et brevets

Plusieurs logiciels sont développés dans le cadre de PARTOUT :

- ◆ Le langage de programmation réactive ReactiveML, au dessus de ML (LRI)
- ◆ Les SugarCubes, au dessus de Java (CNAM)
- ◆ Le langage FunLoft, adapté au multicœur (INRIA)
- ◆ Le langage et le système HOP, au dessus de Scheme (INRIA)

Les liens sur ces logiciels sont disponibles sur le site Web du projet.

Programme « Systèmes embarqués et grandes infrastructures », édition 2008

Projet SPADES

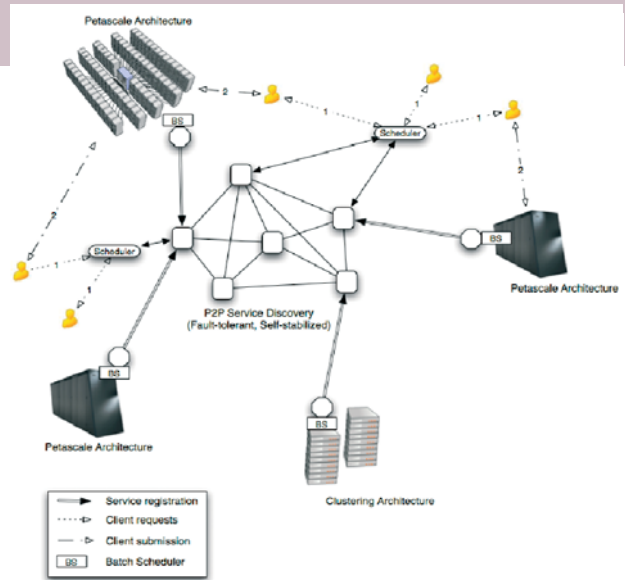
SPADES : une plateforme de services pour les architectures Petascale et distribuées

Expertiser et exploiter les nouvelles architectures Petascale

A l'heure de la nouvelle évolution des plates-formes de calcul, l'émergence des architectures de nouvelle génération Petascale (capable d'exécuter plus d'un quadrillion d'opérations flottantes à la seconde) et des évolutions à la fois des grilles de recherche et des grilles de calcul, le nombre de ressources potentiellement accessibles ne cesse de s'accroître. Les architectures Petascale sont encore mal connues et mal exploitées. Par ailleurs, les infrastructures et les règles permettant d'accéder à ces différents types de ressources sont bien différentes. Dans ce sens, une des idées du projet SPADES est de proposer un environnement peu intrusif mais fortement dynamique afin de bénéficier de ces ressources sans perturber leur utilisation native. En d'autres mots, nous souhaitons transposer le modèle du Desktop Computing utilisé pour exploiter les ressources des internautes aux extrémités de l'Internet en remplaçant les internautes par des ressources de calcul volatiles accédées via des mécanismes de réservations bornées dans le temps ou interruptibles. Au-dessus de ces plates-formes puissantes, il s'agit de découvrir et d'exécuter des applications (ou services) de calcul. Ainsi, un deuxième défi de SPADES est de fournir une solution logicielle pour la découverte de services qui puisse supporter la forte dynamique des ressources et des services eux-mêmes.

Une architecture logicielle pour découvrir et exécuter des services dans un environnement fortement dynamique

Cette solution logicielle pour la découverte de services sera également déployée sur des nœuds volatiles appartenant à des plates-formes partagées et se doit donc d'être tolérante aux pannes. La mise en place de ce développement expérimental implique d'être capable de s'interfacer avec les systèmes de réservation batch permettant l'accès à ces ressources afin de provoquer des réservations de façon transparente pour l'utilisateur. Il sera aussi nécessaire d'être capable de communiquer avec ces systèmes de réservation afin de récupérer les informations nécessaires aux ordonnanceurs chargés de répartir la charge de calcul de façon efficace sur la plate-forme. Là encore, SPADES proposera des solutions pour la gestion d'ordonnanceurs distribués pour des environnements de type Desktop Computing et répondant à un cadre de co-ordonnement entre les différents batchs scheduler.



Architecture générale du projet SPADES.

Le projet « SPADES Plateforme de services pour architecture petascale et distribuées » est un projet de recherche fondamentale et de développement expérimental coordonné par le LIP (UMR 5668 CNRS-ENS Lyon-INRIA-UCBL). Il associe aussi le CERFACS, l'IN2P3 (CNRS), l'INRIA, l'IRISA, le LIG et le MIS (UPJV). Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 1 M€ pour un coût global de l'ordre de 2.9 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

L'impact du projet sera à la fois fondamental par notamment le développement d'algorithmes pour la tolérance aux pannes à différents niveaux de l'architecture, mais aussi et surtout logiciel, par le développement d'une nouvelle infrastructure logicielle permettant la découverte et l'exécution de services dans des environnements dynamiques et hétérogènes. Enfin, des applications de calcul haute performance (modélisation du climat...) seront expérimentées via cette suite logicielle, notamment sur des architectures de type Petascale.

Production scientifique et brevets

Les résultats seront publiés dans des revues spécialisées internationales.

MÉTHODES ET OUTILS POUR LA SIMULATION NUMÉRIQUE

Les progrès dans le domaine du calcul intensif représentent un potentiel formidable pour le développement de la simulation numérique. Ils ouvrent également de nouveaux horizons pour le dialogue entre modélisation et simulation.

Avant même la mise en œuvre de simulations numériques, un préalable est la capacité de construire une modélisation mathématique du phénomène à étudier. Ensuite, en fonction des moyens de calculs disponibles, il peut être nécessaire d'adapter ces représentations mathématiques afin d'aboutir à un volume de calcul réaliste lors des simulations. Ainsi, il peut s'agir de réduire la description des systèmes complexes en cherchant à comprendre leur fonctionnement et en proposant des modèles simplifiés, sans en écarter les propriétés et caractéristiques essentielles.

Le passage d'un modèle mathématique à un code informatique exécutable suppose en général de mobiliser des compétences au confluent des domaines de recherche utilisateurs de la simulation, des mathématiques appliquées, de l'informatique, et du calcul intensif. Des méthodes et des bibliothèques logicielles sont, à cet effet, utilisables pour un large spectre de domaines de recherche.

Des pistes originales sont explorées pour introduire de nouvelles méthodes de simulation.

Méthodes pour la simulation

Parmi les méthodes de simulation numérique les plus courantes, on trouve la méthode des éléments finis, pour la résolution des équations aux dérivées partielles. Le volume de calcul nécessaire est alors directement lié à la finesse du maillage retenu. Les méthodes de Monte-Carlo utilisent des techniques pro-

babilités, et sont par exemple adaptées en physique ou en finance. Des méthodes, telles que la dynamique moléculaire en chimie et en physique, ou les méthodes ab initio utilisées en chimie, sont particulièrement consommatrices de grandes puissances de calcul.

Des méthodes spectrales sont mises en œuvre par le projet MNEC, afin de résoudre l'équation de Boltzmann, intervenant dans la maîtrise de la fusion nucléaire.

Les méthodes multi-échelles trouvent un large spectre d'applications. Le projet MACADAM les exploite pour la détection de fissures causées par des micro-défauts dans une structure solide. Le projet POEM utilise également des méthodes multi-échelles, afin de simuler la propagation de la lumière dans des méta-matériaux. Il s'agit de coupler la prise en compte des phénomènes à l'échelle microscopique de la « brique de base » du méta-matériau et de ceux à l'échelle macroscopique de la structure périodique. Enfin, l'optimisation des méthodes multi-échelles lorsqu'elles sont déployées sur une grille de calcul est traitée par le projet MEG, dans le cas de la résolution de problèmes d'électromagnétisme dans des structures complexes. De nouvelles méthodes sont introduites par le projet PASSEURO6, pour des problèmes électromagnétiques difficiles, en présence par exemple d'une géométrie avec pointe ou couche mince, tout en proposant des améliorations des algorithmes de résolution.

Enfin, une méthode basée sur le problème mathématique du « transport optimal » est proposée par le projet OTARIE pour reconstruire, par exemple, les vitesses des galaxies à partir de grandes bases de données de nature cosmologique.

Outils pour la simulation

La réalisation de grandes simulations soulève des questions de gestion des données qui en sont issues, du fait du volume et de leur com-

plexité, et en particulier de visualisation afin d'en faciliter le traitement. Le projet COLLA-VIZ vise à fournir une plateforme ouverte pour la visualisation scientifique de résultats issus de simulation et le travail collaboratif distant sur ceux-ci.

De manière transverse aux différents outils de simulation, un projet de plate-forme, SCOS, vise à améliorer l'interopérabilité entre les outils pour la simulation et à amener les communautés scientifiques à mutualiser leurs efforts.

Bibliothèques et logiciels pour la simulation

Un effort de mutualisation a été réalisé, par grands domaines de recherche, afin de partager entre chercheurs les codes informatiques permettant de mettre en œuvre des simulations incluant des modèles mathématiques fréquemment utilisés. A titre d'exemple, on peut signaler les codes informatiques permettant une approche numérique de :

- ◆ la résolution des équations de Maxwell, pour les phénomènes électromagnétiques,
- ◆ la théorie de la fonctionnelle de la densité, basée sur la mécanique quantique, pour la simulation de la matière aux niveaux atomiques et moléculaire, pour des petites échelles de temps et d'espace,
- ◆ la résolution des équations de Navier-Stokes pour la mécanique des fluides,
- ◆ la résolution d'équations de cinétique chimique,

ainsi que des codes informatiques permettant le couplage entre ces différents modèles. Cet effort est particulièrement visible dans le domaine des sciences de la terre, où le développement de codes de simulations a été fédéré autour d'un nombre réduit d'outils, notamment les modèles LMD-Z et ARPEGE de circulation générale atmosphérique, le modèle OPA de circulation générale atmo-

sphérique, le modèle Méso-NH atmosphérique de méso-échelle.

En support à la réalisation des simulations, des travaux visent à restructurer, par grand domaine de recherche, des ensembles de logiciels de simulation existants, ou à les rassembler dans des environnements cohérents, afin d'en assurer la maintenabilité, la pérennité, l'évolutivité, l'extensibilité et les performances.

Ainsi, dans le domaine de l'écologie, le projet 3WRL fait le constat que l'adaptation des modèles s'est souvent opérée de manière empirique et sans interaction avec des spécialistes du calcul scientifique. Il propose de mettre à disposition de toute la communauté un logiciel libre pour le calcul intensif et la simulation, intégrant une bibliothèque de modèles écologiques.

Dans le domaine de la mécanique des fluides, le projet INTOCS s'intéresse à des phénomènes d'instabilité pouvant intervenir dans l'évolution et l'interaction des ondes de choc et des tourbillons. Il vise à améliorer la fiabilité des codes de calcul, susceptibles d'introduire des instabilités indépendamment du phénomène réel.

S'agissant de la sûreté des grandes structures mécaniques ou électroniques, le projet CISSSI développe une bibliothèque d'outils pour simuler l'influence sur la structure de divers phénomènes (séismes, trafic, vent, etc.).

Outils de conception

La simulation numérique est devenue incontournable pour assister la conception des systèmes complexes, qu'il s'agisse par exemple d'un aéronef ou d'une nouvelle molécule. Les simulations sont également des outils d'aide à la prise de décision stratégique pour réduire les cycles de conception, optimiser les procédés industriels et permettre d'estimer les risques avant toute prise de décision.

Ainsi, le projet FVNANO développe un outil pour la conception de molécules, appliquée à la biologie ou aux matériaux, intégrant des simulations du comportement de ces molécules, ainsi qu'une interface de pointage 3D avec retour d'effort permettant de manipuler les molécules « du bout des doigts ».

S'agissant des nanosystèmes, le projet SAMSON s'intéresse à leur conception assistée par ordinateur, en développant un ensemble de méthodes simulant les divers phénomènes chimiques, physiques ou biologiques, de manière à pouvoir les intégrer dans un outil de conception.

Concernant la performance des logiciels de simulation pour la conception, le projet PARADE vise à améliorer celle-ci en tenant compte du caractère de plus en plus parallèle des architectures de calcul.

Enfin, le projet EXPLO-RA ouvre de nouvelles perspectives pour la résolution de problèmes d'optimisation et de prise de décision, en étudiant l'apport des algorithmes mathématiques dits « de bandits ».

Méthodes et outils pour la simulation numérique

Acronyme et nom du projet

Le projet résumé en un titre

Méthodes pour la simulation

SOLSTICE	SOLveurs et SimulaTions en Calcul Extrême	SOLveurs et SimulaTions en Calcul Extrême
MNEC	Méthodes Numériques pour les Equations Cinétiques	Le calcul numérique pour une meilleure compréhension des plasmas
MACADAM	Multiscale Asymptotics and Computational Approximation for surface Defects and Applications in Mechanics	Analyse multi-échelle et approximation numérique pour la mécanique
POEM	Propagation des Ondes Electromagnétiques dans les Métamatériaux	La modélisation numérique pour contrôler la lumière à l'échelle nanométrique
MEG	Multiscale modeling: from Electromagnetism to the GRID	La puissance d'une infrastructure virtuelle pour la résolution de problèmes électromagnétiques dans le monde réel
PASSEUR06	Nouveaux outils conceptuels pour le calcul scientifique - Applications à l'électromagnétisme	Nouveaux outils mathématiques en calcul scientifique
OTARIE	Optimal Transport: Theory and Applications to cosmological Reconstruction and Image processing	Une théorie vieille de deux siècles trouve des applications innovantes
OPUS	Open source Platform for Uncertainty treatment in Simulation	Une plateforme industrielle de référence pour le traitement des incertitudes
PITAC	Parallélisation Incluant le Temps pour Accélérer les Calculs	Le parallélisme pour s'affranchir de l'inexorable cours du temps

Outils pour la simulation

COLLAVIZ	Plateforme Open Source pour le pré/post-traitement multi-domaine collaboratif et à distance	Visualisation Scientifique Collaborative Distante
SCOS	Plateforme générique Open Source pour le développement de Systèmes Complexes	Open Standard for Computing Oriented System

Méthodes et outils pour la simulation numérique

Acronyme et nom du projet		Le projet résumé en un titre
Bibliothèques pour la simulation		
3WRL	3Worlds : Une plateforme de simulation multi-échelles pour l'écologie et les sciences de l'environnement	Utiliser les concepts fondamentaux de l'écologie pour proposer un simulateur générique
INTOCS	Interaction d'ondes compressibles	Prédire et calculer la propagation d'ondes en mécanique des fluides
CISSSI	Calcul Intensif Stochastique et Sûreté des Systèmes Industriels	Des outils pour l'analyse de sûreté de grands systèmes mécaniques et électroniques
BioSpace	A Uniform Approach for Stochastic Modeling with Spatial Aspects in Systems Biology	La programmation concurrente pour appréhender la complexité des systèmes biologiques
PARMAT	Parallélisation pour la simulation des Matériaux	Rendre la puissance de calcul pétaflopique accessible à la simulation des matériaux
LN3M	Logiciels nouvelle génération pour la modélisation multi-échelle des matériaux	Modéliser les matériaux, de l'échelle atomique aux dispositifs électroniques
MECAFIBRES	Caractérisation et modélisation multiéchelles du comportement mécanique de milieux fibreux	Modèles multiéchelles de milieux fibreux pour des tissés aux performances optimales
MOMME	MOdèles et Méthodes Mathématiques en Electrocardiologie	Des mathématiques et des ordinateurs pour simuler un électrocardiogramme
Outils de conception		
FVNANO	FlowVRNano : un laboratoire virtuel pour modéliser les systèmes moléculaires nanoscopiques en biologie et dans les matériaux	Toucher, déformer et assembler des molécules du bout des doigts
SAMSON	Système Adaptatif pour la Modélisation et la Simulation d'Objets Nanoscopiques	Système Adaptatif pour la Modélisation et la Simulation d'Objets Nanoscopiques
PARADE	Parallel numerical Algorithms for Real time simulation of Algebraic Differential Equations systems (Algorithmes Numériques / Symboliques Parallèles de Résolution de Systèmes d'Equations Algébro-Différentielles)	Méthodes mathématiques pour la conception système en temps réel
EXPLO-RA	EXPLOitation pour l'Allocation efficace de Ressources. Applications à l'optimisation, le contrôle, l'apprentissage et les jeux	Apprendre à décider : quand explorer de nouvelles alternatives et quand exploiter les connaissances acquises ?
LOGIC	Logiciel d'Optimisation de Gammes Intégré et Convivial	L'optimisation automatique donne une nouvelle dimension à la simulation numérique
CHOC	Challenge en Optimisation Combinatoire	Les machines actuelles pour Résoudre les problèmes d'Optimisation Combinatoire
OMD	Optimisation MultiDisciplinaire	Optimiser les systèmes complexes en présence d'incertitudes

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2006

Projet SOLSTICE

SOLveurs et SimulaTions
en Calcul Extrême**Conception et mise en œuvre haute performance
en vraie grandeur de solveurs linéaires parallèles**

La simulation numérique très haute performance nécessite le développement de nouvelles techniques algorithmiques et numériques, la réalisation de logiciels parallèles performants et leur intégration effective dans des grands codes de calcul pour réaliser des simulations frontières en vraie grandeur. La résolution de systèmes linéaires creux de (très) grande taille intervient de manière centrale dans de multiples simulations et applications. En particulier, les modélisations basées sur des équations aux dérivées partielles sont consommatrices de ce type d'opération de base en algèbre linéaire ; les systèmes linéaires non structurés peuvent atteindre des tailles de plusieurs dizaines voire plusieurs centaines de millions d'inconnues pour des problèmes 3D. Les objectifs de SOLSTICE sont la conception et la mise en œuvre haute performance de solveurs linéaires parallèles efficaces pour résoudre des problèmes scientifiques complexes multi-physiques et multi-échelles de très grande taille et leur intégration effective dans des codes applicatifs issus de partenaires comme EDF, le CEA-CESTA, EADS IW ou encore la Météo dans le but de faire des simulations aujourd'hui hors de portée.

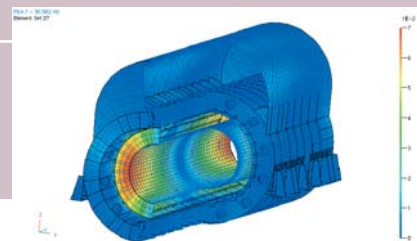
**De l'algorithmique parallèle haute performance à
des bibliothèques génériques pour des simulations
frontières**

La démarche et les retombées scientifiques et techniques de SOLSTICE sont :

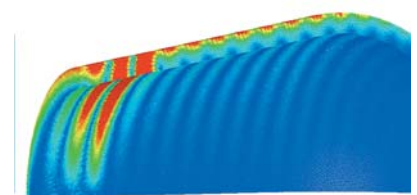
- ◆ Le développement de nouvelles techniques numériques et algorithmiques, ainsi que de nouvelles implantations logicielles de solveurs linéaires hybrides parallèles combinant des approches directes et itératives ;
- ◆ La validation applicative des avancées algorithmiques réalisée en collaboration avec les partenaires industriels. Les nouvelles fonctionnalités développées dans les plates-formes logicielles MUMPS, PaStiX, HIPS, MaPhyS, SCOTCH et TLSE et les nouvelles implantations logicielles des préconditionneurs seront distribuées librement. L'ensemble fait l'objet de publications dans des revues scientifiques internationales.
- ◆ L'accroissement des performances des codes de simulation utilisés par la communauté scientifique et des codes des partenaires industriels en calcul de structures, en électromagnétisme, en vibro-acoustique et en chimie atmosphérique.

On pourra consulter les sites :

<http://graal.ens-lyon.fr/MUMPS/>
<http://gforge.inria.fr/projects/pastix/>
<http://hips.gforge.inria.fr/>
<http://gforge.inria.fr/projects/scotch/>
<http://www.gridtlse.org/>



Code ASTER – Mécanique des Structures



Code ODYSSEE – Electromagnétisme

Le projet « SOLSTICE SOLveurs et SimulaTions en Calcul Extrême »

est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'INRIA. Il associe également le CERFACS, le CNRS (LaBRI, LIP, I'IRIT, LA, CNRM) comme partenaires académiques et le CEA-CESTA, EADS IW et EDF comme partenaires industriels. Le projet a débuté en janvier 2007 et se terminera en juin 2010. Il bénéficie d'une aide ANR de 647 k€ pour un coût total de 1 832 millions €.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Le résultat majeur est la mise à disposition de la communauté scientifique et des partenaires de bibliothèques haute performance : solveurs directs (MUMPS, PaStiX), solveur hybride (HIPS), partitionneur de grands graphes et de maillages irréguliers (SCOTCH) et portail d'expertise pour l'algèbre linéaire creuse (TLSE).

Ces travaux ont donné lieu à de nombreuses publications en revues et en conférences internationales.

Production scientifique et brevets

Les logiciels produits permettent la réalisation chez les partenaires industriels de simulations frontières permettant de faire sauter des verrous dans les domaines de :

- ◆ la prévision du temps chimique,
- ◆ la modélisation de géomatériaux pour la tenue d'ouvrages hydrauliques et le stockage de déchets radioactifs, la tenue mécanique de structures de production d'électricité, l'étude des dégradations de matériaux irradiés,
- ◆ le calcul précis de la réponse électromagnétique d'objets furtifs à un éclairage par une onde plane,
- ◆ la simulation de systèmes hybrides couplés vibro-acoustique,
- ◆ la mécanique des structures.

Programme « Jeunes chercheurs, Jeunes chercheuses », édition 2006

Projet MNEC

Le calcul numérique pour une meilleure compréhension des plasmas

Méthodes spectrales pour la discrétisation de l'équation de Boltzmann

La simulation numérique de l'équation de Boltzmann est le plus souvent réalisée à l'aide de méthodes Monte-Carlo. Ces méthodes donnent des résultats satisfaisants lorsque l'on s'intéresse aux états d'équilibres ou aux quantités moyennées (densité, vitesse et température); mais lorsque l'on souhaite connaître l'évolution de la solution elle-même, les fortes fluctuations rendent ces méthodes inefficaces. Nous développons dans ce projet des méthodes spectrales qui donnent une description précise de la fonction de distribution. La principale difficulté est alors de rendre ces méthodes efficaces en terme de temps de calcul pour l'évaluation de l'opérateur intégral. Récemment, nous avons étendu la méthode spectrale au cas de l'équation de Boltzmann inélastique, décrivant le comportement d'un gaz granulaire avec et sans source de chauffage. Des résultats numériques en dimension un et trois en vitesse permettent de valider cette approche pour l'étude des milieux granulaires. Nous avons ainsi proposé quelques conjectures sur la relaxation de la température (loi de Haff) en nous inspirant des résultats de simulations numériques.

Des calculs numériques pour la Fusion par Confinement Inertiel.

Notre objectif est d'une part de mener à bien des calculs numériques de référence sur les phénomènes complets, c'est-à-dire, résoudre l'équation de transport du type Fokker-Planck-Landau couplée avec le système de Maxwell pour la simulation de particules chargées relativistes, comme des électrons. La méthode cinétique proposée s'appuie sur des travaux récents et originaux menés en collaboration avec le CEA. Le deuxième objectif concerne la dérivation de modèles intermédiaires robustes et rapides capables de restituer avec précision la plupart des effets cinétiques contenus dans le modèle cinétique complet, comme le ralentissement et la dispersion des électrons. Plus spécifiquement, nous utilisons des modèles aux macroscopiques moyennant la direction de propagation des électrons. Ces modèles ainsi obtenus permettront une meilleure compréhension de la Fusion par Confinement Inertiel. Des calculs sur plusieurs milliers de processeurs ont été mis en œuvre durant ce projet.

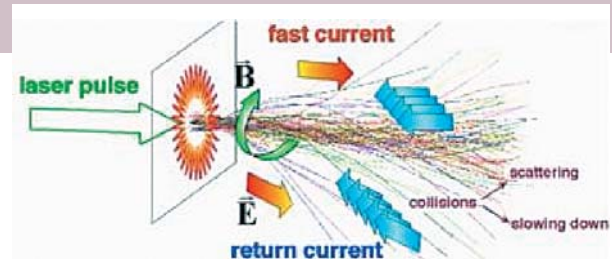


Illustration de la fusion par confinement inertiel : les particules chargées interagissent avec le laser (champs électromagnétiques) et collisionnent entre-elles.

Le projet « MNEC Méthodes Numériques pour les Equations Cinétiques »

est un projet de recherche fondamentale et appliqué coordonné par l'Institut Camille Jordan de l'Université Claude Bernard Lyon 1. Il associe aussi l'Université de Toulouse 3. Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 45 k€ pour un coût global de l'ordre de 100 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Un résultat marquant est la construction d'un logiciel de simulation utilisé par le CEA pour l'étude de l'interaction laser-plasma. Ce logiciel tient compte des collisions physiques entre les particules chargées.

Au cours de ce projet, nous avons également mis en œuvre différentes méthodes numériques pour décrire de manière précise et robuste des problèmes multi-échelles, c'est-à-dire, prenant en compte de manière systématique plusieurs échelles spatiale et temporelle. Cette étape est essentielle pour la compréhension de problèmes physique réalistes.

Production scientifique et brevets

Ce projet a donné lieu à la publication d'une trentaine d'articles scientifique dans des revues internationales à comité de lecture. En outre, des collaborations étroites avec le CEA sont établies sur l'étude des lasers.

Programme « Jeunes chercheurs, Jeunes chercheuses », édition 2006

Projet MACADAM

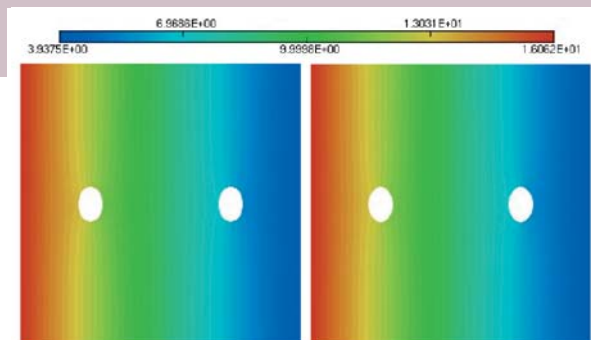
Analyse multi-échelle et approximation numérique pour la mécanique

Prise en compte des détails microscopiques dans un code de calcul

Dans de nombreuses situations physiques, on est amené à considérer des objets dont la géométrie présente naturellement plusieurs échelles. Typiquement, à la description macroscopique s'ajoute un niveau de détail microscopique : c'est le cas de granulats dans un bloc de béton ou d'aspérités à la surface d'une carrosserie. La modélisation mathématique de situations où les défauts sont peu nombreux consiste le plus souvent en un système d'équations aux dérivées partielles posées dans un domaine représentant la géométrie réelle. Si les aspects théoriques sont généralement peu affectés par les inhomogénéités microscopiques, il n'en va pas de même des aspects numériques. En effet, la prise en compte des deux échelles dans un code de calcul impose un raffinement du maillage au voisinage des micro-défauts. Les calculs qui en résultent peuvent devenir très coûteux. Ainsi, seule la description macroscopique de l'objet est le plus souvent conservée dans les codes industriels. On omet alors l'influence des inhomogénéités locales sur le comportement global. Notre objectif est de proposer une méthode numérique qui prenne en compte les deux échelles géométriques, tout en conservant une efficacité raisonnable en temps de calcul.

Analyse multi-échelle et méthode de superposition appliquées à la détection de fissures.

Notre approche se base sur une analyse asymptotique fine de l'équation gouvernant le phénomène en fonction de la taille \hat{A} des micro-défauts. La solution limite quand \hat{A} tend vers 0 correspond à la solution dans le domaine sans défaut. La perturbation induite par les micro-défauts se concentre au voisinage de ceux-ci et il a été montré que le premier terme correctif consiste en un profil, c'est-à-dire une fonction définie dans un domaine infini adimensionné, intervenant en la variable rapide x/\hat{A} , i.e. à l'échelle de la perturbation. Cette structure nous suggère une méthode numérique basée sur la superposition de la solution non perturbée et du profil. Les difficultés principales de la mise en œuvre de cette méthode concernent le calcul effectif du profil et l'analyse numérique des performances de l'algorithme. Notre travail a débuté lors d'une collaboration avec des mécaniciens. Il s'agit de prendre en compte l'influence des défauts surfaciques sur le comportement à rupture d'une structure en béton. La méthode de superposition multi-échelle présentée plus haut constitue la phase préliminaire de détection de fissure, à laquelle s'adjoint un modèle d'endommagement et de propagation.



Comparaison de la solution de référence et de la solution donnée par les deux premiers termes du développement asymptotique.

Le projet « MACADAM Multiscale Asymptotics and Computational Approximation for surface Defects and Applications in Mechanics »

est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'IRMAR (Institut de Recherche en Mathématique de Rennes) - Université Rennes 1 et ENS Cachan Bretagne. Il associe aussi le laboratoire ROBERVAL - Université de Technologie de Compiègne, le LMA - Université de Pau et des Pays de l'Adour, et l'IMT - INSA Toulouse. Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 47 k€ pour un coût global de l'ordre de 539 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Nous avons établi les développements asymptotiques dans différentes situations, notamment pour expliquer l'influence de perturbations très petites et très proches l'une de l'autre. Ces résultats ont ensuite été utilisés en mécanique afin de prévoir le comportement à rupture d'un matériau qui présente deux petits défauts très proches. Par ailleurs, la mise en œuvre de la méthode de superposition nécessite le calcul précis de profils et nous avons proposé plusieurs méthodes de calcul.

Production scientifique et brevets

Ce projet a fait l'objet de cinq articles publiés, d'un article soumis et de deux articles en préparation. Les membres du projet ont exposé leurs résultats à une vingtaine de reprises lors de congrès ou séminaires et ont organisé un workshop « Asymptotic methods, mechanics and other applications » les 31 août et 1^{er} septembre 2009 à l'ENS Cachan-Bretagne. Ce workshop a réuni une quarantaine de chercheurs de la mécanique numérique et des mathématiques autour des méthodes asymptotiques.

Programme « PNANO », édition 2006

Projet POEM

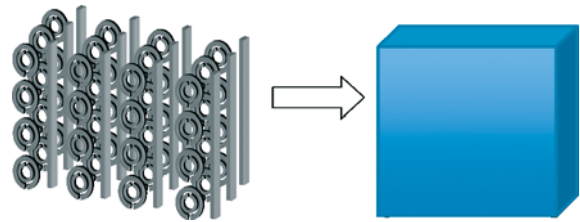
La modélisation numérique pour contrôler la lumière à l'échelle nanométrique

Comprendre comment la lumière se propage dans les métamatériaux

La propagation de la lumière dans la matière est régie par la valeur de l'indice optique du matériau considéré. La nature refusant de produire certaines valeurs de l'indice, les physiciens ont tenté de produire des indices n'existant pas dans la nature en fabriquant des matériaux artificiels : les métamatériaux. Ces matériaux ne sont pas homogènes : ils sont fabriqués à partir de « briques de bases » comme des fils et des résonateurs (voir figure). En revanche, si la longueur d'onde éclairant est assez grande, ils se comportent « comme si » ils étaient homogènes. Le but du projet POEM est de donner un sens précis à ce « comme si ». Il comporte deux volets. D'une part il s'agit de concevoir des méthodes mathématiques nouvelles permettant de décrire ces propriétés homogènes, c'est-à-dire l'indice optique. D'autre part de mettre au point des méthodes numériques permettant de modéliser sur ordinateur avec exactitude la façon dont la lumière se propage dans ces objets, en résolvant les équations de Maxwell qui sont les équations régissant le comportement de la lumière. A l'issue de ces deux étapes, il est alors possible de proposer de nouveaux matériaux artificiels pour des applications spécifiques (télécommunications optiques, microscopie super-résolue, invisibilité...).

Les méthodes multi-échelles appliquées aux métamatériaux

La méthodologie mathématique qui a été employée dans ce projet, repose sur la technique dite des « échelles multiples ». Les métamatériaux sont des objets périodiques et dans ceux-ci deux échelles peuvent en effet être distinguées : d'une part une échelle microscopique, correspondant à la description de la « brique de base » composant le métamatériau (fils et résonateurs); et d'autre part une échelle macroscopique décrivant la structure sur un grand nombre de périodes. La description du matériau hétérogène par des paramètres macroscopiques homogènes est obtenue en ne conservant que l'échelle macroscopique, tout en gardant la « mémoire » du comportement microscopique. C'est tout l'art mathématique du projet que de comprendre comment réaliser ce passage du microscopique au macroscopique et de faire en sorte que ce dernier garde le souvenir du premier. L'étape du projet correspondant à la résolution numérique des équations de Maxwell est réalisée en mettant en commun plusieurs méthodes numériques bien établies : il s'agit alors de marier habilement ces différentes approches, dont certaines sont adaptées aux petites échelles, et d'autres aux descriptions globales. Plusieurs techniques d'optimisation nouvelles sont ainsi sorties du projet.



A gauche un méta-matériau typique. La flèche matérialise le processus d'homogénéisation.

Le projet « POEM Propagation des Ondes Electromagnétiques dans les Métamatériaux » est un projet de recherche fondamentale coordonné par le Groupe d'Etude des Semiconducteurs UMR-CNRS 5650 (Université de Montpellier 2). Il associe aussi l'IMATH de l'université de Sud-Toulon-Var, l'Institut Fresnel (université d'Aix-Marseille III) et le LASMEA UMR 6650 (Université de Clermont-Ferrand 2). Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 42 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 304 k€ pour un coût global de l'ordre de 304 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

La méthode des échelles multiples a été largement développée et approfondie de façon à pouvoir être appliquée aux métamatériaux. Une des conséquences de ce corpus de résultats théoriques a été la mise en évidence de magnétisme artificiel dans des structures composées de matériaux non magnétiques : le rôle des résonances électromagnétiques à l'intérieur des constituants microscopiques a clairement été établi. Par ailleurs, de nouvelles méthodes numériques ont été développées : elles permettent la résolution rigoureuse des équations de Maxwell dans ces milieux complexes.

Production scientifique et brevets

Le projet a donné lieu à quarante publications dans des revues internationales à comité de lecture, dix présentations orales dans des conférences internationales, onze conférences internationales invitées. Les résultats obtenus seront synthétisés dans un ouvrage à paraître chez l'éditeur PanStanford Publishing (www.panstanford.com) dans le courant 2011.

Programme « BLANC », édition 2006

Projet MEG

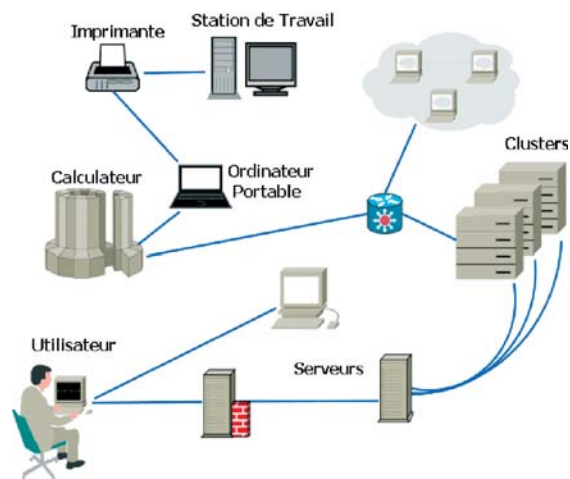
La puissance d'une infrastructure virtuelle pour la résolution de problèmes électromagnétiques dans le monde réel

Déploiement des outils de calcul électromagnétique sur une infrastructure informatique de grande taille

Les performances des outils numériques de simulation électromagnétique de structures complexes, i.e., à échelles multiples, sont souvent limitées par les ressources informatiques disponibles. De nombreux méso-centres, fermes et grilles de calcul, se créent actuellement sur les campus universitaires. Utilisant ces ressources informatiques mutualisées, le projet MEG vise à mener une étude portant sur les potentialités du concept de grille de calcul (Grid Computing) pour la simulation électromagnétique de structures multi-échelles. La grille de calcul peut offrir aux utilisateurs des puissances quasi-illimitées de calcul et de stockage de données, grâce à l'accès transparent et aisé (une simple connexion à un réseau à très haut débit de type Internet suffit) à un vaste ensemble de ressources informatiques distribuées sur une grande échelle. Des simulations électromagnétiques extrêmement exigeantes en temps de calcul voire impossibles à effectuer en utilisant les ressources traditionnelles sont aujourd'hui possibles grâce à la grille de calcul.

Disponibilité, hétérogénéité et efficacité

L'idée principale du calcul réparti consiste à effectuer des calculs à distance sur des machines géographiquement distribuées et disponibles en grande quantité. Les outils numériques de simulation électromagnétique n'étant pas conçus pour être utilisés dans un environnement distribué, la première étape consistait donc à les modifier afin de les déployer sur une grille de calcul. Une analyse approfondie a ensuite été menée pour évaluer les performances des outils de simulation ainsi déployés sur l'infrastructure informatique. La simulation électromagnétique de structures à échelles multiples a finalement été réalisée en un temps record.



MEG permet aux concepteurs de dispositifs électromagnétiques un accès aisé et transparent à un vaste réseau de ressources informatiques à haute disponibilité.

Le projet « MEG Multiscale modeling : from Electromagnetism to the GRID » est un projet de recherche fondamentale coordonné par le Laboratoire d'Analyse et Architecture des Systèmes (LAAS – CNRS). Il associe aussi le Laboratoire d'Informatique de Grenoble (LIG – ENSIMAG). Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 296 k€ pour un coût global de l'ordre de 882 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Des outils numériques de simulation électromagnétique ont été adaptés au calcul réparti dans l'environnement de la Grille de calcul et déployés sur GRID'5000. Nous avons obtenu des temps de simulation électromagnétique de structures multi-échelles de 50 % à 98 % inférieurs à ceux nécessaires sur une seule station de calcul. Pour la première fois à notre connaissance, ces performances justifient l'utilisation de la Grille de calcul dans la conception et l'optimisation des dispositifs électromagnétiques complexes, e.g., à très haute densité d'intégration ou/et surdimensionnés.

Production scientifique et brevets

A ce jour, sept communications ont été présentées dans des conférences internationales à comité de lecture et actes [IEEE APS (3), VECPAR (1), CLADE (1), MEMSWAVE (1) et CLCAR (1)] et deux dans un congrès national à comité de lecture [JNM]. Un manuscrit est en lecture pour publication dans la revue Applied Computational Electromagnetics Society Journal.

Programme « BLANC », édition 2006

Projet PASSEUR06

Nouveaux outils mathématiques en calcul scientifique

Des défis numériques difficiles

Même avec des ordinateurs très puissants, nombre de problèmes de simulation numérique restent extrêmement difficiles. Le projet est construit autour de problèmes linéaires de l'électromagnétisme et vise à améliorer les méthodes numériques par deux moyens : d'une part intégrer dans les codes l'information sur les phénomènes physiques arrivant lors de changement de milieu, en particulier dans le cas d'une géométrie singulière avec pointes ou arêtes, ou d'une couche mince. D'autre part, améliorer les algorithmes de résolution des systèmes linéaires obtenus par discrétisation des équations de Maxwell, en incluant des connaissances nouvelles sur certaines classes de matrices.

Outillage classique, outillage nouveau

Les effets de pointe, bien connus depuis deux siècles, puisqu'ils sont à l'origine du paratonnerre, ne se contentent pas de perturber les champs électromagnétique. Ils rendent aussi les calculs très difficiles, et se manifestent par la présence de quantité très grandes. Pour continuer la difficulté, un des moyens est d'introduire la connaissance théorique des effets de pointe, en introduisant des éléments singuliers dans le code d'éléments finis. Cette méthodologie fonctionne bien sur les problèmes elliptiques, mais pas encore très bien dans le cadre de l'électromagnétisme. Un des buts du projet est de concevoir et coder ces éléments singuliers. Un deuxième axe consiste à remplacer des couches minces par des conditions de transmission, bien moins coûteuses à discrétiser que les couches minces. Un troisième axe consiste à s'intéresser aux discrétisations uniformes des équations de Maxwell dans un milieu homogène, en vue d'en faire des préconditionneurs pour des problèmes sur grille grossière. Il se trouve que les matrices des problèmes discrétisés ont des particularités remarquables : on peut les décomposer en blocs, qui se répètent le long des diagonales descendantes. Ces blocs eux-mêmes admettent une décomposition de même type, avec un troisième niveau analogue de décomposition. Pour le moment, on ne sait pas bien exploiter cette structure. Pour bien l'exploiter, il faut comprendre la dimension de certains objets algébriques compliqués et mal connus : des intersections non complètes de variétés déterminantales.

Le projet « PASSEUR06: Nouveaux outils conceptuels pour le calcul scientifique - Applications à l'électromagnétisme »

est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'Institut Camille Jordan (UMR 5208, CNRS, Université Lyon 1, Ecole Centrale de Lyon, INSA de Lyon). Il associe aussi le Laboratoire Ampère (UMR, CNRS, Ecole Centrale de Lyon, INSA de Lyon, Université Lyon 1). Le projet a commencé en novembre 2006 pour une durée de 42 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 88 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Construction d'éléments d'arête grossiers compatibles avec des éléments nodaux grossiers en multigrille algébrique. Obtention d'un algorithme de complexité linéaire (multipliée par des facteurs logarithmiques) pour des matrices de Toeplitz bi-niveau bandes par blocs bandes. Diverses asymptotiques pour des problèmes en milieu hétérogène, et en particulier des domaines bordés d'une couche mince et modélisant une cellule biologique.

Production scientifique et brevets

Publications dans des revues internationales en mathématiques et en électromagnétisme.

Programme « BLANC », édition 2007

Projet OTARIE

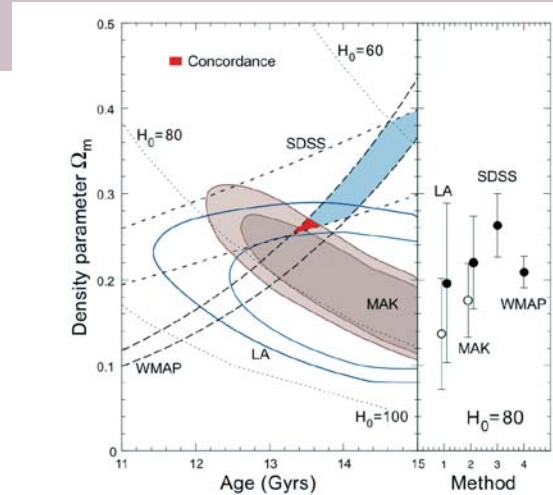
Une théorie vieille de deux siècles trouve des applications innovantes

De « déblais et remblais » de Gaspard Monge au traitement des bases de données visuelles de très grande échelle

Le problème de base du transport optimal, posé pour la première fois par Monge en 1781, est de trouver une stratégie de transport reliant deux distributions de masse données en minimisant un certain coût de transport. Bien des problèmes importants fondamentaux et appliqués peuvent être formulés comme en termes de transport optimal dans des espaces convenables. Une de telles applications est la reconstruction des vitesses particulières des galaxies à partir des catalogues de redshifts à grande échelle, ou l'approximation cosmologique de Zeldovich conduit à un problème de transport optimal avec des données pouvant comporter jusqu'au million d'objets ; les vitesses particulières ainsi obtenues sont utilisées pour contraindre diverses quantités d'intérêt cosmologique. En analyse d'images, le morphing et l'ajustement des couleurs peuvent être traités comme des transports dans l'espace physique ou celui des couleurs. Pour l'enregistrement des images, la reconnaissance des formes et la recherche dans de grandes bases de données, on a besoin de calculer la distance de transport de façon efficace. Tous ces problèmes présentent de sérieux défis d'analyse numérique grâce à la grande taille des problèmes typiques.

Modèles d'hydrodynamique et approches numériques

Le transport optimal est un thème mathématique au carrefour de l'optimisation, des équations aux dérivées partielles et des systèmes dynamiques en dimension à la fois finie et infinie. Des stratégies de transport optimal sont engendrées par les solutions d'équations convenables, notamment celles de Monge-Ampère et de Hamilton-Jacobi. Sur le plan numérique et algorithmique nous nous impliquerons à la fois dans des approches combinatoires (appariement Euclidien efficace en dimensions basses, programmation semi-définie) et des approches par champs continus (méthode de Benamou-Brenier-Uzawa, contrôle bilinéaire optimal, méthodes multi-échelle pour les équations de Monge-Ampère et Hamilton-Jacobi). Ici nous comptons améliorer les performances et atteindre des problèmes de bien plus grande taille que ceux traités dans les études pilotes précédemment développées par les participants. Nous explorerons aussi de façon théorique les modèles pertinents d'hydrodynamique liés au transport optimal.



La méthode de reconstruction cosmologique « Monge-Ampère-Kantorovich » (MAK) met en valeur le transport optimal pour contraindre les paramètres cosmologiques (le rouge indique la domaine qui est compatible avec MAK et avec les observations des expérimentations WMAP et SDSS).

Le projet « OTARIE Optimal Transport: Theory and Applications to cosmological Reconstruction and Image processing » est un projet de recherche fondamentale coordonné par

laboratoire J.-V. Poncelet (UMI CNRS situé à Moscou). Il associe aussi le laboratoire CEREMADE, l'Institut d'Astrophysique de Paris et l'Institut Wolfgang Doebelin (Nice). Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 230 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,5 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Au plan théorique : identification d'une nouvelle classe des distances de transport ; application des méthodes spectrales aux équations de Monge-Ampère, Euler et autres de type hydrodynamique ; une étude des écoulements cosmologiques caractérisés par l'abondance des caustics. Au plan numérique : un schéma pour le transport optimal en présence de diffusion ; une étude des effets d'hyperviscosité du haut ordre sur les équations de transport du type hydrodynamique ; application de transport optimal sur le cercle à l'identification des images. Des codes ont été développés (la bibliothèque WANN pour la recherche des proches voisins dans les espaces Euclidiens et le code MakAuction pour la reconstruction des déplacements et des vitesses particulières des galaxies).

Production scientifique et brevets

vingt articles acceptés dans des revues à comité de lecture françaises et internationales ; trois codes mis à disposition publique dans la page web du projet OTARIE ; deux colloques internationaux.

Programme « Technologies Logicielles », édition 2007

Projet OPUS

Une plateforme industrielle de référence pour le traitement des incertitudes

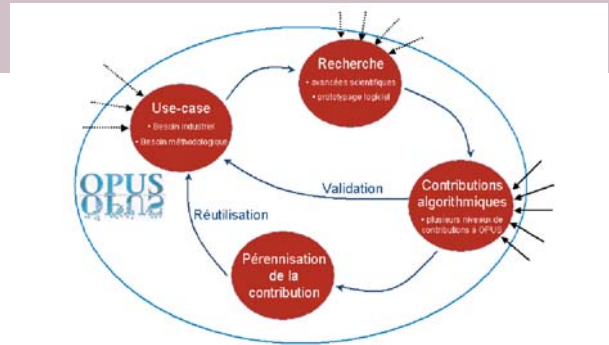
Faire émerger une plateforme logicielle libre pour le traitement des incertitudes

Un nombre croissant d'études industrielles de management des risques inclut explicitement la prise en compte des nombreuses sources d'incertitudes afin de garantir des résultats fiables et d'explorer de façon robuste l'espace de conception et de fonctionnement des systèmes complexes. Plusieurs collaborations importantes (ESReDA, IMdR, System@tic/EPHOC, MUCM...) de niveau français ou international ont été lancées ces dernières années avec pour ambition de développer des référentiels génériques de traitement des incertitudes. Elles s'appuient sur une formalisation mathématique, associant la modélisation statistique et l'analyse probabiliste au calcul scientifique des modèles numériques déterministes.

OPUS vise à faire émerger une plateforme logicielle libre et générique de traitement des incertitudes : celle-ci couvrira notamment les volets statistiques et probabilistes ainsi que la supervision avancée des codes de calcul déterministes industriels. La plateforme sera un outil de capitalisation du savoir-faire et des méthodes les plus avancées, ainsi que l'élément fédérateur d'une communauté de référence comprenant des acteurs de la recherche, de l'industrie, de l'enseignement.

Du besoin industriel à la pérennisation des solutions

La démarche du projet OPUS se base sur une boucle qui part de véritables cas-tests industriels, issus de différents domaines (production d'énergie, sûreté nucléaire, aéronautique). La complexité des traitements mathématiques et logiciels associés fait émerger la nécessité de méthodes avancées issues du monde académique et scientifique. Une fois ces méthodes développées et testées sur les cas-tests, elles sont intégrées et pérennisées au sein de la plateforme logicielle, pour finalement pouvoir être réutilisées dans d'autres études industrielles similaires. Les méthodes avancées examinées dans le cadre du projet OPUS couvrent un large spectre de problèmes et de "verrous" industriels et scientifiques : l'utilisation de "métamodèles" pour remplacer des codes de calcul gourmands en temps de calcul, la hiérarchisation des sources d'incertitude, la modélisation statistique de variables ne pouvant pas être directement observées, le couplage multi-physique et multi-échelle de codes de calcul, l'estimation de quantiles de très faible probabilité, associés à des événements rares et redoutés, et l'implémentation robuste et en temps réel d'équations différentielles à dérivées partielles.



La démarche du projet OPUS.

Le projet « OPUS Open source Platform for Uncertainty treatment in Simulation » est un projet de recherche industrielle coordonné par EDF-R&D. Il associe aussi trois partenaires industriels (CEA, Dassault Aviation, EADS), cinq partenaires académiques (École Centrale Paris, INRIA, SUPELEC, Université D. Diderot Paris 7, Université J. Fourier Grenoble 1) et une PME de services informatiques (SOFTIA). Le projet a commencé en avril 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 942 k€ pour un coût global de l'ordre de 2,24 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Le premier résultat marquant du projet OPUS a été la définition des cas-tests, des enjeux industriels et des besoins méthodologiques associés. Ces cas-tests ont été transférés aux partenaires académiques et sont utilisés pour la mise en œuvre pratique des méthodes avancées qui sont actuellement développées dans le cadre du projet.

Les prochaines étapes consistent en la définition des règles informatiques de contribution à la plateforme logicielle et l'industrialisation des méthodes et des algorithmes.

Production scientifique et brevets

A mi-parcours du projet OPUS, certains sujets de recherche ont déjà fait l'objet de communications/publications scientifiques (estimation de quantiles, bases réduites pour l'implémentation d'équations différentielles).

Par ailleurs, le projet OPUS organise périodiquement des workshops thématiques qui abordent à la fois les aspects théoriques et d'implémentation logicielle autour d'un sujet donné. A présent, trois workshops ont eu lieu autour des thèmes suivants : analyse et quantification des incertitudes, apprentissage et sélection de modèle, méthodes spectrales et polynômes du chaos.

Programme « Calcul Intensif et Simulation » édition 2006

Projet PITAC

Le parallélisme pour s'affranchir de l'inexorable cours du temps

Simulation numérique pour comprendre, prédire, optimiser et contrôler

La modélisation mathématique a pour but de mettre en équation des phénomènes auxquels on s'intéresse. L'analyse mathématique dans un premier temps valide ces modèles puis propose des algorithmes pour les simuler sur ordinateurs : il s'agit des simulations numériques. Elles permettent d'abord de mieux comprendre les phénomènes, puis de prédire des comportements à moindre coût par rapport aux expériences réelles et, éventuellement, d'optimiser, voire contrôler le fonctionnement afin de guider le phénomène vers des endroits où il ne serait pas allé naturellement.

Ces simulations ont néanmoins un coût. Elles font appel en effet à des ordinateurs de plus en plus puissants et les modèles qui simulent les situations les plus complexes sont gourmands en temps calcul. En décomposant la charge de calcul en tâches indépendantes, le calcul parallèle vise à utiliser plusieurs ordinateurs en même temps pour aller plus vite dans la restitution des résultats. Pour des problèmes dépendant du temps, le cours inexorable du temps semble difficile à briser pour être capable de découper le temps en tranches indépendantes et briser la causalité. Ce projet vise à permettre cette gageure.

L'algorithme pararéel pour découper le temps in silico

La démarche utilisée est de type prédicteur-correcteur basée sur des approximations successives ou chaque étape améliore la précision des calculs. Pour le cas de l'illustration proposée par exemple, il semble qu'on est seulement capable de prédire le temps des prochains jours en déterminant d'abord le temps qu'il fera demain, puis on passe à après demain, et ainsi de suite. C'est le cours des choses et on a du mal à voir comment faire autrement. Pourtant pour prédire le temps de demain on peut choisir une pulsation différente : c'est à dire de suivre le temps heure par heure, ou encore minute par minute, ou enfin seconde par seconde. Il est évident que la première stratégie nécessite 24 étapes, la seconde 60 fois plus et la dernière encore 60 fois plus. Si chaque étape a le même coût, disons en attente pour que l'ordinateur ait fini ses prévisions, la stratégie de suivre le temps seconde par seconde va être la plus coûteuse, ce sera aussi, on le comprend bien, la plus précise.

L'algorithme pararéel consiste à alterner ces différents types d'approximations en utilisant de manière constructive les différences observées entre des simulations de pulsations différentes.



Le projet « PITAC Parallélisation Incluant le Temps pour Accélérer les Calculs » est un projet de recherche fondamentale coordonné par le Laboratoire J.-L. Lions, Université Pierre et Marie Curie et CNRS. Il associe également l'Ecole Centrale, l'INRIA et l'IPGP. Le projet a commencé en janvier 2006 et bénéficie d'une aide ANR de 781 k€ pour un budget global de l'ordre de 2,5 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

L'algorithme de simulation pararéel a été utilisé avec profit sur un grand nombre de situations différentes, allant de la prédiction sismique au calcul de trajectoire de planètes en passant par la simulation de phénomènes de pollution et des applications en biomédical. Dans tous ces cas la fiabilité et la stabilité de l'algorithme de base a été testée et des variantes proposées pour s'adapter à chaque type de propagation avec sa typologie distinctive. On a aussi couplé cet algorithme de parallélisation « dans le temps » avec des algorithmes plus classiques de parallélisation en espaces.

Production scientifique et brevets

Une dizaine de publications, plusieurs présentations invitées, organisation d'un minisymposium dans une conférence internationale. Sont en prévision un workshop de restitution et des codes de démonstration.

Programme « Conception et Simulation », édition 2008

Projet COLLAVIZ

Visualisation Scientifique Collaborative Distante

Le défi de la visualisation scientifique et collaborative

Collaviz vise à fournir une plateforme ouverte pour la visualisation scientifique et le travail collaboratif distant.

Sur la base d'une architecture ouverte et de briques logicielles essentiellement open source (middleware, compression, collaboration, moteurs de traitement...), Collaviz va permettre aux scientifiques de répondre aux défis posés par l'augmentation des volumes de données à traiter (Po, To, données 3D...) au regard de leurs moyens disponibles (stations de travail, capacité réseaux souvent inférieures à 100 Mb/s).

Ainsi, Collaviz doit à la fois permettre aux collaborateurs d'une même structure ou d'un même projet, de travailler à distance et simultanément sur les mêmes données et modèles numériques, de partager leurs résultats issus de la simulation, mais aussi d'utiliser uniquement les réseaux existants pour permettre l'accès à des moyens de traitement de grands volumes de données (grappes de calcul).

Résolument ouverte, la démarche de Collaviz permettra de fédérer autour du projet une communauté d'utilisateurs et de créer une communauté de développeurs autour des différents composants qui seront délivrés, que ce soit en France ou sur le plan international. Le projet s'appuie sur les résultats de plusieurs projets pré-existants : CARRIOCAS, SCOS, PART@GE...

Une réponse fédératrice « multi-domaines »

Les communautés scientifiques ne disposent pas aujourd'hui d'environnements collaboratifs virtuels réellement adaptés à la multiplicité de leurs besoins.

Afin de travailler sur une approche générique qui respecte les besoins de chaque communauté, la démarche Collaviz permet le recueil des besoins de différents domaines d'excellence (CAE, CFD, CAD, Géophysique, Chimie ou Conception de médicaments). Ainsi, si les besoins de ces derniers concernant la visualisation scientifique ont leurs spécificités en termes de domaine de recherche, formats de données spécifiques (HDF5, MED, Ensight...) ou encore d'ergonomie liée aux habitudes de chaque communauté de chercheurs, bon nombres d'autres utilisations répondent à des fonctionnalités génériques (navigation, représentation 3D, collaboration, plan de coupe...).

Avec une approche totalement modulaire, la plateforme Collaviz pourra « s'adapter » aux besoins des différentes communautés scientifiques travaillant tout en fournissant une base de services/fonctionnalités communes intégrées dans des briques logicielles autonomes. La mise en place de ces avancées est prévue pour la deuxième phase du projet, soit janvier 2011.



Le projet « COLLAVIZ Plateforme Open Source pour le pré/post-traitement multi-domaine collaboratif et à distance » est un projet de recherche industrielle coordonné par Oxalya. Il associe aussi 27 partenaires dont 17 partenaires nationaux financés par l'ANR : Oxalya, ECP, EGID, INPT, INSA de Rennes, LIRIS, Digiteo Scilab, Artenum, BRGM, Distene, EDF, Faurecia, Medit, Mclp Consulting, Neacs, Techviz, Teratec. Les partenaires associés incluent : Web3D Consortium, Université de Cardiff, CEI, Kitware, Colorado School of Mines, IRD, IPGP, IFP, AGCO... Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 2 M€ pour un coût global de l'ordre de 4 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Un premier prototype circule chez les partenaires afin d'en valider les choix techniques et fonctionnels, et d'y intégrer des services additionnels au middleware. Celui-ci doit être mis à jour au bout de la deuxième année du projet.

Au-delà du strict développement logiciel et de la levée des verrous scientifiques du projet, Collaviz permettra, une fois une première étape stabilisée, à la communauté des développeurs de réutiliser les composants open source du projet pour permettre le développement de la communauté Collaviz.

Production scientifique et brevets

« An asymmetric 2D Pointer / 3D Ray for 3D Interaction within Collaborative Virtual Environments » Web3D Symposium 2009, Darmstadt, Allemagne, June 2009.

« Blind and Robust Mesh WaterMarking using Manifold Harmonics. » Cairo, Egypt, November 2009.

« Adaptive coarse-to-fine quantization for optimizing rate-distortion of progressive mesh compression, Vision, Modeling, and Visualization Workshop » Braunschweig, Germany, November 2009.

Programme « Technologies Logicielles », édition 2006

Projet SCOS

Open Standard for Computing Oriented System

Faire communiquer les communautés scientifiques entre-elles et casser les effets silos de la recherche

Les nouveaux paradigmes de la recherche scientifique nécessitent de mettre à disposition des chercheurs et ingénieurs, des solutions logicielles plus performantes, capables de traiter des problématiques multi-physiques, multi-échelles et multi-modèle, mais aussi de faire face à l'augmentation des besoins de traitement des scientifiques, au regard du volume toujours plus important des données traitées.

Pour ce faire, le projet a adopté une position originale de standardisation des composants logiciels pour le calcul scientifique : plutôt que de développer de nouveaux standards techniques, SCOS se concentre sur une approche ouverte et non-intrusive de la standardisation selon trois axes :

- ◆ Structuration, recueil et valorisation des informations « utiles » des logiciels scientifiques.

Facilitation de l'utilisation des logiciels de calcul scientifique par la définition d'un socle technique commun.

- ◆ Tirer les communautés vers le haut en facilitant les nouveaux usages grâce à des outils techniques et méthodologiques.

- ◆ Chacun de ces objectifs vise à rapprocher les communautés de développement et d'utilisateurs, que ce soit par l'usage ou par l'information, afin d'en favoriser la convergence.

Mise en place de normes et de standards pour le calcul scientifique

Il est nécessaire de casser les « effets silos » du monde scientifique actuel en tentant de « faire communiquer » les communautés entre elles avec une approche non-intrusive. La mise en place de standards, de labels et d'outils d'industrialisation contribue à proposer une réponse à ce besoin.

Cette approche est mise en œuvre selon quatre groupes de travail :

- ◆ Interopérabilité Système : définit un cadre pour qu'un logiciel puisse échanger des données avec les systèmes (une plateforme matérielle et des logiciels).

- ◆ Interopérabilité applicative : définit un cadre pour qu'un logiciel ait la capacité à échanger des données avec un autre logiciel.

- ◆ Outils d'industrialisation : pour pérenniser les outils existants, il y est question de visualisation scientifique utilisée en tant qu'outils d'aide à la décision, pour le travail collaboratif local ou distant ou encore dans le cadre de la mutualisation des moyens.

- ◆ Construction de Communauté : ce groupe traite de la fédération et de la valorisation des projets scientifiques.

Ces angles d'approche non-intrusifs et complémentaires posent les jalons d'une action à long terme pour la standardisation et la normalisation des outils du calcul scientifique.



La démarche non-intrusive des travaux de SCOS s'est organisée selon les quatre groupes de travail présentés ci-dessus afin d'apporter une réponse adaptée aux besoins spécifiques de chaque domaine.

Le projet « SCOS Plateforme générique Open Source pour le développement de Systèmes Complexes »

est un projet de développement expérimental coordonné par Oxalya. Il associe aussi 17 partenaires : ARTENUM, BULL, CEA, CS, ECP, EDF, ENS Cachan, GROOVIZ, IFP, INT, LIRIS, MANDRIVA, OXALYA, INRIA Sci-lab, SETI, TERATEC. Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 24 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 1,1 M€ pour un coût global de l'ordre de 2,3 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Le projet SCOS a dévoilé un certain nombre de livrables et de résultats, en voici un aperçu (oscos.org) :

- ◆ Méthodologie d'analyse des logiciels scientifiques sur la base de critères stratégiques, environnementaux et de pérennité.
- ◆ Spécifications d'Interopérabilité système et d'information.
- ◆ Politique de labellisation OSCOS.
- ◆ Plateforme collaborative d'information des logiciels (<http://directory.oscos.org>).
- ◆ SCOS-V3D comme prototype de logiciel de visualisation scientifique développé dans COLLA-VIZ (ANR).

Production scientifique et brevets

Trois papiers ont été acceptés dans le cadre du projet, en voici la liste :

- ◆ ShareX3D, a scientific collaborative 3D viewer over HTTP. Web3D 2008 : 13th International Symposium on 3D Web Technology, August 9-10, Los Angeles, California, USA, New York, NY: ACM, 2008, pp. 35-41.
- ◆ Collaborative exploration of 3D scientific data, VRST 2008, 27-29 octobre 2008, Bordeaux.
- ◆ Strategic & Economic Study of Scientific Computing Software, paper submitted on summer 2008 and accepted as official paper at World Comp 2008, Las Vegas, Nevada.

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2007

Projet 3WRL

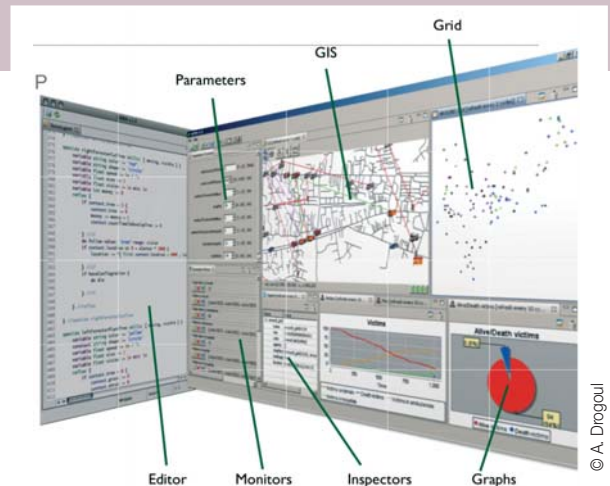
Utiliser les concepts fondamentaux de l'écologie pour proposer un simulateur générique

Amélioration et mise à disposition auprès des spécialistes non modélisateurs de la plus large gamme possible de techniques de simulation en écologie

L'écologie et les sciences de l'environnement produisent et consomment de grandes quantités de modèles, dont une proportion importante sont des simulateurs très complexes. Les méthodes utilisées pour construire ces simulateurs sont souvent empiriques et reposent sur la « culture informatique » des écologistes, sans interaction avec les disciplines informatiques compétentes. Notre objectif est de promouvoir la simulation numérique en écologie sur des bases théoriques solides en construisant un logiciel convivial basé sur un cadre conceptuel unifié, donnant accès au parallélisme et au calcul intensif. Ce logiciel visera les chercheurs, étudiants et enseignants en écologie, et ultérieurement les gestionnaires et décideurs en environnement. Nous utiliserons une représentation multi-échelles hiérarchisée des systèmes écologiques. Le logiciel orchestrera les interactions entre la physique et la biologie dans un cadre spatialisé, permettant l'adaptation de tout modèle spécifique aux connaissances disponibles. L'accent doit être mis sur la programmation et la documentation technique et conceptuelle du modèle sous-jacent. Pour garantir la plus large utilisation possible de 3Worlds, nous comptons le distribuer sous forme de logiciel libre.

Intégration logicielle dans une plateforme multi-agents existante via une ontologie des écosystèmes

Le projet a été organisé en quatre « work packages » : déploiement et intégration logicielle, développement du simulateur, développement d'une bibliothèque de modèles écologiques et développement d'outils d'analyse d'expériences par simulation. A partir d'une analyse des principaux concepts de l'écologie, nous avons proposé une ontologie des écosystèmes qui servira de base à la structuration du simulateur. L'intégration logicielle s'appuie sur la plateforme multi-agents GAMA, développée par l'IRD et l'IFI (Vietnam), elle-même construite sur la plateforme REPAST qui constitue l'une des références actuelles en matière de simulation multi-agents. Une nouvelle méthode d'intégration logicielle, l'« Aspect-oriented thinking », développée par un des membres du projet, est utilisée pour garantir la pérennité et la maintenabilité du logiciel. Un travail en parallèle sur divers simulateurs écologiques à différentes échelles spatiales (plante, parcelle, paysage) fournira des cas réels de complexité suffisante pour tester la plateforme. Enfin, nous réfléchissons à la mise au point d'outils « génériques » d'analyse de simulations, comme par exemple des techniques automatiques de détection de l'émergence ou d'optimisation de paramètres.



La plateforme GAMA de simulation multi-agents, cadre d'implémentation de 3Worlds.

Le projet « 3WRL - 3Worlds: Une plateforme de simulation multi-échelles pour l'écologie et les sciences de l'environnement » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'UMR 7618 Bioemco. Il associe aussi, en France, l'IRD GEODES, l'INRIA DigiPlante et le LECA, ainsi que des collaborateurs en Australie, en Chine et au Vietnam. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 800 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Mise au point d'une stratégie d'intégration logicielle assurant la préservation de l'acquis intellectuel. Grâce à l'AOT, l'investissement intellectuel considérable consenti au cours de ce projet sera archivé sous une forme intelligible et réutilisable, et pas uniquement sous forme de Code informatique définition d'une ontologie des écosystèmes utilisable pour leur modélisation. Développement du langage de spécification GAML qui a permis l'implémentation de plusieurs modèles écologiques sous GAMA. Mise au point ou amélioration de plusieurs modèles écologiques qui serviront de test à la plate-forme.

Production scientifique et brevets

Ce projet a déjà produit quelques publications dans les domaines de la simulation multi-agents (3), de l'écologie (2) et de l'intégration logicielle (1). Nous espérons parvenir à publier prochainement l'ontologie des écosystèmes et une description de l'intérêt de l'AOT pour la construction de logiciels complexes. La plateforme de simulation multi-agents GAMA est librement téléchargeable (<http://gama.ifi.refer.org/mediawiki/index.php/GAMA>) et le modèle BIOMOVE est disponible sur demande.

Programme « Jeunes chercheurs, Jeunes chercheuses », édition 2008

Projet INTOCS

Prédire et calculer la propagation d'ondes en mécanique des fluides

A la découverte des ondes non-linéaires

La résolution des équations de la mécanique des fluides est un enjeu important dans l'industrie aéronautique. En particulier, il est important de comprendre l'évolution et l'interaction des ondes de choc et des tourbillons.

Le projet INTOCS vise tout d'abord à clarifier la théorie mathématique des équations décrivant ces phénomènes. Un premier objectif est de justifier rigoureusement l'appariation de certains types d'ondes qui ont été prédites par des arguments formels.

Le second objectif du projet est de comprendre comment les codes de calcul implémentés dans les ordinateurs retranscrivent effectivement les propriétés des solutions. On souhaite notamment être capable d'expliquer certaines instabilités observées dans des codes de calculs. Ces instabilités semblent provenir du code de calcul et ne sont pas inhérentes au phénomène calculé. Le but du projet INTOCS est d'établir des critères de fiabilité des codes de calcul qui soient vérifiables dans la pratique.

Propagation et réflexion d'ondes haute-fréquence

Les phénomènes d'instabilité que l'on cherche à étudier correspondent à la propagation de signaux haute-fréquence. Un outil naturel dans ce contexte est la théorie connue sous le nom d'optique géométrique. L'utilisation de cette théorie dans l'étude des codes de calcul est encore peu développée. La difficulté majeure de notre étude vient du fait que l'on considère une propagation de signaux qui peuvent se réfléchir sur des parois. On souhaite alors décrire du mieux possible la réflexion de ces signaux. Les codes de calcul doivent alors être capables de reproduire ces phénomènes de propagation et de réflexion, ce qui constitue un test de fiabilité du code.

Le projet « INTOCS Interaction d'ondes compressibles » est un projet de recherche fondamentale et appliquée coordonné par l'Université de Lille 1. Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 60 k€ pour un coût global de l'ordre de 820 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Le premier résultat marquant à cette étape du projet est la description de la réflexion des ondes haute-fréquence dans des situations qui autorisent une amplification des signaux lorsqu'ils se réfléchissent sur une paroi. De tels phénomènes avaient été formellement décrits mais n'avaient pas encore fait l'objet d'une justification mathématique rigoureuse.

Un autre résultat marquant que nous avons obtenu permet de caractériser la stabilité d'un code de calcul pour des phénomènes de propagation d'ondes dans des domaines avec des parois. Notre résultat sera utilisé à l'avenir pour tester si un code de calcul reproduit fidèlement les phénomènes d'amplification que nous avons exhibés dans notre premier résultat.

Production scientifique et brevets

Un article a été publié dans SIAM Journal on Numerical Analysis et un autre article a été soumis pour publication. Ces travaux traitent de la stabilité de schémas numériques pour des problèmes de propagation d'ondes.

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2006

Projet CISSSI

Des outils pour l'analyse de sûreté de grands systèmes mécaniques et électroniques

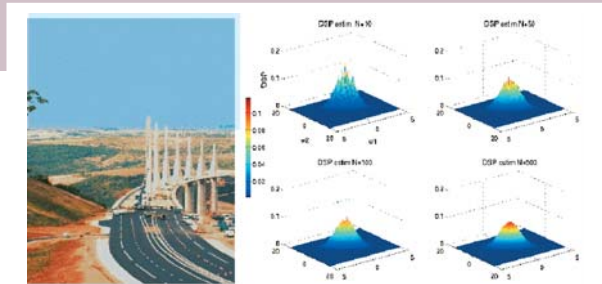
Un ensemble d'algorithmes de calcul probabiliste et de simulation de Monte Carlo

Le projet CISSSI vise à fournir des outils (théoriques et logiciels) aux ingénieurs chargés de l'analyse de sûreté des grandes structures mécaniques (ponts à haubans, plateformes offshore, centrales, avions), ou électroniques (systèmes pilotés, avions), soumises à des chargements statiques ou dynamiques (séismes, trafic, vent, brouillage électromagnétique). La prise en compte des incertitudes se fait via des modèles probabilistes, construits à partir d'observations statistiques. Lorsque l'incertitude est dans le comportement du système lui-même (portant sur la géométrie ou les caractéristiques des matériaux), on se ramène à des équations à paramètres aléatoires. La résolution pourra se faire par des méthodes de Monte Carlo, en procédant à des tirages de paramètres suivant des lois de probabilités données, avec des modèles de dépendances. Il faudra alors des techniques de réduction de variance performantes pour réduire la taille des échantillons. La résolution pourra aussi utiliser des techniques d'éléments finis stochastiques ou des méthodes de collocation.

Lorsque l'incertitude affecte la sollicitation du système, on utilisera des modélisations par processus et champs aléatoires et les équations différentielles ou aux dérivées partielles stochastiques résultantes seront résolues par des techniques numériques appropriées.

Une bibliothèque d'outils utilisables en contexte distribué pour mener des études probabilistes de sûreté

Les outils logiciels mis à disposition sont chargeables à partir du site du projet <http://pole-modelisation.univ-bpclermont.fr/cisssi>. Pour chacun, on trouvera un article d'analyse théorique et une notice utilisateur. Outre un accès à la bibliothèque libre OpenTurns, quelques exemples d'outils disponibles : simulations de champs aléatoires, gaussiens ou non gaussiens, stationnaires ou non (champs de vent turbulents, séismes), résolution d'équations différentielles stochastiques univoques et multivoques, analyse et modélisation de dépendances par copules, support vector machines, chaos polynomiaux, méthodes de Monte Carlo de réduction de variance par sous-ensembles, calculs de courbes de fragilité, méthodes de collocation pour des statistiques de champs électromagnétiques à paramètres aléatoires (chambres à brassage de modes). Ces outils sont conçus pour être utilisés soit sur un simple serveur, soit dans un environnement distribué (clusters, grille de calcul). En effet, certains calculs de ce domaine sont très lourds et nécessitent de faire appel à des calculs distribués.



Une grande structure mécanique (viaduc de Millau) et des résultats d'estimation de densité spectrale de puissance pour un champ stochastique stationnaire scalaire à deux variables.

Le projet « CISSSI : Calcul Intensif Stochastique et Sûreté des Systèmes Industriels » est un projet de recherche fondamentale coordonné par le Laboratoire de Mécanique de l'Université Blaise Pascal. Il associe aussi le Laboratoire de Mécanique et Ingénieries, et le Laboratoire des Sciences et Matériaux pour l'Electronique, et d'Automatique, de l'Université Blaise Pascal, l'ONERA (Département Dynamique des structures et des systèmes couplés, Département Électromagnétisme et Radar), le CEA/DEN (Laboratoire d'études de mécanique sismiques) et PHIMECA Engineering SA. Le projet a commencé en 2007 pour une durée de 36 mois, avec l'appui du Pôle de Compétitivité ViaMeca. : il bénéficie d'une aide ANR de 397 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,2 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Parmi les apports de CISSSI, on peut citer des outils de simulation de champs aléatoires, un outil de simulation de comportement d'une chambre réverbérante à brassage de modes par une méthode de collocation stochastique, une analyse mathématique d'une méthode d'estimation de paramètres de structures dite méthode du décrétement aléatoire, des outils basés sur les chaos polynomiaux, des méthodes de réduction de variance par sous-ensembles.

Pour la partie pratique, une contribution au développement de la bibliothèque d'analyse fiabiliste OpenTurns, et la mise à disposition sur le site du projet d'outils logiciels de simulation en contexte distribué.

Production scientifique et brevets

Huit articles dans des revues internationales, seize actes de conférences.

Compléments à la bibliothèque OpenTurns (Open Source Treatment of Uncertainties, Risk and Statistics). Modules logiciels mis en ligne sur le site du projet :

QCJM - Logiciel de gestion de jobs sur cluster ; GNAP - Génération de nombres aléatoires en contexte distribué ; SENSAG - Simulation de champs aléatoires scalaires et vectoriels et quelques outils statistiques ; EDS - Quelques schémas de résolution d'équations différentielles stochastiques.

Programme « Jeunes chercheurs, Jeunes chercheuses », édition 2008

Projet BioSpace

La programmation concurrente pour appréhender la complexité des systèmes biologiques

Mieux comprendre les systèmes biologiques grâce aux outils informatiques

La recherche biologique portant sur les mécanismes génétiques qui régissent les organismes vivants a fait des progrès phénoménaux depuis la découverte de la structure de l'ADN en 1953. Les grands principes de la transcription de l'ADN en ARN et de la transcription de l'ARN en protéines sont maintenant bien connus. Néanmoins les réseaux de régulation génétiques constituent toujours un champ actif de recherche : pourquoi et dans quelles conditions certains gènes codés par l'ADN sont exprimés et d'autres non. La compréhension de ces mécanismes permet notamment de mettre au point des médicaments dont les molécules déclenchent ou inhibent l'expression d'un gène. Pour observer les cellules et en inférer des modèles de régulation, les biologistes utilisent des expériences *in vitro*, coûteuses, longues à mener, et parfois très difficiles à mettre en œuvre. L'aide des outils informatiques de modélisation et simulation est alors précieuse : ils permettent de représenter un modèle biologique par un programme informatique, puis de le simuler *in silico* pour prédire son comportement, et ainsi infirmer ou confirmer la validité du modèle biologique, ou suggérer de nouvelles expériences *in vitro*.

Prendre en compte les aspects spatiaux des systèmes biologiques

Des langages de programmation et des outils informatiques ont été proposés pour modéliser, simuler et analyser des systèmes biologiques comme les réseaux de régulation génétiques ou les voies métaboliques. La plupart prennent en compte la concurrence des acteurs et la stochasticité intrinsèques aux systèmes biologiques. Le projet BioSpace s'intéresse particulièrement à la modélisation des systèmes de régulation génétiques dont les mécanismes sont contrôlés par des aspects spatiaux comme la position des molécules à l'intérieur du noyau cellulaire, l'existence d'un gradient de concentration, la présence de compartiments, etc. Le but du projet est de proposer, d'une part, un nouveau langage de programmation dédié à la modélisation de ces systèmes, qui intègre un contrôle stochastique concurrent dépendant de données spatiales, d'autre part, des outils permettant d'analyser les modèles. Les langages expérimentés dans BioSpace appartiennent à deux grandes familles : les extensions du pi-calcul (formalisme de référence pour les systèmes concurrents) et les langages à base de règles (plus intuitifs pour des biologistes mais moins étudiés). Les deux approches sont validées sur des études de cas.

```
'RNAPresumes_S1S2broken_a' RNAP(d!1),DNA0(t!1),DNA1(t),S2(s~b1) ->
RNAP(d!2),DNA0(t),DNA1(t!2),S2(s~b1) @ 50.0
'RNAPresumes_S1S2broken_b' RNAP(d!1),DNA0(t!1),DNA1(t),S2(s~fr) ->
RNAP(d!2),DNA0(t),DNA1(t!2),S2(s~fr) @ 50.0
# rule schema 10
'RNAPto36_spawnS3' RNAP(d!1),DNA35(t!1),DNA36(t)
-> RNAP(d!2),DNA35(t),DNA36(t!2),S3(s~fr) @ 50.0
# rule schema 11
'RNAPto47_spawnS4' RNAP(d!1),DNA46(t!1),DNA47(t)
-> RNAP(d!2),DNA46(t),DNA47(t!2),S4(s~fr) @ 50.0
# rule schema 12
'RNAP_dissociate' RNAP(d!1),DNA47(t!1),S3(s~hp!1),S4(s~hp,!1)
-> RNAP(d),DNA47(t),DNA48(t),S3(s~hp,!1),S4(s~hp,!1) @ 50.0
# rule schema 13
'RNAPto48_whenS4fr' RNAP(d!1),DNA47(t!1),DNA48(t),S4(s~fr)
-> RNAP(d!2),DNA47(t),DNA48(t!2),S4(s~fr) @ 50.0
```

Modèle de l'atténuation de la transcription de l'opéron tryptophane chez la bactérie *E.coli*, décrit dans un langage de programmation à base de règles (extrait).

Le projet « BioSpace: A Uniform Approach for Stochastic Modeling with Spatial Aspects in Systems Biology »

est un projet de recherche fondamentale coordonné par le LIFL (Laboratoire d'Informatique Fondamentale de Lille) de l'Université Lille 1. Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 135 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Plusieurs langages ont été proposés, assortis d'études de cas. Le pi-calcul attribué permet d'associer des données (par exemple spatiales) aux acteurs. Le pi-calcul impératif, basé sur le pi-calcul attribué, utilise une mémoire partagée, par exemple pour modéliser des compartiments cellulaires à volume variable. Un autre travail en cours a montré que l'approche à base de règles, initialement dédiée à la modélisation des voies de signalisation, permet de modéliser de manière intuitive des mécanismes de régulation complexes comme l'atténuation de la transcription de l'opéron tryptophane.

Production scientifique et brevets

Les extensions du pi-calcul ont été publiées en 2008 et 2009 dans la conférence de référence CMSB (Computational Methods in Systems Biology) et dans le journal TCSB (Transactions on Computational Systems Biology). Un modèle complexe à base de règles (régulation de l'opéron tryptophane) a été publié en 2009 dans la conférence WinterSim (Winter Simulation Conference, article invité) et le journal TCSB. Ce dernier article illustre le fait que l'analyse d'un modèle par des outils informatiques peut soulever des questions d'ordre biologique et suggérer de nouvelles expériences.

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2006

Projet PARMAT

Rendre la puissance de calcul pétaflopique accessible à la simulation des matériaux

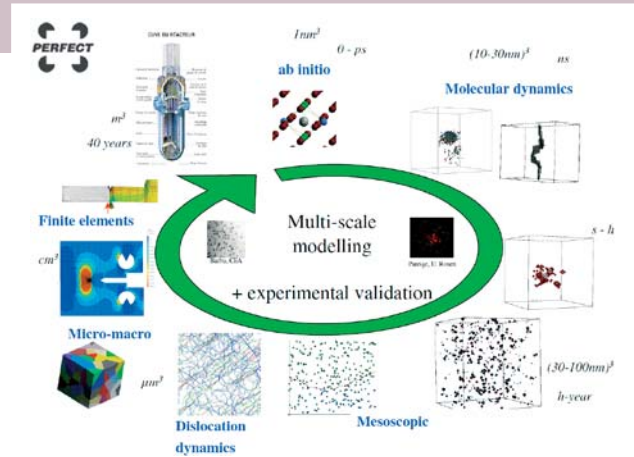
Améliorer la compréhension du vieillissement sous irradiation grâce au calcul haute performance

L'enveloppe et les éléments internes d'un réacteur nucléaire sont soumis à un bombardement neutronique qui, au fil des décennies, altère les propriétés mécaniques des alliages. L'étude du vieillissement sous irradiation a traditionnellement eu recours à des outils expérimentaux (vieillesse accélérée) : les coûts sont importants et l'extrapolation des résultats à des conditions d'utilisation réelles difficile. Pour contourner ces difficultés, la simulation numérique offre un moyen d'investigation complémentaire. Une approche consiste à enchaîner des calculs à plusieurs échelles, en commençant à l'échelle atomique où les effets quantiques déterminent une grande partie des propriétés du matériau, jusqu'à l'échelle macroscopique, où une loi de comportement spécifique pour le matériau endommagé est utilisable dans les calculs de mécanique des milieux continus. Cette méthodologie, initiée dans le projet européen PERFECT, ne pourra mener à des résultats fiables sans une augmentation critique des performances des outils de calcul : puissance des machines et efficacité des algorithmes. Ce projet vise à adapter les algorithmes à l'architecture massivement parallèle des machines actuellement les plus puissantes.

Accroître le parallélisme des algorithmes utilisés aux petites échelles

Accroître la taille des systèmes traités est critique pour la fiabilité de la modélisation dans les cas suivants :

- ◆ à l'échelle atomique, les simulations ab initio fournissent les configurations adoptées préférentiellement par les atomes en présence des différents défauts créés par le flux neutronique. Il est difficile d'exploiter plus de mille processeurs avec les codes actuels.
 - ◆ à l'échelle mésoscopique, l'évolution des défauts au cours du temps est simulée par un algorithme de Monte Carlo cinétique, difficile à paralléliser, sur la base de lois paramétrées : les amas subissent des transformations au cours du temps et l'aléa porte sur la fréquence et l'ordonnement de ces événements.
 - ◆ à cette même échelle, on réalise également des simulations de dynamique d'amas, obtenues à partir des précédentes par homogénéisation en espace des concentrations de défauts. Pour retrouver les résultats expérimentaux, il faudrait multiplier par 104 la taille des systèmes traités actuellement.
- Le parallélisme est absent des algorithmes utilisés dans ces deux derniers codes.
- Les actions entreprises consistent à développer de nouvelles approches, à optimiser les implémentations et à tester des algorithmes de type "décomposition de domaine".



Le projet « PARMAT Parallélisation pour la simulation des Matériaux » est un projet de recherche industrielle coordonné par EDF. Il associe aussi CAPS-Entreprise, le CEA, le CNRS, et l'ENPC. Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 4 ans : il bénéficie d'une aide ANR de 0,5 M€ pour un coût global de l'ordre de 1,3 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Un algorithme de décomposition de domaine pour les calculs ab initio a été développé et testé avec succès sur plus de 1 000 processeurs : simulation de molécules hydrocarbonées linéaires de plus d'un million d'atomes.

Des optimisations dans la programmation de l'algorithme de Monte Carlo cinétique ont permis d'accélérer notablement le code, jusqu'à un facteur 6.

Enfin, une accélération d'un facteur 10 a été obtenue dans le code de dynamique d'amas par des premières améliorations numériques.

Pour ces deux derniers codes, la parallélisation par décomposition de domaine spatiale devrait apporter prochainement des gains supplémentaires.

Production scientifique et brevets

La méthode de décomposition de domaine pour l'ab initio a fait l'objet d'un papier soumis à SIAM Journal on Numerical Analysis, et un autre publié dans la conférence ParCo 2007.

Les autres résultats ont donné lieu à des rapports internes, qui conduiront à des publications après consolidation.

Programme « Calcul Intensif et Grilles de calcul », édition 2005

Projet LN3M

Modéliser les matériaux, de l'échelle atomique aux dispositifs électroniques

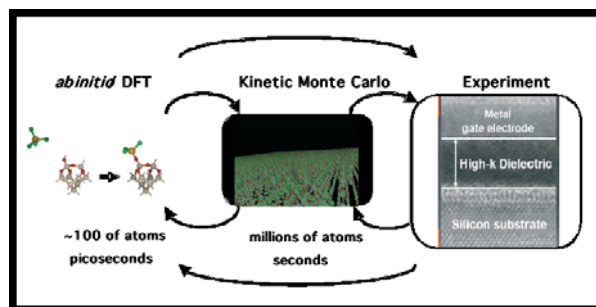
Développer des outils numériques multi-échelles

La capacité à inventer, développer, et modéliser des matériaux avancés dont les propriétés sont contrôlées jusqu'à l'échelle macroscopique repose en particulier sur la compréhension de la relation entre leurs propriétés à l'échelle atomique et leur organisation macroscopique. La prise en compte des mécanismes dominants aux différentes échelles spatiales et temporelles et leur couplage via les approches multi-échelles permet de faire le lien entre les processus mécaniques, dynamiques ou optiques entrant en jeu dans les divers dispositifs technologiques.

Ce projet a pour objet de développer des outils numériques cohérents permettant de coupler les échelles les plus microscopiques : le niveau quantique (méthodes *ab initio*) et le niveau atomique (dynamique moléculaire, d'une part, et méthode Monte Carlo cinétique d'autre part).

Des outils performants et couplés

Le développement de nouvelles méthodes de calcul doit viser à dépasser les limites imposées par l'utilisation d'un seul type d'outil. De ce point de vue, les deux points clés sont d'une part de disposer d'outils numériques très performants à chaque échelle et bien adaptés aux architectures massivement parallèles des supercalculateurs actuels, et d'autre part de pouvoir effectuer concrètement un couplage d'échelle performant. Pour ce qui est du couplage *ab initio* – dynamique moléculaire, il s'agira d'optimiser au cours de la dynamique les paramètres du potentiel classique utilisé. Cette optimisation est réalisée sur la base des résultats obtenus par un calcul quantique, plus précis. Pour le couplage *ab initio* – Monte Carlo cinétique, la clé du couplage, réside dans le calcul des barrières d'activation des différents mécanismes et réactions chimiques qui constituent les paramètres d'entrée des codes Monte Carlo.



Modélisation multi-échelle d'une interface métal/oxyde/semiconducteur de micro-électronique

Ce projet de recherche, coordonné par le CEA, associe des laboratoires publics du CEA (Bruyères le Châtel, Grenoble, Saclay), du CNRS (LAAS à Toulouse, LPPM à Orsay), de l'université de Lyon 1 et de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées. Le projet a commencé en janvier 2006 et a duré 45 mois. Il bénéficie d'une aide ANR de 8,2 M€ et d'un abondement du pôle de compétitivité System@tic de 1,8 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Le concept de simulation multi-échelle pouvant accueillir des modèles complémentaires pour traiter efficacement des questions fondamentales d'interaction atomiques et des questions d'application de composants et de matériaux nanostructurés a été validé, en particulier sur les oxydes de grille de transistors MOS à base de hafnium. Des algorithmes de recherche automatique de mécanismes et chemins réactionnels ont été développés et testés. Des progrès importants ont été réalisés, tant sur le développement des performances de codes *ab initio* (méthodes à base d'ondelettes) et sur le couplage des codes, que sur l'application à la modélisation des couches d'oxydes pour la microélectronique.

Production scientifique et brevets

Une quinzaine de publications sont parues dans des revues scientifiques avec comité de lecture.

Programme « Matériaux et Procédés », édition 2007

Projet MECAFIBRES

Modèles multiéchelles de milieux fibreux pour des tissés aux performances optimales

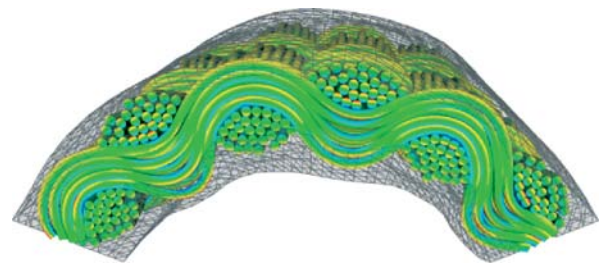
Comportement mécanique multiéchelles de milieux fibreux : construction d'une boîte à outil logiciel

Le comportement mécanique de milieux fibreux, tissés et non-tissés, est d'un grand intérêt actuellement, compte-tenu de leur utilisation croissante dans des contextes divers, où ils présentent des caractéristiques spécifiques intéressantes : gain de poids, gain de temps machine très important pour des grandes productions, de temps main d'œuvre, mais aussi de matière et d'énergie, meilleure répartition des efforts, mobilité importante du tissu sec, performances mécaniques accrues, bonne stabilité chimique, résistance à la corrosion. Ces avantages justifient l'emploi de textiles pour la réalisation de produits à forte composante technologique et à forte valeur ajoutée : géotextiles (fonctions mécaniques et hydrologiques), habillement, construction mécanique et notamment l'industrie aéronautique, secteur dans lequel on assiste à une forte augmentation des composites à renforts fibreux (multiplis à renforts en fibres de carbone utilisés par SNECMA ; NCF Non Crimped Fabric largement utilisés en aéronautique). L'objectif principal de ce projet est de construire une boîte à outil logiciel des modèles de comportement mécanique multiéchelles de milieux fibreux secs, à disposition des partenaires industriels. Ces modèles prendront en compte des informations fines liées aux constituants élémentaires (fils ou fibres) et à leurs interactions mutuelles (contact, frottement, dégradation, rupture), qui auront été caractérisées par des essais et la mise en œuvre de techniques appropriées. Outre le raffinement des modèles aux différentes échelles, l'enjeu essentiel se situe au niveau de l'interface et du dialogue entre ces différents modèles. Un des verrous scientifiques identifiés dans la transition d'échelles est la prise en compte des aspects statistiques inhérents aux milieux fibreux étudiés.

Synergie entre des techniques de calcul et des méthodes d'essais multiéchelles pour des textiles aux fonctionnalités multiphysiques optimisées

Grâce au développement récent des techniques de simulation et des capacités de calcul, il devient possible d'aborder par la simulation le comportement mécanique de milieux fibreux au niveau des interactions entre fibres, ce qui ouvre des voies nouvelles pour l'exploration et la compréhension des phénomènes se produisant à ce niveau, et surtout pour élaborer et identifier des modèles aux échelles intermédiaires, indispensables pour une prédiction du comportement macroscopique. L'identification des principaux phénomènes représentatifs, la recherche de variables pertinentes pour les représenter, sont des questions centrales et ouvertes, qui se posent précisément au niveau des interfaces entre les échelles. L'éla-

laboration de modèles prédictifs qui seront alimentés et validés par des essais menés aussi bien à l'échelle microscopique de la fibre qu'à celle de l'éprouvette, permettra de prévoir l'impact des paramètres des produits élaborés sur les fonctionnalités multiphysiques recherchées, et d'optimiser les critères de choix des textiles.



Vue en coupe d'un échantillon textile soumis à de la flexion. Simulations par le logiciel Multifil développé par D. Durville (LMSSMAT, Paris).

Le projet « MECAFIBRES Caractérisation et modélisation multiéchelles du comportement mécanique de milieux fibreux »

est un projet de recherche de caractère fondamental motivé par des problématiques industrielles coordonné par le Laboratoire d'Energétique et de Mécanique Théorique et Appliquée (LEMETA, Nancy). Il associe aussi le Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Structures (LAMCOS, Lyon), le Centre d'essais textiles Lorrain (CETELOR, Epinal), le Laboratoire de Mécanique des Sols, Structures et Matériaux (LMSSMAT, Ecole Centrale, Paris), le Laboratoire de Physique et Mécanique Textiles (LPMT, ENSISA, Mulhouse), ainsi que des partenaires industriels : SNECMA (Villaroche), Long Lasting Innovation (L2I, Mulhouse) et la société Henri Bastien. Le projet a commencé en 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 858 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,1 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

L'identification des principaux phénomènes représentatifs, la recherche de variables pertinentes pour les représenter, sont des questions centrales et ouvertes, qui se posent précisément au niveau des interfaces entre les échelles. L'élaboration de modèles prédictifs permettra de prévoir l'impact des paramètres des produits élaborés sur les fonctionnalités multiphysiques recherchées, et d'optimiser les critères de choix des textiles.

Production scientifique et brevets

Pas encore de publications compte tenu de la date récente (un an) de démarrage du projet.

Programme « Jeunes chercheurs, Jeunes chercheuses », édition 2007

Projet MOMME

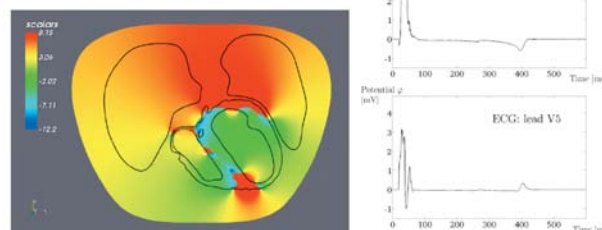
Des mathématiques et des ordinateurs pour simuler un électrocardiogramme

La modélisation mathématique et les simulations numériques en électrocardiologie

Les maladies cardio-vasculaires sont la première cause de mortalité dans notre pays. Le fonctionnement du cœur se mesure en partie via l'électrocardiogramme, un examen simple et bon marché qui est couramment interprété grâce à l'expertise clinique du médecin. Le projet MOMME vise à compléter cette expertise et améliorer sa compréhension scientifique en utilisant la modélisation, les méthodes mathématiques et le calcul scientifique. Ce travail repose sur une étude du cœur à différentes échelles allant de l'organe à la cellule. L'échelle cellulaire est bien décrite par les travaux des biologistes spécialistes d'électrophysiologie. L'intégration de cette modélisation à l'échelle d'un tissu puis de l'organe repose sur une compréhension de la biologie de ce système complexe et relève de la modélisation mathématique. Étant donnée sa complexité, l'utilisation pratique de cette modélisation requiert le calcul approché de solutions d'équations aux dérivées partielles. À cause des échelles mises en jeu, les méthodes et les algorithmes utilisés doivent être étudiés et choisis avec soin. Dans un cadre d'imagerie, un tel modèle pourra servir à l'aide au diagnostic ou à la planification chirurgicale.

Une description hiérarchique et des méthodes numériques performantes pour comprendre un organe biologique complexe

Le projet vise à intégrer des connaissances existantes à différents niveaux de modélisation et à construire une hiérarchie de modèles mathématiques pour décrire le fonctionnement électrique du cœur. D'une part, l'étude de l'ECG ne demande que la description des temps de passage d'une onde électrique dans le cœur, d'autre part, l'apparition et la propagation de cette onde dépend de l'organisation du tissu et des cellules qui le compose. À l'échelle d'un tissu, la propagation est décrite par des phénomènes de diffusion et réaction. L'électrophysiologie des cellules est prise en compte à ce niveau par l'utilisation de systèmes d'équations dont la complexité peut varier suivant l'utilisation désirée : potentiel d'action seul, avec dynamique du calcium, etc. Les solutions numériques de ces équations sont réputées difficiles à calculer. Un des aspects du projet concerne cette difficulté. À l'échelle de l'organe, des tissus de nature différentes sont connectés en réseau. La forme générale de l'ECG découle de cette organisation. Le projet envisage la construction d'un modèle complet d'une part et de modèles simplifiés permettant des simulations plus rapides d'autre part. Il repose sur l'analyse mathématique pour des équations de réaction-diffusion ou des équations intégrales, sur la résolution de grands systèmes linéaires et d'autres techniques numériques de pointe.



Champs électrique dans le thorax (gauche) et électrocardiogramme (droite) calculé par un modèle bidimensionnel de cœur dans le thorax.

Le projet « MOMME MODèles et Méthodes Mathématiques en Electrocardiologie » est un projet de recherche fondamentale coordonné par le Laboratoire de Mathématiques Jean Leray (Université de Nantes, CNRS, École Centrale de Nantes). Il associe aussi l'équipe ASCLEPIOS de l'INRIA. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 125 k€ pour un coût global de l'ordre de 531 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Un premier résultat assure que les équations que nous utilisons sont bien posées au sens mathématique. Une méthode numérique a été proposée pour simuler des électrocardiogrammes. Le résultat pratique majeur du projet consiste en un code de calcul qui intègre des modèles réalistes d'électrophysiologie et le couplage 1D/3D des tissus du myocarde. Des applications font l'objet de publications (en cours) sur des sujets tels que l'optimisation de la stimulation pour un bloc de branche droit ou l'effet de mutations cellulaires sur l'électrophysiologie d'un tissu.

Production scientifique et brevets

Les résultats mathématiques ont été exposés à l'occasion de conférences internationales, publiés dans des revues de mathématiques et d'imagerie médicale (Nonlinear Analysis, Real World Applications, International Journal on Finite Volume, IEEE Transactions on Medical Imaging). Le code de calcul du projet sera disponible en ligne prochainement. Par ailleurs, une conférence internationale a été organisée à Nantes en 2009 avec le soutien du projet MOMME. Elle s'intitulait « Mathematical Modeling and Computing in Electrocardiology ».

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2007

Projet FVNANO

Toucher, déformer et assembler des molécules du bout des doigts

Un laboratoire virtuel pour étudier des molécules biologiques et des matériaux

Ces dix dernières années, la société a été le témoin de progrès importants en physique et en chimie appliquées à l'infiniment petit. Les avancées à l'échelle atomique et moléculaire ont été fédérées par le terme de nanotechnologies. Nos recherches dans ce domaine portent sur le développement et l'utilisation de simulations numériques pour l'étude des biomolécules ou des matériaux. Ces simulations miment par exemple le comportement dynamique extrêmement complexe de molécules comme l'ADN, support de l'information génétique, ou comme les protéines, à la fois ouvriers et briques de la cellule. Ces macromolécules biologiques assurent leur fonction en interagissant sélectivement entre elles au cours d'un gigantesque « LEGO™ » moléculaire au cœur de l'usine cellulaire. Le but de ce travail est d'aboutir à un véritable laboratoire virtuel dédié à la manipulation de structures moléculaires sur ordinateur. Les retombées de cet outil concerneront la recherche à la fois fondamentale et appliquée dans le domaine des nanotechnologies, de la recherche biomédicale et des matériaux.

La réalité virtuelle et les simulations interactives au service de la compréhension des systèmes moléculaires

Pour explorer le LEGO moléculaire décrit ci-dessus, nous développons actuellement une approche pluridisciplinaire très innovante, combinant les simulations moléculaires et les techniques issues de la réalité virtuelle. Dans cette approche, le chercheur peut observer en temps réel les mouvements qui animent les molécules durant la simulation. Il peut aussi saisir, allonger et manipuler ces molécules de manière interactive, pour étudier à la fois leur déformation et leur agencement, dont la compréhension est primordiale pour, par exemple, mettre en lumière les dysfonctionnements à l'échelle moléculaire qui donnent naissance à des maladies. Ceci est facilité par une manipulation très intuitive des molécules qui sont rendues palpables par un périphérique à retour d'effort. Nous avons déjà appliqué cette méthode à de nombreuses macrostructures moléculaires, notamment des groupes de protéines impliquées dans la fusion membranaire, avec des résultats scientifiques prometteurs. D'autres domaines tels que la physique des matériaux ou la conception de nano-objets pourraient bénéficier ensuite de cette approche.



Le laboratoire « FVNano » en action. La partie centrale de l'image illustre une séance de travail typique. En bas de l'image quelques exemples de systèmes moléculaires étudiés. A droite plusieurs captures d'écran.

Le projet « FVNANO FlowVRNano : un laboratoire virtuel pour modéliser les systèmes moléculaires nanoscopiques en biologie et dans les matériaux » est un projet de recherche académique coordonné par le laboratoire de biochimie théorique du CNRS. Il associe aussi le laboratoire d'informatique fondamentale de l'université d'Orléans (LIFO), le projet MOAIS de l'INRIA Grenoble et le CEA/DIF à Bruyères-le-Châtel. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 556 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,2 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Le premier résultat marquant à cette étape du projet est le travail accompli pour rendre notre logiciel performant, une nécessité pour son utilisation interactive. Différentes boucles de simulation, de visualisation et d'interaction coûteuses en calcul et intimement liées sont à agencer. L'outil développé commence à être utilisé dans plusieurs applications scientifiques « grand défi ». Nous cherchons à avancer dans la compréhension de diverses maladies comme le botulisme ou le tabagisme, ou encore à comprendre des processus fondamentaux comme la réparation de l'ADN endommagée dans la cellule.

Production scientifique et brevets

Plusieurs publications sont parues, entre autres dans J. Comput. Chem., J. Supercomputing, IEEE VR 2008, VRST'08 et VRI-PHYS'08. Un article est à paraître à Pacific Symposium for Bio-computing. Nos travaux ont également été présentés sous forme d'affiche ou de démonstration à de nombreuses manifestations scientifiques nationales et internationales.

Programme « Conception et Simulation », édition 2008

Projet SAMSON

Système Adaptatif pour la Modélisation et la Simulation d'Objets Nanoscopiques

Etudier et concevoir des nanosystèmes complexes sur ordinateur

Selon certaines estimations, le marché mondial des produits et services liés aux nanotechnologies, qu'elles soient traditionnelles (les industries pharmaceutiques, chimiques, des matériaux et de l'électronique) ou nouvelles, atteindra mille milliards de dollars en 2015.

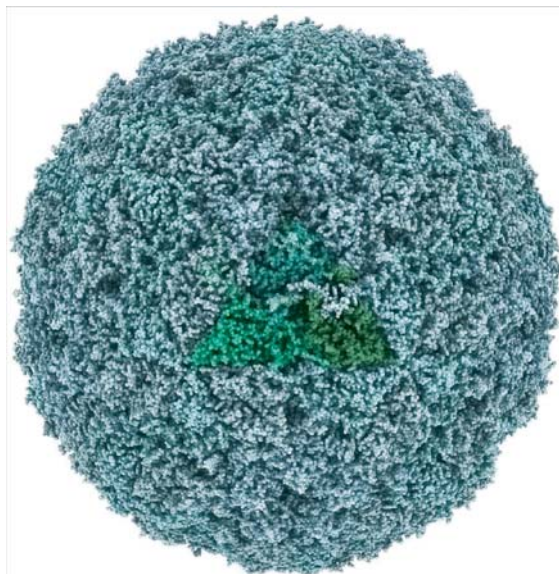
Comme au vingtième siècle, où les progrès en méthodes de conception assistée par ordinateur ont largement contribué au développement des systèmes macroscopiques (voitures, avions, etc., et autres objets manufacturés), l'informatique jouera vraisemblablement un rôle essentiel dans le développement des nanosystèmes.

La conception assistée par ordinateur d'un nanosystème reste un problème extrêmement difficile, cependant, en particulier en raison de la complexité des modèles physiques sous-jacents. Pour résoudre ce problème, il est généralement tentant d'augmenter la puissance de calcul (ce qui peut être coûteux), ou de simplifier les modèles (qui risquent de devenir trop simples pour être utiles).

Des algorithmes adaptatifs

Dans ce projet multidisciplinaire rassemblant des chercheurs en informatique, nanosciences, chimie, physique, mécanique quantique et biologie, nous nous proposons d'aller au delà de l'état de l'art de la modélisation et de la simulation de nanosystèmes en développant un ensemble unifié de méthodes adaptatives pour les mécaniques macro-moléculaires et quantiques. Ces méthodes seront capables de concentrer les ressources de calcul automatiquement et rigoureusement sur les parties les plus pertinentes du système moléculaire, et permettront l'intégration fine des experts lors de l'analyse et de la conception de nanosystèmes.

Le programme de travail se répartit en trois groupes de tâches : (a) la conception d'algorithmes adaptatifs pour la mécanique Newtonienne de systèmes macromoléculaires ; (b) la conception d'algorithmes adaptatifs pour la mécanique quantique et (c) la validation des algorithmes développés via des applications en physique, chimie et biologie.



Modélisation de l'enveloppe du virus de la fièvre aphteuse dans SAMSON.

Le projet « SAMSON : Système Adaptatif pour la Modélisation et la Simulation d'Objets Nanoscopiques » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'équipe NANO-D de l'INRIA. Il associe aussi le CEA DSV, le CEA DSM, le CEMES et l'IBS. Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 380 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,6 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Nous avons proposé quatre nouveaux algorithmes adaptatifs pour le calcul de forces interatomiques. Le premier algorithme est une généralisation de la méthode multipôles pour le calcul des interactions longues distances. Le deuxième algorithme permet de modéliser des systèmes moléculaires symétriques complexes (enveloppes de virus, fibres, etc.). Les deux derniers algorithmes concernent le calcul adaptatif de champs de forces réactifs et d'un modèle de mécanique quantique.

Production scientifique et brevets

L'algorithme permettant de modéliser des systèmes symétriques est en cours de révision pour « Journal of Computational Chemistry ». Nous allons prochainement soumettre les trois autres algorithmes déjà obtenus lors de cette première année.

Programme « Technologies Logicielles », édition 2006

Projet PARADE

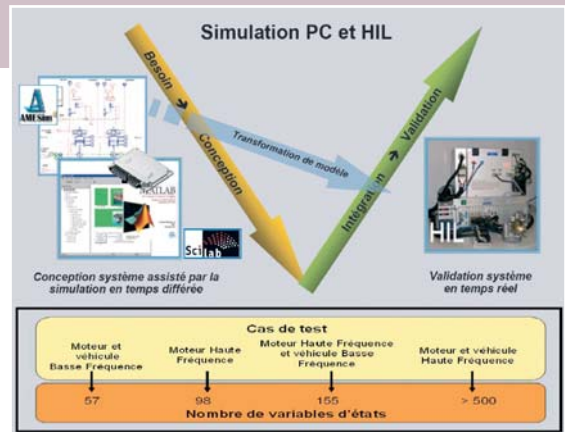
Méthodes mathématiques pour la conception système en temps réel

La conception de systèmes complexes par la modélisation numérique au service de la compétitivité des industries

Les éditeurs de logiciels de Simulation Système continue et/ou discrète comme LMS-Imagine/AMESim et INRIA/Scicos en France sont confrontés à la problématique de la diminution du temps de calcul par la parallélisation des schémas de résolution de systèmes d'équations différentielles algébriques (EDA) ou ordinaires (EDO). D'un côté, parce que le mouvement vers la « maquette virtuelle système » conduit à des problèmes dont la taille augmente de par la complexification et l'enrichissement de modèles qui sont le plus souvent raides et fortement non linéaires avec des échelles en espace et/ou en temps différentes. D'un autre côté, parce que l'utilisation de ces modèles physiques dans un contexte « Temps Réel », que ce soit pour la conception du « contrôle commande » où le « software est dans la boucle » (SIL) ou au niveau de l'intégration et de la validation où le « hardware est dans la boucle » (HIL), pousse également vers la parallélisation des schémas de résolution pour respecter les contraintes de simulation en temps réel. Sans perdre de vue la pression qu'apporte l'utilisation des logiciels de Simulation Système en combinaison d'outils d'optimisation et de conception robustes dans les phases de conception amont.

Développer des méthodes de calcul numérique adaptées aux architectures modernes de calcul

Le calcul distribué impose de déterminer des critères mathématiques pour partitionner l'intervalle de temps de simulation en sous-intervalles et/ou le système dynamique en sous-systèmes sous les contraintes de stabilité et de consistance de l'ensemble. Par ailleurs, l'optimisation des échanges d'information entre les sous-systèmes nécessite : des techniques de théorie des graphes, des techniques numériques de réduction de système (complément de Schur, décomposition de domaine en temps). La conformité des schémas d'intégration spatiale et/ou temporelle différents, est obtenue en définissant des schémas symplectiques préservant les invariants de systèmes multi-échelles et par l'introduction d'éléments multi-ports de type structure de Dirac généralisant le couplage entre échelles 1D-3D par l'emploi systématique de formes différentielles. Enfin, la co-simulation doit être organisée par des protocoles appropriés, en fonction des architectures hardware qui diffèrent en temps réel et en calcul intensif, et de façon à équilibrer la charge entre les différents processus et par des techniques mathématiques de décomposition orthogonale propre permettant de relaxer les couplages des sous-modèles.



Besoin industriel identifié par Continental (taille du système d'EDA).

Le projet « PARADE : Algorithmes Numériques/ Symboliques Parallèles de Résolution de Systèmes d'Equations Algébro-Différentielles » est un projet de recherche exploratoire coordonné par CDCSP/ICJ-UMR 5208-CNRS Université Lyon 1. Il associe aussi les industriels LMS-Imagine et Continental Automotive ainsi que des laboratoires publics : le LAGEP (UMR 5201 CNRS Université de Lyon 1), le LAMSADE (UMR 7024 CNRS Université Paris Dauphine), le LIMOS (UMR 6158 CNRS Université Blaise Pascal) et METALAU INRIA Rocquencourt. Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 1,1 M€ pour un coût global de l'ordre de 3,2 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Les résultats marquants de ce projet sont le développement de méthodes numériques parallèles de décomposition de domaine en temps, de découplage de système dynamique par réduction de modèle, de techniques branch and bound pour la simplification formelle. L'intégration dans les logiciels SUNDIALS, SCICOS et un prototype d'AMESim de décomposition de domaine de type Schur. La réalisation de modules bond graph implémentant les structures de Dirac discrétisées appliqués au génie des procédés, d'un modèle d'export cible Run Time optimisé avec solveur embarqué. La définition de cas tests industriels pour la validation.

Production scientifique et brevets

Papiers publiés/acceptés sur : la DDM Schur LNCSE, 60:535-542, 2008, le découplage de systèmes : (POD) ParCFD08, (C(p,q,i)) LNCSE 67:329-337 2009, la DDM en temps LNCSE 67:171-178,2009, Perturbations and Stability Issues In Spectral Methods For Simulation, Proc. of IASTED Modelling and Simulation Conf., 2008: 603-74, les structures de Dirac discrètes, MATHMOD 2009, l'optimisation combinatoire CIE39 (prix meilleur papier étudiant). Présentations acceptées en 2009: DDM19, PARCO09, NUMDIFF12.

Programme « Conception et Simulation », édition 2008

Projet EXPLO-RA

Apprendre à décider : quand explorer de nouvelles alternatives et quand exploiter les connaissances acquises ?

Allouer des ressources pour explorer ou exploiter ?

Dans un problème de prise de décisions séquentielles (tel que le contrôle d'un réacteur biochimique, l'optimisation d'un procédé industriel, l'apprentissage de stratégie dans un jeu, la commande d'un robot), il est essentiel de savoir bien gérer les ressources (en temps, en puissance de calcul, ou en nombre d'expériences réalisées) disponibles afin de maximiser la performance de la tâche résultante une fois les ressources utilisées. Ce projet vise à définir des stratégies d'allocation adaptatives réalisant un compromis optimum entre l'exploitation (prise de la meilleure décision en fonction de nos connaissances actuelles imparfaites) et l'exploration (acquisition de nouvelles informations). Un exemple particulier concerne la recherche arborescente dans des jeux de grande taille, en particulier pour le jeu de go (nouveau défi en Intelligence Artificielle) où des premiers travaux utilisant une gestion hiérarchique de ce compromis exploration/exploitation ont permis de développer les meilleurs programmes au monde (programme MoGo). De manière remarquable, les mêmes outils utilisés dans les jeux se généralisent dans beaucoup d'autres applications (allocation dynamique de sièges d'avions, planification de ressources humaines en grande distribution, robotique...) où il faut générer dynamiquement des séquences de décisions en environnement complexe, incertain et éventuellement en présence d'adversaires.

Monte-Carlo et les casinos

Les méthodes de Monte-Carlo sont des outils de simulation numérique bien connus en Statistique. Mais les casinos ont aussi inspiré d'autres outils mathématiques très puissants : les algorithmes de "bandit". Un "bandit" (ou bandit manchot, en référence à la machine à sous) retourne une récompense, réalisation d'une variable aléatoire dont la loi est inconnue. Lorsque plusieurs bandits sont disponibles (plusieurs actions possibles), il s'agit d'optimiser l'espérance de gain en décidant à chaque instant quel bandit jouer, privilégiant soit l'exploitation (choisir le bandit qui paraît être le meilleur) soit l'exploration (afin de mieux connaître les lois statistiques des bandits). Ces algorithmes de bandits sont des constituants mathématiques de base gérant le compromis exploration/exploitation et peuvent être combinés en hiérarchie ou en collaboration afin de traiter des problèmes beaucoup plus ambitieux de la sélection de la meilleure décision parmi des millions de choix possibles. Ce projet porte sur l'étude théorique et algorithmique d'extensions de ces outils afin de développer de nouvelles méthodes de simulation basées sur une utilisation intelligente des ressources numériques disponibles, pour résoudre des problèmes complexes d'optimisation et de prise de décisions.



A chaque instant, quel bandit choisir afin de maximiser l'espérance de gain ?

Le projet « EXPLO-RA : EXPLORation - EXPLOitation pour l'Allocation efficace de Ressources. Applications à l'optimisation, le contrôle, l'apprentissage et les jeux » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'INRIA Lille équipe Sequel. Il associe aussi l'équipe TAO de l'INRIA Lille, l'Ecole des Ponts (CERTIS), HEC Paris (GREGHEC), Paris 5 (CRIP5) et l'Université Paris Dauphine (LAMSADE). Le projet a commencé début 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 571 k€ pour un coût global de l'ordre de 2,7 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Nous avons étendu l'analyse des algorithmes de bandits au cas où l'espace d'action (les bras des bandits) est infini, sous deux hypothèses : (1) lorsque l'ensemble des bras forme un espace métrique, sous une hypothèse de régularité de l'espérance des récompenses. (2) lorsque les bras sont dénombrable (infini) sous une hypothèse statistique sur la moyenne d'un nouveau bras testé, où un nouveau compromis exploitation/exploration/découverte est illustré. Ces travaux permettent d'analyser mathématiquement les algorithmes hiérarchiques de type "optimiste dans l'incertain" ayant fait leur preuve dans les programmes récents sur le jeu de go.

Production scientifique et brevets

Depuis début 2009, 3 articles publiés à la conférence NIPS (Neural Information Processing Systems), 3 articles à COLT (Computational Learning Theory), un article à IJCAI (International Joint Conference on Artificial Intelligence), un article à ALT (Algorithmic Learning Theory), un article à la Revue d'Intelligence Artificielle, et plus de 5 articles en cours de soumission.

Programme « Technologies Logicielles », édition 2007

Projet LOGIC

L'optimisation automatique donne une nouvelle dimension à la simulation numérique

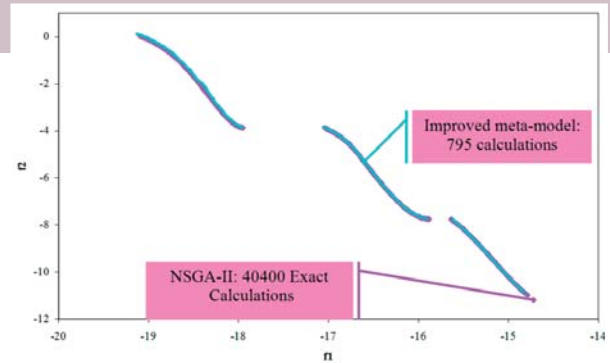
La simulation numérique du procédé de forgeage et l'optimisation automatique: un accord presque parfait

L'usage de la simulation numérique des procédés de mise en forme s'est largement répandu au cours des dernières années dans l'industrie mécanique. Les outils de simulation permettent avec une stratégie d'essais et erreurs virtuels d'optimiser les procédés sans engager des coûts matière ni interrompre la production. Ils requièrent par contre du temps utilisateur pour analyser les résultats, modifier les conditions opératoires et relancer la simulation. En conséquence ce processus est souvent interrompu bien avant l'optimum pour manque de temps. L'optimisation automatique semble donc le complément idéal à la simulation. Malgré cela, on observe très peu d'utilisations couplées. Les raisons sont multiples :

- ◆ difficulté à appliquer les techniques d'optimisation à une réalité complexe et en particulier à formaliser un critère d'optimalité qui est souvent un mixte entre la qualité de la pièce (critères basés sur l'histoire thermo-mécanique et absence de défaut) et son prix de revient (quantité de matière utilisée, dégradation des outils, choix des équipements).
- ◆ complexité du couplage triple entre le noyau d'optimisation, le logiciel de simulation et éventuellement un logiciel de CAO.
- ◆ Difficultés liées à la forme des fonctions coût qui rendent difficiles l'emploi des algorithmes d'ordre 1 et aux temps d'évaluation qui pourraient exclure les algorithmes d'ordre 0.

Intégration des techniques d'optimisation automatique dans FORGE: logiciel de simulation dédié au formage des métaux

Le but du projet est d'apporter des réponses ciblées à un nombre significatif de situations rencontrées par les utilisateurs du logiciel FORGE. Afin de s'assurer que l'espace couvert est suffisamment grand, le projet intègre 10 sociétés représentatives de segments de marché différents, chacune apportant des exemples caractéristiques de ses problématiques. La classification de ces exemples et leur reformulation dans un contexte d'optimisation a constitué une des premières étapes du projet. Afin que chacun puissent bénéficier de cette technique, le module d'optimisation sera intégré de façon transparente dans l'Interface Homme Machine de logiciel. Pour aborder les situations fréquentes où l'optimisation porte sur plusieurs critères, un algorithme d'optimisation Multi Objectifs est développé. De type Génétique, il se prête bien au calcul parallèle, ce qui permet de réduire fortement les temps de calculs. Mais la principale accélération est obtenue grâce au couplage à un méta-modèle par moindres carrés mobiles: des résultats pertinents sont alors obtenus en seulement quelques dizaines de simulation.



Front de Pareto pour un problème d'optimisation multi-objectif. L'algorithme développé (bleu) permet d'obtenir la même qualité de solution en 80 fois moins de calculs.

Le projet « LOGIC Logiciel d'Optimisation de Gammes Intégré et Convivial » est un projet pré-concurrentiel coordonné par Transvalor S.A. Il associe aussi Ascometal Creas, Armines/Cemef, Gevelot Extrusion, les Ateliers de la Haute Garonne, Industeel, Setforge, TrefilEurope Arcelor Mittal, Bollhoff Otal, Cetim, les Forges de Courcelles et les Ateliers des Jarves. Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 36 mois: il bénéficie d'une aide ANR de 570k€ pour un coût global de l'ordre de 1,4 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

A l'issue des 18 premiers mois, nous avons identifié une dizaine de situations types qui recouvrent l'ensemble des cas proposés. L'ensemble des cas a été traité à l'aide d'une version du noyau d'optimisation issue du projet RNTL OPTIMAT et les résultats montrent un gain par rapport à la situation actuelle, ce qui nous a permis de valider notre formulation. Une première version de l'IHM a été fournie aux partenaires industriels pour validation du concept. Le module d'optimisation intégrant les travaux du projet sur ce sujet devrait très prochainement remplacer la version initiale.

Production scientifique et brevets

- 4 présentations dans des conférences avec actes :
- ◆ ESAFORM conf. on Material Forming, Enschede, 27-29 April 2009 (2 présentations).
 - ◆ Coll. Nat. en Calcul Des Structures, 25-29 Mai 2009, Giens.
 - ◆ 8th World Congress on Structural and Multidisciplinary Optimization, Lisboa, June 1-5, 2009.
- Auteurs : M. EJDAY, L. FOURMENT, S. MARIE, R. DUCLOUX, T. MASSÉ, C. BOBADILLA, P. MONTMITONNET.

Programme « Calcul Intensif et Grilles de Calcul », édition 2005

Projet CHOC

Les machines actuelles pour Résoudre les problèmes d'Optimisation Combinatoire

Les problèmes d'Optimisation Combinatoire, un challenge

De nombreux problèmes industriels sont des problèmes d'Optimisation Combinatoire (productique, électronique, transport, supply-chain...). Leur résolution est confrontée à l'explosion combinatoire du nombre de solutions possibles à considérer!

Nous nous sommes intéressés à deux problèmes: Le problème d'Affectation Quadratique est un problème classique d'Optimisation Combinatoire dans lequel il convient de trouver l'affectation optimale de n usines sur n sites de façon à minimiser un coût quadratique dépendant à la fois des distances inter-sites et des flux inter-usines. Ainsi, malgré 30 années de recherches, la taille des applications pouvant être résolue exactement demeure très basse (autour de $n = 30$).

Une extension de ce dernier est le problème d'affectation quadratique à 3 dimensions. Son origine vient des transmissions de données sans fil où on cherche un « mapping » des symboles de transmission aux données maximisant la diversité de transmissions multiples par paquet. Une bonne solution à ce problème permet de réduire significativement le coût d'obtention d'une transmission fiable sur des canaux de communication sans fil avec distorsion du signal. Les travaux précédents n'ont pu aborder que des problèmes de taille inférieure à 12.

Le parallélisme pour lutter contre l'explosion combinatoire

Le parallélisme apparaît comme un excellent moyen pour d'une part réduire les temps de résolution de ces problèmes et d'autre part faire coopérer les méthodes exactes et heuristiques.

Pour cela, le portage des outils Bob++ et ParadisEO, qui sont respectivement des frameworks de résolution exactes et heuristiques, sur la plateforme Kaapi permet de résoudre des problèmes d'optimisation sur machine multi-cœur, cluster de multi-cœur ou grille de calcul.

En effet, KAAPi est un moteur exécutif multithreadé performant qui permet l'exécution d'applications parallèles sur des machines hétérogènes (CC-NUMA, Grappe, Grille).

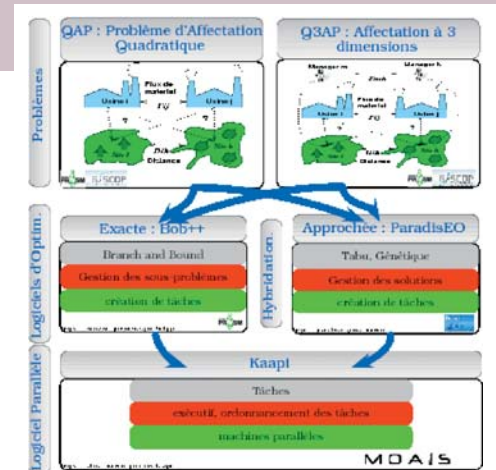
Les algorithmes d'ordonnement sont prouvés théoriquement pour la classe des programmes multithreadés considérés.

Les protocoles de tolérances aux pannes possèdent des surcoûts faibles vis-à-vis d'une exécution sans panne; de plus ils acceptent un nombre arbitraire de pannes franches.

Kaapi : <http://kaapi.gforge.inria.fr/>

Bob++ : <https://software.prism.uvsq.fr/bobpp/>

ParadisEO : <http://paradiseo.gforge.inria.fr/>



Le projet « CHOC Challenge en Optimisation Combinatoire »

est un projet de recherche fondamentale coordonné par le laboratoire PRISM de l'UVSQ. Il associe les laboratoires Dolphin de l'INRIA, G-SCOP de Grenoble INP et l'équipe Moais de l'INRIA-Grenoble. Le projet a démarré début 2005 pour une durée 42 mois: il bénéficie d'une aide ANR de 350 k€ pour un coût global de l'ordre de 1 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Nous détenons les meilleurs algorithmes séquentiels et parallèles de résolution du Q3AP. En résolution exacte, nous avons proposé des améliorations du calcul de la borne inférieure tant du point de vue algorithmique que du point de vue de leur implémentations (utilisation des jeux d'instructions SSE). De plus, la gestion des configurations symétriquement équivalentes, nous a permis pour la première fois de résoudre un problème de taille 14 à l'optimum. En résolution approchée par metaheuristique, le projet a permis d'obtenir une hybridation d'algorithme génétique/Recuit simulé. Il a pu être montré qu'en utilisant une procédure adaptée d'initialisation de la population initiale, il a en effet été possible pour la première fois d'aborder des problèmes de taille 18 et 22.

Mais nous avons aussi hybridé, méthodes exactes et approchées. En effet, d'une part, la méthode exacte est utilisée comme intensification par l'algorithme génétique, et d'autre part, une metaheuristique paradiseo est utilisée par le solveur exact pour améliorer dynamiquement les solutions générées.

Production scientifique et brevets

Beaucoup d'extensions écrites sur les 3 logiciels Bob++, ParadisEO et Kaapi.

Publications: plus de 15 communications, dont 1 livre, 2 chapitres de livre, 5 articles dans des revues internationales et 7 dans des conférences internationales.

Programme « RNTL », édition 2005

Projet OMD

Optimiser les systèmes complexes en présence d'incertitudes

Pouvoir optimiser et propager des incertitudes en utilisant les simulateurs les plus fins

Les importants efforts de développement réalisés depuis 40 ans ont fait progresser les logiciels de simulation et, indépendamment, les méthodes d'optimisation. Pourtant, la conception optimale de systèmes complexes (avions, fusées, voitures...) se heurte à i) un volume de calculs trop élevé, ii) la non-prise en compte des erreurs de modèles dans l'optimisation, iii) et la dispersion des compétences et outils de simulation qui peinent à interagir lors de l'optimisation. Le projet Optimisation MultiDisciplinaire (OMD) vise à rapprocher les méthodes numériques d'optimisation du monde réel des ingénieurs en répondant à ces trois points. L'idée fondamentale d'OMD est de faire interagir des modèles représentant chaque aspect ou sous-système, de représentativité physiques et de coûts numériques variés, dans une démarche nouvelle d'optimisation à plusieurs niveaux.

Le projet réunit une communauté de chercheurs en mathématiques appliquées, aérodynamique, mécanique des structures, et méthodes numériques autour de trois cas tests industriels : les conceptions avant-projet d'un avion d'affaire supersonique et d'un lanceur de satellite, et l'optimisation de soupapes de moteurs diesel.

Intégrer le calcul d'incertitudes et la gestion de la pluridisciplinarité dans le processus d'optimisation

Le projet OMD a répondu aux trois verrous de l'optimisation de systèmes complexes par les axes méthodologiques suivants.

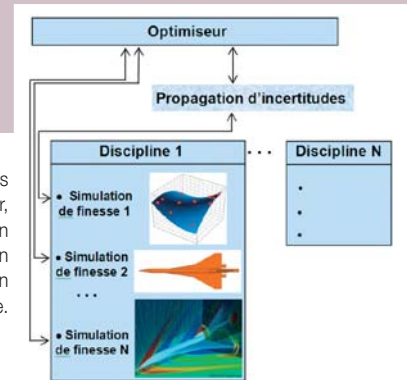
Coût de calcul 1 : les simulateurs physiques les plus fins sont parfois remplacés pendant l'optimisation par des simulateurs à base de physiques simplifiées (en mécanique des fluides et des structures) ou par des méta-modèles (appris à partir de résultats de simulations physiques ou d'expériences).

Coût de calcul 2 : le problème d'optimisation est simplifié par des réductions temporaires et ciblées du nombre de variables au moyen d'approches multi-niveaux.

Prise en compte des incertitudes : l'optimisation et l'estimation des incertitudes sont réalisées simultanément, ce qui permet des économies de calculs. La différentiation automatique est utilisée. La multiplicité de disciplines : les techniques d'optimisation collaborative permettent de découpler les différentes disciplines au cours de l'optimisation, ce qui simplifie beaucoup le problème, tout en garantissant la prise en compte de ces couplages à convergence.

L'utilisation de méta-modèles et du langage de programmation Scilab ont été transverse aux développements du projet.

Organigramme des relations entre optimiseur, programme de propagation d'incertitudes et simulation dans le cas de l'avion d'affaire supersonique.



Le projet « OMD : Optimisation MultiDisciplinaire » est un projet de recherche industrielle coordonné par l'Ecole des Mines de Saint-Etienne. Il associe aussi : Astrium ST, Dassault Aviation, l'Ecole Centrale de Paris, l'ENS Cachan, l'INRIA futurs, l'INRIA Rocquencourt, l'INSA de Rouen, l'ONERA, Renault, Scilab, Sirehna, l'Univ. Paul Sabatier de Toulouse et l'Univ. de Technologie de Compiègne. Le projet a commencé en juin 2006 pour une durée de 41 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 1,2 M€ pour un coût global de l'ordre de 3 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

De nombreuses contributions méthodologiques ont résulté du projet OMD.

Métamodélisation de réponses physiques (champs) : méthodes PU-POD (Partition of Unity Proper Orthogonal Decomposition) et Constrained POD.

Développement de la méthode d'optimisation généraliste CMA-ES avec méta-modèle.

Optimisation multi-niveaux : méthode multi-échelle/multi-résolution en mécanique des structures, paramétrisation de Bezier à plusieurs niveaux, décomposition optimale des variables avec plusieurs disciplines.

Optimisation et incertitudes : bruit et optimisation évolutionnaire, minimisation de quantiles, Optimal Safety Factor, utilisation de la différentiation automatique.

Optimisation collaborative : méthode DIVE (Disciplinary Interaction Variable Elimination).

Signalons de plus une toolbox Scilab avec une programmation orientée objet des optimiseurs.

Production scientifique et brevets

2 livres : « Optimisation MultiDisciplinaire en Mécanique » paru chez Hermès en 2009 et « Multidisciplinary Design Optimization in Computational Mechanics » à paraître chez Wiley en 2010.

6 articles de revues internationales, 12 articles de conférences internationales, 16 articles dans des conférences nationales.

Organisation d'un mini-symposium OMD au congrès Français de calcul des Structures de Giens en Mai 2009.

3 LES APPLICATIONS DU CALCUL INTENSIF

Le Calcul Intensif technologie clé ! L'idée est parfaitement illustrée grâce à la variété d'applications pour lesquelles le calcul intensif est la technologie sine qua non. Sans calcul intensif c'est l'ensemble d'une discipline ou d'industries qui verraient leur développement limité voire bloqué.

L'ANR finance des projets que l'on peut classer en trois catégories: les projets répondant soit à des besoins d'ingénierie, soit à des challenges scientifiques, ou à des challenges sociétaux.

La variété d'applications du calcul intensif est impressionnante. A tel point que le numéro spécial de La Recherche de l'été 2009 intitulait ainsi son éditorial: « Le calcul haute performance va sauver la recherche ! ». Pourquoi ? Parce qu'existe une fertilisation croisée entre le calcul haute performance qui s'appuie sur la recherche fondamentale de pointe la plus récente et l'industrie qui exprime des besoins incessants et de plus en plus exigeants . Le calcul intensif se développe au niveau fondamental, au niveau de la puissance de calcul et permet d'explorer de nouveaux

domaines et d'apporter des analyses et des solutions jusque là insoupçonnées. Ce même numéro de La Recherche présente un aperçu des applications en santé (lutte contre le cancer, révolution dans les neurosciences et analyse du cerveau...) dans le domaine de la sismologie, dans les applications industrielles (simulation des modèles de voitures, mise au point de nouveaux matériaux) etc.

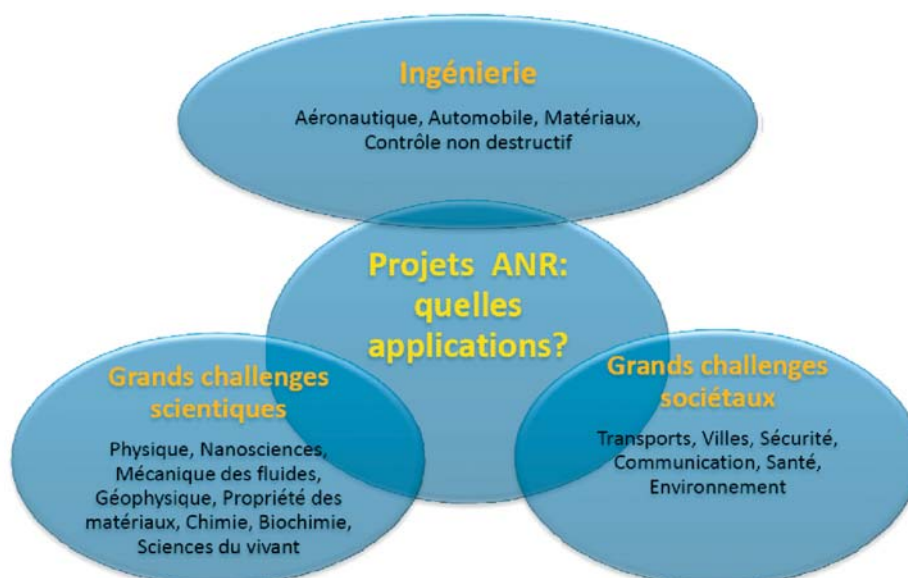
Une typologie d'applications correspondant à des projets financés par l'ANR

◆ Nous avons recensé des projets qui relèvent de l'**ingénierie**. On trouve ainsi différents projets qui se situent dans le secteur de l'aéronautique, de l'automobile, des matériaux ou encore du contrôle non destructif.

◆ Les **challenges scientifiques** ont trait à la physique, aux nanosciences et à de nombreuses disciplines scientifiques.

◆ Enfin, les **challenges sociétaux** sont également essentiels et concernent les transports, la santé ou encore l'environnement...

Le schéma ci-après résume la démarche retenue dans cette troisième partie et précise les nombreux champs d'applications qui seront explicités dans les fiches ci-après.



Les applications liées aux projets ANR figurant dans ce cahier

Ingénierie des systèmes complexes		
	Acronyme et nom du projet	Le projet résumé en un titre
Aéronautique		
APAM	Acoustique et Paroi Multi-perforée	Influence des multi perforations sur l'acoustique des turboréacteurs
COMEDI	Prévision du vieillissement thermo-oxydant de stratifiés composites à matrice organique dédiés à l'aéronautique : prise en compte des couplages mécaniques-diffusifs	Prévoir le vieillissement des matériaux pour accroître la durabilité des aéronefs
CORAYL	Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente avec prise en compte des transferts radiatifs par parallélisation et couplage de codes	Mieux prédire le rayonnement des flammes pour réduire leurs émissions polluantes
LIBRAERO	Large Information Base for the Research in AERODynamics	La mécanique des fluides au service de la conception aérodynamique pour l'industrie
MODELIA	Modélisation électrochimique du comportement des phases intermétalliques dans les alliages d'aluminium : approche multi-échelle de matériaux polyphasés	La modélisation électrochimique pour augmenter la durabilité des matériaux métalliques légers utilisés dans les transports
SIMTUR	Simulation aux grandes échelles Massivement parallèles pour les turbines à gaz	Avenir de la recherche et développement pour les turbines d'hélicoptères, d'avions et de production d'énergie
SPICEX	Simulations numériques hautes performances d'une interaction onde de choc / couche limite en écoulement externe	Repousser les limites applicatives des simulations aérodynamiques en régime compressible
SIMICE	SIMulation des phénomènes d'Ingestion d'eau et de grêle par temps inClément dans les turboréactEURs	Simuler les menaces climatiques (grêle, givre...) et leurs conséquences dans un turboréacteur
Automobile		
CAMPAS	Calculs Massivement Parallèles multicycles / multicylindres de moteurs à piston par une approche SGE	La puissance des supercalculateurs modernes et la SGE au service de moteurs plus propres et économes
FORMEF	Mise en forme, retour élastique et formabilité des aciers à très haute résistance	Maîtrise de la simulation numérique des procédés, vecteur de l'allègement des carrosseries automobiles
OMD2	Optimisation multi-disciplinaire distribuée	Le Calcul Haute Performance au service de la dépollution automobile
STURM4	Simulation de la turbulence à haut Reynolds par multi-maillages et multi-modèles	Calcul parallèle intensif pour simuler la turbulence et le bruit des écoulements
Matériaux		
AMMIS	Analyses multicritères et méthode inverse en simulation énergétique du bâtiment	Analyses multicritères et méthode inverse en simulation énergétique du bâtiment
DPS-MODD	Dual Phase Steels Magnetism Modeling	Du calcul haute performance à la réduction des gaz à effets de serre
AFGRAP	Amorçage d'une fissure de Fatigue dans un Grain d'Agrégat polycristallin et Propagation dans les grains adjacents	Mieux connaître les premiers stades de développement d'une fissure de fatigue dans les matériaux métalliques pour améliorer la tenue en fatigue des structures industrielles
AMELHYFLAM	Amélioration des procédés électrolytiques de production d'hydrogène, de fluor et d'aluminium par modélisation des phénomènes diphasiques et électrochimiques couplés	La modélisation des écoulements de mélanges gaz – liquide et des interactions avec les électrodes : une étape cruciale pour la conception numérique de procédés électrolytiques.
CRACRACKS	Concerted Research for Analysis of CRACK phenomena during solidification of Steels	La solidification des aciers : comment ne pas crier ?
SMACS	Simulation des MACroségrégations en Solidification	L'amélioration de la qualité des produits grâce à la simulation numérique de la solidification

Ingénierie des systèmes complexes (suite)

	Acronyme et nom du projet	Le projet résumé en un titre
Matériaux		
AMUFISE	Analyse multi-échelle de la fissuration des élastomères chargés	La simulation multi-échelle et multi-physique au service de la mobilité durable
PROMETFOR	Réalisation d'outillage rapide en forge par projection métallique	Les nouveaux outillages à hautes performances
TECHNOREMP	Nouvelle technologie de remplissage des matrices pour l'industrie de la métallurgie des poudres	Une nouvelle approche pour remplir des matrices pour la métallurgie des poudres
TRANSBATIBOIS	Transferts dans les parois des bâtiments en bois	Vers un outil numérique d'aide à la conception d'une construction en bois plus performant
Énergie		
ASTER	Adaptive MHD Simulation of Tokamak Elms for ITER	Les instabilités magnétiques au bord des plasmas de fusion dans les tokamaks
VLASOV	Modélisation des plasmas de Fusion thermonucléaire	Etude des interactions onde-particule pour les plasmas de Vlasov
Contrôle non destructif		
INDIAC	Inversion et Diagnostic Automatique en Contrôle Non Destructif	Le contrôle non destructif fait simple !
RADIOLA	Simulation numérique de la radiographie industrielle pour le contrôle non-destructif	Simulation numérique de la Radiographie industrielle pour le contrôle non-destructif
SISTAE	Simulation et Statistiques pour les Essais non destructifs	Garantir l'intégrité des pièces présentant un fort enjeu de sécurité

Programme « SYSCOMM », édition 2008

Projet APAM

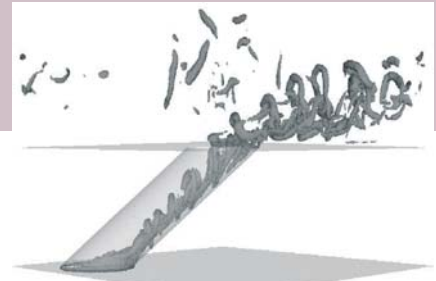
Influence des multi perforations sur l'acoustique des turboréacteurs

Problématique et enjeux industriels

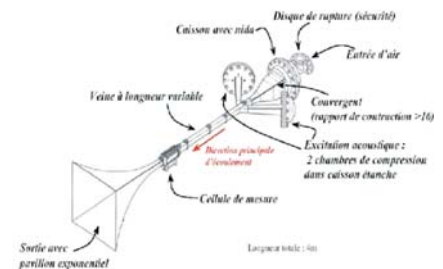
Les parois de la chambre de combustion des moteurs d'avion ou d'hélicoptère doivent être refroidies pour éviter qu'elles se détériorent rapidement. Ceci est réalisé en entourant cette chambre par une seconde chambre, appelée « contournement », contenant de l'air extérieur mis sous pression. Cet air peut de cette façon être injecté par de multiples perforations de petite taille, de l'ordre du demi-millimètre, réparties de façon régulière et disposées en quinconce. Les perforations dans les parois réalisent un couplage entre les chambres de combustion et contournement qui modifie les modes et les fréquences de résonance acoustique du système. Leur influence est donc cruciale pour la prévision des instabilités de combustion dans les moteurs utilisés par l'industrie aéronautique. Ces instabilités résultent d'une interaction entre la combustion et les fluctuations de pression d'origine acoustique et peuvent engendrer de graves dysfonctionnements du moteur pouvant aller jusqu'à sa destruction. La simulation numérique de ce type de phénomène est devenue de ce fait un enjeu industriel majeur suite surtout aux normes environnementales de plus en plus contraignantes relativement aux émissions de gaz dans l'atmosphère. Les phénomènes multi-échelle, résultant des petites perforations, rendent totalement impraticable une approche basée sur une simulation numérique directe. L'étude de la stabilité de la combustion doit donc passer par une modélisation des parois multi-perforées.

Un projet résolument multidisciplinaire

La finalité du projet est claire : développer des méthodes numériques qui prennent en compte les effets de couplage acoustique entre deux chambres à travers une paroi multi-perforée. Cet objectif nécessite de mettre en œuvre des compétences variées et doit passer par la collaboration entre différentes équipes. La construction des modèles mathématiques est effectuée par l'Institut Mathématique de Toulouse. Ces modèles, de type Howe, ne nécessitent notamment pas de maillage des perforations de petite taille et capturent la plupart des phénomènes physiques ayant lieu au niveau des petites échelles. Ils réduisent donc considérablement les coûts de calcul et permettent la prise en compte des parois multi-perforées dans les codes de calculs industriels. Le CERFACS confronte ces modèles à des simulations numériques directes effectuées sur le code AVSP ; l'ONERA réalise des expériences sur banc Aéro-thermo-Acoustique mené à l'aide de mesure non intrusive. Enfin la SNECMA valide ces modèles d'un point de vue industriel.



En haut : un résultat numérique de validation des modèles de type HOWE (issu de S. Mendez and F. Nicoud, 2008) ; En bas : schéma du Banc Aéro-thermo-Acoustique de l'ONERA



Le projet « APAM Acoustique et Paroi Multi-perforée » est un projet de recherche industrielle coordonné par l'Institut de Mathématiques de Toulouse. Il associe aussi le CERFACS, l'ONERA et la SNECMA. Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 400 k€ pour un coût global de l'ordre de 850 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Le calcul haute performance a permis d'effectuer une simulation numérique directe et de vérifier les modèles de type HOWE (J. Dassé et al, 2008, S. Mendez and F. Nicoud, 2008). Dans cette étude préliminaire, la Simulation aux Grandes Echelles (SGE) a permis de confirmer l'apport d'une telle approche instationnaire pour simuler l'écoulement dans une perforation. La réponse acoustique de l'écoulement a en outre été obtenue pour une géométrie simplifiée (2D plan) et permet d'établir le degré de validation du modèle de Howe dans un domaine de fonctionnement compatible avec les hypothèses de ce modèle. Une étude à des configurations plus réalistes reste à mener afin de confronter les nouveaux modèles destinés aux écoulements rencontrés dans les turbines à gaz. Cette phase est tout spécifiquement liée au projet APAM et est en cours de réalisation.

Production scientifique et brevets

Deux papiers ont été soumis dans des revues avec comité de lecture international dont un accepté dans Les Comptes Rendus de l'Académie des Sciences. Nous avons d'autre part participé à la conférence internationale de Mathématiques Appliquées WAVES 2009 où nous avons présenté nos résultats.

Programme « Réseau National Matériaux et Procédés (RNMP) », édition 2005

Projet COMEDI

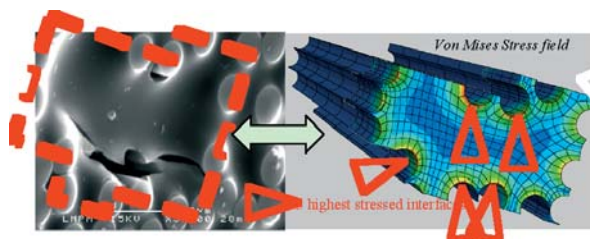
Prévoir le vieillissement des matériaux pour accroître la durabilité des avions

Utilisation de composites à fibres de carbone et à matrice polymère dans des structures aéronautiques « chaudes »

Ce projet s'inscrit dans l'objectif qu'ont les constructeurs aéronautiques d'élargir le champ d'application des stratifiés composites à fibres continues de carbone et à matrice polymère à des pièces dites « chaudes » de structures d'avions civils et d'hélicoptères (de l'ordre de 100°C). Dans une telle configuration, les matériaux sont soumis à des sollicitations sévères et de longue durée : superposition de contraintes mécaniques, vieillissement thermo-oxydant, fatigue thermique... L'objectif du programme est la construction d'outils fiables de prédiction des évolutions de comportement de composites aéronautiques en conditions d'usage. Les principales difficultés découlent des aspects couplés et multi-échelles des phénomènes physiques mis en jeu : expérimentalement, il n'est pas toujours possible de trouver des protocoles d'essais qui permettent de découpler ou d'accélérer ces processus ; théoriquement ces couplages, modélisés en accord avec les principes de la physique, conduisent à des simulations numériques très coûteuses en temps de calcul ; leur intensité doit donc être évaluée afin de déterminer s'il est nécessaire ou non de les conserver dans le cadre des applications envisagées.

Une approche multi-physique et multi-échelles

La démarche a consisté, dans un premier temps, à caractériser les mécanismes d'oxydation de la matrice polymère seule, en présence ou non d'une contrainte mécanique. Pour cela, la réponse à la thermo-oxydation d'échantillons de résine pure a été analysée à l'aide de nombreuses techniques expérimentales. Pour identifier certains paramètres du modèle ainsi que l'intensité des couplages qui apparaissent entre les différents processus physiques de détérioration, un banc d'essai spécifique a été conçu et construit : le banc 'COMEDI' qui permet de tester des échantillons sous pression de gaz neutre ou oxydant ($p \leq 10$ bars), en température ($T \leq 200^\circ\text{C}$) et sous charge. Le comportement de la matrice polymère a alors été représenté à l'aide d'un modèle multiphysique couplé diffusion-réaction-mécanique. Ensuite, un outil numérique dédié a été développé et implanté dans un logiciel de calcul de structures. Cet outil a permis de simuler la thermo oxydation de la matrice dans des 'structures fibres-matrice' représentatives de la morphologie simplifiée ou réelle des composites. Les prévisions du modèle ainsi que son domaine d'applicabilité ont été validés par la comparaison des valeurs expérimentales et simulées de grandeurs locales et globales.



Thermo-oxydation d'un composite à fibres de carbone et à matrice polymère : observation par microscopie à balayage des endommagements induits et simulation numérique correspondante.

Le projet « COMEDI Prédiction du vieillissement thermo-oxydant de stratifiés composites à matrice organique dédiés à l'aéronautique : prise en compte des couplages mécaniques-diffusifs » est un projet de recherche fondamentale coordonné par le Laboratoire de Mécanique et Physique des Matériaux (LMPM-UMR CNRS-ENSMA 6617). Il associe aussi le LIM-ENSAM Paris et EADS IW, Suresnes. Le projet a commencé en décembre 2005 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 586 k€ pour un coût global de l'ordre de 1 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

À partir de la compréhension des mécanismes de thermo-oxydation de la matrice polymère d'un composite industriel, un modèle théorique a été élaboré et identifié, des outils expérimentaux et numériques ont été construits, et une base de données expérimentales a été obtenue pour des vieillissements de très longues durées (>14000 heures). Ces outils sont à même d'aider au choix de composites pour applications « chaudes », et de prévoir leur durabilité. Corollairement, le principe d'accélération des essais de thermo-oxydation par augmentation de la pression d'oxygène a été validé.

Production scientifique et brevets

Ce programme a dès à présent conduit à 5 publications dans des revues à comité de lecture, dont 4 internationales, et à la présentation de 11 communications et publications dans les actes de conférences dont 4 internationales.

Programme « Calcul Intensif et Grilles de Calcul », édition 2005

Projet CORAYL

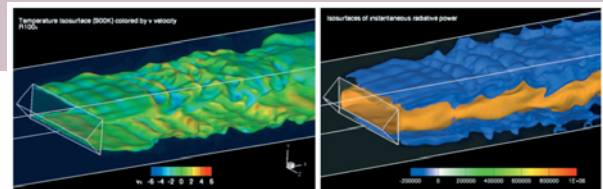
Mieux prédire le rayonnement des flammes pour réduire leurs émissions polluantes

Mieux modéliser la combustion pour optimiser par calcul un système réel

La combustion, qui intervient dans la transformation de 85 % de l'énergie primaire dans le monde, doit encore faire l'objet de recherches approfondies, notamment pour diminuer la consommation de combustible et réduire bruit et émissions polluantes. La simulation numérique est devenue un outil performant pour aider les ingénieurs à optimiser des nouveaux foyers et limiter les tests de prototypes, toujours longs et coûteux, à des configurations proches du produit final. Toutefois, la complexité des phénomènes physiques mis en jeu (mécanique des fluides, réactions chimiques, transferts de masse et de chaleur, acoustique...) fait qu'elle n'est pas encore complètement prédictive, notamment pour les émissions polluantes. Les transferts radiatifs jouent un rôle primordial dans certains systèmes, mais sont souvent négligés ou décrits par des modèles relativement grossiers. Combustion et transferts radiatifs sont des phénomènes physiques de natures fondamentalement différentes: la description des écoulements réactifs repose sur des bilans locaux tandis que le rayonnement fait intervenir des interactions à longue distance, ce qui n'est pas sans incidence sur la formulation des modèles et l'optimisation de leur implantation informatique.

Simulations aux grandes échelles et couplage de codes

La démarche retenue combine deux outils différents: i) la simulation aux grandes échelles, qui consiste à calculer explicitement les plus grosses structures turbulentes de l'écoulement tandis que seul l'effet des plus petites est modélisé, donne accès à une information instantanée qui simplifie la modélisation des transferts radiatifs, essentiellement contrôlés par les zones de gaz chauds; ii) le couplage de codes, via les langages spécialisés CORBA ou PALM, préserve la structure de chaque code. L'ensemble est optimisé pour tourner sur machines parallèles. Le code de combustion AVBP (CERFACS / IFP, parallélisé par domaine) transmet au code de rayonnement DOMASIUM (RAPSO-DEE, parallélisé par bandes spectrales et direction de propagation) champs de température et de fractions massiques d'espèces et récupère en retour champs de puissance radiative et flux radiatifs aux parois. L'équilibrage des charges sur machines parallèles est optimisé en répartissant les processeurs entre les deux codes et en déterminant le pas de couplage. Typiquement, entre la moitié et les deux tiers des processeurs sont dévolus au calcul des transferts radiatifs.



Simulations aux grandes échelles d'une flamme turbulente stabilisée en aval d'un obstacle (écoulement de gauche à droite). Surface instantanée de température (à gauche) et champ instantané de puissance radiative (à droite).

Le projet « CORAYL Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente avec prise en compte des transferts radiatifs par parallélisation et couplage de codes » est un projet de recherche académique coordonné par le laboratoire EM2C du CNRS et de l'Ecole Centrale Paris. Il associe aussi le CERFACS (Toulouse) et RAPSO-DEE (CNRS – Ecole des Mines d'Albi-Carmaux). Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 36 mois: il bénéficie d'une aide ANR de 352 k€ pour un coût global de l'ordre de 1 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Les calculs couplés combustion / rayonnement réalisés ici constitue une première mondiale: simulations aux grandes échelles avec modélisation fine du rayonnement quand les calculs usuels se limitent à des modèles simples; utilisation d'une technique de couplage de codes qui préserve les caractéristiques et l'optimisation de chacun d'eux; calculs sur machines massivement parallèles, jusqu'à 400 processeurs dans le cadre du programme européen DEISA. Les résultats montrent l'importance des transferts radiatifs (modifications des températures, dont l'influence est grande sur les émissions polluantes, et du comportement dynamique de la flamme). Ces calculs, conduits pour une configuration académique (figure) et pour une chambre de combustion de turbine à gaz d'hélicoptère, sont coûteux (deux à trois fois plus que sans rayonnement) mais restent accessibles, notamment dans la perspective de machines parallèles « pétaflops ».

Production scientifique et brevets

Ces travaux ont donné lieu à deux publications internationales (Combustion and Flame et Journal of Heat Transfer), quatre communications dans des congrès internationaux, quatre communications dans des congrès français. Deux autres publications internationales sont en cours de préparation et contiendront une analyse détaillée des derniers résultats, en particulier pour un secteur de chambre de combustion d'une turbine à gaz d'hélicoptère. L'autre retombée importante est la disponibilité d'un outil optimisé de simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente avec prise en compte des transferts radiatifs, de type « semi-industriel » et maintenu comme tel (suivi de versions, maintenance...). Cet outil offre de nombreuses perspectives, notamment pour mieux quantifier l'influence des transferts radiatifs en combustion.

Programme « Technologies Logicielles », édition 2007

Projet LIBRAERO

La mécanique des fluides au service de la conception aérodynamique pour l'industrie

Donner aux industriels les moyens de répondre aux nouvelles normes et d'anticiper par l'innovation

Dans un contexte de simulations multidisciplinaires, la simulation numérique des écoulements fluides (Computational Fluid Dynamics ou CFD en anglais) bloque le cycle de conception par des temps de calcul très largement supérieurs à ceux des autres disciplines. Ces délais prohibitifs sont en partie responsables des interactions rigides et contraignantes qui existent aujourd'hui entre le designer et l'ingénieur calcul. La société Fluorem, une émanation de l'Ecole Centrale de Lyon, a développé une approche qui contourne ce goulot d'étranglement. Le succès de cette approche repose sur une stratégie qui découple la phase de résolution, lourde en ressources humaines et matérielles, de la phase d'exploitation alors réduite en simple interrogation instantanée de bibliothèques générées à l'issue de cette phase de résolution. Cette réduction en bibliothèques directement et instantanément exploitables rend ainsi possible la cohabitation, dans un même environnement, de phénomènes physiques multiples, ramenant la CFD à une échelle de représentation comparable aux autres disciplines. En apportant ainsi une analyse précise et complète très tôt dans le processus de conception, elle autorise une réduction significative de la phase d'essai et de prototypage.

Ramener la CFD à l'échelle des autres disciplines par une technologie de rupture : la paramétrisation

La construction de la bibliothèque s'appuie sur une technologie de dérivation à l'ordre élevé des équations régissant la dynamique des fluides. Le logiciel calcule alors en tout point du domaine les dérivées des grandeurs aérodynamiques caractéristiques de l'écoulement en fonction de paramètres de conception. Les dérivées successives sont stockées dans une base de données (nommée bibliothèques) dont l'exploitation permet d'obtenir instantanément le champ de l'écoulement pour tout nouveau jeu de paramètres. Si cette technologie a déjà fait ses preuves dans un contexte plutôt R&D, l'objectif du projet est d'étendre le domaine de fonctionnalité du logiciel à des problématiques résolument industriels, c'est-à-dire plusieurs millions de degrés de liberté, et compatible avec les logiciels commerciaux déjà présents dans les chaînes industrielles.

Cette innovation va alors se traduire chez l'industriel par une réduction drastique du cycle de conception et de l'accès au marché : obtenir un produit performant dans un délai plus court laisse plus de temps pour la création et le design, ce qui contribue sans aucun doute à la compétitivité.

Le projet « LIBRAERO : Large Information Base for the Research in AERODynamics » est un projet de recherche industrielle coordonné par Fluorem. Il associe aussi l'Ecole Centrale de Lyon, l'Institut Camille Jourdan (Université Lyon 1) et l'IRISA/INRIA. Le projet a commencé en octobre 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 239 k€ pour un coût global de l'ordre de 399 k€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

A cette étape du projet, le focus essentiel a été la technique. Le calcul des dérivées requière la résolution d'un système linéaire très mal conditionné. La structure des matrices obtenues est un véritable défi mathématique, nécessitant des développements poussés sur les méthodes de résolution de systèmes linéaires, sur les pré-conditionnements, sur les techniques de décomposition de domaine et d'accélération de convergence. Ces différents développements ont pu ainsi être mis en œuvre dans cette première phase sur un cas industriel concret, dans une perspective d'optimisation multi-objectif.

Production scientifique et brevets

Plusieurs publications et conférences : 8th European Turbomachine Conference (ETC8) en Autriche pour présenter les résultats obtenus sur le cas industriels, des articles soumis de manière régulière dans le journal Applied Numerical Mathematics (APNUM), ou à l'issue de la conférence Parallel Computational Fluid Dynamics tenue à Lyon dans le cadre de la mécanique des fluides ou encore à l'International Conference Scaling Up and Modeling for Transport and Flow in Porous Media en Croatie, pour présenter les développements sur les techniques d'accélération et de décomposition de domaines.

Programme « Matériaux Fonctionnels et Procédés Innovants », édition 2008

Projet MODELIA

La modélisation électrochimique pour augmenter la durabilité des matériaux métalliques légers utilisés dans les transports

Nouveaux traitements de surface des matériaux métalliques complexes à base d'aluminium

La majeure partie de pièces de structure des avions est généralement réalisée à partir d'alliages d'aluminium polyphasés (ou composites), Al-Cu et Al-Zn-Mg-Cu, caractérisés par de hautes propriétés mécaniques. Cependant l'hétérogénéité de ces matériaux est à l'origine de nombreux défauts dans les systèmes de protection anti-corrosion, nécessaires à l'utilisation de ces alliages de structure.

De plus, l'emploi de métaux lourds ou de solvants organiques lors des opérations de traitements des pièces est soit interdit ou très fortement réglementé. Ainsi, les compagnies de transport sont alors nombreuses à vouloir limiter les traitements de surface sur leurs équipements lors des entretiens réguliers de maintenance de leurs appareils.

L'objectif du projet est la recherche de nouvelles fonctionnalisations de surface des matériaux métalliques complexes polyphasés, permettant une protection anti-corrosion de longue durée et répondant aux règles de la « chimie verte ».

Le niveau de performance des nouveaux procédés initiera une rupture dans les moyens de protection classiques utilisés dans l'industrie en supprimant l'application d'une protection organique supplémentaire sur les pièces de structure en alliages légers d'aluminium. De plus, le gain économique et le gain environnemental dans les ateliers de fabrication sont un enjeu de marché et de compétitivité important pour l'industrie.

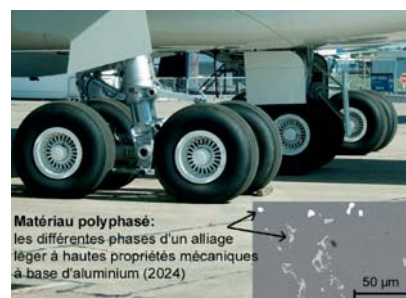
Etude des différentes phases vers la modélisation du comportement chimique du matériau polyphasé

Notre projet consiste donc à développer une approche multi-échelles de ces matériaux polyphasés pour comprendre puis modéliser le comportement chimique et électrochimique des phases intermétalliques dans les alliages d'aluminium de type Al-Cu et Al-Zn-Mg-Cu. La connaissance puis la modélisation permettra de définir la stratégie chimique à adopter dans les traitements de surface pour éviter la formation de défauts, puis à prédire le comportement de ces alliages en service.

La méthodologie développée consistera à synthétiser des phases pures et des alliages modèles pour acquérir les données thermodynamiques et cinétiques à l'échelle macro- ou mésoscopique à l'aide de techniques électrochimiques et de la spectroélectrochimie d'émission atomique.

La seconde phase industrielle du projet consistera à appliquer ces outils de modélisation et de prédiction du comportement chimique de ces matériaux polyphasés au développement de traitements de surface spécifiques à ces matériaux.

Modelia a pour objectif l'étude du comportement chimique des différentes phases des matériaux polyphasés constituant les matériaux de structure des moyens de transport (train d'atterrissage d'un Airbus A340).



Matériau polyphasé : les différentes phases d'un alliage léger à hautes propriétés mécaniques à base d'aluminium (2024)

Le projet « MODELIA : Modélisation électrochimique du comportement des phases intermétalliques dans les alliages d'aluminium : approche multi-échelle de matériaux polyphasés »

est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'Institut Jean Lamour UMR 7198 (Dept CP2S) de Nancy-Université. Il associe aussi le Laboratoire de Physico-Chimie des Surfaces UMR7198 de l'ENSCP-Paris, ainsi que deux partenaires industriels : Messier-Bugatti (Groupe Safran) et Harmony AST. Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 457 k€ pour un coût global de l'ordre de 1 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Le premier résultat marquant en ce début de projet est la réussite de la synthèse de phases métalliques complexes présentes dans ces alliages en quantité importante (plusieurs dizaines de grammes), nécessaire à l'établissement des modèles de comportement. L'étude électrochimique de certaines phases est très prometteuse et ouvre la voie d'autres possibilités pour améliorer et adapter les traitements de surface à ces alliages particuliers.

L'approche multi échelles du comportement chimique des matériaux métalliques polyphasés pourra être étendue à d'autres matériaux polyphasés (alliages Mg-Al, Al-Li, Zn-Al...) pour lesquels l'interdiction des métaux lourds, inhibiteurs de corrosion « universels », impose la recherche d'alternatives. En effet, le comportement en corrosion et la fonctionnalisation de surface d'alliages de magnésium (Mg-Al ou Mg-terres rares) ou de zinc (Zn-Mg) semblent également fortement dépendant du caractère polyphasé de ces alliages.

Production scientifique et brevets

Divers papiers sont d'ores et déjà en préparation sur les résultats de recherche fondamentale du projet. Une participation au congrès annuelle de l'International Society of Electrochemistry est prévue à Nice en 2010.

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2007

Projet SIMTUR

Avenir de la R&D pour les turbines d'avions, d'hélicoptères et de production d'énergie

Vers une révolution dans la R&D des turbines à gaz : un enjeu écologique et économique

Les turbines à gaz sont présentes dans le milieu aéronautique (hélicoptères, avions) et sont utilisées également pour la production d'énergie. Leurs développement et optimisation sont donc un enjeu majeur pour le XXI^{ème} siècle. Le projet SIMTUR vise à faciliter la R&D dans ce domaine, grâce à la simulation numérique et notamment l'utilisation de la méthode dite de « Simulation aux Grandes Echelles » (SGE). En s'appuyant sur le calcul massivement parallèle, cette méthode permet d'étudier des verrous tels que les instabilités thermo-acoustiques, les allumages et extinctions de flammes ainsi que les limites d'opérabilité de ces systèmes ou la prédiction des polluants.

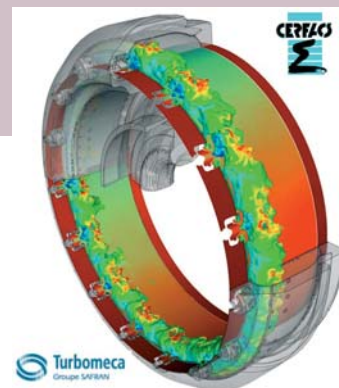
Les développements du projet permettront de prendre en compte n'importe quel système complexe et d'en étudier le fonctionnement avec des temps de retour raisonnables grâce au calcul massivement parallèle. La plateforme choisie est le code AVBP, copropriété du CERFACS et de l'Institut Français du Pétrole. Ce code massivement parallèle déjà utilisé par des centres de recherches nationaux et européens mais aussi par des industriels tels que le groupe SAFRAN permettra de faire le lien entre la recherche fondamentale qui utilise déjà la SGE et le monde industriel qui la découvre.

Le chemin de la SGE vers l'industrie...

La démarche du projet repose sur l'utilisation conjointe d'optimisations de plusieurs points clefs d'une simulation numérique simplifiant au maximum la charge de l'utilisateur afin qu'il puisse se concentrer sur la problématique de son étude.

Les outils et les méthodes développés permettront de guider le choix de l'utilisateur quant à la résolution de son maillage tout en lui donnant la liberté de prendre en compte autant que possible la complexité des vrais systèmes (et non une version simplifiée). La modélisation de la combustion est étudiée afin de permettre une prédiction fiable des polluants. Et une méthodologie logicielle sera définie afin de réduire au maximum la charge utilisateur pour le traitement des données permettant des temps de retour réalistes pour un cycle de Recherche et Développement.

Simulation aux Grandes Echelles appliquée à un démonstrateur de chambre aéronautique : Champ de pression (cylindre) et isosurface de température colorisée par la vitesse.



Le projet « SIMTUR Simulation aux grandes échelles Massivement parallèles pour les turbines à gaz » est un projet de recherche fondamentale coordonné par le CERFACS. Il associe aussi le laboratoire EM2C, le laboratoire CORIA, Snecma Villaroche et Turbomeca. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 521 056 k€ pour un coût global de l'ordre de 1M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Le premier résultat marquant à cette étape du projet est la simulation d'un démonstrateur de chambre de combustion complète avec un maillage de 93 millions d'éléments sur 4 095 processeurs de type BlueGene P (IBM) grâce aux diverses méthodes développées. Ce calcul aurait été impossible sans le projet SIMTUR de part sa complexité et ses besoins informatiques. De plus un critère physique de maillage ainsi qu'un modèle de combustion adaptés au problème ont été développés, ce qui permet d'envisager des avancées notables dans la suite du projet.

Production scientifique et brevets

Les travaux du projet ont fait l'objet de conférences et de publications, par exemple :

- ◆ B. Fiorina, O. Gicquel and D. Veynante. Turbulent flame simulation taking advantage of tabulated chemistry self-similar properties. Proc. Combust. Inst. Vol 32(2) pp 1687-1694 (2009)
- ◆ O. Esnault, R. Vicquelin, M. Boileau, B. Fiorina and O. Gicquel. Optimization of DNS/LES explicit solvers for combustor simulations using local time-stepping. 4th European Combustion Meeting, Vienna, Austria. (2009)
- ◆ R. Vicquelin, B. Fiorina, N. Darabiha, D. Veynante, V. Moureau and L. Vervisch. Coupling tabulated chemistry with large eddy simulation of turbulent reactive flows. Proceedings of the 2008 Summer Program. Center For Turbulence Research, Stanford University.
- P. Wolf, G. Staffelbach, L.Y.M. Gicquel and T. Poinot, Massively Parallel Simulation of Gas Turbines, Conference series (180), Journal of Physics, 2009.

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2007

Projet SPICEX

Repousser les limites applicatives des simulations aérodynamiques en régime compressible

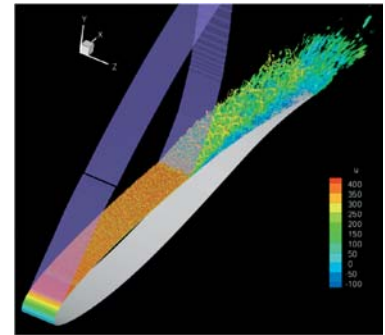
Vers la simulation des grandes échelles du tremblement sur une voilure d'avion

Lorsque l'on cherche à simuler un écoulement turbulent en utilisant une modélisation statistique de la turbulence de type RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) couramment utilisées dans l'industrie, certains types d'écoulements demeurent "résistants" : les écoulements turbulents décollés ou en présence d'une onde de choc. Or, dans le domaine aéronautique, il est fréquent de rencontrer ces deux types de configurations dans un même écoulement. Par exemple, l'interaction entre une onde de choc, une couche limite, le plus souvent turbulente, et les décollements résultants de cette interaction sur l'extrados d'une aile d'avion en régime transsonique peut conduire à des instationnarités basses fréquences : on parle de régime de tremblement, qui limite l'enveloppe de vol des avions civils. Ce phénomène de tremblement survenant à grand nombre de Reynolds avec un caractère fortement instationnaire et tridimensionnel, il n'est pas réaliste de reproduire ce phénomène par une Simulation Numérique Directe (SND) avec les supercalculateurs actuels, pour des raisons de coût de calcul. L'objectif du projet est donc de proposer des modélisations de la turbulence et des méthodes numériques pour réaliser une Simulation des Grandes Echelles (SGE) ou une simulation hybride RANS/SGE de cet écoulement complexe.

Proposer des modélisations numériques adaptées au calcul intensif

Ce projet s'intéresse à la simulation des écoulements transsoniques où une onde de choc interagit avec une couche limite turbulente qui posent un double défi à la fois en terme numérique (schéma à la fois précis et efficace) et en terme de modélisation de la turbulence (difficulté pour résoudre toutes les échelles spatio-temporelles de l'écoulement). Le choix des méthodes et stratégies numériques est crucial dans ce type de simulation intensive. Des méthodes numériques de haute précision sont mises en œuvre avec un traitement spécifique pour la capture des ondes de choc afin d'augmenter la résolubilité de l'algorithme et donc de minimiser son coût global. L'étude de la turbulence dans différentes configurations caractéristiques permettra de mieux comprendre ses caractéristiques en régime compressible, plus particulièrement lors de l'interaction avec une onde de choc. Les configurations visées représentent un défi en terme de calcul intensif dans la mesure où une interaction onde de choc / couche limite turbulente sur une voilure d'avion est un écoulement instationnaire, tridimensionnel à haut nombre de Reynolds. Afin de pouvoir réaliser la prédiction de ces écoulements avec des simulations des grandes échelles, il est nécessaire de réaliser des calculs avec des grilles de plusieurs dizaines de millions de points. Le développement de méthodes compatibles avec les architectures parallèles en plein essor devient un atout indispensable pour repousser les limites applicatives.

Simulation des Grandes Echelles des oscillations auto-entretenues basses fréquences entre une onde de choc et une couche limite turbulente sur une voilure d'avion OAT15A (Une iso-valeur du critère Q colorée par la vitesse longitudinale et une iso-valeur pour la pression, en mauve, qui indique la position instantanée du choc) à $M = 0.73$.



Le projet « SPICEX : Simulations numériques hautes performances d'une interaction onde de choc / couche limite en écoulement externe » est un projet de recherche fondamentale coordonné par Arts et Métiers ParisTech. Il associe aussi l'Institut National Polytechnique de Toulouse, l'Université de Poitiers, l'ONERA et l'Université d'Orléans. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 485 k€ pour un coût global de l'ordre de 998 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Les premiers résultats à cette étape du projet concernent l'étude de dispositifs de capture de choc, la création d'une turbulence synthétique pour alimenter l'entrée du domaine de calcul et l'analyse a priori et a posteriori des modèles de fermeture pour les échelles de sous-maille à partir de la simulation numérique directe d'une interaction onde de choc/couche limite turbulente sur une plaque plane (70 millions de points sur un supercalculateur parallèle). Une première simulation des grandes échelles ambitieuse (10000 heures NEC SX-8 soit plus de 4 ans de calcul sur un simple PC) a permis une confrontation encourageante avec une base de données expérimentales.

Production scientifique et brevets

Plusieurs papiers ont été présentés dans des congrès internationaux. Un papier à l'ICCFD 2008 à Séoul retrace les premiers développements sur la capture de choc. Quatre papiers présentent l'analyse de la turbulence pariétale en régime compressible ainsi que les analyses a priori et a posteriori des modèles de turbulence en 2009 : 1 TSFP à Séoul, 2 CFM/LESTAC à Marseille et 1 THMT à Rome. Deux papiers décrivent la simulation du tremblement pour un profil OAT15A : DLES à Trieste en 2008 et TI en 2009 à Sainte Luce.

Programme « Technologies Logicielles », édition 2007

Projet SIMICE

Simuler les menaces climatiques (grêle, givre...) et leurs conséquences dans un turboréacteur

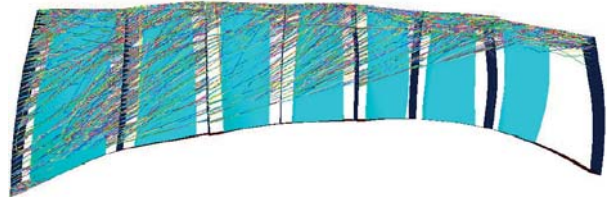
Mieux comprendre les phénomènes d'ingestion de grêle et de givrage dans les turboréacteurs et en perfectionner les outils de simulation numérique

La traversée d'un nuage givrant, d'une tempête de pluie ou d'un orage de grêle peut s'avérer critique pour un avion, et en particulier pour ses moteurs. Afin d'assurer un fonctionnement sûr du moteur et de répondre aux exigences des autorités de certification, il est nécessaire de prendre en compte ces phénomènes dès la phase de conception : en comprendre la physique et disposer d'outils de simulation fiables est donc un enjeu important pour les motoristes. Le projet SIMICE a pour but de mettre en place une chaîne de simulation complète du moteur en 3D pour l'ingestion d'eau givrante et de grêle. Les modèles physiques développés sont basés sur des essais réalisés dans le cadre du projet (essais d'impact de grêlons sur plaque plane et essais de givrage sur une configuration moteur simplifiée).

La validation de cette chaîne de calcul permettra de prédire les risques liés aux phénomènes d'ingestion et donc d'améliorer la conception des moteurs. De plus, la fiabilité de la chaîne permettra de remplacer certains essais réalisés jusqu'à présent par une étude numérique et donc de réduire notablement les coûts.

Mise en place de modèles et corrélations physiques à partir d'études expérimentales ; Intégration de ces développements dans les codes de calcul.

La démarche utilisée consiste d'abord à adapter un code de trajectographie existant à une utilisation dans les turboréacteurs et aux particules de grêle. Pour cela, des développements sont nécessaires afin de prendre en compte la succession d'étages fixes et tournants des réacteurs : une telle fonctionnalité, dite plan de mélange, a donc été mise en place. De plus, des essais d'impact de grêlons sur une plaque plane permettent d'élaborer un modèle physique statistique de fragmentation et de rebonds des particules. Enfin, un modèle de fusion de la grêle a été mis au point et incorporé dans le code. Ces adaptations permettent d'obtenir un code capable de calculer les trajectoires de particules de grêle à travers le moteur. Il sera validé sur des données d'essais moteur. Concernant l'aspect givrage, des tests d'ingestion d'eau en conditions givrantes sur une configuration moteur simplifiée ont permis d'obtenir une base de données solide de résultats expérimentaux. Une analyse rhéologique de la glace accrétée lors de ces essais est prévue. Ces études constituent un bon moyen d'améliorer et de valider le code d'accrétion de glace actuellement disponible.



SIMICE a pour but de mettre en place un code de suivi de trajectoire de la grêle dans un turboréacteur. Ici, un exemple de trajectoire de particules à travers le compresseur basse pression obtenu grâce au code de calcul.

Le projet « **SIMICE SIMulation des phénomènes d'Ingestion d'eau et de grêle par temps inClément dans les turboréacteurs** » est un projet de recherche industrielle coordonné par Snecma. Il associe aussi l'ONERA (Centre de Toulouse), le Laboratoire de Glaciologie et Géophysique de l'Environnement (LGGE) de Grenoble et l'Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique (GeM) de Nantes. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 30 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 466 k€ pour un coût global de l'ordre de 1 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Les principaux résultats du projet sont :

- ◆ La mise en place d'un modèle de fragmentation et de rebonds de la grêle issu des essais d'impact de grêlons
- ◆ L'intégration d'une fonctionnalité « plan de mélange » pouvant gérer la succession d'étages fixes et tournants du moteur
- ◆ La réalisation d'un code de calcul de suivi de trajectoire de particules de grêle à travers le turboréacteur qui sera validé ultérieurement par des essais sur moteur complet.
- ◆ L'obtention d'une base de données « mesures de dépôts de givre » issue des essais partiels en conditions givrantes qui permettront de fiabiliser le code d'accrétion de glace actuel.

Le code de trajectographie sera par la suite validé sur diverses configurations moteur.

Production scientifique et brevets

Deux articles sont en cours de rédaction : ils concernent les résultats et modèles obtenus grâce aux essais d'impact de grêle. L'un sera soumis à Cold Regions Science and Technology et l'autre à l'International Journal of Impact Engineering.

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2006

Projet CAMPAS

La puissance des supercalculateurs modernes et la SGE aux services des moteurs plus propres et économes

Mettre ne place des outils pour permettre une meilleure compréhension des interactions cylindre à cylindre et leur impact sur la consommation et les émissions polluantes.

Le monde automobile, tiré par la réduction des cycles de recherche et développement mais aussi par les normes de pollution de plus en plus contraignantes, est en perpétuelle quête de méthodes innovantes permettant d'accélérer le processus d'évaluation et d'optimisation de nouveaux concepts. La simulation numérique, dont l'utilisation ne cesse de s'intensifier, a permis d'effectuer de nets progrès en ce sens. Il reste cependant des domaines dans lesquels d'importants gains pourraient résulter de la disponibilité d'outils et méthodologies innovants permettant de simuler des géométries réelles complexes de manière prédictive. Les interactions cylindre à cylindre sur un moteur réel et leur impacts directs sur le rendement (donc la consommation) et les émissions polluantes des moteurs à pistons au travers des variabilités cycliques induites sont parmi les phénomènes qui à ce jour restent mal compris et maîtrisés par manque d'outils et de méthodologies pour les traiter dans un contexte industriel. De même, au vu des maillages nécessaires à décrire ces géométries complexes en mouvement, ceci n'est pas accessible industriellement sans l'utilisation de machines massivement parallèles.

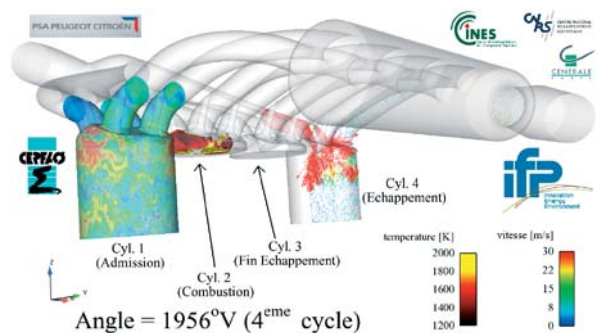
Développer les outils et méthodologies de SGE moteur massivement parallèle sur base du code AVBP

Un calcul multi cycle d'un monocylindre avait été réalisé en 2006 avec le code AVBP dans le cadre du projet européen LESSCO2. CaMPaS a pour objectif ambitieux de permettre d'envisager l'étape suivante : le calcul multi cycle d'un multicylindre. Cela nécessitant de nombreux développements d'outils et de méthodologies. En effet, la gestion du maillage mobile (du fait des mouvements des soupapes et des pistons), ainsi que la masse importante de données générée, nécessite le développement d'outils spécifiques permettant :

- ◆ la gestion optimale des calculs massivement parallèles sur de gros maillages mobiles : partitionnement, gestion des mouvements (et en particulier automatique), outil parallèle et d'ordre élevé permettant d'interpoler les résultats de calculs (champs 3D) d'un maillage vers un autre.
- ◆ l'analyse en ligne des résultats : extraction en ligne de champs de variables sélectionnées, analyse des interactions acoustiques entre cylindres.

Le code de calcul AVBP, au cœur de tous les travaux, est un code SGE cell-vertex utilisant des schémas numériques volumes

finis et éléments finis. Sa structure de données permet d'utiliser des maillages structurés, non structurés ou hybrides. L'aspect parallélisations est basée sur la bibliothèque MPL développée au CERFACS.



Visualisation des divers temps caractéristiques moteur en fonction du cylindre. La flamme de la toute première combustion simulée est visible dans le cylindre 2.

Le projet « CAMPAS Calculs Massivement Parallèles multi-cycle / multi-cylindre de moteurs à piston par une approche SGE » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'IFP. Il associe aussi PSA Peugeot-Citroën, le CERFACS, le CINES, l'École Centrale Paris et le CNRS (via le laboratoire EM2C), et est labellisé par le pôle de compétitivité SYSTEM@TIC. Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 42 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 310 k€ pour un coût global de l'ordre de 810 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Mise en place des outils/méthodes de gestion de maillages complexe : ITC pour le mouvement de maillage sur multicylindre, partitionnement parallèle de maillage en ligne, méthode d'interpolation parallèle. En première mondiale, calcul SGE de 3 cycles moteurs entraînés (i.e. sans combustion) sur multicylindre. Développement d'un savoir-faire français incontestable dans la maîtrise de calculs massivement parallèles sur des configurations complexes tout en ouvrant la voie vers l'exploitation industrielle de la SGE sur des configurations moteur complexes.

Production scientifique et brevets

Des publications sont prévues. Elles ne peuvent s'effectuer tant que le calcul multi cycle multicylindre avec combustion sera terminé, marquant l'aboutissement du projet et l'assemblage des contributions indispensables de tous les partenaires afin de mettre en place la chaîne de calcul utilisée (prétraitement, calcul et post-traitement).

Programme « Réseau National Matériaux et Procédés (RNMP) », édition 2005

Projet FORMEF

Maîtrise de la simulation numérique des procédés, vecteur de l'allègement des carrosseries automobiles

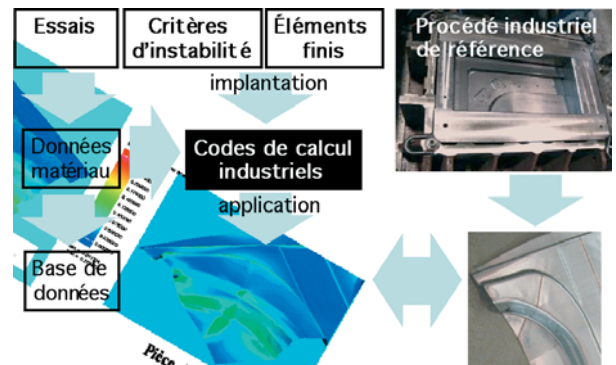
Développement des logiciels de simulation de l'emboutissage vers la prise en compte fiable des nouveaux aciers

Les aciers à très haute résistance (aciers THR) répondent aux impératifs contradictoires d'allègement et de sécurité auxquels est confrontée l'industrie automobile dans le contexte du développement durable. La simulation numérique est un outil de prédilection pour la réduction des coûts et délais lors de l'industrialisation de tels nouveaux matériaux. Cependant, leurs caractéristiques mettent en défaut à plusieurs niveaux les logiciels industriels de simulation de la mise en forme des pièces de carrosserie automobile, dont les prédictions perdent ainsi en fiabilité. Pour améliorer le développement actuel des logiciels de calcul par éléments finis, le projet propose de lever les verrous qui entravent actuellement la capacité de prédire les défauts d'emboutissage pour les aciers THR :

- ◆ développement de technologies éléments finis adaptées aux difficultés de l'emboutissage,
- ◆ développement de critères de striction, plissement, localisation de la déformation, implantation de ces développements au cœur des logiciels commerciaux de simulation,
- ◆ développement d'essais expérimentaux spécifiques de caractérisation et de validation.

Mettre en évidence – comprendre – modéliser – simuler les défauts d'emboutissage : une approche complète orientée vers la simulation numérique

Pour lever ces verrous, le projet FORMEF adopte une approche portant sur les trois aspects théorique, numérique et expérimental. Cette démarche permet la confrontation de plusieurs approches et leur validation, afin de rendre mesurables les avancées réelles apportées par les développements proposés. L'apport le plus fondamental du projet concerne la mise en place d'une technologie d'éléments finis adaptée aux exigences du procédé d'emboutissage. Un autre développement théorique important concerne la prévision des instabilités plastiques limitant la formabilité des tôles. Les éléments finis développés, ainsi que les critères de prédiction des défauts en mise en forme sont implantés dans les logiciels de simulation utilisés par les industriels de l'automobile. Ils sont couplés aux modules décrivant les lois de comportement non linéaires. Du point de vue expérimental, le projet vise à remplir le vide constaté actuellement dans le domaine des essais sur tôles fortes en nuances d'acier à haute résistance, du fait de la capacité insuffisante des machines d'essais actuelles. Une méthode d'identification automatique des paramètres sera aussi développée.



Des développements complémentaires, autour de la simulation numérique, jusqu'à la validation sur pièce type industrielle.

Le projet « FORMEF Mise en forme, retour élastique et formabilité des aciers à très haute résistance » est un projet de recherche appliquée coordonné par le laboratoire LPMM des Arts et Métiers ParisTech – Centre de Metz. Il associe aussi le laboratoire LaMCoS de l'INSA Lyon et ArcelorMittal Research. Le projet a commencé en avril 2006 pour une durée de 42 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 212 k€ pour un coût global de l'ordre de 900 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

La mise en évidence des défauts d'emboutissage des aciers THR nécessite des moyens expérimentaux d'une capacité plusieurs fois supérieure aux standards actuels des laboratoires ; construire ce type de moyens d'essais a été le premier résultat concret du projet. La modélisation du comportement et notamment des limites de formage a atteint un bon niveau de maturité et ces modèles sont intégrés dans des logiciels de simulation industriels – dont la capacité prédictive est ainsi considérablement accrue. Enfin, le développement de nouveaux éléments finis adaptés aux tôles épaisses devrait apporter une véritable rupture dans la qualité des résultats de simulation – en maîtrisant le temps de calcul. Ces travaux ont permis d'initier de nouveaux partenariats industriels, avec des constructeurs automobiles et des éditeurs de logiciels.

Production scientifique et brevets

Les travaux du projet ont déjà donné lieu à sept publications dans des journaux scientifiques internationaux prestigieux (Int. J. Numerical Methods Engineering, Int. J. Plasticity...) et ont été présentés à une douzaine de conférences scientifiques internationales (Numisheet, Numiform, Esaform...).

Programme « Conception et Simulation », édition 2008

Projet OMD2

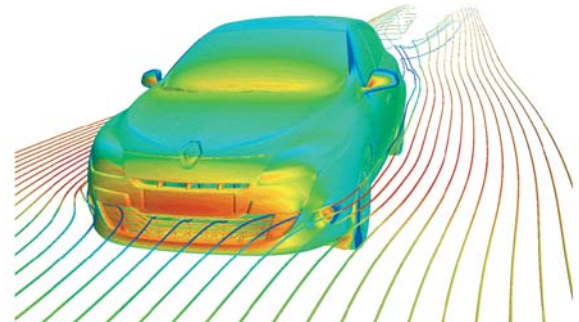
Le Calcul Haute Performance au service de la dépollution automobile

L'essor de l'optimisation numérique pour l'automobile

L'avènement du Calcul Haute Performance profite à la recherche scientifique, aux services et en premier lieu à l'automobile. Dans un contexte économique et environnemental sévère (émergence des pays Low Cost, loi sur le CO2, réglementation EURO VI sur les émissions polluantes...) cette industrie est obligée de développer des technologies, processus et méthodes d'ingénierie en rupture avec l'existant, en complexifiant de plus en plus les modèles numériques (aérodynamique, combustion interne, crash...). Pourtant, les nombreux outils industriels d'optimisation de systèmes complexes multidisciplinaires ont encore aujourd'hui un impact limité sur la conception alors même que, pris séparément dans chaque discipline, les outils s'améliorent graduellement. La plupart des applications de l'optimisation numérique ne se font que sur des petits périmètres (composants élémentaires) et pas toujours de façon systématique. Nous identifions plusieurs raisons parmi lesquelles: le manque de connexion entre les outils, entre les services de conception et de calcul, le manque de précision et la lourdeur de la simulation numérique, le manque d'automatisation des chaînes de calcul...

Le passage à l'échelle de l'optimisation multi-disciplinaire

Le projet OMD2 contribue à la levée de ces verrous techniques en visant le passage à l'échelle des méthodes de conception numérique pour permettre une intégration industrielle généralisée (au niveau système) et plus ambitieuse (robustesse, multidisciplinarité) de l'optimisation. Nous nous focalisons sur les verrous suivants: (1) le développement d'une plateforme ouverte (simplification des interfaces, ouverture des stratégies d'optimisation en SCILAB, encapsulation algorithmique, optimisation collaborative); (2) le développement des techniques d'optimisation robuste par planifications d'expériences numériques (prise en compte des aléas de calcul et de conception, automatisation et parallélisation des stratégies, asynchronisme, convergence partielle, évolution à la très grande dimension, calcul des dérivées, adéquation qualité/coût/délai); (3) l'applicabilité industrielle (automatisation et consolidation de la chaîne numérique, open source dans un contexte fortement distribué, validation sur des cas industriels complexes non confidentiels).



Ecoulement fluide autour d'une Megane 3 © RENAULT

Le projet « OMD2 Optimisation multi-disciplinaire distribuée » est un projet de recherche industrielle coordonné par RENAULT. Il associe aussi les PME CD-ADAPCO, SIREHNA, ACTIVEEON, et les laboratoires publics INRIA, ENSM-SE, UTC, ECP, IRRCCYN, ENS CACHAN. Le projet a commencé en juillet 2009 pour une durée de 36 mois: il bénéficie d'une aide ANR de 2,8 M€ pour un coût global de l'ordre de 7,3 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Nous proposons de mettre à disposition de la communauté scientifique une plateforme collaborative ouverte en optimisation multidisciplinaire qui mette en œuvre les technologies les plus récentes en matière de calcul parallèle et distribué. Une évaluation industrielle précise sera effectuée sur la base de cas test automobiles réels, complexes et à fort enjeu environnemental et économique, en confrontant les résultats de l'OMD avec ceux issus du processus standard de conception industrielle en vigueur chez RENAULT.

Production scientifique et brevets

Le projet OMD2 s'appuie sur les fondamentaux scientifiques développés au cours du précédent projet OMD, qui a fait l'objet de deux récents ouvrages (éditions Hermès et Wiley) regroupant exemples industriels, réalisations logicielles et introduction à la problématique de l'optimisation multidisciplinaire.

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2006

Projet STURM4

Calcul parallèle intensif pour simuler la turbulence et le bruit des écoulements

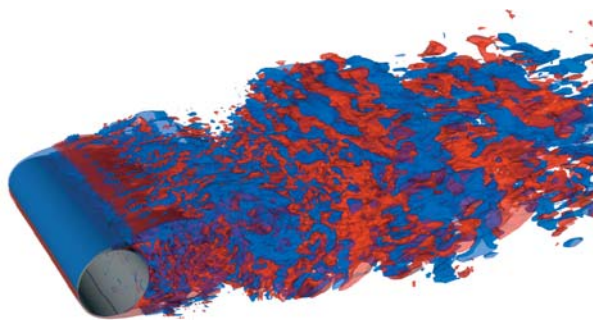
Simulations d'écoulements turbulents sur maillages composites et calcul parallèle intensif

La modélisation RANS stationnaire de la turbulence ne permet pas de représenter la dynamique spectrale des fluctuations turbulentes qui est essentielle pour modéliser finement des phénomènes comme la fatigue thermique, l'aéroacoustique ou les interactions fluide/structure. Seules des modélisations instationnaires de type LES permettent d'accéder à ces informations. Néanmoins ce type de calcul devient particulièrement coûteux à grand nombre de Reynolds car de très petites structures turbulentes doivent alors être captées par des maillages de plus en plus fins. Plusieurs points deviennent alors essentiels. Tout d'abord la qualité des maillages au niveau des parois qui conditionne souvent dans les configurations industrielles la représentativité globale de l'écoulement. Ensuite la possibilité d'utiliser des maillages composites multi-domaines qui permettent de s'adapter aux géométries complexes ou d'envisager des couplages de modèles de turbulence entre domaines. Et enfin, l'introduction du calcul parallèle qui autorise à la fois d'accéder à beaucoup de mémoire et de réduire les temps de calcul. Ce sont ces trois points qui sont au cœur des objectifs du projet STURM4.

Application de la simulation aéroacoustique pour déterminer le bruit rayonné par des profils en écoulement

Les simulations aéroacoustiques qui sont conduites dans le projet sont de deux ordres. D'une part on trouvera des simulations aéroacoustiques dites hybrides qui utilisent des résultats d'écoulements turbulents incompressibles instationnaires de type LES. Ces résultats sont ensuite incorporés comme source dans des modèles de rayonnement adaptés à chaque configuration. D'autre part on trouvera des simulations aéroacoustiques dites directes dans lesquelles le bruit rayonné est directement obtenu à partir de la résolution instationnaire des équations des fluides turbulents compressibles. Cela requiert des méthodes numériques de très haute précision.

Pour chacune de ces approches, un code de calcul adapté est utilisé. Dans le premier cas, c'est Code_Saturne d'EDF R&D qui est concerné. Et dans le second cas, c'est Code_Safari d'EDF R&D. Ces deux codes sont appliqués au rayonnement acoustique de profils en écoulement issus de cas d'étude Valéo pour l'optimisation de pales de ventilateurs.



Code_Saturne – Champ de vorticité engendré par un cylindre en écoulement transverse.

Le projet « STURM4 Simulation de la turbulence à haut Reynolds par multi-maillages et multi-modèles » est un projet de recherche industrielle coordonné par le CNRS/LaMSID. Les autres partenaires sont EDF R&D, Valéo et l'Université Paris 6. Il associe également l'Université de Manchester et l'Ecole Centrale Lyon. Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 682 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,3 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Une thèse et trois post-docs ont été engagés dans le projet. Des résultats de référence ont été obtenus sur des configurations reconnues et documentées dans la littérature : le cas du cylindre en écoulement à nombre de Reynolds 3900, le cas de l'interaction entre un cylindre et un profil NACA0012. Deux calculs sont en cours sur la même configuration d'un profil Valéo afin d'en calculer le rayonnement acoustique : l'un avec Code_Saturne, l'autre avec Code_Safari. Les outils mis en œuvre dans le projet et les capacités de calcul mobilisées permettront de fournir de nouveaux résultats dans le domaine.

Production scientifique et brevets

Plusieurs rapports d'avancement ont été rédigés. Une publication a été acceptée dans l'I. J. Heat and Fluid Flow. Plusieurs communications ont été présentées dans des conférences internationales (AIAA Aeroacoustics Conference, ERCOFTAC ETMM7, Overset Composite Grid symposium). Plusieurs publications sont en préparation notamment pour l'AIAA Journal.

Programme « HABISOL », édition 2008

Projet AMMIS

Analyses multicritères et méthode inverse en simulation énergétique du bâtiment

Objectif et force du projet

Le projet consiste à créer un modèle de calcul, qui s'appuyant sur une méthode inverse, permet d'estimer les besoins de performance d'un bâtiment (enveloppe, inertie...) à partir de l'esquisse et d'un fichier météo (charges externes), pour atteindre un niveau de confort et de consommation donné.

Cette méthode de calcul sera adaptée à un logiciel à destination des architectes pour intégrer la problématique énergétique au plus tôt dans les phases de conception.

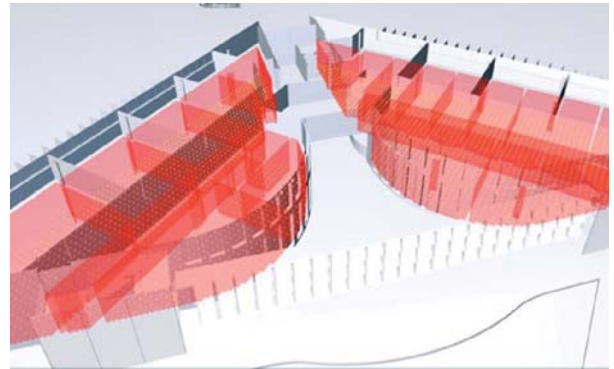
La force de ce projet est de s'appuyer sur les méthodes inverses pour proposer une nouvelle approche de l'aide à la décision pour les architectes et/ou les maîtres d'ouvrage. Il s'agit à partir d'un objectif de consommation d'énergie et d'un objectif de confort par zone thermique dans un bâtiment de remonter aux paramètres de construction nécessaires à l'obtention de ces deux grandeurs. Le travail portera sur la réalisation du modèle inverse de calcul. Etant donné le problème à résoudre, il est évident qu'il y a le risque d'une infinité de solutions. Cependant la physique, la réglementation et la technologie des bâtiments permettent de borner ce problème à la réalité.

Des solutions au service de l'architecte

La création d'un outil permettant d'obtenir, au plus tôt dans le projet architectural, le besoin de performance de l'enveloppe, le besoin d'inertie du bâtiment, et la gestion des apports solaires, à partir d'une performance énergétique souhaitée, d'une esquisse et des données météo, donnera à l'architecte des informations précieuses dans la première phase de création du bâtiment.

Un des problèmes à résoudre est de proposer des solutions pour sélectionner rapidement les types constructifs qui pourront rentrer dans l'espace de liberté calculé. Par exemple, estimer l'épaisseur d'isolation nécessaire et le type de fenêtre suivant la performance globale du bâtiment voulue. Une optimisation en fonction du coût des éléments permettra d'orienter les choix. Une bibliothèque devra donc être créée suivant les éléments de constructions utilisés.

Cet outil sera un guide et ne fera qu'orienter l'architecte dans ses choix ou l'amener à réfléchir sur la validité de ses esquisses. Il gardera toute liberté sur ses choix en matière de construction, rien n'est imposé. L'idée est de connaître rapidement les impacts d'un choix architectural afin de chiffrer les besoins de performance de l'enveloppe et donc leur coût pour atteindre une certaine performance globale du bâtiment.



Simulation énergétique 3D d'un bâtiment tertiaire

Le projet « AMMIS : Analyses multicritères et méthode inverse en simulation énergétique du bâtiment » est un projet de recherche industrielle coordonné par le centre ARMINES de l'école des mines d'Albi. Il associe aussi un industriel TBC « générateur d'innovation », ainsi que des laboratoires publics : le TREFLE (UMR 8508, ENSAM, ENSCPB, Université Bordeaux 1), le LEP-TIAB (Université de La Rochelle), et le Centre Énergétique et Procédés (Ecole des Mines de Paris). Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 498 k€ pour un coût global de l'ordre de 1 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Le résultat sera la mise au point d'une méthodologie scientifique permettant de réaliser des calculs sur les besoins de performance énergétique du bâtiment à partir d'une esquisse.

Cette méthode, une fois validée, sera adaptée pour être diffusée dans un environnement logiciel existant ou à développer.

L'impact d'un tel outil sur la conception des bâtiments sera bénéfique sur les premiers choix des projets de construction sans brider la création de l'architecte, cela ne se substituera pas au travail aval des bureaux d'études qui seront toujours nécessaires pour aider à la conception détaillée.

Production scientifique et brevets

Aucune publication ni brevet publié à ce stade d'avancement du projet.

Programme « Matériaux Fonctionnels et Procédés Innovants », édition 2008

Projet DPS-MODD

Du calcul haute performance à la réduction des gaz à effets de serre

Utiliser le calcul haute performance pour produire les aciers de demain

La nécessité de réduire les émissions de dioxyde de carbone conduit à demander des pièces automobiles plus légères. Néanmoins, il n'est pas question de sacrifier les capacités de ces aciers à protéger les passagers en cas d'accident.

Les sidérurgistes tels qu'ArcelorMittal développent actuellement une nouvelle génération de produits plats en aciers Dual Phase qui répondent à ces besoins. Si les performances d'usage de ces aciers de nouvelle génération sont améliorées, leurs propriétés sont plus exposées aux variations des paramètres de fabrication que les aciers conventionnels. Il en résulte la nécessité d'outils de mesures non destructives permettant, par un contrôle en ligne de la production, de mieux surveiller les performances des procédés de fabrication.

Grâce à une modélisation appropriée, des méthodes numériques ad hoc et l'utilisation du calcul haute performance, le projet DPS-MMOD a pour objectif de prédire de manière qualitative et quantitative, la réponse magnétique, à plusieurs paramètres de la microstructure des aciers industriels Dual Phase. De cette manière la réponse des aciers à une excitation électromagnétique donnera une « signature » qui permettra d'évaluer la régularité des caractéristiques importantes de l'acier en cours de fabrication.

Cycle d'hystérésis : un lien entre la microstructure des matériaux et leur comportement magnétique

Lorsque l'on magnétise un échantillon d'acier ferromagnétique, en appliquant un champ magnétique H variant d'une valeur H_1 à une valeur H_2 , la courbe représentant l'aimantation M en fonction de H est dite d'hystérésis : le chemin suivi par M lorsque H varie de H_1 à H_2 est différent du chemin suivi par M lorsque H varie de H_2 à H_1 . Du point de vue magnétique, un échantillon d'acier s'organise en milliers domaines magnétiques, séparés par des parois. Les déplacements de parois et l'irréversibilité de ces déplacements, à l'origine de l'hystérésis, sont dus à la présence de « défauts » dans la microstructure : inclusions, précipités, joints de grains... qui expliquent aussi leur comportement en déformation. Ainsi, à travers un modèle simplifié des matériaux ferromagnétiques, on étudie numériquement quels sont des facteurs qui sont suspectés de contribuer aux déplacements de parois. On couplera ensuite le magnétisme et les comportements mécaniques, de façon indirecte en ayant recours à des modèles entre caractéristiques microstructurales et propriétés d'usage pour lesquels ArcelorMittal a acquis une expérience considérable.



En haut : place des liens microstructure-magnétisme pour la maîtrise des propriétés d'usage des aciers.
En bas : bobines d'acier.

Le projet « DPS-MODD Dual Phase Steels Magnetism Modeling » est un projet de recherche fondamentale et industrielle, avec une composante de développement expérimental, coordonné par l'ESILV (Pôle Universitaire Léonard de Vinci à Paris La Défense). Il associe aussi le laboratoire LMT de l'Ecole Normale Supérieure de Cachan, le laboratoire L2ELab de l'Institut Polytechnique de Grenoble et ArcelorMittal. Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 422 k€ pour un coût global de l'ordre de 2 100 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Ces recherches vont permettre d'avoir une meilleure compréhension de la modélisation multi-échelle des aciers ferromagnétiques et des couplages magnéto-élastiques. Elles permettront également la mise en place d'un nouveau logiciel (SIVIMM3D) utilisant ces modèles et utilisant les dernières techniques du calcul haute performance pour simuler, en-ligne, les caractéristiques des aciers. Ces résultats seront, en outre, confrontés à la réalité au moyen d'expérimentations.

Production scientifique et brevets

Si l'objectif est avant tout de pouvoir prédire les défauts des aciers ferromagnétiques, les retombées concernent tous les domaines faisant appel à la modélisation multi-échelle des aciers ferromagnétiques et des couplages magnéto-élastiques, aussi les résultats feront l'objet de publications dans les revues spécialisées. Le logiciel produit : SIVIMM3D sera, quand-à-lui disponible via une licence GPL.

Programme « Matériaux Fonctionnels et Procédés Innovants », édition 2008

Projet AFGRAP

Mieux connaître les premiers stades de développement d'une fissure de fatigue dans les matériaux métalliques pour améliorer la tenue en fatigue des structures industrielles

Objectif général

La fatigue, consécutive à des sollicitations variables, constitue l'un des risques majeurs de ruine des composants métalliques, déterminant pour la durée de vie des matériels. La tenue à la fatigue peut être améliorée en travaillant sur la finition de surface des composants. Cependant, de nouvelles connaissances sont nécessaires pour optimiser celle-ci.

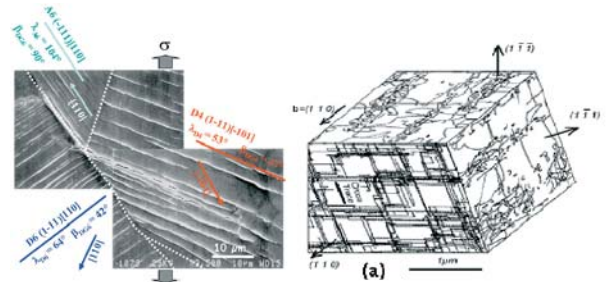
Pour répondre à ce besoin, le projet AFGRAP se propose d'améliorer la connaissance de l'initiation des fissures au niveau de la surface d'un grain de matériau métallique et de la propagation des fissures d'un grain à l'autre. Les connaissances acquises seront mises à profit pour optimiser les états de surface des matériels en fonction de l'usage qui en est fait et restreindre les essais de fatigue aux seules étapes nécessaires.

Technologies utilisées

Le projet s'appuie sur des observations expérimentales microscopiques de fissures dans les grains de matériau et sur des développements numériques portant sur le comportement métallurgique et mécanique des grains. Les résultats expérimentaux et numériques seront confrontés à chaque étape du projet.

Les examens microscopiques permettent la connaissance de l'état du matériau avant les sollicitations puis, après celles-ci, autour et en pointe des fissures. Cette connaissance se traduit avant la fissuration par la création d'un relief de surface de faibles niveaux dû aux "bandes persistantes de glissement". Après la création de fissures, l'observation indique le trajet de la fissure dans le grain et aux joints de grains mais aussi l'état de plastification du matériau autour de la fissure. Ce dernier se traduit par des densités et des arrangements de "défauts" appelés dislocations.

La simulation numérique de l'initiation de fissures demande de gros moyens de calculs, que ce soit pour calculer des états plastifiés dans les grains ou pour calculer, à une encore plus petite échelle, les arrangements de dislocations dans un seul grain. Plus encore, le projet a pour ambition de coupler ces deux types de calculs pour permettre d'obtenir la distribution des dislocations dans un ensemble de grains.



A gauche : Déformations à la surface d'un matériau
A droite : Arrangement de dislocations dans un grain de matériau

Le projet « AFGRAP Amorçage d'une fissure de Fatigue dans un Grain d'Agrégat polycristallin et Propagation dans les grains adjacents » est un projet de recherche industrielle coordonné par EDF R&D. Il associe aussi AREVA NP et ARCELORMITTAL ainsi que les laboratoires publics du CEA et de l'Ecole des Mines de Paris, de l'Ecole Centrale de Paris, de l'Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aéronautique de Poitiers, de l'Institut National Polytechnique de Grenoble et de l'Université de Savoie. Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 1,1 M€ pour un coût global de l'ordre de 3,8 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Le projet n'a démarré qu'en janvier 2009. Les résultats obtenus ne peuvent être qualifiés que d'intermédiaires. Ce sont des observations de déformations de surfaces en cours d'essais de fatigue et des premiers calculs de plastification dans un "agrégat" de grains.

Production scientifique et brevets

Aucune publication ni brevet publié à ce stade d'avancement du projet.

Programme « Matériaux et Procédés », édition 2007

Projet AMELHYFLAM

La modélisation des écoulements de mélanges gaz - liquide et des interactions avec les électrodes : une étape cruciale pour la conception numérique de procédés électrolytiques

Optimisation des procédés de production d'aluminium, d'hydrogène et de fluor

De nombreux procédés d'électrolyse industriels génèrent des gaz. On peut citer les procédés de production d'aluminium, de chlore et soude, de fluor ou d'oxygène et d'hydrogène à partir de l'eau. Ces procédés mettent en jeu des flux de chaleur, de matière et d'électricité. Ces flux sont perturbés par la présence de dégagements gazeux. Ces perturbations ont un fort coût environnemental, énergétique et économique.

Le projet AMELHYFLAM a pour but d'améliorer les modèles décrivant les phénomènes liés aux bulles dans les électrolyseurs afin de permettre la conception numérique de nouveaux procédés optimisés.

Modélisation par couplage de méthodes numériques spécifiques et validation des modèles par des mesures non intrusives

Le projet mise sur le couplage de deux méthodes numériques possédant leurs spécificités notamment la méthode des volumes finis qui a fait ses preuves en hydrodynamique et la méthode des éléments finis en électrochimie.

Les électrolyseurs ciblés étant opaques et contenant des électrolytes agressifs le projet vise à créer de nouveaux outils de mesure non intrusifs afin d'obtenir des données pour générer des modèles empiriques et valider les modèles théoriques. Une technique à l'étude est une adaptation de l'émission acoustique, technique acoustique passive mettant à profit la propension des bulles à générer des sons.



Développement d'une technique de localisation de bulles à la surface d'une électrode.

Le projet « AMELHYFLAM : Amélioration des procédés électrolytiques de production d'hydrogène, de fluor et d'aluminium par modélisation des phénomènes diphasiques et électrochimiques couplés » est un projet de recherche industrielle coordonné par Alcan, Centre de Recherches de Voreppe, pour le compte d'Aluminium Pechiney (groupe Rio Tinto Alcan). Il associe aussi les partenaires industriels : Areva NC, Euro Physical Acoustics, Astek Rhône-Alpes, Fluidyn, le CEA, et les partenaires publics : LEPMI (INPG), LECIME (ex. LECA), LGPM (Ecole Centrale de Paris). Le projet a commencé en mai 2008 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 998 k€ pour un coût global de l'ordre de 2,3 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Le projet a déjà donné ses premiers résultats en montrant que la technique de l'émission acoustique permet de suivre le régime de fonctionnement d'électrolyseurs de laboratoire. On cherche à démontrer que cette technique permet de mesurer la population des bulles présentes dans l'électrolyseur. L'origine des formes panache de bulles observé, jusqu'alors inexplicée, commence à être entrevue.

Production scientifique et brevets

Des communications scientifiques sont en cours de rédaction à la date d'élaboration du présent et seront soumises au comité de lecture des revues ciblées en vue de leur publication.

Programme « Matériaux et Procédés », édition 2007

Projet CRACKRACKS

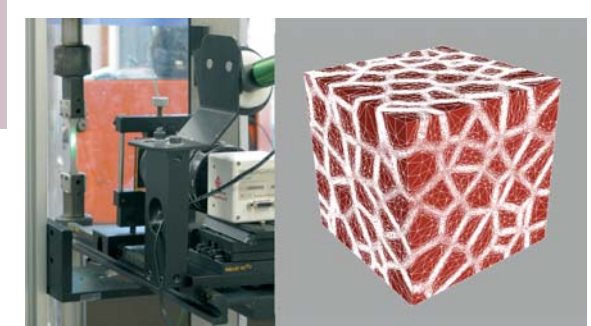
La solidification des aciers : comment ne pas criquer ?

Eviter le risque de fissuration à chaud dans les procédés de solidification

Le phénomène de fissuration à chaud affecte gravement certaines pièces de fonderie en acier ou des produits sidérurgiques tels que lingots ou billettes coulées en continu. Ce défaut consiste en une déchirure du métal lorsqu'il est presque complètement solidifié. Ne contenant plus que très peu de liquide, sous forme de films entre les cristaux, il se déchire facilement sous les tensions internes qui résultent des hétérogénéités de température. Eviter ces déchirures – ou criques – constitue un enjeu industriel fort en terme de qualité (diminuer le taux de rebuts) et de production de nouvelles nuances d'acier (la sensibilité à la crique des aciers à très haute résistance limite les vitesses de coulée en continu). Depuis de nombreuses années, chercheurs et ingénieurs travaillent au développement de simulateurs numériques des procédés de solidification. Cependant, la prédiction des criques est restée jusqu'ici hors de portée, pour différentes raisons. Le projet CRACKRACKS vise à proposer de nouvelles solutions technologiques pour une meilleure prédiction de ces défauts et permettre ainsi un pilotage optimisé des procédés industriels de solidification.

Mieux connaître le comportement des aciers et simuler numériquement le phénomène à différentes échelles

Pour atteindre les objectifs visés, le projet se décompose en trois volets. En premier lieu, il est indispensable de mieux connaître la loi de comportement thermomécanique qui caractérise chaque nuance d'acier, c'est-à-dire la relation entre déformations et efforts internes. Ceci est particulièrement vrai à haute température, près du point de fusion (au-delà de 1 400 °C). Pour cela, on utilise des essais de traction analysés à l'aide de la technique des "speckles" laser. En second lieu, une modélisation numérique 3D est développée à l'échelle millimétrique d'un volume élémentaire de métal à l'état pâteux (solide-liquide). L'objectif est d'y intégrer les différents phénomènes participant à la fissuration à chaud et ainsi de mieux comprendre, en soumettant de tels échantillons numériques à des déformations ou des pressions externes, quels sont les phénomènes les plus critiques. Enfin, le simulateur numérique à l'échelle du procédé est enrichi, d'une part avec de nouveaux critères déduits de l'analyse à petite échelle, et d'autre part avec de nouvelles capacités pour effectuer un calcul thermo-mécanique perfectionné, y compris pendant les phases de remplissage, permettant ainsi la prédiction de criques de surface. Pour les deux derniers volets, la validation par rapport à des essais de solidification instrumentés, à différentes échelles, est systématiquement effectuée.



A gauche, à très haute température, l'illumination laser d'une éprouvette de traction donne accès aux déformations par analyse d'image du suivi des taches d'interférence dues à la rugosité de la surface. A droite, la numérisation d'un volume élémentaire permet de mieux comprendre la thermo-mécanique du métal à l'état pâteux (solide-liquide).

Le projet « CRACKRACKS: Concerted Research for Analysis of CRACK phenomena during solidification of Steels » est un projet de recherche industrielle, coordonné par Armines-CEMEF (Mines-ParisTech). Il associe aussi Ascometal, ArcelorMittal-Maizières, ArcelorMittal-Industeel, le Centre Technique des Industries de la Fonderie, Transvalor et Arts et Métiers - ParisTech. Le projet a commencé en février 2008 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 859 k€ pour un coût global de l'ordre de 2 105 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

A ce stade, le développement des techniques numériques et expérimentales dans chacun des volets a été largement entamé. L'imagerie laser pour analyser les essais à haute température est en voie de validation. Une première version de la simulation numérique à l'échelle d'un volume représentatif du métal en fin de solidification est opérationnelle. Ces deux développements devraient donner accès à de nouvelles lois de comportement et de nouvelles expressions des critères de fissuration. Enfin, la simulation numérique enrichie, à l'échelle du procédé, mettant notamment en jeu l'interaction entre régions liquides et solidifiées, est en cours de réalisation.

Production scientifique et brevets

Une communication a été effectuée au congrès français de mécanique de Marseille en septembre 2009. D'autres sont prévues, par exemple à la conférence internationale Numiform (Numerical Methods of Industrial Forming Processes) qui aura lieu en Corée du Sud en juin 2010.

Programme « BLANC », édition 2007

Projet SMACS

L'amélioration de la qualité des produits grâce à la simulation numérique de la solidification

Modélisation et simulation numérique de la solidification d'alliages métalliques

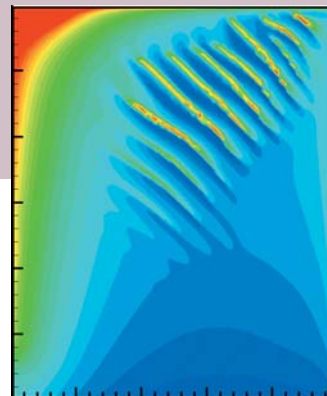
Dans la filière d'élaboration de produits métallurgiques où l'étape de solidification est concernée, celle-ci entraîne la formation d'hétérogénéités de composition (macroségrégations) et de structure à l'échelle du produit. La diminution de ces défauts est un enjeu important pour l'industrie afin de maîtriser la qualité des propriétés finales de leurs produits. La simulation numérique est un outil précieux pour progresser dans cette voie, d'une part, en aidant à la compréhension des phénomènes et, d'autre part, en évitant des essais coûteux en temps et en argent. Des codes de calcul sont actuellement mis en œuvre dans l'industrie. Cependant ils ne sont pas encore totalement prédictifs pour ce type de défauts. Plusieurs raisons sont liées à cela. Les macroségrégations sont engendrées par des mouvements relatifs des phases solide et liquide pendant la solidification. En particulier, les mouvements de la phase liquide sont généralement induits par des différences de densité liées à des écarts de température et de concentration en espèces chimiques. Ces mouvements de convection naturelle sont difficiles à décrire avec une bonne précision pour les métaux liquides. Des paramètres des modèles comme la perméabilité du squelette solide, le nombre de germes ne sont, en outre, pas toujours connus. Par ailleurs, certains phénomènes comme le mouvement des grains demandent encore des approfondissements physiques et méthodologiques. Le but de ce projet est d'améliorer le caractère prédictif de ces codes de calcul en travaillant sur ces différents aspects.

Benchmark numérique et expérimental afin de valider et compléter les modèles

Le projet SMACS est centré autour de l'étude de la formation des macroségrégations et de la mise en place des structures de solidification pour des alliages métalliques. Les actions mises en œuvre sont les suivantes :

- ◆ La définition de cas de référence pour la simulation, d'une part, en convection naturelle à faible nombre de Prandtl et thermo-solutale à faible nombre de Prandtl et grand nombre de Lewis, d'autre part, en solidification pour un alliage binaire.
- ◆ Un benchmark sur la simulation numérique de la formation des macroségrégations, dans un premier temps à l'échelle des partenaires du projet et dans un deuxième temps étendu au niveau international.
- ◆ La production d'une base de données de résultats expérimentaux produits à partir d'essais dont la thermique est bien contrôlée et caractérisée.
- ◆ L'étude de l'influence de la formation des structures de solidification (colonnaire-équiaxe) sur les macroségrégations.

- La confrontation simulation-expérience à partir des essais réalisés dans le cadre du projet.



Carte finale de composition moyenne en fin de solidification d'un alliage Pb-18% Sn dans une cavité de 0,05 m de large par 0,06 m de haut correspondant à un des cas du benchmark.

Le projet « SMACS: Simulation des MACroségrégations en Solidification » est un projet de recherche appliquée coordonné par l'Institut Jean Lamour. Il associe des équipes des laboratoires : CEMEF, FAST, IJL, SIMAP, TREFLE. Le projet a commencé en décembre 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 67 k€ pour un coût global de l'ordre de 261 k€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Les cas de références en convection naturelle et en solidification ont été définis. Les premières comparaisons entre les contributions des différents partenaires sont en cours. Un appel à contribution international a été publié dans le cadre du benchmark dans la revue 'International Journal of Thermal Sciences' et sera annoncé dans des prochains congrès de la spécialité (EUROMAT Glasgow, STEESIM Leoben...). Un site web : <http://www.ijl.nancy-universite.fr/benchmark-solidification> a été mis en place pour les échanges de données dans le cadre du benchmark. Enfin, la moitié de la base de données de résultats expérimentaux est maintenant alimentée.

Production scientifique et brevets

Les résultats obtenus dans le cadre du projet ont fait, jusqu'à présent, l'objet de 2 publications dans des revues internationales :

- ◆ Kumar, B. Dussoubs, M. Zaloňnik, H. Combeau, Effect of discretization of permeability term and mesh size on macro- and meso-segregation predictions, *Journal of Physics D: Applied Physics*, (sous presse),
- ◆ M. Bellet, H. Combeau, Y. Fautrelle, D. Gobin, M. Rady, E. Arquis, O. Budenkova, B. Dussoubs, Y. Duterrail, A. Kumar, C.A. Gandin, B. Goyeau, S. Mosbah, M. Zaloňnik, Call for contributions to a numerical benchmark problem for 2D columnar solidification of binary alloys, *International Journal of Thermal Sciences*, (sous presse), et 4 communications dans des congrès.

Programme « Matériaux Fonctionnels et Procédés Innovants », édition 2008

Projet AMUFISE

La simulation multi-échelle et multi-physique au service de la mobilité durable

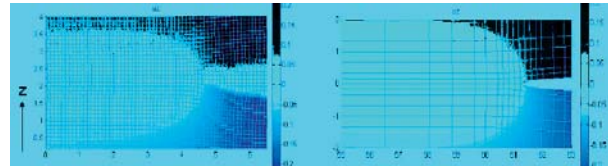
Vers une optimisation de la tenue en fatigue des élastomères des pneumatiques via la simulation de leur comportement

L'économie de nos ressources naturelles est aujourd'hui un enjeu fort pour l'industrie du pneumatique, tant sur le plan sociétal que sur le plan économique. Le juste dimensionnement -l'allègement du pneumatique tout en progressant encore sur sa sécurité, sa fiabilité et sa longévité – est un véritable défi qui doit s'appuyer sur une compréhension poussée des mécanismes relatifs à sa résistance en fatigue.

Le projet AMUFISE vise à ouvrir de nouvelles voies d'innovation ou d'optimisation dans le domaine des élastomères chargés, en développant un moyen de simulation du comportement du matériau fissuré soumis à des sollicitations de fatigue, sur une large gamme d'échelles. L'objectif est de mettre en évidence l'articulation entre la structure du matériau (de quelques nanomètres à quelques micromètres), son comportement spécifique aux abords de la fissure (quelques dizaines de micromètres) et le comportement de la structure considérée (quelques centimètres). La prise en compte des interactions complexes entre ces échelles, grâce à un outil de simulation validé expérimentalement, nous paraît déterminante pour être en mesure de prédire l'impact d'une modification de la composition du matériau sur sa performance en fatigue.

Le dialogue de la simulation multiéchelle d'une fissure et de techniques expérimentales originales

AMUFISE doit relever plusieurs défis, comme la nécessité d'établir dans le calcul une cohérence entre le champ de petite échelle et le champ lointain généré par la structure, ou encore la modélisation de phénomènes aujourd'hui mal maîtrisés pour les élastomères chargés (l'origine physico-chimique de l'endommagement en pointe d'une fissure, les lois de comportements non linéaires et très sensibles à l'historique de sollicitation...). En conséquence, le développement du logiciel doit s'accompagner de la mise au point d'expériences originales aux différentes échelles pour guider et permettre la validation sur une demi-douzaine de matériaux analytiques. Des techniques de caractérisation physico-chimique sont utilisées pour éclairer les mécanismes d'endommagement micrométrique (apparition de cavités, de fibrilles, anisotropie du matériau...). Des protocoles originaux sont développés pour étudier le comportement des matériaux en séparant les contributions viscoélastiques ou d'endommagement. Enfin, l'adaptation de la technique de corrélation d'images aux très grandes déformations permet de reconstruire (du µM. au cm) les champs mécaniques autour d'une fissure se propageant, dans le but de valider ou nourrir par démarche inverse notre outil de simulation.



AMUFISE développe une méthode de simulation d'une fissure (à droite) validée grâce aux mesures expérimentales des champs de déplacement (ici suivant l'axe z) par la technique de corrélation d'images (à gauche).

Le projet « AMUFISE Analyse multi-échelle de la fissuration des élastomères chargés »

est un projet de recherche industrielle coordonné par Michelin. Il associe aussi trois unités mixtes de recherche: le Laboratoire de Mécanique et de Technologie (Ecole Nationale Supérieure de Cachan / Université Pierre et Marie Curie / CNRS), le Laboratoire de Mécanique de Lille (Ecole Centrale de Lille / Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers de Lille / Université des Sciences et Technologies de Lille / CNRS) et le Laboratoire de physico-chimie des Polymères et des Milieux dispersés (Ecole Supérieure de Physique et Chimie Industrielles / Université Pierre et Marie Curie / CNRS). Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 48 mois: il bénéficie d'une aide ANR de 888 k€ pour un coût global de l'ordre de 2 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

A ce jour, nous avons produit un premier prototype de simulation bi-échelle, basé sur un code de calcul dédié aux très grandes déformations, ainsi que des premiers éléments de validation grâce à la technique de corrélation d'images. Nous disposons également d'une première version de loi de comportement permettant de reproduire une anisotropie induite par des sollicitations cycliques variées quel que soit le niveau de déformation. Enfin nous avons montré la faisabilité de différentes techniques pour caractériser les mécanismes d'endommagement (diffusion des rayons X, spectroscopie Raman ou IR...).

Programme « Matériaux et Procédés », édition 2006

Projet PROMETFOR

Les nouveaux outillages à hautes performances

Améliorer la durée de vie des outillages de forge

Les outillages de mise en forme dans le domaine de la plasturgie, de l'emboutissage, de la fonderie et surtout de la forge sont fortement sollicités durant leur utilisation. Ces sollicitations mécaniques et thermiques répétées dégradent rapidement l'outillage qui devient hors d'usage. L'objectif de ce projet est de rechercher des matériaux résistants à cet environnement agressif afin d'accroître fortement la durée de vie de ces outillages. Le dépôt de différentes couches de superalliage garantira à la fois, une forte résistance à la corrosion, à l'usure ainsi qu'à la fatigue. La maîtrise de cette technique conduira à réaliser des outillages au juste nécessaire par des choix et des épaisseurs de ces nouveaux matériaux en fonction de la durée de vie souhaitée et des contraintes inhérentes aux procédés de mise en forme. Cette démarche aboutira à l'optimisation globale du procédé de fabrication afin d'être très compétitif au niveau du marché international des pièces forgées.

Une méthode innovante par un procédé hybride

La démarche utilisée pour ce projet repose sur une approche globale intégrant le cycle de vie de l'outillage. La simulation du procédé de forgeage sur un logiciel métier montre les contraintes mécaniques et le champ de température supporté par l'outillage. A partir de ce constat et d'un objectif de durée de vie, la méthode permet de choisir le type de matériau à déposer ainsi que les épaisseurs minimales. Le dépôt de ces matériaux est réalisé par l'utilisation d'un robot de soudure équipé d'un laser ou d'une source plasma. Ces procédés ne garantissent pas les tolérances dimensionnelles et géométriques exigées par le concepteur d'outillage. Une reprise par usinage à grande vitesse s'impose pour obtenir ces caractéristiques sachant que les matériaux déposés sont difficilement usinables. L'objectif global consiste à définir les bons matériaux résistants aux sollicitations du procédé de forgeage mais présentant une certaine usinabilité. Une machine hybride intégrant le dépôt de matériaux et l'usinage à grande vitesse est envisageable.



Robot de soudure par plasma

Le projet « PROMETFOR: Réalisation d'outillage rapide en forge par projection métallique »

est un projet de recherche industrielle coordonné par le LACM de l'Université de Reims. Il associe aussi les laboratoires de recherche LLB CEA Saclay, le LPMM, le CRIT MDTs, et les entreprises BOURGUIGNON BARRE, ESTAMFOR, LA FOULERIE, RAGUET et STEVENIN NOLLEVAUX. Le projet a commencé en mai 2007 pour une durée de 36 mois: il bénéficie d'une aide ANR de 851 k€ pour un coût global de l'ordre de 2,5 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

La loi de comportement des matériaux déposés ainsi que la loi d'endommagement sont entièrement définies permettant ainsi de prédire la durée de vie de ces nouveaux outillages. Les stratégies d'usinage ainsi que le choix des outils pour l'usinage à grande vitesse ont été validés par des essais sur des éprouvettes ainsi que sur des outillages. La mesure des contraintes résiduelles par diffraction des neutrons et des synchrotrons sur les outillages corrobore correctement les résultats obtenus par simulation

Production scientifique et brevets

Les publications portent principalement sur l'usinabilité des superallages et sur l'évaluation des contraintes résiduelles par diffraction de neutron et de synchrotron. La loi de comportement et d'endommagement sont en cours de validation et feront l'objet de futures publications.

Actuellement, huit publications ou conférences internationales ont été acceptées: Materials Science Forum 2008 et 2009, Wear 2008, Congrès international ICERS Denver USA Août 2008.

Programme « Réseau National Matériaux et Procédés (RNMP) », édition 2005

Projet TECHNOREMP

une nouvelle approche pour remplir des matrices pour la métallurgie des poudres

Le développement de systèmes de remplissage par une approche combinée simulation/expériences/contrôle

Le pressage-frittage est un procédé comportant au moins deux étapes : une compression en matrice (généralement à froid) suivie d'une étape thermique, le frittage. Dans la majorité des références des pièces produites pour l'industrie automobile, les pièces sont ré-usinées après frittage (opérations secondaires), en raison de spécifications sur les géométries très exigeantes.

Ainsi, ces opérations secondaires sont rendues indispensables à cause des dispersions de masse ou de géométrie des pièces, engendrées par les différentes étapes du procédé. Ces opérations secondaires sont très coûteuses et représentent une part importante du coût de la pièce. La suppression de ces opérations secondaires permettrait de dégager des marges de productivité importantes pour l'industrie de la métallurgie des poudres.

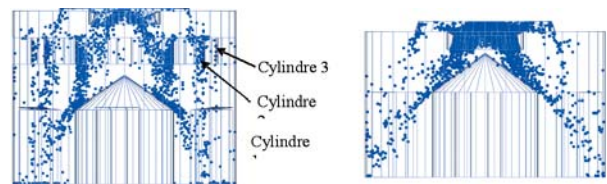
Dans cette perspective, beaucoup de fritteurs mondiaux ont travaillé afin de réduire au maximum les dispersions engendrées par le procédé de pressage-frittage. Ainsi, les techniques de préparation des outillages et le pilotage des presses ont progressé sans que la suppression des opérations secondaires ne soit encore envisageable. En effet, il apparaît que l'opération limitante dans le processus de fabrication constitue l'étape de remplissage de la matrice : les dispositifs de remplissage actuels sont constitués d'un sabot se déplaçant au-dessus de la matrice et remplissant celle-ci par gravité ; la poudre étant stockée dans un réservoir placé en hauteur. L'objectif du projet a consisté à développer une nouvelle génération de systèmes de remplissage par une approche incluant la simulation numérique du remplissage et le développement de technique de contrôle du remplissage.

Développement de la simulation du remplissage par la méthode discrète (DEM) en relation avec une conception en totale rupture des systèmes de remplissage pour la métallurgie des poudres

Un système de remplissage en rupture a été conçu et breveté par le CEA, partenaire du projet. Ce dispositif est basé sur un remplissage actif e la matrice par une turbine qui pulvérise la poudre dans la matrice. Le dispositif permet de contrôler le profil de remplissage. Le principe de la physique repose sur l'accélération de la poudre lors du remplissage de la matrice par la rotation d'un disque. Dans un deuxième temps, la poudre est projetée sur un répartiteur et un diffuseur. La poudre est ainsi canalisée dans la cavité à remplir.

Ce sera l'un des enjeux de ce projet que de développer un système de remplissage susceptible de remplir proprement une ma-

trice multi-étagée pour la production de pièces de forme complexe. La simulation numérique a permis d'optimiser la conception du dispositif de remplissage et d'éviter de nombreuses itérations expérimentales.



Exemple de résultat : simulation du remplissage de la matrice par éléments discrets.

Le projet « TECHNOREMP Nouvelle technologie de remplissage des matrices pour l'industrie de la métallurgie des poudres » est un projet de recherche industrielle coordonné par le CEA. Il associe aussi Federal Mogul, JPH system, l'INSA CNDRI et l'INPG-L3S. Le projet a commencé en avril 2006 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 711 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,3 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Le projet a donné lieu à une validation du concept de système de remplissage en environnement industriel. Les pièces produites présentent des précisions géométriques suffisantes pour envisager les opérations de rectification.

D'autres résultats importants ont été obtenus sur d'autres thèmes, abordés dans le projet :

- ◆ Simulation du comportement qualitatif des poudres lors de l'opération de remplissage.
- ◆ Développement d'un système industriel de pré dosage de poudre. Ce système permet de produire des doses avec des précisions de l'ordre du centième de gramme.
- ◆ Développement du contrôle des pièces de fer par tomographie RX. Ces développements ont conduit à la réalisation d'images pour lesquelles le rayonnement diffusé a été atténué.

Production scientifique et brevets

2 brevets produits en liaison avec le système de remplissage. 5 publications ont été soumises dans le cadre des congrès en liaison avec le monde de la métallurgie des poudres (SF2M, EPMA) sur le thème de la simulation par éléments discrets du remplissage de matrices par l'INPG. Le papier présenté au congrès de l'EPMA à Ghent en 2006 a reçu le prix du meilleur poster.

Programme « Matériaux et Procédés », édition 2008

Projet TRANSBATIBOIS

Vers un outil numérique d'aide à la conception d'une construction en bois plus performant

Elaboration d'un outil de simulation dynamique des transferts de chaleur et de masse dans les parois des constructions bois.

De nombreuses études montrent que les performances thermiques et hydriques de l'habitat bois sont mal évaluées par les méthodes de dimensionnement actuelles. Ceci est partiellement dû à la non prise en compte de propriétés spécifiques des matériaux utilisés, ou à la méconnaissance de certains phénomènes physiques qui ont lieu au sein des parois à base de bois ou de matériaux fibreux hydrophiles (thermodiffusion, transferts non-fickiens, transferts au sein d'une lame d'air, etc.).

Le projet TransBatiBois vise à comprendre et à caractériser l'importance de ces différents phénomènes puis à les intégrer dans un outil d'aide à la conception permettant de simuler les transferts de chaleur et de masse à travers une paroi à base de bois, la consommation énergétique de l'enveloppe en hiver ou sa température intérieure en été, en réponse aux conditions climatiques et aux modes de vie des occupants.

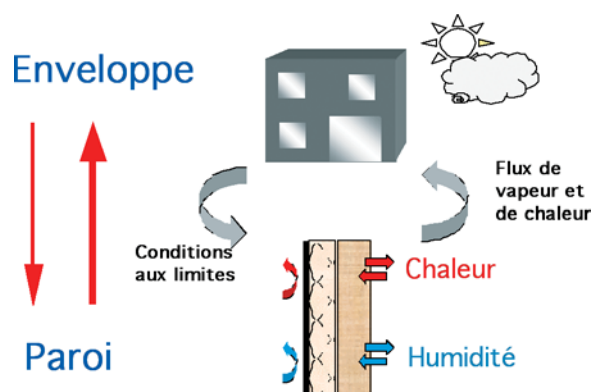
Ces travaux contribueront à la reconnaissance de propriétés thermiques du bois et des matériaux hydrophiles ignorées jusqu'à présent dans les logiciels de bilans thermiques et dans les réglementations thermiques.

Une approche complète caractérisation-modélisation-validation

Dans un premier temps, les matériaux constituant les différentes couches des parois de constructions en bois seront caractérisés : isothermes de sorption, coefficient de diffusion, densité, porosité, thermodiffusion, etc.

Un code numérique existant (TransPore, AgroParisTech-ENGREF) permettant de simuler les transferts couplés de chaleur et de masse dans un milieu poreux sera ensuite étendu afin de modéliser ces transferts dans une paroi multicouche, multicomposant, intégrant ou non une lame d'air. Une version bidimensionnelle de cet outil sera aussi développée afin de prédire le comportement local de détails constructifs. Cette étape validée, un modèle simple à l'échelle de l'enveloppe sera développé afin d'estimer la consommation énergétique annuelle de la construction.

En parallèle, une double chambre expérimentale sera réalisée pour mesurer les transferts de chaleur et d'eau s'effectuant dans une paroi en réponse aux conditions climatiques de part et d'autre de la paroi. Ces données, ainsi que des caractérisations sur site du comportement de construction en bois et de parois réelles, permettront de valider le code numérique étendu et le modèle enveloppe.



Modèle numérique à double échelle paroi / enveloppe (AgroParisTech-ENGREF).

Le projet « TRANSBATIBOIS Transferts dans les parois des bâtiments en bois » est un projet de recherche fondamentale coordonné par le CRITT Bois d'Epinal. Il associe aussi l'INRA, AgroParisTech-ENGREF, l'Université Henri Poincaré - Nancy 1 et le CNRS, ainsi que les entreprises Ecologgia, Poirot Construction, Rondins Construction, ACMB - Atelier Construction Maison Bois et Lignatec. Le projet a commencé en juin 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 651 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,3 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Ce projet apportera une meilleure compréhension des transferts dans les matériaux fibreux et ligneux constitutifs des parois à base de bois, et de leur impact sur le climat intérieur de l'habitat. L'outil numérique et les résultats expérimentaux obtenus au cours de ce projet permettront de caractériser de manière plus juste les performances des constructions en bois. Par la suite, ils permettront de collaborer avec d'autres laboratoires français ou internationaux afin de simuler le comportement de l'enveloppe dans sa globalité en intégrant, notamment, le comportement aérodynamique intérieur.

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2007

Projet ASTER

Les instabilités magnétiques au bord des plasmas de fusion dans les tokamaks

Recherche sur les instabilités magnétiques au bord des plasmas pour mieux les contrôler dans ITER

La production d'énergie par la fusion est une option prometteuse pour la génération d'électricité sans pollution. La méthode la plus avancée est le confinement d'hydrogène à très haute température (le plasma) grâce à un champ magnétique intense dans une chambre toroïdale (un tokamak). La prochaine étape vers le développement d'un réacteur à fusion est la machine ITER, actuellement en construction à Cadarache.

L'un des sujets à la pointe de la recherche dans les plasmas de tokamak est l'étude d'instabilités magnétiques localisées au bord du plasma. Ces instabilités se produisent lorsque la pression du plasma est trop élevée (comparable à l'éclatement d'un pneu surgonflé). La conséquence qui s'en suit est une perte partielle du confinement de l'énergie du plasma sur une échelle de temps très courte (0.0002 secondes). Les flux d'énergies résultants peuvent endommager les matériaux de la machine qui font face au plasma. Le projet ASTER vise à mieux comprendre ces instabilités (nommés ELMs), en particulier les mécanismes physiques qui déterminent l'amplitude et les échelles de temps de la perte d'énergie. Les résultats de cette étude peuvent permettre de mieux contrôler ces instabilités lors des expériences.

Simulation numérique sur des calculateurs de haute performance

La méthode utilisée dans ce projet est la simulation numérique sur ordinateur. La complexité des phénomènes, la géométrie magnétique et les échelles de temps imposent l'utilisation des supercalculateurs les plus puissants.

Une partie du projet ASTER est le développement des méthodes numériques et du modèle physique pour améliorer et faciliter la simulation de ces instabilités. Ces méthodes doivent être compatibles avec les supercalculateurs, qui consistent de milliers d'unités (processeurs) interconnectés. Le code numérique développé dans ce projet est maintenant capable de simuler les instabilités (ELMs) avec une grande précision.

L'autre partie du projet est l'application de ce code numérique à la physique des ELMs. De ces simulations numériques résulte une grande quantité de données contenant de nombreux détails sur les mécanismes physiques impliqués. La visualisation de ces données est un outil précieux pour améliorer la compréhension de la physique des ELMs.

Un autre aspect important des simulations est la comparaison avec les observations expérimentales des plasmas de tokamak, comme le tokamak européen nommé « JET ». De telles comparaisons sont aussi bien nécessaires pour la validation des simulations numériques que pour guider l'approche à suivre vis-à-vis de la physique.



Simulation d'une instabilité magnétique au bord du plasma : des filaments de plasma sortent du plasma avec une vitesse de plusieurs km/s.

Le projet « ASTER Adaptive MHD Simulation of Tokamak Elms for ITER » est un projet de recherche fondamentale coordonné par LE CEA Cadarache. Il associe aussi l'INRIA Futurs, Labri & MAB (Université de Bordeaux 1 et l'IRFM). Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 418 k€ pour un coût global de l'ordre de 982 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Les résultats des simulations de ces instabilités au bord du plasma de fusion (les ELMs) sont qualitativement en bon accord avec les mesures expérimentales. Dans l'expérience, des filaments de plasma sortent à grande vitesse du cœur du plasma (plusieurs kilomètres par seconde). Ces mêmes structures ont été reproduites dans les simulations numériques (voir figure).

Les flux d'énergies induits par ces instabilités arrivent sur la paroi du tokamak en forme de spirales d'une épaisseur très fine. Les simulations ont montrés que le changement de la structure magnétique du plasma (due à l'instabilité) est à l'origine de cette structure du dépôt d'énergie.

Production scientifique et brevets

Les résultats du projet sur le développement des méthodes numériques ont été publiés dans les revues *MagnetoHydroDynamics* 2009, *Journal of Computational Physics* 2008 et aux conférences PAMIR 2008 et International. Conference on Numerical Simulation of Plasmas 2009.

Les résultats physiques des simulations numériques ont été publiés dans la revue *Plasma Physics and Controlled Fusion* en 2009 et aux conférences *Theory of Fusion Plasmas* 2008 et 2009, *EPS conference on plasma physics* 2008 et 2009, *Numerical models for Controlled Fusion* 2008 et 2009.

Programme « BLANC », édition 2005

Projet VLASOV

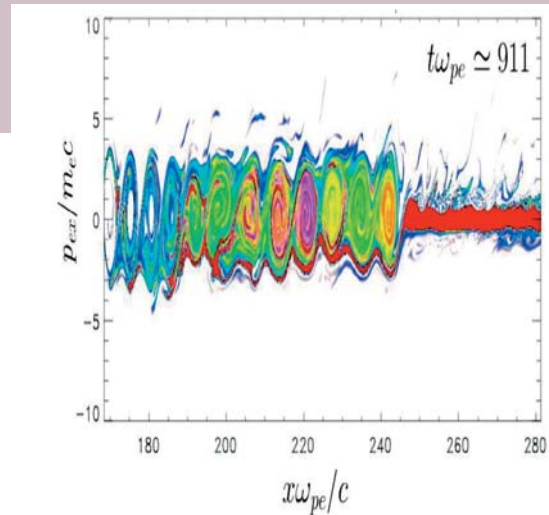
Modélisation des plasmas de Fusion thermonucléaire

Théorie et simulation numérique des plasmas sans collision

Le défi scientifique et technique posé à la communauté internationale par la construction du réacteur expérimental de fusion thermonucléaire ITER par confinement magnétique demande un travail intense au niveau de la théorie et de la modélisation, pour faire avancer la compréhension des phénomènes de base en physique des plasmas. Les recherches actuelles montrent que les processus physiques, qui régissent par exemple, le cœur du plasma impliquent de résoudre les équations cinétiques complètes (au moins à 5 dimensions d'espaces des phases). D'un autre côté, la conception du Laser MégaJoule, qui constitue le second aspect en recherche sur la fusion (inertielle), pose des problèmes tout aussi redoutables. La compréhension des mécanismes physiques et en particulier des effets cinétiques s'avère indispensable. Le thème central de ce projet est la théorie et la simulation numérique des phénomènes cinétiques en physique des plasmas où les effets cinétiques sont dominants. La démarche intègre aussi bien les analyses fondamentales associées à cette Physique que la conception et la mise en œuvre de méthodes numériques innovantes.

Le développement des codes « Vlasov » semi-lagrangiens

La résolution du système Vlasov-Maxwell constitue un véritable défi pour le calcul scientifique en physique des plasmas. Notre outil numérique principal fait appel aux codes Vlasov semi-lagrangiens (ou non particuliers). Ces codes présentent un niveau de bruit numérique incomparablement plus faible que les codes particuliers habituels et offrent une meilleure résolution de la fonction de distribution dans l'espace des phases, en particulier dans les queues de fonction de distribution. Jusqu'à présent seules les méthodes particulières permettaient d'aborder des problèmes à 2D voire 3D. Toutefois la montée en puissance des ordinateurs parallèles rend désormais possible l'utilisation des codes Vlasov à 2D (quatre à cinq dimensions d'espace des phases). Parmi les résultats obtenus figure le développement de méthodes à maillage adaptatif pour étudier plus finement la dynamique des particules rapides. Ces divers codes développés ont permis à la fois l'étude des instabilités relativistes dans l'interaction laser-plasma à très haut-flux ou encore les modèles gyrocinétiques pour étudier la turbulence plasma, le transport et le confinement de l'énergie dans un plasma de fusion magnétique.



Description du processus de transparence auto induite dans un plasma surdense : la pénétration d'une impulsion laser ultra intense s'accompagne d'un chauffage cohérent du plasma (ici représenté par des tourbillons dans l'espace des phases).

Le projet « VLASOV Etude des interactions onde-particule pour les plasmas de Vlasov » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'Institut Jean Lamour de Nancy de l'Université de Lorraine. Il associe aussi l'institut Elie Cartan de Nancy. Le projet a commencé en décembre 2005 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 142 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,2 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Diverses techniques pour la résolution du système non-linéaire Vlasov-Maxwell sont développées ainsi que des modèles de réduction permettant de réduire la dimension de l'espace des phases. Ces modèles incluent la modélisation gyrocinétique à partir d'invariants adiabatiques ou les moments canoniques généralisés pour l'interaction laser-plasma. Les avancées principales portent sur le développement de codes pour le régime ultra relativiste. D'autres techniques sont développées pour l'étude du transport anormal dans un plasma de tokamak ou encore l'étude du chauffage par onde hybride basse.

Production scientifique et brevets

/1/ Stimulated-Raman-Scatter behavior in a relativistically hot plasma slab and an electromagnetic low-order pseudocavity, A. Ghizzo, T.W. Johnston, T. Reveille, P. Bertrand, M. Albrecht-Marc, Phys. Rev. E 74, 046407 (2006).

/2/ A wavelet-MRA-based adaptive semi-lagrangian method for the relativistic Vlasov-Maxwell system, N. Besse, Guillaume Latu, A. Ghizzo, E. Sonnendrücker, P. Bertrand, Journal of Computational Physics, vol 227, Issue 16, August 2008.

Programme « Technologies Logicielles », édition 2007

Projet INDIAC

Le contrôle non destructif fait simple !

Développement d'outils d'analyse permettant de faciliter le travail de diagnostic des opérateurs lors d'un contrôle non destructif

Le projet INDIAC vise à mettre au point des méthodes de caractérisation de défauts dans le but de donner une représentation graphique des défauts détectés.

Les techniques de Contrôle Non Destructif (CND) ont pour but de mettre en évidence la présence de défauts pouvant remettre en cause la conformité d'une pièce. C'est en effet à partir de l'identification et des caractéristiques estimées des défauts (localisation, dimensionnement, orientation) que peut être prise une décision quant à la mise au rebut ou à la réparation de la pièce inspectée. On comprend de ce fait l'importance d'optimiser les diagnostics posés à l'issue d'un contrôle. En général, et ceci est particulièrement vrai pour les techniques ultrasonores et électromagnétiques, la relation existant entre les signaux enregistrés et les caractéristiques physiques du défaut à l'origine de ces signaux est complexe et sa caractérisation nécessite une expertise importante.

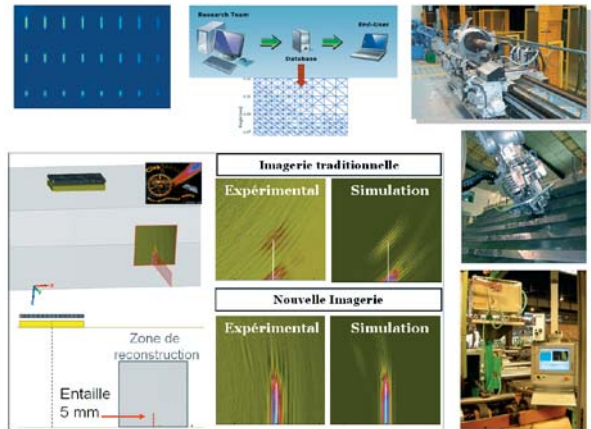
L'objectif du projet est d'aider les industriels à optimiser les diagnostics en mettant à leur disposition des outils logiciels d'analyse qui soient en rupture avec les pratiques actuelles car exploitant de façon optimale des données extraites de la simulation.

Développement de méthodes de caractérisation performantes

Les avancées portent sur le développement des méthodes de caractérisation de défauts et d'inversion de données, ainsi que sur la mise au point de techniques d'optimisation avancées dans le but de maximiser les performances numériques autant dans le domaine ultrasonore qu'électromagnétique.

Des outils de visualisation de nouvelle génération sont développés, qui à partir des informations qu'apporte la modélisation fourniront une représentation graphique des défauts détectés et non plus, comme c'était le cas auparavant, des représentations indirectes qui restent difficiles à interpréter.

Un générateur de bases de données adaptatives et adaptées aux configurations industrielles est développé afin de pouvoir soutenir efficacement les modèles d'inversion et de caractérisation. Trois tels modèles sont développés dans ce projet : inversion électromagnétique pour des défauts surfaciques, inversion ultrasonore par réseaux de neurones, et caractérisation ultrasonore.



INDIAC aide les industriels à optimiser les diagnostics de contrôle en mettant à leur disposition des outils logiciels d'analyse exploitant de façon optimale des données extraites de la simulation

Le projet « INDIAC Inversion et Diagnostic Automatique en Contrôle Non Destructif » est un projet de développement pré-concurrentiel coordonné par le CEA LIST. Il associe aussi EDF R&D, VM France (Vallourec), le L2S-SUPELEC et la société M2M. Le projet a commencé en décembre 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 360 k€ pour un coût global de l'ordre de 850 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Les résultats sont des modules a posteriori qui enrichissent le volet analyse de la plateforme logicielle CIVA mais aussi des modules en temps réel inspirés des modules a posteriori et implémentés au sein du logiciel de pilotage d'un système d'acquisition. Les premiers ont vocation à fournir une aide à l'expert dans une phase d'analyse a posteriori, tandis que les seconds fournissent pendant l'acquisition une indication à l'opérateur sur les défauts en cours de détection. Cette dernière possibilité pour concevoir puis programmer les paramètres du contrôle constitue un atout majeur pour les produits commercialisés par la jeune société M2M.

Production scientifique et brevets

Article : G. Franceschini, M. Lambert, D. Lesselier, Adaptive database for eddy-current testing of metal tube, 8th International Symposium on Electric and Magnetic Fields, EMF 2009, Mondovi (Italie), mai 2009.

Programme « Technologies Logicielles », édition 2007

Projet RADIOLA

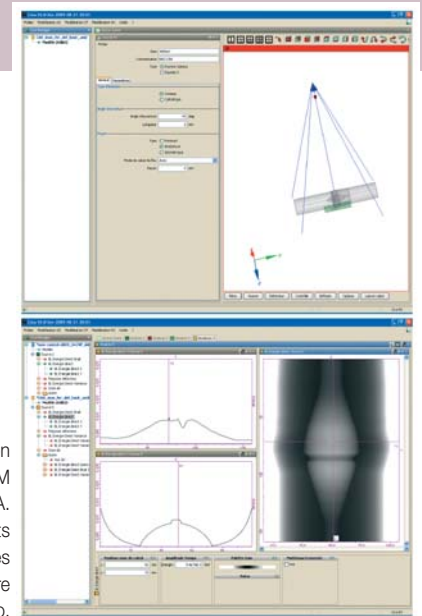
Simulation numérique de la Radiographie industrielle pour le contrôle non-destructif

La simulation du Contrôle Non Destructif : Améliorer la fiabilité des contrôles pour garantir l'intégrité des structures sensibles

Le Contrôle Non Destructif (CND) est présent dans tous les domaines à fort enjeu de sécurité (énergie, transports, pétrochimie...). Il rassemble un certain nombre de méthodes et de systèmes ayant pour objectif de détecter, localiser et caractériser d'éventuels défauts au sein d'une structure, notamment les structures sensibles, comme, par exemple, les composants des centrales nucléaires, les pièces aéronautiques ou les conduites pétrochimiques. Ces techniques sont non destructives car le contrôle est effectué sans détériorer la pièce. Les signaux et images obtenus permettent de s'assurer de l'intégrité d'une pièce ou de décider de son remplacement. La simulation numérique est aujourd'hui largement utilisée dans le CND car elle permet de contribuer efficacement à l'amélioration des techniques de contrôle, aux diagnostics, ou encore à la qualification des procédés. Parmi les techniques non destructives, une technique bien connue est le contrôle par radiographie. Parmi d'autres techniques majeures, on peut citer le contrôle par ultrasons ou par technique électromagnétique. Le projet RADIOLA a pour objectif d'optimiser le module de simulation de CND par radiographie, implémenté dans la plateforme logicielle CIVA.

Des modèles puissants et des interfaces utilisateurs conviviales : Les conditions pour une utilisation performante de la simulation des CND par radiographie

Le logiciel de modélisation CIVA est aujourd'hui la référence mondiale pour la simulation des CND, notamment pour la technique ultrasonore. Toutefois, le module de simulation par radiographie (rayons X et rayons Gamma), présente encore des limitations par rapport aux enjeux associés à cette technique. Une simulation d'un contrôle radio intègre la définition des données d'entrée comme la géométrie et le matériau de la pièce, le type de source (source à rayons X ou Gamma) et le film photo-sensible. A partir de cela, le modèle calcule le rayonnement photonique direct de la source vers le détecteur ainsi que le rayonnement diffusé par la matière traversée. L'une des difficultés présentées par la structure actuelle est qu'elle fait intervenir différents codes de calcul selon que l'on modélise une source gamma ou une source X. Le projet RADIOLA ambitionne d'améliorer les possibilités offertes à l'utilisateur de l'outil, que ce soit en terme de performance de calcul, qu'en terme d'utilisabilité et de convivialité pour l'utilisateur, condition sine qua non du passage de l'outil des mains des experts numériques vers les bureaux d'études des ingénieurs. Cela passe notamment par une homogénéisation des possibilités de calcul et de l'interface utilisateur pour les 2 types de source.



En haut : Visualisation de la nouvelle IHM radio de CIVA.
En bas : Résultats obtenus et visualisés dans la nouvelle fenêtre CIVA Radio.

Le projet « RADIOLA : Simulation numérique de la radiographie industrielle pour le contrôle non-destructif » est un projet de recherche industrielle coordonné par EDF R&D. Il associe aussi le CEA-LIST, le CEA-LETI, CEDRAT SA, le groupe SAFRAN-SNECMA, l'INSA de Lyon. Le projet a commencé en mars 2008 pour une durée de 24 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 530 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,3 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Les premiers résultats du projet ont permis la réalisation d'une architecture logicielle permettant une intégration plus homogène des différents composants du calcul (modèle de matériaux, spectres, détecteurs, modèles de calcul de rayonnement).

Les modèles de détecteur disponibles à l'utilisateur (notamment numériques) ont été élargis.

Le travail se poursuit sur l'intégration des différents composants, l'amélioration des possibilités de post-traitement (outils de mesure et de détectabilité, comparaison de réponse de plusieurs détecteurs par recalcul partiel) ainsi que des performances de calcul.

Production scientifique et brevets

Communication au congrès COFREND 2008 de Toulouse : (« Simulation de contrôles par radiographie dans CIVA », J. Tabary, P. Hugonnard, A. Schumm, R. Fernandez. »

Communication à la conférence WCNDT 2008 de Shanghai (Simulation studies of radiographic inspections with Civa", R. Fernandez, A. Schumm, J. Tabary, P. Hugonnard)

Programme « Technologies Logicielles », édition 2006

Projet SISTAE

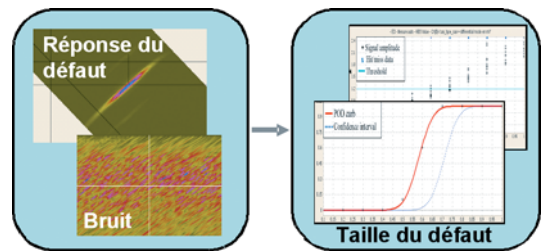
Garantir l'intégrité des pièces présentant un fort enjeu de sécurité

Améliorer l'évaluation des méthodes d'inspection non destructives

Les essais non destructifs rassemblent les techniques d'inspection utilisées dans l'industrie pour détecter la présence de défauts remettant en cause la conformité de la pièce inspectée. Ils garantissent ainsi un haut niveau de qualité et de sécurité des matériels. Pour une application donnée, le choix d'une technologie (ultrasons, courants de Foucault...) et d'une méthodologie (choix d'un capteur, de la configuration du contrôle...) est fonction des caractéristiques physiques du composant inspecté et du défaut recherché. Dans ce contexte, il est crucial d'être capable d'évaluer de manière précise les performances des méthodes de contrôles utilisées. Pour ce faire, une approche probabiliste de type POD (Probability Of Detection) a été mise en place dans certains secteurs d'activité. Celle-ci repose sur des analyses statistiques longues et coûteuses car portant sur un grand nombre d'essais expérimentaux. L'objectif du projet SISTAE est de développer les outils logiciels qui permettront via l'utilisation de simulations numériques de réduire le temps et le coût de ces analyses statistiques tout en augmentant leur fiabilité.

Une approche basée sur l'utilisation d'outils statistiques en association avec la simulation numérique des essais non destructifs

L'approche adoptée consiste à coupler méthodes statistiques et outils de simulation afin, d'une part, de limiter le nombre d'essais expérimentaux en mettant en œuvre des essais virtuels, et, d'autre part, d'élargir le domaine de variation des différents paramètres d'influence accessible à l'investigation. Il s'agit donc de se doter d'outils logiciels permettant la mise en œuvre d'une approche statistique pour la qualification des méthodes de contrôle qui exploite, au moins en partie, des données issues de simulations numériques. Pour y parvenir, on s'appuie sur l'existence d'outils de simulation des essais non destructifs et en particulier, sur la plateforme logicielle multi-technique CIVA. Les outils mis en place doivent permettre d'estimer les indicateurs statistiques recherchés (en particulier la POD) à partir de résultats de simulation utilisant les modèles physiques proposés par le logiciel. Ceci nécessite de tenir compte des incertitudes sur les paramètres influents du contrôle et de modéliser les différentes sources de bruit afin de simuler des réponses du système d'inspection qui soient réalistes. Des algorithmes sont ensuite développés afin d'évaluer, à partir des résultats de simulation, la probabilité de détecter un défaut de taille donnée.



Evaluation de la courbe POD à partir de données simulées dans le cas d'un contrôle par ultrasons.

Le projet SISTAE « Simulation et Statistiques pour les Essais non destructifs » est un projet précompétitif coordonné par le CEA-LIST. Il associe aussi le BUREAU VERITAS, CEDRAT, le CMAP (Ecole Polytechnique), EADS-IW, EDF R&D et le LCND (Université de la Méditerranée). Le projet a commencé en mars 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 600 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,3 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Réalisation d'un module POD accessible dans le logiciel CIVA et proposant les outils indispensables à l'établissement de courbes de probabilité de détection à partir de résultats d'inspections issus de simulations numériques. Des cas d'application représentatifs des besoins industriels ont été sélectionnés et les données expérimentales correspondantes ont été regroupées. Ces données permettront, d'ici à la fin du projet, de valider l'approche numérique pour des cas de contrôles par ultrasons et par courants de Foucault.

Production scientifique et brevets

Ce projet a fait l'objet de plusieurs communications dans des congrès français et internationaux. En particulier, le module développé au sein du logiciel a été présenté lors d'un workshop portant sur la fiabilité des essais non destructifs (4^e workshop Europe-États-Unis, Berlin, 2009). Des présentations ont été faites lors des conférences internationales ICNDE (Yokohama, 2009), ASME (Prague, 2009) et QNDE (Rhodes Island, 2009). Des papiers ont également été publiés dans le cadre de ces conférences.

Grands challenges scientifiques

Acronyme et nom du projet		Le projet résumé en un titre
Physique		
HOUPIC	High Order Finite Element Particle-In-Cell Solvers on Unstructured Grids	Endommagement d'engins spatiaux par des particules chargées
PETAQCD	Vers le PetaFlops pour LQCD	Comprendre la matière par des simulations intensives à grains très fins
SiNERGHy	Simulation Numérique pour la Recherche en Rayonnement, Gravitation et Hydrodynamique	Le calcul massivement parallèle pour la modélisation des plasmas astrophysiques et de laboratoire
ToolsDmColl	Tools for Dark Matter and the New Physics at the Colliders and in Astrophysics	Outils pour la découverte et l'analyse de la matière sombre
Nanosciences		
SIMINOX	Simulations multi-échelles de la formation de nano-objets : des nano-oxydes artificiels aux particules minérales du milieu naturel	La simulation au service des nanosciences
MODERN	Modélisation de Dispositifs en Régime Nanométrique	La simulation numérique multi-échelle, une clé pour l'avenir des nanotechnologies
OsiGe_Sim	Simulation atomique du système SiGe dans le contexte de la micro-électronique : oxydation, contrainte, diffusion	Modélisation atomistique multi-échelle dans le domaine de la micro-électronique
QUANTAMONDE	QUANTum and Atomistic Modeling of NanoDEvices	Modélisation de nano-transistors : quand mécanique quantique et industrie se rencontrent
Abinitio-Nanospin	Abinitio simulation of transport in nanospintronics devices	Structure électronique et transport quantique ab initio des matériaux de la spintronique
Mécanique des fluides, géophysique		
VFSitCom	Volumes Finis pour Situations Complexes	Des mathématiques pour la gestion durable des réservoirs et stockages souterrains
MSDAG	Multiscale Data Assimilation in Geophysics	Assimilation de données multi-échelles en géophysique
CARPEINTER	Grilles cartésiennes, pénalisation et suivi d'interface pour la simulation et l'optimisation d'écoulements complexes	Une technologie pour simuler le mouvement de corps dans les fluides
Propriétés des matériaux		
THERMIDE	THErmique, Microstructure, Deformation	La simulation numérique au service des procédés de mise en forme dans la Métallurgie
H-inter	Rupture intergranulaire semi-fragile en présence d'hydrogène : étude expérimentale et simulations multi-échelles	« H-inter Rupture intergranulaire par l'hydrogène » Simulations multi-échelles pour des matériaux de structure plus sûrs
NOSSI	NOSSI	De nouveaux matériaux « multi-propriétés » : les matériaux hybrides organiques-inorganiques
MITECT	Modelling Intermetallics and Computational Thermodynamics	A la recherche des superalliages de nouvelles générations

Grands challenges scientifiques

Acronyme et nom du projet		Le projet résumé en un titre
Chimie, biochimie		
ASURE	Alliages métalliques complexes : Surfaces et Réactivité	"Des alliages prometteurs pour la catalyse"
SIRE	Simulation de la réactivité chimique aux interfaces	Vers une modélisation réaliste des mécanismes en catalyse hétérogène et en électrochimie
SPBRUSH	Influence of long-range interactions on sheared polymer brushes	Vers une meilleure compréhension des lubrifiants composés de matière plastique
SUSHI	SimUlation de Systèmes Hétérogènes et d'Interfaces	Super-calcul pour une immersion dans le nano-monde
LibrarEnergy	Librairie d'atomes non-sphériques : vers le calcul précis des énergies d'interaction dans les biomolécules et zéolithes	Librairie d'atomes non-sphériques : vers le calcul précis des énergies d'interaction entre molécules.
Sciences du vivant		
PROTEUS	Les protéines en plis : de nouvelles approches pour la prédiction de structures	Reconnaissance de pli et repliement inverse : vers une prédiction à grande échelle des structures de protéines
PHEROSYS	Olfactory coding in the insect pheromone pathway : models and experiments	« Codage olfactif dans la voie phéromonale des insectes : modèles et expériences » Comment analyser et modéliser le traitement de l'information dans un cerveau miniature
EVOLVINGSYST	Dissecting co-evolved systems : towards a systems biology approach of cell phenotypes within evolving lineage	Evolution des bactéries à long terme, à échelle humaine d'un million d'années
INTEGRACTCELLS	Analyse et modélisation intégrative du développement des Lymphocytes T	Analyse génomique et modélisation mathématique du développement des lymphocytes T

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2006

Projet HOUPIC

Endommagement d'engins spatiaux
par des particules chargées**Simulations massivement parallèles de particules
chargées dans des géométries complexes**

De nombreuses applications physiques, telles l'étude de la vulnérabilité d'engins spatiaux à des flux intenses de particules chargées ou la simulation d'accélérateurs de particules nécessitent des simulations précises du mouvement de particules chargées sous l'effet du champ électromagnétique ambiant et auto-généré. Ce type d'applications a pour spécificité la nécessité de gérer la géométrie complexe de l'objet considéré et un domaine de calcul 3D de très grande taille. Pour pouvoir les traiter de manière efficace il va donc falloir coupler des solveurs de Maxwell très précis sur des maillages de tétraèdres permettant d'approximer de manière adéquate la géométrie complexe du bord du domaine de calcul avec un solveur pour les particules. Des techniques efficaces de parallélisation, permettant d'utiliser un grand nombre de processeurs pour les simulations, existent pour chacun de ces solveurs pris isolément, mais un couplage parallèle efficace est très difficile à réaliser.

**Couplage de solveurs Maxwell d'ordre élevé
avec le déplacement de particules chargées**

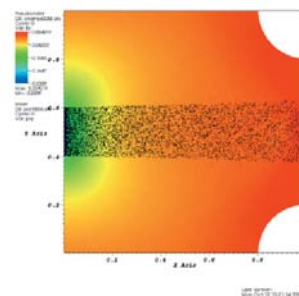
Des progrès importants ont été réalisés ces dernières années dans la mise au point de méthodes numériques d'ordre élevé pour les équations de Maxwell sur des maillages non structurés aussi bien avec des éléments finis conformes traditionnels que des techniques de type Galerkin Discontinu. Les éléments finis conformes ont l'avantage de reproduire au niveau discret des propriétés importantes des espaces continus dans lesquels vivent les différentes quantités intervenant en électromagnétisme.

Par ailleurs, avec les éléments finis discontinus les champs sont mis à jour en utilisant le flux passant d'une maille à sa voisine. Ceci introduit une grande souplesse et permet donc de coupler facilement des éléments de degrés différents et d'utiliser des maillages non conformes.

Le couplage de ces deux types de méthodes avec la simulation de particules chargées a encore été très peu étudié. Les objectifs de ce projet sont donc de réaliser et d'étudier de manière approfondie ces couplages et de les comparer.

Une attention particulière est donnée au problème de la parallélisation de ces solveurs couplés sur un grand nombre de processeurs.

Injection d'un faisceau
de particules
dans un accélérateur.



Le projet « HOUPIC: High Order Finite Element Particle-In-Cell Solvers on Unstructured Grids » est coordonné par l'Université de Strasbourg. Il associe aussi l'IRMA, Université de Strasbourg, le LSIT, Université de Strasbourg, NACHOS, l'INRIA Sophia Antipolis-Méditerranée, le CEA-CESTA et les partenaires étrangers Paul Scherrer Institut (Suisse) et IAG Stuttgart (Allemagne). Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 36 mois: il bénéficie d'une aide ANR de 337 k€ pour un coût global de l'ordre de 755 k€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Nous avons obtenu un premier résultat important dans le cas des éléments finis conformes qui est le développement d'un cadre général permettant d'obtenir la conservation exacte de la charge au niveau numérique pour des éléments finis d'ordre quelconque. Une nouvelle procédure de localisation des particules sur des maillages non structurés et une bibliothèque pour le partitionnement de graphe ont été développées et appliquées à la parallélisation du solveur couplé de Vlasov-Maxwell. Par ailleurs, une nouvelle stratégie de répartition de la charge de calcul pour les simulations parallèles, basées sur l'utilisation de courbes remplissant l'espace (courbes de Hilbert), a été proposée et implémentée dans un outil logiciel prochainement en diffusion libre.

Production scientifique et brevets

Un article sur le cadre général de conservation de la charge est en révision au Journal of Scientific Computing, ce résultat a également été présenté à la conférence Waves 09.

La stratégie de répartition de la charge de calcul basée sur l'utilisation de courbes remplissant l'espace a fait l'objet d'un article soumis à la revue Parallel Computing (une version étendue est disponible sous la forme d'un rapport de recherche IRNIA).

Programme « Conception et Simulation », édition 2008

Projet PETAQCD

Comprendre la matière par des simulations intensives à grains très fins

Augmenter significativement la précision des simulations en préservant la rapidité et la robustesse.

La Chromodynamique Quantique sur Réseau (« Lattice Quantum Chromodynamics » ou « LQCD ») est la théorie qui simule les propriétés de l'interaction forte à l'échelle sub-nucléaire, interaction qui met en œuvre des particules nommées "quarks" liées par des "gluons". La QCD étudie l'interaction nucléaire forte (une des quatre forces physiques connues à ce jour), avec pour but de comprendre les propriétés de la matière nucléaire, qui constitue 99 % de la matière visible de l'univers. Elle étudie aussi comment cette matière s'est formée juste après le « Big Bang ». Les simulations s'effectuent au travers d'une représentation discrète de l'espace-temps sous la forme d'un réseau régulier aussi fin que possible. Plus le réseau est fin, plus on se rapproche du continu, mais les calculs requis passent alors au-delà des limites traditionnelles.

PetaQCD est un projet pluridisciplinaire ambitieux qui vise à fournir une puissance de calcul permettant des simulations à grains très fins. Les investigations se feront tant au niveau algorithmique qu'au niveau matériel, en adéquation avec les technologies émergentes. Les principaux défis à relever seront ceux de la stabilisation des algorithmes numériques, l'accélération des calculs, la production des données, et la robustesse du système. Les principales retombées seront scientifiques, principalement en physique fondamentale. On peut aussi entrevoir des retombées dans des procédés basés sur des modèles similaires (proton-thérapie, sismologie...).

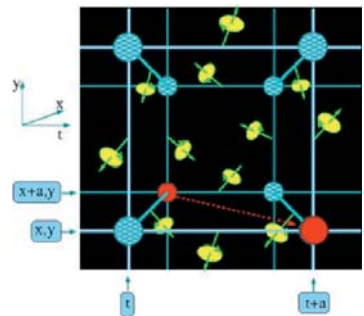
Un ordinateur à un milliard d'opérations par seconde (« petaflop ») consacré à la chromodynamique quantique

Du point de vue numérique, la taille et la sensibilité de nos structures algébriques imposent d'avoir recours aux méthodes les plus avancées. En effet, les opérations à effectuer dans le cadre des simulations LQCD peuvent se ramener à une série de calculs matriciels numériquement délicats. Ces difficultés ne sont pas une nouveauté dans le calcul matriciel mais les solutions décrites dans la littérature ne sont pas adaptées. Dans le cas présent, on doit prévoir des méthodes hybrides ou spécifiques. Dans un premier temps, une étude expérimentale permettra d'étudier la corrélation entre les différents paramètres mis en jeu et le comportement des algorithmes choisis. En parallèle, une étude formelle permettra de dériver automatiquement les programmes de calculs.

Du point de vue matériel, nos espoirs reposent sur les architectures hétérogènes. Ceci va logiquement impliquer la mise en œuvre de nos applications sur chacune des architectures à consi-

dérer (CPU scalaire/vectoriel, GPU, CELL...) et des mécanismes très performants pour les différents mouvements de données (accès mémoire locaux et distants, communications).

Les simulations de la QCD sont basées sur une représentation cartésienne, discrète et finie de l'espace-temps dans laquelle les évolutions des particules sont régies par la loi des interactions fortes.



Le projet « PETAQCD Vers le Petaflop pour LQCD » est coordonné par l'IN2P3. Pluridisciplinaire, il associe aussi neuf partenaires issus de l'IN2P3 et/ou du CNRS (LAL, LPT sur le campus d'Orsay), du CEA/IRFU, de l'INRIA, de l'Université de Saint-Quentin en Yvelines, du LPSC de Grenoble, et deux entreprises privées CAPS et KERLABS à Rennes. Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 1,2 M€ pour un coût global de l'ordre de 4,9 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Deux programmes de simulation ont été rendus opérationnels sur nos plateformes et plusieurs sous-modules ont été développés sur des architectures spécialisées.

Production scientifique et brevets

Le projet est dans sa phase de démarrage. Les efforts en cours sont focalisés sur l'étude de l'existant, la formulation algorithmique du problème, et la mise en place des pistes à explorer.

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2006

Projet SiNERGHy

Le calcul massivement parallèle pour la modélisation des plasmas astrophysiques et de laboratoire

Plasmas Astrophysiques et Fusion par confinement inertiel : des besoins communs pour la modélisation

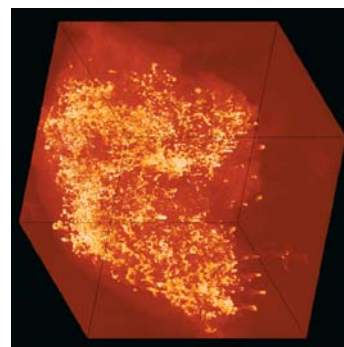
Le projet SiNERGHy vise à satisfaire les besoins communs, en matière de simulation numérique, des communautés scientifiques de l'Astrophysique et de la Fusion Inertielle par Laser. En effet, l'activité de recherche de ces communautés repose très largement sur la simulation numérique d'écoulements complexes, instationnaires, couplés au transport de particules hors équilibre thermodynamique et, ou, à une cinétique chimique. Les rapports d'échelle entre les temps fluides et les temps caractéristiques du transport font qu'il est le plus souvent nécessaire de recourir, dans les codes de calcul, à des méthodes implicites. C'est en particulier le cas pour le transport électronique et le transfert radiatif.

L'ouverture à la recherche académique des grands instruments expérimentaux, comme le laser LIL, est récente. Elle renforce cette convergence thématique, ainsi que la nécessité de disposer d'outils numériques partagés. Les principaux problèmes rencontrés pour l'élaboration de ces outils sont : la mise au point de schémas tridimensionnels pour l'hydrodynamique des gaz réels, l'algorithmique massivement parallèle, et en particulier, celle mise en œuvre pour la résolution implicite des équations de transport, la visualisation de gros volumes de données.

Vers la modélisation d'écoulements complexes

Les deux domaines d'application de ce projet ont ceci de commun que les systèmes étudiés obéissent à une physique complexe et non linéaire ce qui fait de la modélisation numérique un outil privilégié et incontournable. Le couplage entre des échelles de temps et d'espace variant sur plusieurs ordres de grandeurs font que les problèmes abordés nécessitent donc la réalisation et l'exploitation de simulations sur les machines les plus puissantes disponibles. Cependant, la complexité sans cesse croissante des modèles physiques utilisés ainsi que les difficultés techniques qui découlent de l'utilisation de machines massivement parallèles rendent absolument nécessaire la création d'une équipe pluridisciplinaire ayant pour objectif de développer et de mettre à disposition de la communauté une bibliothèque numérique destinée au calcul de très haute performance pour les plasmas astrophysiques et la fusion par confinement inertielle. Cette équipe est composée d'(astro)physiciens numériques, de physiciens des plasmas, d'un groupe support applicatif, et d'un groupe de mathématiciens appliqués plus particulièrement responsable des aspects très hautes performances, parallélisme massif et algorithmique.

Carte de densité d'une simulation 3D de la fragmentation du milieu interstellaire. Les régions les plus claires sont des cœurs denses dans lesquels se forment les étoiles.

**Le projet « SiNERGHy Simulation Numérique pour la Recherche en Rayonnement, Gravitation et Hydrodynamique »**

est un projet de recherche fondamentale coordonné par le service d'astrophysique du CEA/Saclay. Il associe aussi le laboratoire CELIA de l'université de Bordeaux I. Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 600 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,7 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Réalisation d'une bibliothèque partagée de physique atomique et d'une interface pour les codes d'hydrodynamique.

Développement d'un schéma numérique tridimensionnelle pour résoudre les équations de la dynamique des gaz compressibles dans le formalisme Lagrangien.

Développement d'un schéma numérique pour la résolution couplée de l'hydrodynamique et de la gravité.

Mise au point d'un modèle de transfert radiatif multi-groupes.

Réalisation d'outils de visualisation et d'un film stéréoscopique.

Toutes ces réalisations visent à rendre possible la réalisation de simulations numériques d'écoulements ayant une physique complexe.

Production scientifique et brevets

Les travaux réalisés dans le cadre de ce projet ont fait l'objet de plusieurs publications dans des journaux à comité de lecture et ont été présentés à des conférences internationales. Ces publications concernent essentiellement, l'hydrodynamique 3D lagrangienne, la physique de milieu interstellaire, le transfert radiatif et les écoulements auto-gravitants.

Programme « BLANC », édition 2007

Projet ToolsDmColl

Outils pour la découverte et l'analyse de la matière sombre

Matière sombre dans le ciel et aux collisionneurs

Nous savons depuis des siècles déjà que nous ne sommes pas au centre de l'Univers. Ces dernières années ont été le théâtre d'avancées spectaculaires en cosmologie et en astrophysique confirmant que la matière ordinaire ne représente qu'une partie infime de ce qui constitue l'Univers. Une substance sombre qui n'émet pas de lumière semble constituer en grande partie cette matière et tient donc compte de la masse manquante de l'Univers. L'hypothèse la plus probable est que cette matière sombre est constituée de particules qui sont parmi les éléments d'une nouvelle physique qui reste à découvrir. Or, il se trouve que notre modèle de physique des interactions fondamentales souffre aussi de lacunes et d'instabilités qui peuvent être résolues dans le cadre de théories admettant précisément, entre autres constituants, des candidats matière sombre. La recherche de cette nouvelle physique est le but principal du collisionneur du CERN à Genève qui démarrera très bientôt. En même temps, plusieurs expériences en astrophysique sont à la recherche de signaux de cette matière noire. Notre projet vise à fédérer ces recherches en développant des outils communs à ces deux communautés.

Automatisation et structure modulaire des codes pour une collaboration multi-disciplinaire

On assiste donc à l'émergence d'un nouveau paradigme qui demande un effort et une collaboration concertés pour analyser toutes les données futures sur la matière sombre dans leur globalité. Cette mission importante n'est possible que si des collaborations trans-thématiques et multidisciplinaires entre physique des particules et astroparticules, impliquant des théoriciens et des expérimentateurs, s'établissent en mettant à leur disposition des outils communs pour l'analyse des données aux collisionneurs ainsi que pour les recherches astroparticules. Notre projet s'insère dans ce contexte et vise à développer, associer et exploiter de tels outils pour la prédiction, la simulation et l'analyse de signaux de matière sombre. L'automatisation est au centre de ce projet et aidera à monter une structure modulaire (mise en relations de plusieurs codes) ainsi que d'incorporer très facilement de nouveaux modèles. On est aussi amené à quantifier le potentiel des expériences astroparticules. Combiner ces analyses peut mener à des contraintes fortes sur les propriétés astrophysiques de la matière sombre telle que sa distribution, ce qui pourrait être révélateur sur la formation de galaxies.

« Tools for Dark Matter and the New Physics at the Colliders and in Astrophysics » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'IN2P3. Il associe aussi le LAPTH et LAPP (2 Laboratoires CNRS, Université de Savoie, Annecy-le-Vieux), le LPSC (CNRS, Université Joseph Fourier, Grenoble). Le projet a commencé en novembre 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 260 k€ pour un coût global de l'ordre de 3,2 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Un module du code micrOMEGAs pour la détection directe de la matière noire (diffusion sur des noyaux) a été rendu public et a reçu un excellent accueil. Comme la plupart de nos codes il est automatisé et s'applique à tout candidat matière noire. Nos premiers résultats sur l'automatisation des calculs de boucles, à l'ordre quantique, ont été réalisés et appliqués à la densité relique de matière noire. Nous avons notamment amélioré les codes de détection indirecte (annihilation de la matière noire en particules chargés) et étudié les bruits avec une investigation très critique des incertitudes dans les prédictions sur ces détections.

Production scientifique et brevets

Depuis son démarrage, en moins de deux ans, le projet a donné lieu à une trentaine de publications dans des revues internationales. Des codes sur la détection directe de la matière noire, sur la propagation des rayons cosmiques, sur les calculs de précision automatisés ont été réalisés. Certains des participants du projet ont participé à la rédaction d'un ouvrage de référence sur la matière noire et sur sa détection en astrophysique et aux collisionneurs.

Programme « PNANO », édition 2006

Projet SIMINOX

La simulation au service des nanosciences

Formation de nanoparticules en laboratoire ou dans le milieu naturel

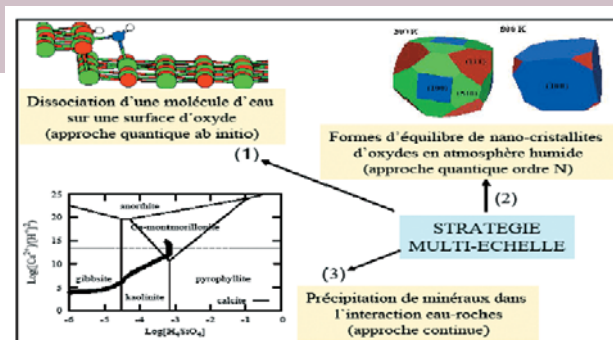
Avec l'accélération de la miniaturisation qui atteint maintenant les tailles nanoscopiques, il est de plus en plus crucial de maîtriser à l'échelle atomique les mécanismes sous-jacents à la formation de ces nano-objets. Les enjeux applicatifs sont nombreux allant de l'optique, à la catalyse, à l'électronique de spin, etc. En particulier, que ce soit dans le milieu liquide lorsque des nanoparticules sont formées par précipitation, ou en ultra-vide lorsqu'on les fait croître sur un substrat, la compréhension des mécanismes de nucléation-croissance qui vont déterminer la taille, la forme et la stoechiométrie de ces objets est une étape fondamentale. A ce stade, la simulation numérique peut jouer un rôle très important, non seulement comme expérience sur ordinateur, complémentaire des autres types d'expériences, mais aussi comme révélateur de mécanismes microscopiques.

Le projet interdisciplinaire SIMINOX vise le développement de plusieurs nouvelles méthodes numériques, et leur application à la compréhension de la formation et des propriétés de nano-particules dans divers environnements. Le croisement des connaissances de croissance cristalline, physique des surfaces, géochimie et minéralogie est au cœur de ce projet, afin de se doter de nouveaux outils susceptibles d'améliorer les approches existantes et/ou d'ouvrir de nouveaux champs d'études.

Approches multi-échelles – plusieurs pas vers l'avenir ?

Dans le cadre d'une approche multi-échelle, les développements et les applications sont centrés autour de deux volets principaux. D'une part, la mise au point d'un code de simulation atomistique quantique auto-cohérent et d'ordre N, sans équivalent actuellement, pour des applications à des systèmes iono-covalents (oxydes principalement) de basse dimension : agrégats libres ou supportés, surfaces, couches ultra-minces.

D'autre part, l'implémentation de plusieurs codes, décrivant les processus de nucléation et croissance de particules solides en solution aqueuse, incluant les effets de taille et de composition chimique, pour des applications en géochimie : précipitation d'oxydes complexes, effets précurseurs, compétitions entre phases secondaires dans l'altération des roches, formation de minéraux à composition variable.



L'action interdisciplinaire SIMINOX associe des techniques de simulation allant de l'échelle atomique à macroscopique, permettant de faire le pont entre des problématiques de physico-chimie des surfaces d'oxydes et de géochimie.

Le projet « SIMINOX Simulations multi-échelles de la formation de nano-objets : des nano-oxydes artificiels aux particules minérales du milieu naturel » est coordonné par l'INSP (CNRS et Université Paris 6). Il associe aussi le CINAM (CNRS) et le LHYGES (CNRS et Université de Strasbourg). Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 261 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,4 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

L'implémentation numérique de la méthode atomistique a été effectuée et assure désormais le scaling linéaire du temps du calcul en fonction de la taille du système, ce qui était l'objectif principal de ce volet, et le cœur du projet SIMINOX. Ce code autorise la simulation de croissance d'agrégats de plusieurs milliers d'atomes. Les codes de nucléation/croissance ont été développés et un important travail d'optimisation (dans la précision des résultats et la rapidité d'exécution) a été effectué. Diverses applications géochimiques ont été réalisées.

Production scientifique et brevets

L'activité scientifique dans le cadre du projet a généré plus de 10 publications scientifiques dans les journaux internationaux et a donné lieu à de nombreuses communications et invitations en conférences internationales.

Programme « PNANO », édition 2005

Projet MODERN

La simulation numérique multi-échelle, une clé pour l'avenir des nanotechnologies

Comprendre la physique de la nanoélectronique, des matériaux aux circuits

Aux échelles nanométriques, voire atomiques, que l'on approche actuellement dans les technologies de l'électronique, la progression se heurte à des limites physiques, par exemple d'origine quantique, qui remettent en cause les règles de miniaturisation usuelles. Pour dépasser ces limites, il apparaît clairement un besoin d'innovations, voire de ruptures technologiques. Dans un tel contexte, industriels et chercheurs ressentent de façon cruciale le besoin de modèles physiques et de simulateurs de composants appropriés, aptes à explorer de façon fiable et prédictive les limites de la miniaturisation des composants, tant au niveau de leur comportement intrinsèque que de celui de leur utilisation dans des circuits élémentaires. La motivation de ce projet était de construire un ensemble d'outils de simulation au meilleur niveau international pour l'étude prédictive des nano-transistors Si et de développer une méthodologie cohérente qui nous conduise de la compréhension de la structure de bande des différents matériaux et des mécanismes physiques agissant sur le transport des porteurs de charge à la description du comportement électrique de circuits élémentaires.

Des outils de simulation précis, de la physique des matériaux au transport électronique quantique et aux architectures de circuits

La démarche consiste à faire "communiquer" des outils de simulation à différentes échelles. Cela commence par les champs de contrainte mécanique générés dans le semiconducteur par les processus technologiques qui sont, avec les champs de confinement, inclus dans des calculs de structures de bandes sophistiqués, notamment de type k.p. Les structures de bande obtenues sont répercutées dans les modèles numériques de transport électronique, par exemple de type Monte Carlo. Ces mêmes modèles sont adaptés à la prise en compte des défauts d'interface et des effets quantiques caractéristiques des dimensions nanométriques. Ils ont été validés par comparaison aux résultats expérimentaux disponibles. Ces modèles précis donnent une bonne compréhension de la physique, mais ils sont coûteux en ressources informatiques et ne sont pas directement utilisables au-delà d'un composant unique. Ils servent alors à établir des modèles analytiques ou quasi-analytiques exploitables pour la simulation électriques de circuits complets. C'est toute cette chaîne qui a pu être mise en place dans le cadre du projet.

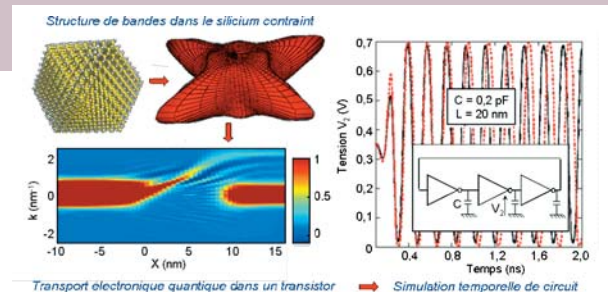


Illustration de l'approche multi-échelle développée dans MODERN : surface équi-énergie d'une bande de valence dans le silicium contraint, cartographie de la fonction de Wigner simulée dans un nanotransistor de longueur de grille de 6 nm, et simulation temporelle d'un oscillateur en anneau constitué de nanotransistors.

Le projet « MODERN Modélisation de Dispositifs en Régime Nanométrique » est coordonné par l'Institut d'Electronique Fondamentale. Il associe aussi STMicroelectronics, le CEA/LETI, l'Institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence, l'Institut de Microélectronique Electromagnétisme et Photonique et l'Institut des Nanotechnologies de Lyon. Ce projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 870 k€ pour un coût global de l'ordre de 2,3 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Nombre d'approches développées dans ce projet ont atteint ou dépassé l'état de l'art international. Citons par exemple les calculs de structures de bande de matériaux contraints et confinés, les simulations numériques du transport électronique quantique dans un nanotransistor, ou les modèles analytiques des nanotransistors adaptés à la simulation de circuits. Cette stratégie multi-échelle deviendra incontournable pour les futurs développements en nanotechnologie afin de gérer de façon globale la complexité des phénomènes physiques en jeu aux dimensions nanométriques, de l'atome au circuit.

Production scientifique et brevets

L'ensemble du projet a donné lieu à plus de vingt articles dans des revues internationales à comité de lecture (dont Physical Review B, Journal of Applied Physics, IEEE Electron Device Letter, IEEE Transaction on Electron Devices...) et à plus de quarante communications à des conférences internationales (dont IEDM, ESSDERC, VLSI Tech., SISPAD...), dont huit invitées.

Programme « PNANO », édition 2005

Projet OSiGe_Sim

Modélisation atomistique multi-échelle dans le domaine de la micro-électronique

Modélisation multi-échelle de l'oxydation, la diffusion et les contraintes dans SiGe

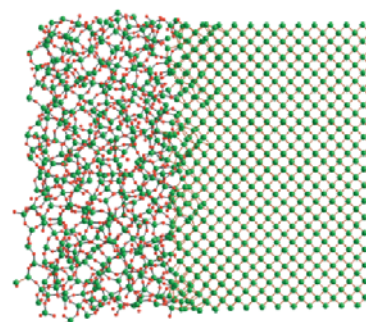
L'alliage silicium-germanium (SiGe) est de plus en plus utilisé pour réaliser différents dispositifs en micro-électronique notamment en couches minces de seulement quelques nanomètres. La faible taille de ces films fait apparaître des effets physiques nouveaux ou exaltés par un effet d'échelle qui doivent pouvoir être inclus dans les simulateurs traditionnels par éléments finis utilisés en micro-électronique. Ceci nécessite de formuler de nouveaux modèles phénoménologiques reproduisant le comportement des matériaux à ces échelles.

L'ambition du projet OSiGe_Sim est de fournir de tels modèles, en explicitant les couplages entre diffusion, concentration, température et élasticité, par la mise en œuvre des outils de la simulation atomistique. La validation du protocole comportera une phase de comparaison expérimentale et une phase d'intégration dans les simulateurs traditionnels. Une application visée est une meilleure prise en compte des effets liés aux petites échelles dans les simulateurs de TCAD lors des étapes d'oxydation et de recuit des couches contraintes de SiGe comme celles mise en jeu dans le procédé de « condensation du germanium ».

Vers une amélioration des modèles phénoménologiques grâce aux simulations à l'échelle atomique

Le projet repose sur la compréhension à l'échelle atomique de différents phénomènes : l'oxydation, la diffusion et les contraintes. À cet effet, trois pôles de compétences ont en charge la définition et la mise en œuvre des simulations permettant d'extraire les modèles phénoménologiques recherchés. Un quatrième pôle est en charge de l'intégration de ces modèles dans les outils industriels. Le pôle « diffusion » a choisi de simuler par calculs de Monte Carlo l'effet des contraintes biaxiales sur la diffusion des défauts au sein du film de silicium. Cependant, l'influence de l'oxyde sur le profil de contraintes est assez mal connue à l'échelle atomique. Le pôle « contraintes » a ainsi étudié la topologie de contraintes générées au cours de l'oxydation d'un substrat de silicium par Dynamique Moléculaire classique. Parallèlement, la diffusion étant très sensible à la concentration en défaut, il est nécessaire de comprendre les mécanismes de création à l'interface. Le pôle « oxydation » a ainsi étudié par calculs ab initio l'énergétique de formation de ces défauts ponctuels en sub-surface en présence d'oxyde de silicium sur un substrat comprenant ou non des atomes de germanium.

Structure atomique de l'interface SiO₂/Si générée par le protocole numérique (Dynamique Moléculaire classique) d'oxydation d'un substrat de Si mis au point dans le cadre du projet. Le front d'oxydation se déplace de gauche à droite, les atomes de Si étant en vert et ceux de O en rouge.



Le projet de recherche « OSiGe_Sim Simulation atomique du système SiGe dans le contexte de la micro-électronique : oxydation, contrainte, diffusion » vise aussi des applications industrielles. Il est coordonné par CEA (INAC, Leti). Il associe aussi STmicroelectronics et deux laboratoires du CNRS : le LAAS à Toulouse et le CINaM à Marseille. Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 42 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 539k€ pour un coût global de l'ordre de 1,1 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Les résultats marquants concernent les quatre pôles du projet. Le premier point concerne la mise en évidence de la moindre réactivité du germanium lors des premières étapes de l'oxydation. Le second point concerne la mise au point d'un protocole de simulation d'une interface réaliste entre le substrat de silicium et son oxyde (voir figure) et du profil de contraintes associées. Le troisième point concerne la mise en évidence d'une dissymétrie dans l'accélération de la diffusion lacunaire en fonction du signe de la contrainte appliquée. Le dernier point concerne le succès du transfert du modèle de diffusion sous contrainte vers un simulateur industriel de référence.

Production scientifique et brevets

Deux articles ont été publiés dans Applied Physics Letter et un troisième article a été publié dans Physical Review B. Ces documents couvrent une partie des trois premiers résultats marquants détaillés ci-dessus. Les derniers résultats ont été présentés lors de conférences internationales (EMRS '09 et GADEST '09) et vont faire l'objet d'au moins trois nouveaux papiers dans les mois à venir.

Programme « PNANO », édition 2007

Projet QUANTAMONDE

Modélisation de nano-transistors : quand mécanique quantique et industrie se rencontrent

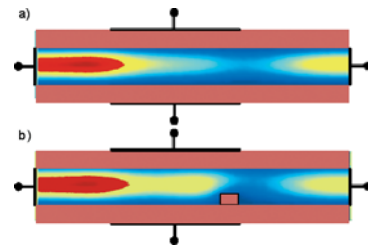
Développement d'une nouvelle génération d'outils de simulation prédictifs de transistors nanométriques

La réduction continue de la taille des transistors, suivant la célèbre loi de Moore, est à l'origine de la croissance de l'industrie des semi-conducteurs. Cependant, l'élan de miniaturisation des transistors CMOS, dont les dimensions atteignent désormais l'échelle nanométrique, doit faire face à de nouveaux problèmes physiques. La compréhension et la résolution d'une partie de ces problèmes, ainsi que la détermination de la structure optimale des nanotransistors exigent des méthodes de simulations fiables. Il existe, cependant, un consensus sur le fait que les outils de modélisation actuels ne sont pas adaptés à de tels dispositifs nanométriques et que l'émergence de nouveaux modèles, capturant les effets quantiques et atomiques, revêt un intérêt de tout premier plan.

Dans ce contexte, le projet QUANTAMONDE vise à développer une nouvelle génération d'outils de simulation pour le transport quantique, en traitant les problèmes émergeant à l'échelle atomique ; condition capitale pour la compréhension des dispositifs semi-conducteurs de faibles dimensions.

Approche multi-échelle pour le développement d'outils de simulation prédictifs.

Sur la base d'un formalisme de fonction de Green éprouvé, les expertises complémentaires des partenaires du projet, allant d'approches ab initio les plus pointues, à des modèles sophistiqués de liaisons fortes et de masse effective, sont combinées afin de développer des codes multi-échelles 3D de simulation de dispositifs. Ils permettront une analyse détaillée des propriétés de transport quantique sur des modèles réalistes de transistors à nanofil. A l'aide d'une stratégie graduelle des schémas ab initio vers ceux de la masse effective, l'impact des mécanismes intrinsèques de diffusion sur les caractéristiques de courant sera étudié par un traitement auto-cohérent rigoureux de l'électrostatique. Simultanément, les effets quantiques cohérents à basse température, en particulier les longueurs de cohérence de spin, seront explorés dans la perspective d'une spintronique à base de nanofils semi-conducteurs.



Exemple d'une nouvelle architecture de transistor qui intègre une indentation en fin de canal améliorant les performances électriques. La densité électronique le long de l'axe source-drain du nanofil est calculée : a) pour une architecture « usuelle », b) en présence d'une indentation. L'augmentation de la densité électronique du canal dans le cas b) est clairement visible.

« QUANTAMONDE QUANTum and Atomistic Modeling of NanoDEVICES » est un projet de recherche fondamentale coordonné par IM2NP (UMR CNRS 6242). Il associe aussi des laboratoires publics (IEMN, IMEP-LAHC et Institut Néel) ainsi que le CEA-Grenoble et ST Microelectronics-Crolles. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 450 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,7 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Les résultats marquants à ce stade du projet sont d'une part le développement d'un modèle de liaisons fortes capable de décrire très précisément les structures de bandes dans les alliages SiGe. Une autre étude a montré l'influence de différents centres diffuseurs élastiques (rugosité d'interface, impuretés) sur la mobilité des électrons dans les nanofils. Enfin une nouvelle architecture de transistor susceptible d'améliorer les performances électriques des dispositifs a été proposée.

Production scientifique et brevets

Un article présentant un nouveau modèle semi-empirique de calculs de bandes d'énergie a été publié à Physical Review B. Deux autres papiers sont parus dans la revue IEEE Transaction On Electron Devices concernant l'impact de défauts ponctuels sur la mobilité des électrons. Enfin, un papier présentant l'influence du type et de l'orientation du semi-conducteur de canal vient d'être accepté à la conférence IEDM qui aura lieu en décembre 2009.

Programme « PNANO », édition 2006

Projet ABINITIO-NANOSPIN

Structure électronique et transport quantique ab initio des matériaux de la spintronique

La théorie de la structure électronique au service de l'expérience

Ce projet s'insère dans une des thématiques principales de recherche européenne sur les nanotechnologies. Il permet notamment d'épauler les expérimentateurs car l'approche de la simulation numérique dont nous faisons usage est fondée sur des méthodes permettant d'obtenir une description fiable, à l'échelle atomique, des propriétés électroniques et de transport des matériaux à partir des premiers principes. Notre objectif est une étude ab initio de la structure électronique et du transport dépendant du spin des hétérojonctions de matériaux pour la technologie spintronique. Nous étudions principalement les matériaux hybrides faits d'électrodes ferromagnétiques et d'un espaceur semi-conducteur, oxyde, ou moléculaire. Cette étude est réalisée par la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) dépendante du spin. L'atout principal de notre approche est la résolution des différents problèmes, depuis les propriétés de l'état fondamental jusqu'au calcul de la magnéto-résistance électrique par effet tunnel, à l'aide de la même méthode de calcul ab initio, ce qui assure une cohérence des résultats obtenus. La précision offerte par les calculs DFT est telle que ceux-ci peuvent guider les expérimentateurs dans la compréhension de leurs résultats, et parfois même les remplacer.

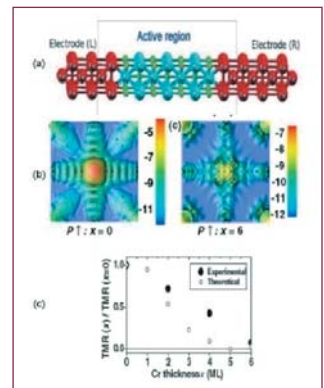
Des équations de la mécanique quantique à la compréhension de l'électronique de spin

Notre démarche vise deux objectifs. D'une part, étudier les propriétés de l'état fondamental des hétérostructures considérées, en mettant l'accent sur les différents phénomènes tels que le désordre chimique et structural, les effets des impuretés, ou la relaxation atomique à l'interface, qui influencent la qualité de l'effet magnéto-résistif. D'autre part, déterminer les propriétés de transport par un calcul direct de la conductance en utilisant une approche de type Kubo-Landauer et dans un formalisme fondé sur la méthode des fonctions de Green hors-équilibre de Keldysh. Cette approche nous permettra de calculer l'intensité du courant électrique en fonction du voltage appliqué à l'hétérostructure hybride FM-semi-conducteur-FM ou FM-oxyde-FM. Afin de compléter les calculs précédents pour le calcul de transport électronique nous utiliserons la méthode ab initio d'orbitales localisées. Cette méthode est fondée sur le formalisme des fonctions de Green, et elle permet de simuler la rupture de périodicité et de reproduire la géométrie expérimentale des hétérostructures. Elle rend également possible le traitement des systèmes désordonnés tels que les alliages, les effets des impuretés ou l'interdiffusion aux interfaces.

Calcul ab initio de la magnéto-résistance par effet tunnel dans les jonctions Fe/Crx/MgO/Fe.

Le panneau (a) représente la configuration atomique de la jonction Fe/MgO/Fe, (b) la transmission par effet tunnel pour la jonction sans et avec 6 couches de chrome pour la polarisation magnétique où les deux électrodes sont alignées ferromagnétiquement, (c) la comparaison du rapport de la magnéto-résistance (TMR) par effet tunnel avec l'expérience.

Nous avons montré que la décroissance de la TMR est due au fait que le chrome se comporte comme une barrière tunnel additionnelle. Ce travail est publié dans le Physical Review Letters 99, 187202 (2007).



« Abinitio-Nanospin Abinitio Simulation of Transport in Nanospintronics Devices » est un projet coordonné par l'Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg. Il associe aussi l'équipe théorique de calcul ab initio de l'IPCMS, l'équipe LCM3B de Nancy et différents partenaires étrangers, les équipes théoriques de Trinity College, Dublin, de Prague, d'Upsalla et de Jülich. Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 352 k€ pour un coût global de l'ordre de 662 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Nous avons implémenté un code numérique pour calculer le dichroïsme circulaire de rayon X dans un code ab initio de calcul de la structure électronique pour pouvoir directement calculer les spectres XMCD et les comparer à l'expérience. Nous avons également implémenté un programme numérique pour calculer le transport tunnel en utilisant le formalisme des fonctions de Green hors-équilibre. Ces codes nous ont aidés à expliquer de nombreuses expériences sur la spintronique.

Production scientifique et brevets

Depuis le commencement de ce projet nous avons publié deux papiers dans le Physical Review Letters, un papier dans le Physical Review B (Rapid Communication), trois papiers dans Europhysics Letters, et huit papiers dans le Physical Review B.

Programme « BLANC », édition 2008

Projet VFSitCom

Des mathématiques pour la gestion durable des réservoirs et stockages souterrains

Concevoir des méthodes numériques robustes pour l'évaluation des écoulements en sous-sol et de leurs conséquences sur l'environnement

Les ressources énergétiques feront certainement partie des grands sujets du 21^{ème} siècle. De nombreuses problématiques liées à ces ressources font intervenir des modèles d'écoulements de fluides en milieux poreux : le pétrole est « pompé » depuis les roches dans lesquelles il est captif ; les déchets nucléaires sont enfouis dans des zones dans lesquelles les écoulements de fluides doivent être contrôlés ; le CO₂ résiduel est stocké par piégeage dans des roches sous-terraines.

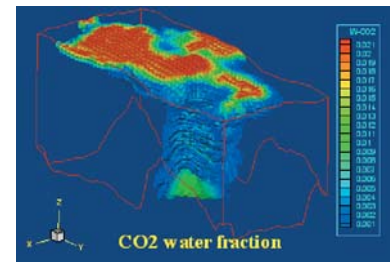
Les modèles physiques décrivant les écoulements de ces fluides sont extrêmement complexes et lourds à traiter. Le projet VFSitCom a pour but de construire des méthodes mathématiques pouvant être efficacement implémentés sur des stations de calcul, et permettant une résolution robuste de ces modèles. L'ambition du projet est de conjuguer l'étude théorique des modèles et outils numériques employés, et les aspects pratiques de l'utilisation informatique finale : les techniques conçues seront ainsi robustes de bout en bout, assurant que les résultats obtenus peuvent être utilisés comme outil de décision efficace.

Mettre des techniques éprouvées ou nouvelles au service des problèmes concrets

Le projet s'appuie sur une méthode numérique éprouvée, celle des volumes finis, déjà beaucoup utilisée en ingénierie pour obtenir des solutions approchées à des équations venant de la mécanique des fluides. Cette technique a l'avantage d'être mathématiquement bien comprise, et d'avoir aussi des origines physiques marquées, de sorte qu'elle fournit des solutions respectant de nombreux comportements naturels attendus. Son champ d'application a cependant des limites assez rigides (sur la géométrie du bassin d'étude, le type de modèles d'écoulements que l'on peut considérer), et un des premiers objectifs de VFSitCom est d'étendre cette méthode, de l'enrichir de nouvelles idées de sorte qu'elle soit effectivement applicable en pratique aux phénomènes complexes considérés.

Ces extensions doivent se faire à la fois en respectant les propriétés et la richesse mathématique de la méthode, mais aussi en prenant en compte les objectifs finaux concrets : les nouvelles méthodes générées doivent préserver au maximum les propriétés physiques des solutions, et doivent être implémentables – à moindres coûts – dans les environnements informatiques parallèles disponibles.

VFSitCom développe en particulier des techniques mathématiques avancées pour le traitement en calcul intensif du stockage de CO₂.



« VFSitCom Volumes Finis pour Situations Complexes » est un projet de recherche mathématique coordonné par l'Université Montpellier 2. Il associe aussi l'Université d'Aix-Marseille 1, l'Institut Français du Pétrole et le Commissariat à l'Energie Atomique. Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 180 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,8 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Un grand benchmark a été organisé par des membres du projet, avec pour objectif de comparer les comportements des nombreuses méthodes récemment développées pour la diffusion en milieu poreux. Suite aux résultats obtenus lors de ce benchmark, il a été prouvé que trois de ces méthodes numériques, qui semblaient différentes, sont en fait identiques ; cela a permis de créer des liens entre les communautés à l'origine de ces méthodes. Plusieurs schémas aisément parallélisables ont aussi été conçus et sont en cours d'étude.

Production scientifique et brevets

Plusieurs articles sont déjà parus dans des revues mathématiques de premier plan (revues de SIAM et IMA, M3AS...); les membres du projet ont aussi donné des communications dans des conférences internationales (voire ont participé à leur organisation). A l'heure actuelle, ces résultats tournent surtout autour de l'analyse et la conception de méthodes numériques pour les modèles de diffusion dans des situations complexes.

Programme « Système Complexes et Modélisation Mathématique », édition 2008

Projet MSDAG

Assimilation de données multi-échelles en géophysique

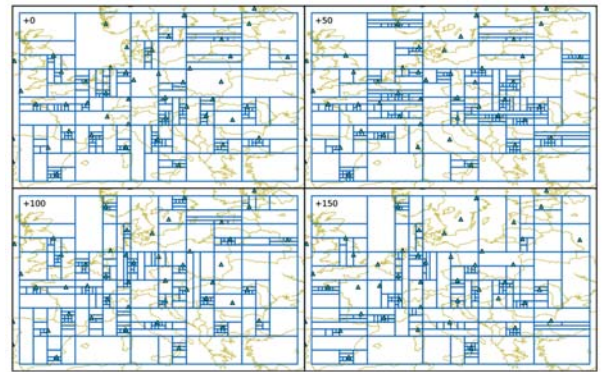
Assimilation de données et analyse multi-échelle

L'assimilation de données est un ensemble de techniques mathématiques qui permettent de combiner optimalement un modèle numérique simulant un système physique à des données observationnelles sur ce système, afin de mieux estimer l'état passé, présent et futur du système étudié. Ce corpus méthodologique est utilisé et fait tous les jours les preuves de son efficacité en prévision météorologique. En géophysique, les modèles numériques et les bases de données d'observation sont de très grande taille, ce qui constitue une difficulté majeure tant mathématique que technique dans l'implémentation des méthodes d'assimilation de données. Par ailleurs, la géophysique (météorologie, océanographie, chimie atmosphérique, images satellitaires) est de nature fondamentalement multi-échelles, de nombreux processus intervenant à de nombreuses échelles, dont certains, comme le transport turbulent, eux-même intrinsèquement multi-échelles.

L'objectif du projet MSDAG est d'étudier le changement d'échelles dans le formalisme de l'assimilation de données pour la géophysique, thème largement inexploré à ce jour. Les difficultés et les solutions relèvent aussi bien des mathématiques appliquées, de l'implémentation numérique, que de l'interprétation physique.

Application à l'analyse d'images d'écoulements, l'océanographie, la chimie atmosphérique et le climat.

La complexité mathématique des modèles numériques et de la physique sous-jacente implique qu'une nouvelle méthodologie ne fait sens que confrontée à une application, comme c'est toujours le cas en modélisation mathématique géophysique. Par exemple, dans le cadre de ce projet, l'équipe de Laurent Debreu au laboratoire Jean Kunzmann de Grenoble étend le formalisme multi-grilles connu en analyse numérique avancée pour étudier l'assimilation de données sur un modèle d'océan à deux grilles de résolutions différentes. L'équipe d'Etienne Mémin d'INRIA Rennes utilise un large éventail de techniques développées en analyse d'images pour appliquer ce programme aux écoulements géophysiques turbulents. L'équipe de Peter Rayner (laboratoire des sciences du climat et de l'environnement du CEA) et l'équipe de Marc Bocquet (centre de recherche en environnement atmosphérique de l'École des Ponts ParisTech et EDF R&D) utilisent des domaines à résolution adaptative pour réaliser de manière optimale l'inversion de source de polluants atmosphériques, comme les flux de dioxyde de carbone, cruciaux dans l'estimation du réchauffement climatique à venir.



Quatre coupes temporelles du maillage adaptatif dynamique (qui possède deux dimensions d'espace et une de temps) optimisé pour la modélisation inverse d'une source accidentelle nucléaire surveillée par un réseau de mesure européen. Le maillage est logiquement plus dense près des stations d'observation (triangles) mais s'adapte également aux conditions météorologiques qui conditionnent le transport atmosphérique des polluants accidentels.

« **MSDAG Multiscale Data Assimilation in Geophysics** » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'École des Ponts-ParisTech. Il associe aussi l'université Joseph Fourier de Grenoble (laboratoire LJK), l'INRIA Rennes et le CEA/CNRS (Laboratoire LSCE), et notamment trois équipes-projets de l'INRIA abrités dans les trois premiers établissements : CLIME, Fluminence et MOISE. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 480 k€ pour un coût global de l'ordre de 2,4 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Un premier résultat marquant (parmi d'autres) de ce projet est la construction de maillages optimaux de l'espace de contrôle (c'est-à-dire l'espace des variables inconnues à déterminer grâce au modèle et aux observations) pour la modélisation inverse des sources de polluants atmosphériques. La figure ci-jointe représente l'exemple d'un tel maillage adaptatif pour un réseau de surveillance de la dispersion de radionucléides à l'échelle européenne.

Production scientifique et brevets

Sur la période du 1^{er} janvier 2009 au 31 juillet 2009 :

1. Quatre articles de conférences (avec comité de lecture) sur l'analyse multi-échelles d'images d'écoulements turbulents.
2. Un article dans la revue *Montly Weather Review* rendant compte entre autres du résultat décrit ci-dessus.
3. D'ores et déjà une dizaine de présentations orales dans des conférences ou en séminaire (autre que les réunions internes au projet).

Programme « Conception et Simulation », édition 2008

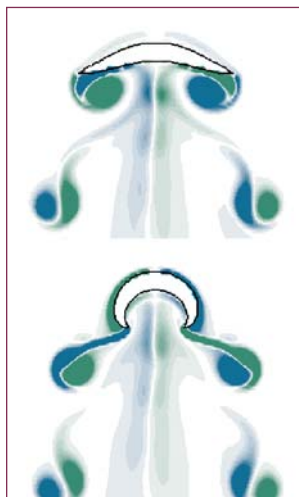
Projet CARPEINTER

Une technologie pour simuler le mouvement de corps dans les fluides

La nage de poissons et le vol d'oiseaux, le tremblement des ailes d'un avion en régime de croisière, la rupture d'un barrage, l'écoulement dans une turbine sont tous des exemples de phénomènes physiques complexes où des corps élastiques qui se déforment interagissent avec un fluide. Le projet CARPEINTER vise à mettre en place des méthodes numériques performants et dont la mise en œuvre est rapide, pour la simulation de tels phénomènes.

Grilles cartésiennes, Level-Set et parallélisation massive

Les méthodes numériques existantes ont permis la prédiction assez fiable du comportement de l'écoulement autour de géométries comme celle d'un avion complet. Ces méthodes sont compliquées et difficiles à mettre en œuvre lorsque les corps se déforment ou bougent. Nous nous proposons de simuler le couplage fluide-structure par une méthode qui permet de prendre en compte le mouvement des objets sans hypothèses simplistes sur l'interaction. Les équations qui gouvernent le problème physique sont résolues sur un maillage cartésien fixe où les conditions au bord sont prises en compte de manière indirecte (pénalisation), sans que le maillage soit adapté au bord. En outre, le mouvement de la structure est modélisé par une méthode dite des lignes de niveau (Level-Set), permettant une mise en œuvre facilitée de la simulation. Les calculs nécessaires à la solution des équations qui découlent de cette méthode seront résolues en partageant l'effort sur un nombre élevé de processeurs, afin de simuler des phénomènes le plus possible réalistes avec des temps de calcul supportables.



Simulation de la nage d'une méduse

Le projet « CARPEINTER Grilles cartésiennes, pénalisation et suivi d'interface pour la simulation et l'optimisation d'écoulements complexes » est coordonné par l'Institut de Mathématiques de Bordeaux et l'INRIA Bordeaux Sud-Ouest, le CEMAGREF Aix-en-Provence, l'Imath de Toulon. Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 436 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Nous pourrions simuler la nage de petit poissons ou de petits insectes. D'un point de vue plus pratique il sera possible d'évaluer le risque associé aux ruptures de barrages. Une collaboration avec Boeing Research est en cours sur l'application de ces méthodes au tremblement d'ailes d'avions. Dans le cas des éoliennes, les précipitations givrantes réduisent la production électrique et peuvent causer des bris mécaniques. En général, la production d'électricité est arrêtée lors des événements givrants, ce qui réduit l'énergie totale produite annuellement par un parc d'éoliennes. Dans le cas des aéronefs, de nombreux accidents aéronautiques sont provoqués, chaque année, par des phénomènes liés au givrage. Les forces aérodynamiques enlèvent les morceaux de glace et les transportent en aval de l'écoulement. Notre objectif est de développer un code numérique basé sur les outils décrits précédemment permettant de prédire le détachement d'un morceau de glace d'une paroi et sa trajectoire aérodynamique. Pour le domaine de l'éolien CARPEINTER est en contact avec un constructeur d'éoliennes VALOREM situé à Bègles (33). Et dans le domaine aéronautique un contrat avec Airbus France (DESGIVRE) concernant la prédiction de dégradation de performances liée au givre est en cours.

Production scientifique et brevets

Deux codes de calcul (écoulements incompressibles et écoulements compressibles) 3D et massivement parallèles sont en cours de développement.

Publications en préparation depuis janvier 2009 dans le cadre de ce projet : H. Telib, A. Iollo. Penalisation and level-set in compressible flow simulations. En cours de soumission.

M. Bergmann, A. Iollo. Numerical simulation of swimmers. En cours de soumission.

Publications parues depuis janvier 2009 dans le cadre de ce projet : F. Chantalat, C.H. Bruneau, C. Galusinski, A. Iollo. Level-Set, Penalization and Cartesian Meshes : a Paradigm for Inverse Problems and Optimal Design. Journal of Computational Physics. Vol. 228, pp. 6291-6315, 2009.

Programme « Matériaux et Procédés », édition 2007

Projet THERMIDE

La simulation numérique au service des procédés de mise en forme dans la métallurgie

Réduire les coûts et les délais de fabrication de pièces métalliques mises en forme par déformation plastique

La fabrication de pièces métalliques par des procédés métallurgiques s'articule autour d'opérations de mise en forme (forgeage, laminage, filage, emboutissage, fluotournage...) et de traitements thermiques (normalisation, austénitisation, trempe et revenu) pouvant être couplées ou non. Les problèmes liés directement à cette fabrication sont de deux types :

- ◆ déformations incontrôlées, incompatibles avec les impératifs dimensionnels industriels imposant des surépaisseurs pour pallier cette difficulté,
- ◆ structures non conformes : taille de grain non adaptée à certaines caractéristiques de mise en œuvre et/ou d'utilisation (soudabilité, usinabilité, contrôlabilité et caractéristiques mécaniques). Ceci conduit à un accroissement des coûts et délais de fabrication, voir à des rebuts. Savoir contrôler l'apparition de telles déformations et maîtriser la taille de grain représente donc un enjeu industriel de première importance.

Les objectifs industriels du présent projet, déposé avec le soutien du pôle de compétitivité « Pôle Nucléaire Bourgogne », sont d'optimiser le processus de fabrication des composants métalliques pour le nucléaire par une meilleure maîtrise des déformations et le contrôle de la taille de grain.

Nouveau modèle pour simuler l'opération de forgeage à chaud d'aciers inoxydables austénitiques

L'action proposée associe industriels et chercheurs pour développer des modèles physiques d'évolution des déformations et des microstructures au cours de la mise en forme et des traitements thermiques. Devant la complexité que constitue la simulation complète de tels processus, une attention toute particulière est portée à la modélisation de la recristallisation dynamique activée durant la déformation à chaud (forgeage libre, laminage) des métaux, dont les formulations restent totalement ouvertes à ce jour.

Pour être validés et exploitables, ces modèles nécessitent :

- ◆ des investigations expérimentales en conditions in-situ,
- ◆ d'être compatibles avec les logiciels métiers de simulation de mise en forme et de traitements thermiques, utilisés actuellement par les industriels pour modéliser les évolutions thermomécaniques de pièces métalliques.

Les premières applications portent sur les matériaux utilisés dans la fabrication des composants pour le nucléaire (différentes nuances d'acier) ainsi qu'un matériau « école » (le tantale).

Les outils de simulation développés seront ensuite exploitables pour le traitement de tout autre procédé industriel de mise en forme d'un produit métallique moyennant une caractérisation adéquate du matériau.

Presse de Creusot Forge
Groupe AREVA, servant au
forgeage libre des pièces
destinées au circuit primaire
de réacteur nucléaire civil.



Le projet THERMIDE « THERmique, Microstructure, DEformation » est coordonné par le Laboratoire ICB (UMR 5209 CNRS, Université de Bourgogne). Il associe aussi en partenariat avec CREUSOT FORGE (groupe AREVA NP), INDUSTRIEL (groupe ARCELOR-MITTAL), TRANSVALOR, CEA Valduc, ARMINES_CEMEF et ARTS_ARTS & METIERS Paristech_Cluny. Le projet a commencé en février 2008 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 960 k€ pour un coût global de l'ordre de 2,5 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

À ce stade du projet, les points marquants résultent de l'analyse du processus industriel de mise en forme par forgeage libre des viroles et de tuyauteries entrant dans la fabrication du circuit primaire de centrales nucléaires :

- ◆ Après traitement thermique, l'ovalisation des pièces massives semble dépendre essentiellement de leur orientation à l'entrée du bain de trempe, ainsi que de la vitesse de trempe.
- ◆ Le forgeage des aciers austénitiques conduit à un gradient de taille de grain entre la surface et le cœur de la pièce forgée. Son origine peut être associée à la fois au gradient de température entre la peau et le cœur ainsi qu'au gradient de déformation qui découle du processus de mise en forme.

Le modèle décrivant la recristallisation dynamique des aciers inoxydables et du tantale est en cours de développement et sera validé prochainement.

Production scientifique et brevets

Deux communications :

« Etude numérique de la recristallisation dans des aciers inoxydables », présentée par R. BOISSIERE (ARTS & METIERS Paristech_Cluny) à la 1^{re} Journée des Jeunes Scientifiques du pôle de compétitivité Nucléaire Bourgogne. Colloque, organisé par le Pôle Nucléaire Bourgogne et l'Université de Bourgogne, juin 2009.

« Modelling of recrystallization phenomena at different scales », présentée au congrès THERMEC'2009 à Berlin (25 au 25 août 2009) par R. LOGE, P. BERNARD, H. RESK, M. HOUILLON et M. BERNACKI du CEMEF, de l'Ecole des Mines de Paris - Sophia-Antipolis.

Programme « BLANC », édition 2006

Projet H-inter

Simulations multi-échelles pour des matériaux de structure plus sûrs

Modéliser l'endommagement des matériaux pour optimiser leur durée de vie

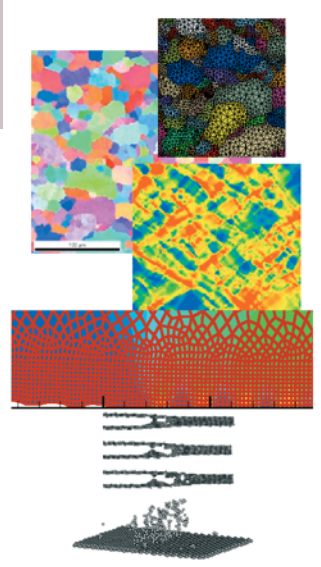
Nous cherchons à modéliser l'avancée des fissures dans les alliages métalliques utilisés pour fabriquer des structures (alliages d'aluminium pour les avions, aciers pour les navires, les pipelines, alliages de nickel pour les cuves et les tubes des échangeurs thermiques). Ces structures ont des durées de vies s'étendant sur des dizaines d'années, pendant lesquelles le matériau est agressé par son environnement : humidité de l'air, corrosion marine, irradiation... Les structures sont régulièrement inspectées pour contrôler l'apparition de fissures. Si c'est le cas, il est important d'estimer la vitesse de propagation pour prévoir le remplacement des pièces. Grâce au design des structures et aux contrôles, les ruptures en service sont rares, mais les conséquences au quotidien perceptibles : pollutions, retards dans les transports, coûts d'exploitation... Le rôle de la modélisation et des simulations numériques développés dans H-inter est de contribuer à la compréhension des mécanismes physiques qui pilotent l'endommagement, pour concevoir des matériaux plus résistants et optimiser ceux qui existent déjà.

La fragilisation par l'hydrogène: un problème multi-échelle

L'hydrogène (H) produit lors de l'oxydation des surfaces diffuse en avant de la pointe de la fissure, là où la déformation est intense. H, déformation et piégeage aux joints de grains sont la cause de la perte de cohésion des interfaces.

Les différents phénomènes physiques sont traités à l'échelle qui leur est adaptée par une hiérarchie de simulations. Chacune traite un aspect et passe l'information pertinente aux autres :

- Les déformations et les contraintes locales sont calculées avec une résolution du micron par un modèle de plasticité cristalline, sur un agrégat de grains. L'arrangement des grains est tiré d'observations expérimentales pour une comparaison directe calcul/expériences.
- La propagation le long d'une facette de grain (10 µm), prenant en compte une fine précipitation, est modélisée à une échelle mésoscopique par une zone cohésive hétérogène et un maillage raffiné jusqu'à 5nm. A terme, un critère de rupture, fonction de la répartition des précipités, et de l'hydrogène piégé, sera passé à l'échelle supérieure.
- Le piégeage de l'hydrogène est simulé à l'échelle atomique dans une boîte de quelques nanomètres de côté. A terme, la cohésion de l'interface, en fonction de la concentration en H, sera utilisée pour paramétrer le modèle de zone cohésive.

- 
- (a) Maillage d'un agrégat polycristallin et carte des déformations,
 (b) Propagation de fissure le long d'un joint avec décohésion de précipités fragiles,
 (c) Calculs atomiques : pointe de fissure et hydrogène intergranulaire.

« H-inter Rupture intergranulaire semi-fragile en présence d'hydrogène: étude expérimentale et simulations multi-échelles » est un projet coordonné par l'École des Mines de Saint-Etienne, l'École des Mines de Paris, l'INSA Lyon, l'ENS Lyon (CECAM). Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 42 mois: il bénéficie d'une aide ANR de 420 k€ pour un coût global de l'ordre de 650 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Ce projet a permis la mise en œuvre, concertée, de quatre méthodes de simulation lourdes, ce qui permet de mieux cerner les difficultés pour transférer l'information d'une méthode à une autre, un obstacle majeur dans le développement de modèles physiques allant de l'atome à l'échelle de la structure du matériau et de ses propriétés d'usage.

Production scientifique et brevets

Trois publications réalisées dans des revues internationales, deux sont en préparation, cinq communications dans des conférences internationales ont été présentées.

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2007

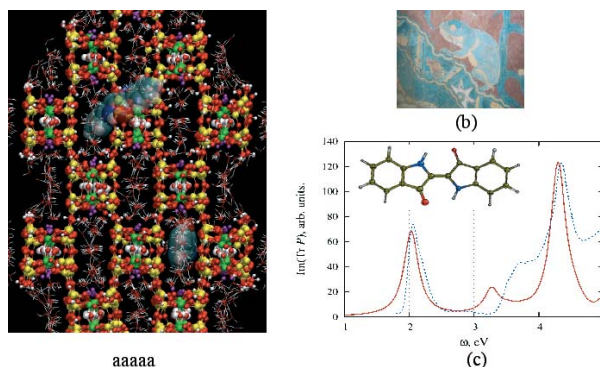
Projet NOSSI

De nouveaux matériaux « multi-propriétés » :
les matériaux hybrides organiques-inorganiquesModélisation à l'échelle atomique des interactions
organique-inorganique dans les matériaux
hybrides

Les matériaux hybrides qui associent les propriétés d'une matrice inorganique (résistance physique et chimique, stabilité...) avec celles d'une molécule organique (colorant) font l'objet de nombreuses études en regard d'un nombre croissant d'applications possibles (revêtements non toxiques et non dégradables, dispositifs luminescents, commutateurs, mémoires optiques, photocatalyseurs...). Par exemple, le pigment « Bleu Maya » (indigo incorporé dans la palygorskite) que l'on trouve sur de nombreuses fresques et objets de Méso-Amérique présente un état de conservation exceptionnel qui a retenu l'attention de nombreux scientifiques. Cependant, la structure de ce composé et les interactions colorant/matrice restent aujourd'hui encore controversées. Dans ce cadre, le développement de méthodes spécifiques, permettant l'étude au niveau atomique des interactions entre la partie organique et la matrice solide inorganique, apparaît essentiel dans la maîtrise des propriétés de ces composés et l'étude de leurs propriétés optiques via la spectroscopie électronique (absorption et fluorescence) constitue un outil de choix pour mener à bien ces investigations.

Un logiciel haute performance adapté
à la modélisation des propriétés optiques
des matériaux hybrides

Le projet NOSSI propose de développer, dans un cadre pluridisciplinaire, un outil original de simulation à haute performance numérique des matériaux hybrides, basé sur la conception d'un nouveau logiciel parallèle de dynamique moléculaire couplant des approches quantiques la partie organique et classique de la matrice inorganique. Cette nouvelle plateforme de calcul qui a pour vocation de modéliser les spectres électroniques de ces matériaux et ainsi, permettre leur interprétation, s'appuie sur une interface d'utilisateurs graphique permettant le pilotage, la visualisation et l'analyse de ces calculs parallèles complexes, lors de leur exécution. Ce logiciel introduit une méthode de calcul novatrice et rapide des propriétés optiques de la molécule organique et la couple avec des calculs de dynamique moléculaire, particulièrement adaptés pour modéliser la matrice inorganique. Cette dernière étape nécessite, par ailleurs, la mise au point de champs de force classiques qui reproduisent la structure et les propriétés de la partie inorganique et qui rendent également compte des interactions colorant-matrice.



(a) Représentation à l'échelle atomique du Bleu Maya présent dans de nombreuses fresques de méso-amérique.
(b) Le Bleu Maya résulte de l'association de molécules d'indigo avec une argile (la palygorskite). (c) Spectres optiques de la molécule d'indigo : comparaison entre le spectre expérimental (en pointillés bleus) et le spectre calculé dans NOSSI (en traits pleins rouges).

Le projet « Nouveaux Outils pour la Simulation des Solides et des Interfaces » est coordonné par l'IPREM, Université de Pau et des Pays de l'Adour. Il associe aussi le CPMOH, le Labri, le DRIMM (Université de Bordeaux) et l'Institut Néel, Grenoble. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 530 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Les premiers résultats marquants de ce projet concernent la mise au point d'un logiciel de calcul quantique des propriétés optiques des molécules, particulièrement performante en terme de temps de calcul par rapport aux approches couramment utilisées pour ce type de modélisation. Ce code constituera une des briques du logiciel NOSSI en cours d'élaboration, utilisable par la communauté scientifique à la fin du projet.

Production scientifique et brevets

D. Foerster and P. Koval, "On the Kohn-Sham density response in a localized basis", J. Chem. Phys. 131, 044103 (2009).

Programme « BLANC », édition 2006

Projet MITECT

A la recherche des superalliages de nouvelles générations

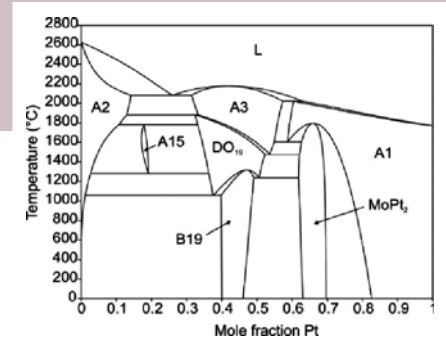
Augmentation des températures de service des aubes de turbines

De nombreuses applications faisant intervenir des dispositifs de génération d'énergie, tels que les turbines à gaz terrestre et aéronautique, requièrent le développement de nouveaux matériaux garantissant à hautes températures de bonnes propriétés mécaniques et une résistance à l'oxydation suffisante. Les alliages actuellement utilisés, tels que les superalliages base nickel, ont une température de fonctionnement limitée à environ 1 200 °C. Or, des matériaux plus réfractaires permettraient d'atteindre des températures de fonctionnement supérieures concrétisant ainsi l'espoir d'augmenter les rendements de ces machines thermiques et par conséquent de diminuer leurs consommations d'énergies. Dans ce contexte visant à définir ces superalliages de nouvelles générations, les alliages base molybdène et niobium s'avèrent être des candidats potentiels. Mais, alors que leurs propriétés mécaniques sont prometteuses, leurs résistances à l'oxydation restent un problème majeur. Parmi les différentes voies envisagées pour y remédier, certaines consistent à développer des revêtements protecteurs basés sur l'utilisation de nombreux éléments d'alliages tels que Cr, Si, Al, Pt, Ru...

Une approche multiéchelle pour la description thermodynamique des systèmes Mo-Si-(Pt, Ru) et Nb-Ru-Al

L'étude de tels systèmes est rendue particulièrement difficile par le nombre et la complexité structurale des intermétalliques qui y précipitent mais également dans certains cas, par l'impossibilité de recourir à des informations expérimentales, due notamment au caractère réfractaire des alliages ou à la grande réactivité chimique du silicium. Dans ce cas, la caractérisation thermodynamique de ces systèmes ne peut s'envisager que par une modélisation de type CALPHAD qui consiste à obtenir une description de l'énergie de Gibbs des différentes phases à partir de modèles permettant de prendre en compte les informations obtenues de façon expérimentale ou théorique. Dans ce projet, nous mettons en œuvre une approche multiéchelle (macro-micro) qui prend en compte dans la modélisation simultanément les données obtenues aux deux échelles. Du point de vue macroscopique, nous déterminons expérimentalement les équilibres de phases en fonction de la température et de la composition ainsi que les enthalpies de formation à hautes températures. A l'échelle microscopique, nous déterminons les structures cristallines avec leurs défauts et calculons par des méthodes "ab initio" les structures électroniques et les propriétés thermodynamiques à basses températures.

Diagramme des équilibres entre phases du système Molybdène-Platine obtenu par une modélisation multiéchelle



« MITECT Modelling Intermetallics and Computational Thermodynamics » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'équipe de Réactivité Chimique des Solides et des Surfaces (Institut Jean Lamour, Université Nancy 1). Il associe le laboratoire d'Etude des Microstructures de l'ONERA (Châtillon) et l'équipe de Chimie Métallurgique des Terres Rares (Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est, CNRS-Université Paris XII). Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 270 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,6 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Les principaux acquis à l'heure actuelle du projet concernent :

- ◆ l'obtention sur ces trois systèmes de nombreuses données expérimentales et théoriques concernant notamment les équilibres entre phases, la découverte de nouveaux siliciures ternaires et leur résolution structurale, l'étude des défauts dans les cas les plus significatifs et l'obtention d'enthalpies de formation à haute et basses températures ;
- ◆ la mise en œuvre de modèles aptes à rendre compte des nombreuses transitions de type ordre-désordre dans le système Mo-Pt-Si ;
- ◆ la réalisation de modélisations permettant de décrire les systèmes Mo-Pt-Si et Nb-Ru-Al qui illustrent l'opportunité de la démarche adoptée et qui offrent à la communauté scientifiques un outil pour leurs description thermodynamique.

Production scientifique et brevets

Une première partie des résultats concernant les données obtenues et les modélisations établies a déjà fait l'objet d'une diffusion scientifique à l'échelle nationale et internationale.

Cela s'est traduit par des publications dans des revues telles que Journal of Chemical Thermodynamics et Thermochemica Acta ainsi que par des présentations à des congrès tels que les Journées d'Etude des Equilibres entre Phases à Marrakech (2008) et Anecy (2009) et CALPHAD à Prague (2009).

Programme « BLANC », édition 2008

Projet ASURE

Des alliages prometteurs pour la catalyse

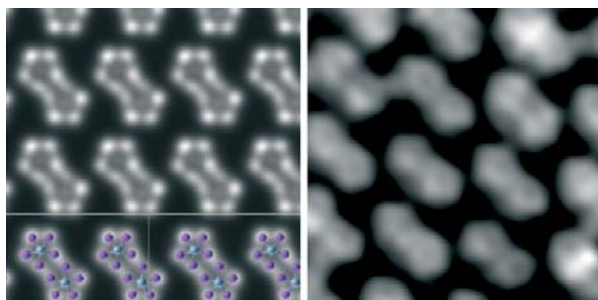
Les alliages métalliques complexes, une nouvelle classe de matériaux pour la catalyse

Les alliages métalliques complexes (CMA) représentent une nouvelle classe d'alliages métalliques prometteurs du point de vue des applications dans le domaine de la catalyse en particulier. La structure cristallographique des CMA diffère de celle des alliages habituels par le nombre conséquent d'atomes dans la cellule unitaire (jusqu'à plusieurs milliers d'atomes) et l'occurrence d'agrégats de haute symétrie comme briques élémentaires. Les quasicristaux constituent un cas limite de CMA pour lesquels la maille est de dimension infinie (système aperiodique).

La structure atomique spécifique de cette nouvelle classe de matériaux, ainsi que la structure électronique singulière associée, leur confère des propriétés inhabituelles - du moins lorsque ces propriétés sont évaluées en regard de celles d'alliages métalliques plus classiques : faible friction, résistance à l'oxydation, faible adhérence, etc. En particulier, du fait de cette complexité structurale présente jusqu'en surface, le comportement de surface des CMA avec leur environnement est susceptible d'être atypique, ce qui pourrait donner lieu à des applications intéressantes, notamment du point de vue de la catalyse.

La réactivité des surfaces complexes analysée par deux approches complémentaires

À l'aide d'une démarche couplant à la fois des observations expérimentales et des simulations numériques, la réactivité des surfaces de CMA sera étudiée en fonction de leur complexité structurale et de leur structure électronique. Une fois les matériaux sélectionnés et leur surface parfaitement caractérisée expérimentalement et numériquement, ces dernières seront exposées à différents flux gazeux de petites molécules. Deux études complémentaires seront ensuite menées. D'une part, une substitution du métal de transition dans des phases binaires de complexité structurale semblable devrait nous permettre de corréler la structure électronique de l'échantillon (position du centre de la bande d du métal de transition) avec la réactivité de surface. D'autre part, les éléments chimiques de l'alliage binaire étant fixés, la réactivité sera étudiée en fonction de plusieurs phases de complexité structurale croissante. Les calculs seront menés en utilisant les méthodes de la théorie de la fonctionnelle de la densité et la démarche semi empirique de type Monte Carlo Metropolis.



(gauche) Images de microscopie à effet tunnel simulée et (droite) expérimentale (5 nm x 5 nm) d'une surface de CMA.

Le projet « ASURE Alliages métalliques complexes : Surfaces et Réactivité » associe trois partenaires dont l'Institut Jean Lamour (Nancy), l'ICMMO (Orsay) et le CIRIMAT (Toulouse). Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 627 k€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Certains modèles structuraux et les structures électroniques de surface de plusieurs alliages métalliques complexes ont été établis à partir de la démarche décrite ci-dessus. À l'aide des calculs, nous envisageons à présent de déterminer les énergies de surface pour chacun des alliages choisis, et les énergies d'adsorption en différents sites précis de surface afin d'identifier les sites de nucléation préférentiels et d'analyser les variations locales d'énergie potentielle et de réactivité. Ces résultats numériques seront complétés et confrontés aux résultats expérimentaux.

Production scientifique et brevets

Ce projet, démarré depuis six mois, a déjà donné lieu à plusieurs communications internationales (4) et nationales (3) mono- et multi-partenaires ainsi qu'à la publication d'un article.

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2006

Projet SIRE

Vers une modélisation réaliste des mécanismes en catalyse hétérogène et en électrochimie

Modélisation réaliste et simulation intensive de la réactivité moléculaire aux interfaces complexes.

La rupture et la formation de liaisons chimiques sont au cœur d'un grand nombre de processus naturels ou industriels. C'est le cas évidemment en chimie, mais aussi plus largement dans les sciences de la vie, des matériaux, de la terre et de l'environnement. Tous les rapports de prospective récents soulignent l'importance des phénomènes réactifs en simulation scientifique. Dans ce contexte, la réactivité à l'interface solide/gaz ou solide/liquide joue un rôle particulièrement important en catalyse hétérogène et dans l'industrie chimique, pour les matériaux, pour l'environnement et la dépollution (pots catalytiques par exemple), pour l'énergie (piles à combustibles, batteries), pour l'atmosphère (aérosols, glace). Cependant, la réactivité chimique est un phénomène quantique complexe à modéliser. Les approches *ab initio*, précises, sont limitées à des systèmes de très petite taille. Dans ce cadre les conditions électrochimiques, importantes pour de nombreuses applications, posent un problème spécifique pour le calcul de la structure électronique et de l'énergie, à cause du potentiel imposé à l'interface. Afin d'aborder des systèmes réalistes comportant un grand nombre d'atomes, des champs de force ont commencé à être développés pour la description des réactions chimiques, mais leur précision est insuffisante. De plus, la réactivité de molécules complexes sur des surfaces, en prenant en compte l'environnement, pose de plus le problème de l'exploration des surfaces d'énergie potentielle, pour un grand nombre de degrés de liberté et pour des systèmes flexibles. Les algorithmes et codes actuels ne sont pas adaptés pour cela.

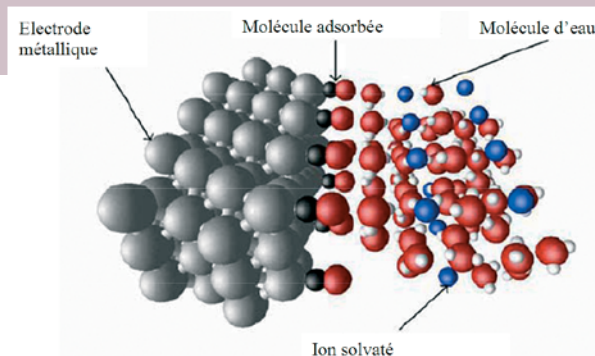
Interfaces complexes et chemins réactionnels : développement de méthodes et calcul intensif

Ce projet développe, par une combinaison mathématiques - chimie théorique, de nouvelles méthodes de simulation pour les processus réactionnels aux surfaces :

- ◆ méthodes efficaces de recherche de chemins réactionnels, incluant les effets d'environnement, de température et de pression,
- ◆ méthodes de champs de force réactionnels, en particulier la description des états de transition,
- ◆ méthodes de calcul en électrochimie.

Ces développements sont menés en visant un parallélisme important. Ces méthodes sont mises en œuvre sur quelques défis choisis en catalyse hétérogène et en électrochimie, à forte retombée potentielle sociétale ou industrielle.

Le projet est organisé en trois lots : 1) modélisation réaliste de la réactivité chimique, 2) méthodes en électrochimie, 3) application à la réactivité aux interfaces complexes.



Modèle d'interface électrochimie comprenant une électrode métallique, une couche de molécules adsorbées, le solvant eau et les ions à l'interface.

Le projet « SIRE : Simulation de la réactivité chimique aux interfaces » est un projet de recherche fondamentale coordonné par le Laboratoire de Chimie de l'Ecole Normale Supérieure de Lyon et CNRS. Il associe aussi le CERMICS (Ecole Nationale des Ponts et Chaussées), l'ICGM (Université de Montpellier II et CNRS) ainsi que l'Institut Français du Pétrole (IFP). Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 42 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 590 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,35 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

A cette étape du projet, une partie importante des codes a été développée. Nous avons mis en place une première version du logiciel de recherche de chemins réactionnels CARTE0 et une méthode de calcul de structure électronique à potentiel constant a été développée pour les simulations en électrochimie. Par ailleurs, pour la première fois, un champs de force simple a été construit pour décrire rapidement, mais avec une bonne précision, la réactivité de l'hydrogène sur le palladium. Les premières applications intensives ont été développées, dans le domaine de l'adsorption de molécules à l'interface solvant/métal pour des applications en catalyse et en électrochimie.

Production scientifique et brevets

Sur la partie méthodes, plusieurs articles ont été soumis : méthodes de biais pour le calcul des chemins d'énergie libre, champs de force réactionnels, calcul de structure électronique à potentiel constant. Un chapitre d'ouvrage intitulé "Ab-initio Electrochemical Properties of Electrode Surfaces" (I. Dabo, N. Bonnet, Y. L. Li, N. Marzari) paraîtra aux éditions Wiley dans le livre "Fuel Cell Science: Theory, Fundamentals and Bio-Catalysis". Pour la partie application, un article de fond vient de paraître sur la structure des agrégats M13 (C.H. Hu, C. Chizallet, H. Toulhoat, and P. Raybaud, Physical Review B 79, 195416, 2009).

Programme « BLANC », édition 2006

Projet SPBRUSH

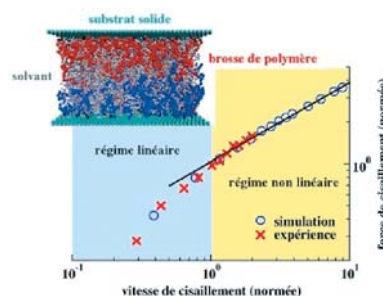
Vers une meilleure compréhension des lubrifiants composés de matière plastique

Brosses de polymères : un grand potentiel pour des applications comme lubrifiant

Les polymères sont des molécules en forme de longues chaînes, résultant de la répétition covalente d'un très grand nombre d'unités élémentaires appelées monomères. De nos jours ces « macromolécules » ont de nombreuses applications, par exemple quand elles se trouvent liées à la surface d'un solide. Une méthode de les fixer est de greffer les chaînes de polymère par l'une de leurs extrémités. Comme les chaînes greffées ont tendance à s'orienter perpendiculairement par rapport à la surface solide, on parle d'une « brosse de polymères ». Les brosses ont des propriétés spectaculaires. Par exemple, quand deux brosses, l'une en face de l'autre, entrent en contact, elles se repoussent fortement. Il en résulte une bonne résistance à une compression normale. En revanche, la résistance à un déplacement latéral (« cisaillement ») est extrêmement faible. Ces phénomènes restent encore largement incompris. Le projet SPBRUSH vise à améliorer la compréhension des effets agissant à une échelle microscopique dans les brosses de polymères cisailées afin de mieux cerner le potentiel de ces systèmes pour des applications possibles comme lubrifiant.

Exploration des brosses de polymères sous cisaillement par simulation numérique

Dans ce contexte, des études par simulation numérique constituent une approche prometteuse, parce que la simulation peut servir de « microscope ultra puissant » pour explorer les corrélations structure-propriété dans les systèmes (modèles) étudiés. Comment cela est-il possible ? À l'aide des ordinateurs, les équations déterminant le mouvement des monomères des brosses de polymères et des molécules de solvant sont résolues. Ainsi, la simulation fournit à chaque instant une photographie des positions de toutes les particules, monomères et solvant. Ces photographies sont ensuite analysées. Ceci permet de répondre à diverses questions. Par exemple : comment les chaînes de polymères se réorientent-elles sous cisaillement ou comment les molécules de solvant se répartissent-elles spatialement (i.e., sont-elles réparties de façon homogène à travers le système ou non ?). Le but de ces analyses consiste à corréler la « réponse » des brosses de polymères et du solvant à la force de résistance au cisaillement du système entier, afin d'identifier les caractéristiques microscopiques qui déterminent cette force macroscopique, accessible aussi dans des expériences.



« SPBRUSH Influence of long-range interactions on sheared polymer brushes » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'Institut Charles Sadron, unité propre du CNRS. Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 163 k€ pour un coût global de l'ordre de 800 k€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Un résultat marquant est montré sur la figure ci-dessus. Pour de petites vitesses v de cisaillement, la force de cisaillement est proportionnelle à v (régime linéaire), mais augmente plus faiblement pour de grandes vitesses (régime non linéaire). Nos résultats numériques sont en bon accord avec des résultats expérimentaux récents, et peuvent être compris par un modèle théorique que nous avons développé (trait plein pour le régime non linéaire). Ce projet nous a aussi permis de commencer une collaboration avec des expérimentateurs dans notre institut et avec un groupe de simulation en Allemagne.

Production scientifique et brevets

Un papier sur les résultats illustrés par la figure ci-dessus a été soumis à Langmuir. Un papier sur la force qu'exerce une brosse de polymères sur une paroi solide en face d'elle, issu de la collaboration avec les collègues expérimentateurs de notre institut, est en cours de rédaction. Il en va de même pour un papier avec nos collègues allemands, avec lesquels nous avons étudié l'influence d'une variation de la structure du solvant sur la force de cisaillement.

Programme « BLANC », édition 2007

Projet SUSHI

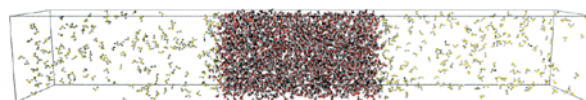
Super-calcul pour une immersion dans le nano-monde

Une description de la matière à l'échelle de l'atome

Les systèmes qui intéressent aujourd'hui les scientifiques recourent une complexité de plus en plus grande : nanomatériaux, micro-émulsions, molécules du vivant et milieux réactifs sont autant de défis pour la modélisation de la matière. Dans ces systèmes, de larges hétérogénéités apparaissent : des matériaux de nature et de densité différentes coexistent séparés par des interfaces. La présence de ces interfaces conditionne en partie les propriétés physico-chimiques du système et seule une description au niveau atomique permettra de bien comprendre leur rôle. Le projet SUSHI fournira des outils de modélisation permettant une description rigoureuse d'interfaces à l'échelle de l'atome. Nous avons retenu les méthodes de Monte Carlo et de Dynamique Moléculaire. Si ces méthodes sont répandues et de plus en plus utilisées pour l'étude de systèmes homogènes, il n'en est pas de même dans le cas de systèmes hétérogènes et de nouveaux développements méthodologiques sont donc nécessaires. Les applications traitées dans le cadre de ce projet seront dédiées à l'étude de la perméabilité de matériaux polymères, du stockage du CO₂ ou encore à la compréhension de réactions chimiques dans des conditions extrêmes d'onde de choc.

Des super-calculateurs au service de la modélisation moléculaire

La modélisation moléculaire est une technique gourmande en moyens de calcul. La description d'une interface complexe au niveau atomique nécessite la prise en compte de plusieurs millions de particules (voir plusieurs milliards). L'étude des processus dynamiques mis en jeu nécessite de longs temps de calcul. C'est pourquoi d'importants efforts sont réalisés afin d'obtenir des codes performants, parallélisés et adaptés à différents types d'architectures. Si la dynamique moléculaire est une méthode numérique qui se prête bien à une distribution des calculs sur plusieurs nœuds de calcul, les difficultés sont plus importantes dans le cas d'un code Monte Carlo. L'utilisation d'algorithmes spécifiques comme la « thermalisation parallèle » permet d'introduire un bon niveau de parallélisme et d'améliorer la description statistique du système. A terme, nous souhaitons obtenir un code de simulation généraliste, adapté à l'étude des systèmes hétérogènes.



Modélisation explicite d'une interface liquide-vapeur

« SUSHI SimULATION de Systèmes Hétérogènes et d'Interfaces » est un projet de recherche fondamentale coordonné par le CNRS et l'Université Paris-Sud 11. Il associe aussi l'Université Blaise Pascal, le CEA et l'IFP. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 365 k€ pour un coût global de l'ordre de 2,2 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Dans le cadre de l'étude des interfaces liquide-liquide et liquide-vapeur, nous avons établi différentes formules opérationnelles pour le calcul de la tension superficielle. Nous nous sommes intéressés aux équilibres de phase de l'eau en présence de CO₂, d'H₂S ou de méthane. Cette étude contribue entièrement à la problématique du stockage souterrain des gaz acides. Des simulations d'agrégats de carbone dans des conditions extrêmes de pression (plusieurs dizaines de GPa) et de température (plusieurs milliers de K) ont été réalisées, permettant de déterminer le diagramme de phase des agrégats dans ces conditions.

Production scientifique et brevets

A ce jour, le projet a donné lieu à cinq publications dans des revues internationales, dont quatre impliquant plusieurs partenaires, ainsi que cinq communications dans des congrès internationaux. Ces travaux traitent de problèmes méthodologiques liés à l'étude d'interfaces par modélisation moléculaire ainsi que les premiers résultats sur des systèmes d'intérêt dans les domaines de la détonique et des fluides pétroliers.

Programme « BLANC », édition 2005

Projet LibrarEnergy

Librairie d'atomes non-sphériques : vers le calcul précis des énergies d'interaction entre molécules

Voir les atomes et les électrons tournant autour

La cristallographie est méthode d'imagerie très puissante qui permet de voir au cœur de la matière, et ce jusqu'à la position des atomes formant une molécule.

Le cristal représente un espace périodique en trois-dimensions où les molécules sont empilées de façon régulière. Le laboratoire nancéen CRM2 est engagé dans le développement du logiciel MoPro (MOlecular PROperties) d'affinement cristallographique à très haute résolution. L'on voit ainsi les électrons impliqués dans la formation des liaisons chimiques. Ce logiciel est généraliste par son champ d'application : petites et macro-molécules, organométalliques, zéolithes.

Le laboratoire développe aussi une librairie d'atomes multipolaires qui décrit la densité électronique expérimentale des fonctions chimiques dans les protéines. La figure montre l'accumulation d'électron sur les liaisons covalentes et les doublets électroniques sur la chaîne polypeptidique. Avec la librairie d'atomes transférables, les structures cristallographiques sont plus précises que pour d'autres logiciels qui font l'approximation de l'atome sphérique. Pour élargir son champ d'application, la librairie a été généralisée des protéines aux groupements chimiques courants. La définition des types d'atomes dans une librairie généralisée est sophistiquée, elle se base sur la géométrie locale et la connectivité des atomes. Pour les groupes polarisables tels que O = C et O-H contenant de l'oxygène, il est nécessaire de connaître les atomes voisins jusqu'au troisième niveau.

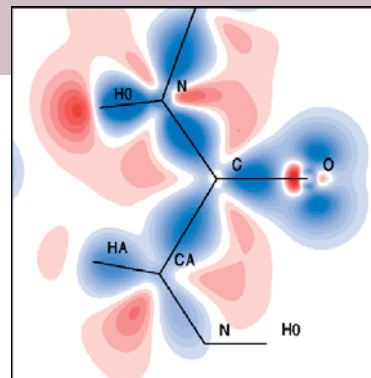
Applications aux protéines cibles de médicaments

De nouvelles fonctionnalités, comme le calcul des énergies d'interaction électrostatique ont été implémentées dans le logiciel. Avec la création d'une interface graphique, la qualité du logiciel a été considérablement accrue. Signalons que plusieurs groupes internationaux publient régulièrement des résultats dans ces thématiques, ce qui confirme l'intérêt de ces recherches.

Nos méthodologies ont les applications suivantes :

- ◆ les complexes protéines/ligands à intérêt pharmaceutiques : analyse des interactions électrostatiques.
- ◆ l'analyse de l'énergie de cohésion des cristaux de composés médicinaux.

Les propriétés électrostatiques de plusieurs composés médicinaux ont été caractérisées par cristallographie à résolution ultra haute : anti-inflammatoires non-stéroïdiens et leurs complexes métalliques (paracétamol, Cu-aspirinate), les inhibiteurs de l'intégrase du virus VIH, les nouveaux antitumoraux comme la céphalotaxine et le busulfan.



La figure montre les électrons impliqués dans les liaisons covalentes entre les atomes (en bleu : accumulation d'électrons, en rouge : déficit en électrons).

Le projet « LibrarEnergy Librairie d'atomes non-sphériques : vers le calcul précis des énergies d'interaction dans les biomolécules et zéolithes » est coordonné par le CRM2(CNRS, Nancy Université). Il associe aussi la Faculté de Pharmacie de Chatenay Malabry et l'École Centrale Paris. Le projet a commencé en janvier 2006. Il bénéficie d'une aide ANR de budget 300 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

La densité de charge de l'aldose réductase humaine, une protéine impliquée dans les complications du diabète, a été analysée à très haute résolution. La densité électronique d'un composé médicamenteux, le fidarestat, un inhibiteur de l'enzyme, a été déterminée. Les interactions électrostatiques entre le ligand et la protéine ont été caractérisées en utilisant le modèle d'atome multipolaire.

L'utilisation de la librairie d'atomes multipolaires en conjonction avec la structure cristallographique à très haute résolution d'une protéine DING, a permis notamment d'élucider le mode de fixation du phosphate dans cette classe de protéines.

Production scientifique et brevets

Seize articles ont été publiés dont deux dans le « Journal of the American Chemical Society ».

Les travaux de recherches ont donné lieu à quinze conférences dans les congrès internationaux.

Un brevet de modèle moléculaire en plastique a été déposé ; les forces attractives et répulsives entre les atomes sont simulées par des aimants.

Programme Calcul Intensif et Simulation, édition 2006

Projet PROTEUS

Les protéines en plis : de nouvelles approches pour la prédiction de structures

Reconnaissance de pli et repliement inverse : vers une prédiction à grande échelle des structures de protéines

La séquence d'acides aminés d'une protéine détermine sa structure 3D et, à travers celle-ci, sa fonction biologique. Sur les millions de protéines connues aujourd'hui, seules environ 50.000 ont une structure 3D qui a été déterminée expérimentalement. Pour les autres, des méthodes de modélisation peuvent prédire la structure 3D, à condition de disposer d'une autre protéine, de structure connue, et dont la séquence d'acides aminés est suffisamment similaire à la première. Identifier une protéine similaire, c'est un problème de classification bien connu, qui peut être difficile et coûteux. Nous explorons des algorithmes plus performants et plus rigoureux, mais aussi une nouvelle approche, qui commence par résoudre le problème inverse du repliement : identifier les séquences les plus favorables correspondant à une structure 3D donnée.

Algorithmique et calcul distribué volontaire à très grande échelle

Pour évaluer la similarité entre deux protéines, dont une de structure connue et l'autre de structure inconnue, l'étape clé est de mettre en correspondance leurs deux séquences d'acides aminés, tout en tenant compte de la structure 3D connue. Malgré les avancées récentes dans ce domaine, toutes les méthodes décrites dans la littérature ne proposent que des alignements « séquence-structure » globaux. Or, les alignements séquence-séquence locaux ont montré qu'ils permettaient de détecter des régions fonctionnelles dans des familles de protéines. Nous avons développé une nouvelle approche de la reconnaissance des repliements qui permet d'aligner une partie d'une structure de protéine avec une partie d'une séquence de protéine afin de détecter des similarités locales (alignement séquence-structure local). Nous montrons que cette approche, basée sur la programmation mixte en nombre entiers (MIP), améliore la qualité de la reconnaissance. Par ailleurs, pour le problème inverse du repliement, nous avons développé un ensemble logiciel qui implémente une méthode d'évolution dirigée. Pour une structure 3D de protéine donnée, la méthode explore à grande échelle les mutations d'acides aminés qui sont acceptables (conférant une bonne stabilité à la structure 3D). La méthode a été paramétrée et testée sur une dizaine de protéines. Pour appliquer la méthode à des centaines de protéines, nous avons également développé une plateforme de calcul distribué volontaire, basé sur les outils Open Source BOINC. Cette plateforme a été testée puis déployée à grande échelle, chez plus de 30 000 volontaires dans plus de 100 pays.

L'économiseur
d'écran du projet
Proteins@Home



Le projet « Proteus Reconnaissance de pli et repliement inverse : vers une prédiction à grande échelle des structures de protéines » est coordonné par le Laboratoire de Biochimie de l'École Polytechnique en partenariat avec l'INRA (Jouy-en-Josas) et les Universités de Rennes, Nantes et Paris VI. Le projet a démarré en janvier 2007 pour une durée de 3 ans. L'aide apportée par l'ANR est de 500 k€ pour un coût total de 1,5 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Pour évaluer la similarité entre deux protéines, dont une de structure connue et l'autre de structure inconnue, une nouvelle approche permet de mettre en correspondance leurs deux séquences d'acides aminés, tout en tenant compte de la structure 3D connue. Nous avons également développé une nouvelle approche d'identification automatique des familles structurales de protéines. Enfin, pour le problème inverse du repliement, nous avons développé une plateforme de calcul distribué volontaire, Proteins@Home. Pendant des périodes de plusieurs mois, les calculs ont été déployés chez plus de 30 000 volontaires, délivrant une puissance de calcul soutenue d'environ un teraflop.

Production scientifique et brevets

Le projet a fait l'objet de plusieurs publications dont :

- M. Schmidt am Busch, D. Mignon & T. Simonson (2009), *Proteins*, 77, 139 – 158. Computational protein design as a tool for fold recognition.
- M. Schmidt am Busch, A. Lopes, N. Amara, C. Bathelt & T. Simonson (2008), *BMC Bioinformatics*, 9, 148-163. Testing the Coulomb/Accessible Surface Area solvent model for protein stability, ligand binding, and protein design.
- Schmidt am Busch, A. Lopes, D. Mignon & T. Simonson (2008), *Journal of Computational Chemistry*, 29, 1092-1102. Computational protein design : software implementation, parameter optimization, and performance of a simple method.
- Sam, V, Tai, CH, Garnier, J, Gibrat, JF, Lee, B, Munson, PJ (2008), *BMC BIOINFORMATICS*, 9: Art. No. 74. Towards an automatic classification of protein structural domains based on structural similarity.

Programme « Biologie Systémique »

Projet PHEROSYS

Comment analyser et modéliser le traitement de l'information dans un cerveau miniature

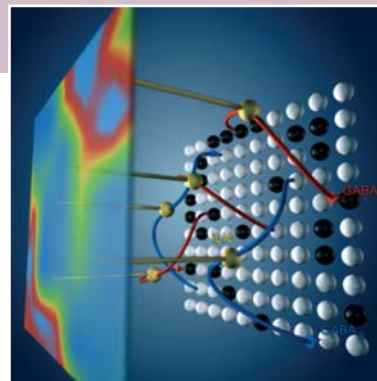
Pour une compréhension détaillée du fonctionnement d'un système olfactif

Dans le règne animal l'olfaction joue un rôle vital dans la détection de nourriture et la recherche du partenaire sexuel. Cela explique qu'un nombre important de travaux lui ait été consacré ces dernières années. En particulier, la découverte de la superfamille des gènes récepteurs olfactifs a été récompensée par le prix Nobel en 2004. Le Projet PHEROSYS vise à mieux comprendre comment le système nerveux traite l'information olfactive en prenant l'exemple des papillons de nuit. Les femelles signalent leur présence aux mâles en libérant un mélange de deux-tiers composés volatils – les phéromones sexuelles. Le système olfactif des mâles comporte deux parties dont l'une est réservée à la perception des phéromones. Les neurones récepteurs, en grand nombre, portent des récepteurs activés par les composés phéromonaux. Ils envoient leurs messages dans un réseau de neurones du cerveau, le complexe macroglomérulaire, où ils sont traités. Cette organisation étant fort semblable à celle du système olfactif généraliste des insectes et des vertébrés, le système phéromonal est bien adapté à l'étude du codage olfactif tant pour la connaissance biologique que pour les nombreuses applications en olfaction artificielle.

L'utilisation de méthodes complémentaires fondées sur l'expérimentation et la modélisation

Le projet PHEROSYS met en œuvre des méthodes variées. L'expérimentation repose essentiellement sur l'enregistrement électrique de l'activité des neurones du système dans les antennes et le cerveau, en réponse à des stimulations uniques ou périodiques par la phéromone sexuelle et ses principaux composés à des concentrations connues. On peut ainsi accéder à une connaissance fine des messages que les neurones de l'antenne envoient au cerveau et que les neurones du cerveau échangent entre eux. La modélisation vise à reproduire ces messages dans des neurones individuels et associés en réseau. Les modèles de neurone font usage notamment de canaux ioniques dont les ouvertures et fermetures orchestrent les mouvements d'ions qui sont à l'origine des courants enregistrés expérimentalement. Les interactions synaptiques excitatrices et inhibitrices sont pris en compte dans des modèles de réseaux de neurones. Grâce à l'émergence de nouveaux outils théoriques et d'ordinateurs de plus en plus puissants, il est aujourd'hui possible de simuler des réseaux de complexité croissante. Un cercle vertueux est créé où les modèles bénéficient des expériences et les inspirent en retour.

Modèle d'assemblées neuronales spécifiques dans le lobe antennaire de l'insecte.



« PHEROSYS Olfactory coding in the insect pheromone pathway: models and experiments. » est un projet de recherche en biologie systémique coordonné par l'INRA de Versailles. Il associe aussi le LORIA de Nancy et l'Université du Sussex à Brighton. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 380 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,35 M€.

IMPACTS

Comment réaliser un système artificiel capable de discriminer des odeurs en s'inspirant du système biologique ? Les chercheurs du projet Pherosys ont fait un pas en ce sens en développant des modèles qui imitent le fonctionnement du système olfactif des insectes.

Résultats majeurs

Deux modèles significatifs ont été mis au point : 1) Un modèle de neurone récepteur qui décrit les réactions biochimiques et électriques en jeu lors de sa stimulation par la phéromone, telles que son interaction avec les récepteurs membranaires, sa destruction enzymatique et l'ouverture séquentielle de canaux ioniques. 2) Un modèle du réseau de neurones du lobe antennaire à l'échelle 1/10, qui éclaire les mécanismes d'encodage d'une odeur, dans lequel, lors d'une stimulation stationnaire, certains groupes de neurones synchronisent leur activité sur la période de l'activité moyenne du réseau.

Production scientifique et brevets

Les résultats obtenus ont donné lieu à plusieurs publications dans des journaux à comité de lecture international dont PLoS Computational Biology (4(8), 2008 et 5(3), 2009), Cell and Tissue Research (337: 491-511, 2009), Journal of Experimental Biology (212: 1191-1201, 2009). Ils ont également donné lieu à plusieurs communications dans des congrès consacrés à l'olfaction et à la neuroinformatique.

Programme « Biologie Systémique », édition 2006

Projet EVOLVINGSYST

Evolution des bactéries à long terme, à échelle humaine d'un million d'années

La biologie des systèmes pour disséquer les processus évolutifs au long terme

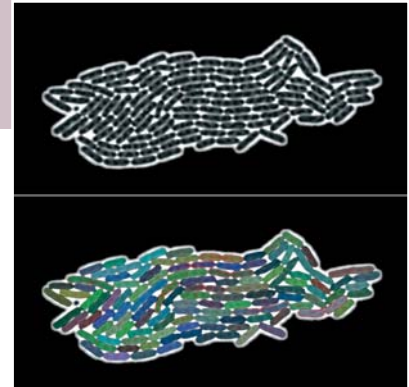
L'évolution a façonné l'extraordinaire diversité des êtres vivants. Elle est difficile à étudier car elle implique un passé lointain et des circonstances uniques. Son étude est cependant possible grâce à des expériences d'évolution de bactéries en laboratoire, permettant de comparer un ancêtre et ses descendants pendant des dizaines de milliers de générations. La possibilité de congeler et revivifier ancêtres et intermédiaires de l'évolution permet de disposer d'une machine à remonter le temps en ouvrant son congélateur. La plus longue expérience d'évolution en cours a été initiée en 1988 et douze populations ont été propagées depuis à partir d'un ancêtre commun d'*Escherichia coli*, ce qui représente plus de 45 000 générations.

Le projet EvolvingSyst est pluridisciplinaire : il inclut des analyses moléculaires et phénotypiques, une technologie de microscopie de pointe pour suivre chaque cellule individuellement ainsi qu'une automatisation des analyses d'images. Ce projet déterminera les sous-systèmes moléculaires et cellulaires responsables de l'évolution de la valeur sélective et ceux impliqués dans chacun des phénotypes ayant co-évolué au cours de cette expérience d'évolution.

Des technologies de pointe en génétique moléculaire, microscopie et analyse d'images au service de l'évolution

Nous avons combiné le développement d'une technologie automatisée d'analyse d'images avec le suivi génétique et phénotypique des processus évolutifs pour comprendre comment les contraintes génétiques, moléculaires et évolutives sont intégrées dans ce système cellulaire. Pour analyser finement les phénotypes, nous disposons d'une technique de microscopie permettant non seulement de mesurer les phénotypes cellulaires moyens qui ont co-évolué (morphologie, taille, asymétrie, vitesse de croissance), mais aussi toute la distribution et les corrélations entre cellules. Pour produire à haut débit des données de qualité, cette analyse est effectuée entièrement automatiquement. Ce projet inclut donc une composante d'analyse d'images pour atteindre un très haut degré de fiabilité et éviter un post-traitement systématique. Les caractéristiques fines des phénotypes ainsi obtenus sont comparées aux données génétiques disponibles, chaque mutation étant classée en fonction des sous-systèmes dans lesquels elle intervient. Les prédictions tirées de ces corrélations sont ensuite testées expérimentalement pour disséquer l'imbrication de ces systèmes qui ont co-évolué.

En haut, une image tirée d'une séquence brute. En bas, la même image après traitement. Les méthodes d'analyse mathématique d'images, développées au sein



du projet EvolvingSyst, ont permis d'aboutir à un logiciel qui identifie automatiquement les cellules dans chaque image de la séquence et suit au cours du temps leur déplacement (traits rouges courts) et leurs divisions (traits rouges longs) pour aboutir à un lignage complet.

« EVOLVINGSYST Dissecting co-evolved systems : towards a systems biology approach of cell phenotypes within evolving lineages »

est un projet de recherche fondamentale et de développement expérimental coordonné par le Laboratoire Adaptation et Pathogénie des Microorganismes UMR5163 CNRS-Université Joseph Fourier (Grenoble 1). Il associe aussi le laboratoire Génétique moléculaire évolutive et médicale de l'Inserm U571 Université Paris V, le laboratoire MAP5 de Mathématiques appliquées UMR8145 CNRS-Université Paris Descartes et le Génoscope (Evry). Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 300 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,2 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Nous avons identifié des phénotypes qui co-évoilent avec l'augmentation de la performance bactérienne lors de l'expérience d'évolution : une modification de l'architecture des réseaux de régulation, une augmentation de la taille moyenne et une modification de la morphologie des cellules bactériennes, une augmentation de la variabilité cellulaire suggérant des divisions asymétriques et une augmentation de la vitesse de croissance et de la quantité de biomasse. Des mutations responsables de ces changements évolutifs ont été identifiées. Un logiciel Cellst de traitement d'images a été développé.

Production scientifique et brevets

Ce projet a conduit pour l'instant à onze publications dans des revues internationales à comité de lecture (dont PNAS, PLoS Genetics, Molecular Microbiology, Ecology Letters, Journal of Bacteriology) et trois communications (colloques « Modélisation statistique des images », ISBI 2008-IEEE International Symposium on Biomedical Imaging-, et BioSysBio 2008).

Programme « Biologie Systémique », édition 2006

Projet INTEGRACTCELLS

Analyse génomique et modélisation mathématique du développement des lymphocytes T

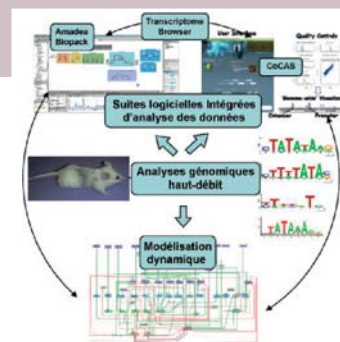
Génomique fonctionnelle du développement des lymphocytes T

Les lymphocytes T sont des composants essentiels du système immunitaire. Ces cellules jouent un rôle majeur de protection contre les agressions antigéniques microbiennes et les cancers. Elles acquièrent ce potentiel durant leur développement au travers d'étapes de sélection marquées par la mise en place d'un récepteur unique de reconnaissance antigénique et d'une tolérance aux molécules propres à l'organisme. Le dérèglement de ces phénomènes se traduit par des affections cliniques graves, insuffisances immunitaires, maladies autoimmunes ou leucémies. Pour l'heure, les réseaux de contrôle (ou programmes génomiques) qui gouvernent ces processus restent mal définis hypothéquant d'autant le traitement de ces pathologies. Le projet IntegraTcells vise à caractériser ces programmes chez la souris, organisme mammifère de référence, en combinant les analyses biologiques à haut-débit (utilisation de puces ADN et séquençage massif) et la modélisation mathématique. Affinés et validés au travers de mutations ciblées, les modèles générés serviront à identifier les nœuds de contrôle et mécanismes moléculaires responsables ; ainsi à mieux comprendre et traiter les susceptibilités aux infections et autres désordres immunitaires.

Optimisation synergique des technologies d'analyse génomique et de modélisation dynamique appliquée à l'étude du développement des lymphocytes T

Notre démarche repose sur (i) l'utilisation de techniques d'analyse génomique haut-débit ChIP-Chip et ChIP-Seq appliquées aux populations purifiées de lymphocytes T normaux ou porteurs de mutations géniques spécifiques ; (ii) l'élaboration de logiciels adaptés à l'interprétation des masses de données ainsi générées ; (iii) leur confrontation - par le biais de l'informatique - avec celles déjà disponibles ; et (iv) la modélisation dynamique du processus étudié. Ainsi, nous avons mis au point et rendu accessible la suite logicielle d'étude ChIP-Chip CoCAS maintenant amplement utilisée. La mise en forme de l'algorithme DBF-MCL assure par ailleurs la recherche automatisée de gènes co-exprimés interrogeables via l'interface TranscriptomeBrowser pourvue de nombreux outils d'analyse. La plateforme Amadea Biopack de l'entreprise partenaire ISoft permet la création de suites versatiles d'examen des données expérimentales en lien avec les connaissances du domaine. L'ensemble agit comme catalyseur de modélisations qui rendent compte, par exemple, de l'expression d'un récepteur antigénique unique ou des interactions entre régulateurs de la différenciation T en sous-types effecteurs, essentiels aux fonctions immunitaires.

Le projet IntegraTcells met en place et utilise un ensemble de modules et suites logicielles d'analyse des données génomiques générées à partir de lymphocytes T chez la souris. En synergie avec la modélisation mathématique, ces approches fournissent au chercheur de puissants outils de décryptage des mécanismes biologiques qui contrôlent le développement de ces cellules indispensables aux fonctions de défense de l'organisme contre les agressions infectieuses et les cancers.



« INTEGRACTCELLS Analyse et modélisation intégrative du développement des Lymphocytes T » est un projet coordonné par le Centre d'Immunologie de Marseille-Luminy (CIML). Il associe aussi le Centre de Physique Théorique (CPT), Marseille, Technologies Avancées pour le Génome et la Clinique (TAGC), Marseille et l'entreprise ISoft, Gif-sur-Yvette. Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 444 k€ pour un coût global de l'ordre de 750 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Production de la suite logicielle CoCAS d'analyse de données ChIP-Chip/Chip-Seq.

Création et implémentation (i) d'algorithmes identifiant les états stables et circuits fonctionnels de régulation de modèle logiques complexes ; et (ii) d'applications modulaires capables, à partir des données brutes ChIP-Chip/Chip-Seq, de fournir la liste des motifs génomiques impliqués dans la reconnaissance du régulateur étudié. Elaboration (i) d'un modèle logique du réseau de contrôle du développement des lymphocytes T auxiliaires en cellules effectrices ; et (ii) d'un modèle dynamique de l'exclusion allélique des réarrangements du gène TCR.,

Production scientifique et brevets

Naldi et al (2007), Lecture Notes Bioinformatics 4695 :233.

Chaouiya et al (2008), J Discrete Algorithms 6 : 165.

Remy et al (2008), Adv. Applied Mathematics 41 : 335.

Benoukraf et al (2009), Bioinformatics 25 : 954.

Lopez et al (2009), PLoS One3(12):e4001.

Naldi et al (2009), Lecture Notes Bioinformatics 5688 : 266.

Naldi et al (2009), Biosystems 97 : 134.

Et, sous presse ou soumis les publications suivantes :

Chaouiya et al, Natural Computing ; Bonnet et al, J Immunol ; Cauchy et al Methods Mol Biol.

Farcot et al (soumis pour publication).

Grands challenges sociétaux		
Acronyme et nom du projet		Le projet résumé en un titre
Transports, Villes		
D.I.B.	Développement d'outils quantitatifs pour l'analyse couplée pression – vitesse en aérodynamique instationnaire. Phénomènes acoustiques associés	Aérodynamique et Bruit
MIRO2	Modélisation Intra-urbaine des Rythmes quOtidien : accroître l'accessibilité à la ville pour maîtriser la mobilité urbaine	Accroître l'accessibilité à la ville pour maîtriser la mobilité
Sécurité		
ASPIC	Aide par la Simulation à la Protection des Infrastructures Critiques	Simulation interactive de capteurs, de menaces et de comportements humains en environnement 3D
Communication		
FREIA	Framework for Embedded image Applications	La technologie des outils d'optimisation des super ordinateurs au service de caméras intelligentes
Animaré	Expressive rendering models for 2D/3D animations	L'informatique graphique impose son style
Santé		
DOCK	Conformation Sampling and Docking on Grids	De futurs médicaments testés virtuellement
OCFIA	OCFIA	Modélisation numérique cardio-vasculaire en vue d'une utilisation clinique
TurboSpeech	Physical modelling of turbulent flow in the human upper airways	Où comment se comporte le souffle pendant que l'on parle ?
fGATE	Simulation efficace d'examens précliniques et cliniques en tomographie d'émission	fGATE : un outil de simulation numérique pour accélérer les innovations en imagerie médicale
RHOME0	Research on peripheral T-Lymphocyte Homeostasis	Modèles mathématiques et statistiques pour comprendre le système immunitaire
Environnement		
MEDUP	Forecast and Projection in climate scenario of Mediterranean intense events : Uncertainties and Propagation on environment	Les sources d'incertitudes de la modélisation des événements intenses en Méditerranée
CICLE	Calcul Intensif pour le Climat et l'Environnement	La puissance des super-calculateurs au service de la modélisation du climat
OSIFI0ST	Outil de Simulation pour la Formation des Images Optiques Sous-marines en milieu Turbide	Vers la synthèse d'images optiques sous-marines réalistes
STATOCEAN	Mécanique statistique hors équilibre de courants océaniques	Réduction de la complexité et amélioration des modèles numériques grâce à la mécanique statistique
VODA	Assimilation variationnelle de données pour des applications océaniques multi-échelles	Comprendre et prédire la dynamique océanique
ColonSGS	Mise en place d'une structure génétique spatiale au cours d'une colonisation : modèles mathématiques et cas d'études chez deux espèces forestières (cèdre et hêtre)	Dispersion de graines in silico pour comprendre la diversité génétique en fin de colonisation
MICAS	Modelling and Intensive Computation for Aquifer Simulations	Les supercalculateurs vont-ils remplacer la baguette du sourcier ?
HEXECO	Hydrodynamique Extrême du large à la Côte	La modélisation de l'hydrodynamique liée aux événements météorologiques extrêmes

Grands challenges sociétaux

Acronyme et nom du projet		Le projet résumé en un titre
Environnement		
INLOES	Etude des interactions non-linéaires des échelles océaniques grâce au Earth Simulator	Importance des petites échelles sur la circulation générale océanique
TSUMOD	Tsunamis : amélioration de la modélisation numérique et de la connaissance des processus de génération, propagation et amplification	Comment comprendre et prévenir les tsunamis par les moyens de la simulation numérique ?
COHERSiS	Vers une approche cohérente du signal sismique complet	Développement d'une infrastructure pour l'analyse des données géophysiques modernes
QSHA	Quantitative seismic hazard assessment	Les ondes sismiques dans la croûte terrestre pour une estimation fine du mouvement du sol
SEISCOPE	Imagerie sismique multi-échelles / multi-paramètres à partir de dispositifs "global-offset"	L'imagerie sismique haute résolution : un enjeu pour la connaissance du sous-sol (gestion des ressources et des déchets)
AUTREMENT	Aménager l'Utilisation des Terres et des Ressources de l'Environnement en Modélisant les Ecosystèmes aNTropiques	Modélisation de l'impact du changement climatique sur les systèmes agricoles
IRCAAM	Influence Réciproque des Climats d'Afrique de l'ouest, du sud de l'Asie et du bassin Méditerranéen	La puissance de calcul de Météo-France et du CNRS pour mieux comprendre l'origine des canicules
SIMONANOMEM	Simulation and Modeling of the transport across Polymeric Nanoporous Membranes prepared by self-assembly of block copolymers	Etude fondamentale des membranes nanoporeuses pour le dessalement des eaux saumâtres et de mer
Géologie numérique	Prédire, intégrer et enrichir la géologie par la modélisation numérique	De la physique, des maths et des ordinateurs pour expliquer la formation des montagnes
IMPACT BOREAL	IMPACT of Climate on hydrology and methane production in anaerobic soils in BOREAL Regions	Rôle des zones humides boréales dans le changement climatique au XXIème siècle?
NUMASIS	NUMASIS Adaptation et Optimisation des Performances Applicatives sur architectures NUMA. Etude et Mise en œuvre sur des Applications en SiSmologie	Optimisation des simulations sismiques sur ordinateurs massivement parallèles

Programme « BLANC », édition 2007

Projet D.I.B.

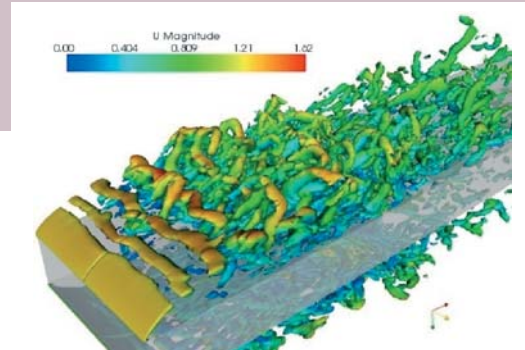
Aérodynamique et Bruit

Pour une réduction des nuisances sonores des véhicules terrestres

Le projet vise l'étude d'aérodynamiques instationnaires turbulentes et des sources acoustiques associées. Ces écoulements, typiques de ceux qui se développent sur les automobiles, sont fortement décollés et en régime turbulent. Cette recherche est sous-tendue par des enjeux de sociétés très clairs (sécurité, pollution sonore). Sur le plan fondamental, la difficulté d'analyser quantitativement ces écoulements et leurs mécanismes de génération de bruit rayonné ou transmis est un défi scientifique très important. Expérimentalement, l'approche implique des mesures multi-capteurs (pression/vitesse) résolues en espace et en temps dont il est extrêmement difficile d'extraire la contribution à l'aéroacoustique. La simulation numérique, quant à elle, est certes capable de fournir une information plus complète mais elle souffre de la grande difficulté de résoudre ou modéliser les petites échelles de l'écoulement en proche paroi et de fournir des statistiques convergées. Celles-ci sont pourtant nécessaires à l'application d'outils statistiques modernes. Par ailleurs, les approches numériques et expérimentales génèrent un tel volume de données que des outils spécifiques de traitement doivent être inventés.

Une utilisation croisée de l'expérimentation et des calculs hautes performances en aérodynamique et en aéroacoustique

Sur la base de trois situations physiques sélectionnées par les partenaires pour leur complémentarité, un enjeu fort est d'établir de nouvelles spécifications et de nouveaux standards d'analyse en termes de mise en place d'expérimentations multi-capteurs et de performances de simulations numériques aérodynamiques et aéroacoustiques. Cet enjeu est valable tant au plan fondamental qu'au plan appliqué. Expérimentations et simulations s'enrichissent mutuellement et sont étroitement couplées au développement d'outils d'analyse novateurs de l'écoulement [analyse topologique quantitative; analyse lagrangienne; outils d'estimation stochastique et de décomposition propre...] afin de suivre les événements significatifs de l'écoulement en termes de niveaux énergétique et d'impact acoustique. L'examen et le développement des cadres théoriques adaptés doivent permettre de définir les « filtres physiques » pertinents pour l'analyse du champ de pression instantané en paroi, à cœur ou dans le lointain à partir de ces méthodes d'identification quantitatives. Ce problème est difficile car l'efficacité acoustique d'une quantité source est souvent d'un ordre de grandeur inférieur à cette même quantité.



Simulation aux grandes échelles de l'écoulement turbulent autour d'une plaque plane épaisse: iso-surface du critère Q ($Q = 3$) colorée par la norme de vitesse au niveau de la zone de recirculation mettant en évidence le développement des structures tourbillonnaires de grande taille au sein de la couche de cisaillement située sur la partie supérieure du large décollement. (Y. Fraigneau, C. Tenaud - LIMS)

« D.I.B. Développement d'outils quantitatifs pour l'analyse couplée pression - vitesse en aérodynamique instationnaire. Phénomènes acoustiques associés. » est un projet coordonné par le Laboratoire d'Etudes Aérodynamiques (LEA - UMR CNRS-ENSMA - Université de Poitiers 6609) de Poitiers. Il associe aussi le Laboratoire d'Informatique pour la Mécanique et les Sciences de l'Ingénieur (LIMS), laboratoire propre du CNRS et l'industriel PSA Peugeot-Citroën (Dépt. DRIA/DSTF/MFTA). Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 48 mois: il bénéficie d'une aide ANR de 450k€ pour un coût global de l'ordre de 1,58M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Un outil commun dédié à l'identification de structures incluant des techniques Lagrangiennes a été mis en place. Les résultats de calculs par Simulation Numériques Directes, Simulations aux grandes échelles et Méthodes Hybrides (RANS/LES) sont exploités. Différentes approches aéroacoustique sont explorées: (i) un calcul du champ de pression à partir d'une méthode spectrale en éléments de frontière (BEM) a été implémenté (fortran/mpi) et testé avec succès, (ii) parallèlement, un prolongement champ proche du formalisme de Lighthill est en cours de développement.

Production scientifique et brevets

Deux communications à la « 30th AIAA Aeroacoustics Conference » et trois communications nationales portant sur les méthodes d'identification de structures ont été présentées. Ces communications d'ordre méthodologiques seront complétées prochainement par des travaux portant sur l'analyse des configurations calculées et/ou mesurées dont les premiers résultats sont maintenant disponibles.

Programme « Villes durables », édition 2008

Projet MIRO2

Accroître l'accessibilité à la ville pour maîtriser la mobilité urbaine

Du droit à une mobilité choisie au droit à la ville pour tous

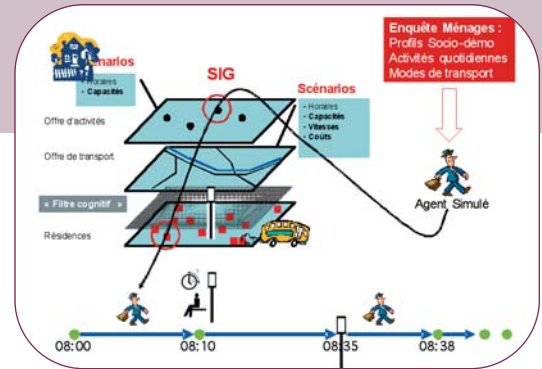
« Trop de mobilité tue la ville ». L'enjeu d'un développement urbain harmonieux et durable est alors d'identifier des conditions de mobilité quotidienne permettant à la ville de continuer à jouer son rôle de mise en relation, tout en conservant la maîtrise de la croissance d'externalités négatives qui se posent aujourd'hui avec une acuité particulière : étalement urbain, congestion, consommation et production énergétique, risques et nuisances...

Cet équilibre délicat et fragile implique, pour être atteint, une réflexion de fond sur la notion d'accessibilité à l'espace urbain, non seulement du point de vue des lieux (accessibilité structurelle), mais également et surtout de celui des individus qui les habitent et qui, pour l'organisation de leurs activités quotidiennes, sont amenés à naviguer entre besoins et ressources, contraintes et opportunités (accessibilité fonctionnelle).

Compte tenu de la complexité des organismes urbains et des problèmes posés, ainsi que des fortes contraintes qui limitent nos capacités d'expérimentation, ce projet vise également à contribuer au développement de méthodes et de protocoles de modélisation et de simulation nous permettant à terme d'explorer, sur une base quasi expérimentale, le fonctionnement même des systèmes urbains.

Des trajectoires individuelles à la ville en mouvement : vers une simulation multi-agents de la mobilité urbaine quotidienne

L'accessibilité spatio-temporelle réelle des citoyens aux territoires urbains ne peut être obtenue simplement en travaillant sur l'accessibilité des lieux, et implique de reconstruire les programmes d'activités et les trajectoires spatio-temporelles des individus. Des données fiables existent (enquêtes ménages-déplacements), qu'il s'agit d'exploiter et de valoriser dans une perspective renouvelée. Toutefois, compte tenu des interactions en jeu et de la forte dépendance des comportements individuels aux situations localement rencontrées, nous proposons une approche fondée sur la simulation informatique individus-centrée, à base d'agents. Une telle approche permet d'explorer aussi bien l'influence des comportements individuels sur le fonctionnement global de la ville que les possibles modifications comportementales induites par des modifications macroscopiques.



Des agents sont créés à partir de données d'enquête et peuplent un environnement urbain virtuel réalisé dans un système d'information géographique. Ces agents naviguent alors dans cet environnement dynamique qu'ils ne maîtrisent pas complètement.

Le projet « MIRO2: Modélisation Intra-urbaine des Rythmes quOtidien: accroître l'accessibilité à la ville pour maîtriser la mobilité urbaine »

est un projet de recherche pluridisciplinaire qui associe géographes, économistes, statisticiens et informaticiens de plusieurs institutions et universités. Il est coordonné par l'Université de Strasbourg (LIVE) et regroupe également le CNRS, l'IRD (GEODES) et les Universités de Franche-Comté à Besançon (CRESE et LIFC), de Bourgogne (THEMA), de Grenoble (PACTE) et d'Orléans (CEDETE). Il bénéficie d'une aide ANR de 346 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,5 M€. Il a démarré en janvier 2009, pour une durée de 48 mois.

Ce projet s'inscrit dans la continuité du projet MIRO, financé par la DRAST dans le cadre du PREDIT3 (GO1) et fait partie des projets labellisés par le pôle Véhicules du Futur et par l'institut des Systèmes Complexes de Paris-Ile de France (www.iscpif.fr).

IMPACTS

Résultats majeurs

Ce projet vise à créer des environnements urbains virtuels réalistes (SIG des agglomérations de Dijon et Grenoble) et à y créer de larges populations d'agents synthétiques à partir de données de recensement et d'enquête. Ces agents intégreront des mécanismes complexes d'arbitrage et de choix, mobilisables lors du processus de prise de décision dans un environnement complexe porteur d'opportunités et de contraintes. De nouveaux indicateurs d'accessibilité spatio-temporelle désagrégés seront alors produits, afin de préciser les pertes et gains d'accessibilité engendrés par des projets d'aménagement, ainsi que leurs retombées sur les programmes d'activités des individus. Des protocoles de vérification et de validation permettront de déterminer la confiance à accorder aux simulations ainsi produites. Nous testerons également les possibilités d'évolution vers une plateforme de simulation collaborative permettant de réunir différents acteurs autour d'un modèle et de les faire participer à un même processus de simulation.

Programme « Concepts systèmes et outils pour la sécurité globale », édition 2006

Projet ASPIC

Simulation interactive de capteurs, de menaces et de comportements humains en environnement 3D

Simulation pour l'optimisation de la protection des sites et des personnes

L'objectif du projet ASPIC est de développer le démonstrateur d'un outil d'aide au positionnement et au déploiement de capteurs pour optimiser la surveillance et la protection des infrastructures critiques (ex : aéroports, gares, stations de métro, sites sensibles...). Le démonstrateur, par l'intermédiaire d'une IHM conviviale, permet de prendre en charge une modélisation en 3D d'un site, de positionner divers capteurs dans cet environnement virtuel et de visualiser de manière interactive leur enveloppe de couverture et leur réponse face à une menace simulée de type incendie ou propagation de gaz toxique. Le démonstrateur possède un module de simulation de comportement humain permettant d'évaluer les impacts de la menace suivant différents scénarios, chaque personnage ayant des interactions avec la menace (cumul de dose) mais aussi avec les personnages de son entourage (comportement de foule). La possibilité d'activation d'éléments de sécurité (alerte et évacuation, déclenchement d'une ventilation d'extraction) sur une simulation de menace donnée permet également de vérifier l'adéquation entre les moyens de détection déployés et les procédures à mettre en œuvre pour la sécurité du site.

Intégration et interfaçage des différentes briques de simulation

Le démonstrateur utilise des briques technologiques préexistantes ou fait appel à des développements spécifiques notamment pour modéliser la portée et la sensibilité des capteurs. Cet outil de simulation s'appuie sur une IHM interactive visualisable via un navigateur Internet et permettant une utilisation aisée du système par des non-spécialistes de la simulation.

Les étapes du développement ont consisté principalement en :

- ◆ La modélisation 3D du site à partir de différents éléments tels que des plans vectoriels ou des photos.
- ◆ Le choix des capteurs et leur modélisation (codage des algorithmes de détection).
- ◆ La modélisation des menaces avec la prise en compte de la 3D de l'infrastructure et de l'aérodynamique du système de traitement d'air.
- ◆ Le développement d'une IHM de préparation et de visualisation de simulations.
- ◆ La visualisation 3D du site.
- ◆ Le positionnement d'une source de menace.
- ◆ Le positionnement des capteurs et visualisation de leur enveloppe de couverture.
- ◆ Le calcul des instants de détection sur un scénario de menace donné.

- ◆ L'introduction d'éléments de comportement humain prenant en compte des notions de zones de passage, de trajet, de classe d'avatar et de scénarios.

- ◆ La gestion de centrale d'alerte avec possibilité de déclencher une évacuation.

- ◆ Le lancement d'une simulation avec visualisation en temps réel de la dispersion, de la détection des capteurs avec suivi. Suivi des statistiques globales des effets toxiques sur les avatars.

Propagation d'un toxique



« ASPIC Aide par la Simulation à la Protection des Infrastructures Critiques » est un projet de développement expérimental coordonné par THALES. Il associe aussi l'INERIS, Bertin Technologies et BULL. Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 28 mois (achevé en mai 2009) : il bénéficie d'une aide ANR de 800 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,5 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Le projet a abouti à la conception d'un démonstrateur sur le cas concret du terminal T2.1 de l'aéroport de Nice Côte d'Azur. Le démonstrateur permet la simulation de propagation de gaz toxiques (lourd et léger) en prenant en compte l'architecture et l'aérodynamique des lieux. Dans ce cas, la concentration est calculée en chaque point du bâtiment et est directement utilisable pour le positionnement des capteurs ou la visualisation des effets toxiques sur les personnes. Il permet également la simulation de la propagation d'un incendie. Dans ce cas, les données calculées sont la température, la concentration en monoxyde de carbone (CO) et la visibilité (fumée).

Production scientifique et brevets

Un article a été publié dans le cadre des conférences WISG'08 et WISG'09.

Programme « Architectures du Futur », édition 2007

Projet FREIA

La technologie des outils d'optimisation des super-ordinateurs au service de caméras intelligentes

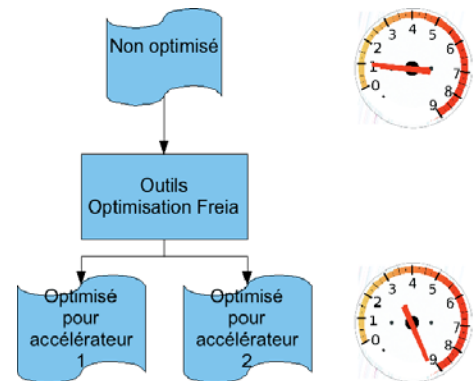
De meilleurs outils pour améliorer la puissance de calcul dans le traitement d'images

On a de plus en plus recours à des caméras vidéo pour faire des contrôles visuels automatiques gérés par un ordinateur. Les algorithmes de traitement d'images nécessaires pour ces contrôles demandent de grands moyens de calculs. Dans la plupart des cas, les ordinateurs courants sont suffisants, mais on doit parfois recourir à des circuits électroniques spécialisés qui accélèrent ces calculs. Ces circuits, très performants dans leur domaine d'origine, ne sont malheureusement pas polyvalents ; leur complexité et spécificité rendent le portage des programmes lent et ardu.

Le projet FREIA entend démontrer que ces lacunes peuvent être comblées. Une architecture matérielle flexible permettant une meilleure polyvalence sera proposée. Des outils seront développés pour transformer automatiquement un code source non optimisé, fonctionnant sur l'ordinateur de bureau, en un code optimisé fonctionnant sur le circuit spécialisé. On montrera la flexibilité et l'efficacité de ces solutions matérielles et logicielles sur des applications dans les domaines de la vidéo-surveillance et de l'automobile.

Les outils d'optimisation pour des plates-formes matérielles reconfigurables

Tout l'art de l'accélération électronique d'un algorithme consiste à réacheminer des données sur lesquelles le maximum de calcul sera effectué en même temps. Pour le traitement d'images, les algorithmes se divisent en plusieurs grandes classes, définies par le type de chemin nécessaire pour faire le calcul. Ce projet envisage d'associer plusieurs unités de calcul spécialisées dans chacune de ces grandes classes (chemins de données et moyens de calcul différents mais complémentaires). On pourra basculer vers l'une ou l'autre des unités au gré de l'algorithme, en s'appuyant sur les possibilités de reconfiguration de l'électronique. En parallèle, on développera des outils d'optimisation de calcul facilitant le portage des algorithmes de traitement d'images sur les différentes unités de calcul. Ces outils héritent du savoir-faire qui s'est développé dans les grands super-ordinateurs parallèles. Lors de l'analyse du programme, ils détecteront ce qui peut être optimisé en réordonnant, éliminant ou modifiant les instructions, pour les rendre compatibles avec les accélérateurs matériels. Les outils choisiront enfin l'accélérateur le plus approprié pour faire le calcul.



Les outils d'optimisation de FREIA permettent d'adapter automatiquement le code d'une application de traitement d'images en un code optimisé pour différents accélérateurs matériels

« FREIA FREIA : Framework for Embedded image Applications » est un projet de projet de recherche exploratoire coordonné par Armines/Mines-Paristech. Il associe aussi Thales (TRT) et Telecom Bretagne. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 884k€ pour un coût global de l'ordre de 1,9 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Le résultat majeur à mi-parcours de ce projet est la démonstration d'une plateforme matérielle de traitement d'images et d'outils d'optimisation d'algorithmes permettant de transformer un code source non optimisé en un code optimisé pour la 1^{re} plateforme visée avec des accélérateurs travaillant au niveau image. On a pu aussi montrer les premières étapes d'optimisation vers un accélérateur travaillant au niveau pixel et imagerie.

Production scientifique et brevets

Un article a été publié à la conférence RenPar en septembre 2009 sur une des approches utilisées pour l'optimisation de code source.

Programme « Jeunes chercheurs, Jeunes chercheuses », édition 2008

Projet ANIMARÉ

L'informatique graphique impose son style

Développer des outils intuitifs pour la création d'images animées, étendre la palette des styles graphiques

Le Rendu Expressif est une branche récente de l'Informatique Graphique qui offre de nouveaux styles prometteurs et s'est récemment démocratisée dans des domaines d'application tels que la production de films ou les jeux vidéos. Au jour d'aujourd'hui, seuls des artistes experts dans la manipulation d'outils très spécialisés sont capables de produire des résultats convaincants. Et même pour ces spécialistes, la tâche est extrêmement coûteuse en temps et limite intrinsèquement leur créativité. La raison de ces limitations est que les outils existants ne sont pas assez sophistiqués pour permettre des manipulations intuitives tout en offrant des styles variés. La principale motivation qui sous-tend le projet Animaré est de surmonter ces limitations, à la fois pour la création d'animations 2D (dessins animés) et 3D (synthèse d'images).

Tirer parti des découvertes récentes en vision humaine et en apprentissage par ordinateur

Fournir des outils intuitifs pour l'artiste revient à se mettre à sa place, en rendant contrôlables des éléments d'une image qui lui paraissent évidents. Il faut, par exemple, identifier les caractéristiques de forme les plus saillantes d'un objet 3D, ou reconstruire les différentes parties qui sont implicitement agencées dans un dessin 2D. Ces tâches relèvent de la Vision Humaine, hormis le fait que dans notre cas, nous avons accès à toute la structure d'un objet 3D ou d'un dessin 2D. Il faut alors adapter des méthodes qui ont été récemment développées en perception visuelle à l'information supplémentaire dont nous disposons.

Une fois ces éléments perceptuels identifiés, l'artiste peut alors les manipuler de diverses manières, qui dépendent du style qu'il veut donner au résultat final. Il n'existe cependant aucune fonction mathématique qui permette de caractériser tous les styles possibles : de nouveaux styles sont créés chaque jour. En conséquence, notre approche va consister à analyser un exemple de style fourni par l'artiste, afin de le propager à toute une animation. Cet approche « par l'exemple » va reposer sur des outils récents d'apprentissage par ordinateur.

« Animaré : Expressive rendering models for 2D/3D animations » est un projet coordonné par l'INRIA. Il associe aussi EPI IPARLA (INRIA Bordeaux Sud-ouest) et ARTIS (INRIA Rhône-Alpes). Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 137 k€ pour un coût global de l'ordre de 800 k€.



Les outils développés dans le cadre du projet Animaré permettent d'identifier des propriétés importantes d'objets 3D ou de dessins 2D et de les représenter dans divers styles. Ici, la méthode de « Light Warping » permet de mettre en avant des caractéristiques de surface les plus saillantes d'un objet 3D, tout en conservant son matériau et son environnement lumineux.

IMPACTS

Résultats majeurs

Le premier résultat marquant en ce début de projet est création d'une méthode de rendu intitulée « Light Warping » qui permet d'améliorer la perception de la forme d'un objet 3D sans toutefois modifier ses propriétés de matériau, ni son environnement lumineux apparent. Cette méthode a été publiée à la conférence internationale Siggraph et occupe la couverture frontale des actes imprimés. Cette publication nous a permis de prendre contact avec des industriels du jeu vidéo, du cinéma d'animation et d'effets spéciaux.

Production scientifique et brevets

Nous avons publié huit articles depuis le début du projet. Deux ont été publiés dans les conférences Siggraph et Siggraph Asia, numéros réguliers du journal Transactions on Graphics (TOG), et concernent respectivement la manipulation et l'extraction de l'éclairage. Une nouvelle méthode d'animation 2D a été publiée dans le journal IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics (TVCG), puis une évolution de cette méthode a été présentée à la Conférence on Computer Animation and Social Agents (CASA). La création de motifs a été explorée dans deux contextes : le drapé de textures, publié dans l'Eurographics Symposium on Rendering (EGSR) ; et la synthèse par l'exemple de motifs crayonnés, publié dans le Symposium on Non-Photorealistic Animation and Rendering (NPAR). Enfin, la stylization cohérente d'objets 3D en mouvement a donné lieu à deux publications, dans l'ACM Symposium on Interactive 3D Graphics and Games (I3D) et dans le Symposium on Applied Perception in Graphics and Visualization (APGV).

Programme « Calcul Intensif et Grilles de Calcul », édition 2005

Projet DOCK

De futurs médicaments testés virtuellement

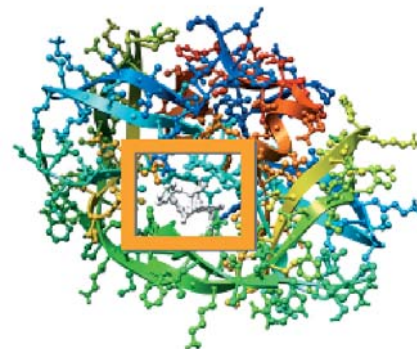
Docking moléculaire sur Grilles de calcul

Le docking moléculaire est au cœur d'applications pratiques comme la conception de médicaments et le criblage des banques de molécules potentiellement actives. Il a déjà fait ses preuves dans la conception de nouveaux ligands pour des agents anti-sida et anti-cancer, et pour le traitement de certains types de diabètes.

Les processus d'interaction à simuler sont d'une complexité combinatoire (taille des partenaires, nombre de degrés de liberté) défiant les capacités de calcul disponibles actuellement, d'où les trois impératifs de la recherche actuelle en modélisation moléculaire : (1) trouver des modèles mathématiques d'une simplicité maximale tout en restant fiables pour décrire le comportement moléculaire, (2) développer des puissants algorithmes d'optimisation distribués (Algorithmes génétiques, recherche locale et algorithmes hybrides) pour l'échantillonnage des états peuplés par ces molécules, et (3) déployer ces algorithmes intrinsèquement distribués sur des Grilles de calcul.

Docking@GRID: un logiciel open source pour le docking moléculaire flexible sur grilles

Confrontée à des coûts de R&D de plus en plus importants, l'industrie pharmaceutique cherche aujourd'hui à réduire le temps de découverte de ses nouveaux médicaments. Il faut en effet tester des milliers de molécules d'intérêt thérapeutique pour finalement n'en développer qu'une. Docking@Grid doit permettre de répondre à ces enjeux. Comment ? En favorisant la réalisation de ces tests de manière virtuelle.



« **DOCK Conformation Sampling and Docking on Grids** » est un projet coordonné par le LIFL (Laboratoire d'Informatique Fondamentale de Lille; USTL- CNRS-INRIA), avec la participation de l'IBL (Institut de Biologie de Lille, CNRS-INSERM), le CEA -Direction des Sciences du Vivant / iRTSV- Grenoble (CMBA et BIM - équipe IACG). Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 260 k€ pour un coût global de l'ordre de 527 K€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Ont, en premier lieu, été mis au point des modèles mathématiques simples et fiables pour décrire le comportement moléculaire. De puissants algorithmes d'optimisation, inspirés de la nature, ont également été réalisés pour déterminer la meilleure interaction possible. Enfin, ces algorithmes ont été déployés au sein d'un réseau de plusieurs milliers d'ordinateurs connectés à distance, afin d'obtenir la puissance de calcul nécessaire. Autant de progrès qui devraient convaincre l'industrie pharmaceutique d'étendre l'usage de cette simulation virtuelle.

Production scientifique et brevets

Plusieurs articles ont été publiés aussi bien dans des journaux dédiés à la biologie (e.g. Current Computer-Aided Drug Design), algorithmique combinatoire (e.g. Journal of Soft Computing) et la calcul hautes-performances (e.g. Future Generation Computer Systems). Ces articles couvrent toutes les étapes du docking moléculaire : modélisation, méthodes d'optimisation, et validation.

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2007

Projet OCFIA

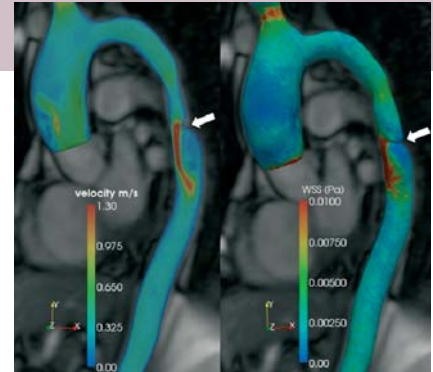
Modélisation numérique cardio-vasculaire en vue d'une utilisation clinique

Mise à disposition à l'hôpital d'un système d'imagerie fonctionnelle vasculaire de type biomécanique

L'athérosclérose représente la principale cause de décès dans les pays développés, la recherche scientifique dans ce domaine est cruciale. Les pathologies vasculaires sont multifactorielles et spécifiques à chaque patient. L'initiation et la progression d'un anévrisme ou d'une sténose restent des phénomènes difficiles à comprendre. Pour programmer un geste médical, le clinicien compte aujourd'hui avec l'imagerie médicale qui fournit des informations sur la morphologie artérielle en 3D et d'une exploration fonctionnelle qui se limite à des zones très localisées (doppler, cathétérisme). Une meilleure compréhension de la physiopathologie et une augmentation du taux de guérison sont possibles, à condition d'avoir accès à l'imagerie fonctionnelle de type biomécanique. L'objectif général du projet OCFIA est de rendre accessible au corps médical la mécanique des fluides numérique (MFN) à travers un système qui fait appel au calcul scientifique haute performance. De la même façon que dans l'industrie cette technologie est utile pour le design automobile et aéronautique, en médecine elle ouvre la voie aux calculs des contraintes mécaniques dont les vaisseaux sont le siège.

Une chaîne de calcul de l'imagerie médicale à l'imagerie fonctionnelle artérielle

Le programme OCFIA est une chaîne de traitements de l'information qui intègre plusieurs disciplines : la radiologie, la physique, les mathématiques appliquées, l'informatique et la biomécanique. Il s'agit de coupler un protocole d'imagerie médicale (IRM) avec la MFN, afin de produire l'imagerie fonctionnelle artérielle (Champs de vitesses, pression, contraintes) nécessaire aux praticiens hospitaliers. Ce procédé sera utile si le temps de restitution de la chaîne complète est inférieur à quelques heures. Le calcul intensif est le moyen pour y arriver. Par ailleurs, la plupart des simulations d'écoulements sanguins réalisées jusqu'à présents l'ont été sur des modèles in vitro théoriques ou in vivo avec une hypothèse de paroi artérielle rigide ou linéaire élastique, les deux sont fausses. En d'autres termes, les simulations hémodynamiques réalisées à ce jour ne prennent pas en compte les variations physiologiques de la géométrie artérielle, négligeant ainsi l'effet pourtant majeur qu'elles ont sur l'écoulement sanguin. Ici, nous proposons une méthode de traitement d'images qui impose aux calculs des conditions réalistes et contrôle les résultats fonctionnels.



Imagerie fonctionnelle sur une pathologie (flèche) de l'aorte chez un patient. Coupe sur le champ de vitesses (m/s) à gauche et frottement pariétal (Pa) sur la surface artérielle à droite.

« Optimized Computational Functional Imaging for Arteries »

est un projet de projet de recherche fondamentale coordonné par I2MR (Institut de médecine moléculaire de Rangueil, INSERM, CHU de Toulouse). Il associe aussi le laboratoire public I3M (Institut de mathématiques et modélisation de Montpellier, Montpellier) ainsi que le partenaire privé ASA (Advanced Solution Accelerator, Montpellier). Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 620 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,3 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Pendant cette première moitié du projet nous avons réussi à relever trois défis importants. Le premier est celui d'avoir aujourd'hui en pratique clinique un protocole d'imagerie qui nous permet de préparer et de contrôler les modélisations numériques. Le deuxième est une diminution du temps consommé par les calculs. Sur une partie des procédés, nous passons de 20 heures à 3 heures, ce qui constitue une accélération très importante. Le dernier défi est celui d'avoir effectué une validation in-vitro et in-vivo avec la même méthode. Il nous reste à rendre l'ensemble des procédés utilisateur indépendants et que le temps de restitution des résultats soit inférieur à 2 heures.

Production scientifique et brevets

Les résultats mentionnés ont été l'objet de plusieurs communications avec comité de lecture en biomécanique et en médecine. Ces publications sont disponibles sur le site du projet. Le travail final fait l'objet d'un dépôt de brevet à travers Inserm Transfert et inclue l'ensemble des méthodes pour rendre accessible cette technologie au monde médical.

Programme « Jeunes chercheurs, Jeunes chercheuses », édition 2007

Projet TurboSpeech

Ou comment se comporte le souffle pendant que l'on parle ?

Une étude de l'écoulement d'air turbulent appliqué à la parole

Les sons de parole sont générés par les perturbations de l'écoulement d'air provenant des poumons. Si de grandes avancées ont été réalisées en ce qui concerne la description de l'écoulement glottique, il n'en est pas de même pour la prise en compte des phénomènes liés à la turbulence de l'écoulement. Ceci concerne bien entendu la production des fricatives, mais aussi bien d'autres configurations vocales (sons de plosives, chuchotement, chant...). La quasi-totalité des études actuelles repose sur une approche simpliste qui consiste à introduire des paramètres empiriques afin de « corriger » des modèles laminaires unidimensionnels et stationnaires. Cependant, d'un point de vue fondamental, la turbulence induit un mouvement tridimensionnel et chaotique des particules fluides. De plus, le développement de la turbulence est un phénomène qui n'est pas instantané ce qui implique une instationnarité de l'écoulement. Notre objectif, sur la base d'une analyse approfondie des phénomènes, est de prédire théoriquement les caractéristiques d'écoulements turbulents produits dans le conduit vocal. La production de son induite par l'écoulement turbulent, en interaction avec le conduit vocal, constitue un objectif à plus long terme, qui dépend en particulier de ce travail fondamental.

Le comportement de l'écoulement d'air quantifié par expérimentation, simulation et modélisation

L'approche expérimentale comprend une importante facette 'in-vitro'. Il s'agit tout d'abord de valider expérimentalement les modèles aérodynamiques théoriques développés. Les expériences 'in-vitro' impliquent des simplifications de la réalité et consistent en des mesures quantitatives sur des maquettes d'anatomie pertinente. L'objectif est d'obtenir des données quantitatives de manière interprétable, contrôlable, mesurable et reproductible. Ce qui est difficile ou impossible à réaliser sur des locuteurs en particulier du fait des variations inter- et intra-individuelles.

Les données expérimentales sont complétées par des simulations numériques. Cette approche permet non seulement de valider les données obtenues par simulations numériques, mais permet aussi d'obtenir une estimation du champ de vitesse dans des endroits pour lesquels des mesures sont difficiles voire impossibles à réaliser.

En conséquence, l'expérimentation 'in-vitro' ainsi que la simulation numérique permet d'évaluer la pertinence (avec quelle précision peut-on expliquer les données mesurées et simulées?) et le champ d'application (quelles sont les limites?) des théories envisagées.



Visualisation des phénomènes étudiés sur une géométrie simplifiée d'une corde vocale.

« TurboSpeech Physical modelling of turbulent flow in the human upper airways » est un projet de recherche fondamentale coordonné par Grenoble Images Parole Signal Automatique (Gipsa-lab, UMR 5216 CNRS, Université de Grenoble). Il associe aussi le Laboratoire d'Etudes Aérodynamiques (LEA, UMR CNRS 6609, Université de Poitiers, ENSMA), le Laboratoire de Modélisation en Mécanique (LMM, UMR CNRS 7190). Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 125 k€ pour un coût global de l'ordre de 900 k€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

A cette étape du projet, des premiers résultats ont été obtenus. Des géométries très simplifiées d'un conduit vocal sont réalisées et soumises à des études expérimentales et numériques afin de quantifier le champ de vitesse moyen ainsi que le champ d'intensité turbulent. La technique d'anémométrie à film chaud a mis en évidence le développement de jet à la sortie d'une constriction représentant une dent ainsi que l'influence du rapport longueur sur diamètre. Ces mesures en aval d'une constriction sont complétées par des simulations numériques lourdes permettant d'obtenir le champ de vitesses en trois dimensions. Ces études sont le prélude à l'étude de géométries plus complexes modélisant de façon plus réaliste le conduit vocal humain.

Production scientifique et brevets

Quatre papiers de conférences internationaux ont été présentés (ETMM7, Acoustics'08 et ETC12) et deux articles de revues internationales sont acceptés (Commun. Numer. Meth. Engng. and Eur. J. Mech. B/Fluids). Ces documents couvrent des données de champ de vitesses obtenu par expérimentation et simulation numérique, la caractérisation des données ainsi que leur modélisation avec des modèles de complexités différentes.

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2006

Projet FGATE

FGATE : un outil de simulation numérique pour accélérer les innovations en imagerie médicale

Simulation d'examens hyper-réalistes de Médecine Nucléaire chez l'homme et le petit animal

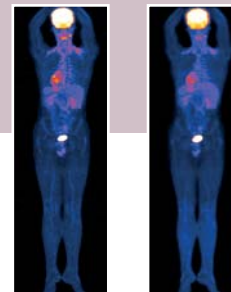
Le recours à la simulation numérique en imagerie médicale est indispensable pour le développement d'appareils plus performants, pour la réalisation d'examens plus riches d'informations, et pour une meilleure utilisation et interprétation des données enregistrées par ces appareils.

Le projet FGATE vise à développer un outil de simulation numérique dans le domaine de l'imagerie médicale fonctionnelle pratiquée dans les services de Médecine Nucléaire, où l'enjeu est de visualiser et de caractériser le (dys-) fonctionnement des organes. En particulier, l'objectif est d'être capable de reproduire, dans des temps de calcul raisonnables, des images indiscernables des images acquises chez des sujets réels, mais pour lesquels on contrôlera toute la complexité des processus physiologiques et physiques mis en jeu. Ce type de simulations permettra donc d'étudier précisément les possibilités d'améliorer la qualité des examens et la précision des mesures effectuées à partir de ces examens. L'outil permettra également de simuler le même type d'imagerie fonctionnelle réalisé chez les animaux de laboratoire, largement étudiés pour faire progresser les techniques d'imagerie fonctionnelle chez l'homme.

L'alliance de la simulation Monte Carlo et d'une modélisation précise des processus physiologiques, des composantes des détecteurs et des protocoles d'acquisition

Le projet est construit autour d'une plateforme de simulation Monte Carlo développée par les acteurs du projet et diffusée dans le domaine public depuis 2004. Devant le succès rencontré par cette plateforme (500 utilisateurs environ en 2006), le défi consiste à pérenniser le développement de la plateforme afin qu'elle s'impose comme la ressource standard, sur le plan international, dans le domaine de l'imagerie en Médecine Nucléaire, et à intégrer des nouvelles fonctionnalités qui permettront de simuler des examens extrêmement réalistes. En particulier, la possibilité de simuler aisément les mouvements respiratoires et cardiaques du patient pendant l'examen sera intégrée, les temps de calcul nécessaires aux simulations seront réduits en intégrant de nouveaux modèles physiques, la puissance de l'outil sera démontrée pour de nouvelles applications, la convivialité de l'outil de simulation sera améliorée pour favoriser sa diffusion et la formation des futurs utilisateurs sera assurée.

Examen de tomographie d'émission de positons réalisé dans un service de Médecine Nucléaire (A), et simulation numérique de ce même examen (B). Dans le cas des données simulées, on connaît parfaitement toutes les variables physiques, physiologiques, instrumentales qui ont conduit à l'image mesurée. En modifiant ces variables, on peut étudier leur influence sur les images. Ainsi, on peut identifier les composantes de l'appareil d'imagerie à modifier pour obtenir de meilleures images, ou encore déterminer comment la présence d'une tumeur de petite taille modifie l'aspect des images mesurées.



« FGATE Simulation efficace d'examens précliniques et cliniques en tomographie d'émission » est un projet innovant coordonné par le laboratoire Imagerie et Modélisation en Neurobiologie et Cancérologie (IMNC - UMR 8165 – CNRS, Université Paris 7 et Université Paris 11, Orsay). Il associe aussi le CEA-SHFJ (Orsay), le Centre de Physique des Particules de Marseille (CNRS – Marseille), le Laboratoire de traitement d'images médicales (LATIM, INSERM, Brest), et CREATIS (INSERM-CNRS, Lyon). Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 578k€ pour un coût global de l'ordre de 1,4 M€.

IMPACTS Résultats majeurs

Une plateforme de simulation totalement novatrice a été élaborée. Elle permet de simuler des examens d'imagerie de Médecine Nucléaire, mais aussi de radiologie (scanner X), tels qu'ils sont réalisés chez l'homme ou le petit animal, avec une très grande précision et avec des moyens de calcul conventionnels. Compte tenu de l'importance croissante de la radiothérapie guidée par l'imagerie pour le traitement des cancers, la possibilité de simuler des traitements par radiothérapie a également été intégrée à la plateforme. Ce développement original, non prévu initialement dans le projet, conduit à un outil de simulation sans équivalent pour améliorer les examens d'imagerie et leur prise en compte dans les traitements par radiothérapie.

Production scientifique et brevets

Quatre versions intermédiaires du logiciel ont été diffusées dans le domaine public (avec formations et "users meetings"), ce qui a déjà permis de doubler le nombre d'utilisateurs par rapport à celui du logiciel disponible en début de projet. La version finale sera distribuée en décembre 2009. Les méthodes originales intégrées dans le logiciel ont fait l'objet de deux articles dans des revues internationales (Physics in Medicine and Biology et Journal of Instrumentation), de six présentations à des conférences internationales avec actes longs et deux articles ont également été soumis à Physics and Medicine and Biology.

Programme « Biologie Systémique », édition 2007

Projet RHOMEO

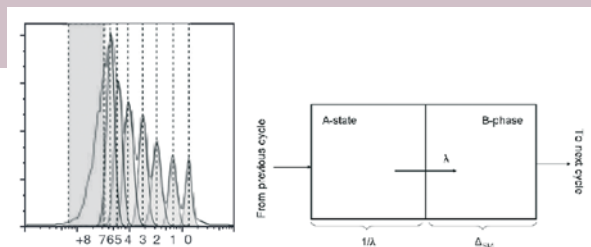
Modèles mathématiques et statistiques pour comprendre le système immunitaire

Comprendre les mécanismes de multiplication et de différenciation des lymphocytes

Les lymphocytes T, éléments clés du système immunitaire, sont régulés grâce aux mécanismes homéostatiques qui maintiennent ces cellules à un niveau constant. En cas de lymphopénie, les cellules T naïves peuvent alors proliférer. L'étude de ce mécanisme chez des souris transgéniques a montré un spectre de réponse très varié allant de l'absence de prolifération à une suite de divisions rapides accompagnées de modifications des marqueurs de surface conduisant à une transition du phénotype naïf au phénotype mémoire. Cependant, la contribution de ces cellules et les facteurs conduisant à cette différenciation sont inconnus. Y-a-t-il un seuil du nombre de divisions ou de l'intensité de division qui conduit à cette différenciation ? Est-ce que la prolifération induite par la lymphopénie est un mécanisme important dans l'homéostasie des lymphocytes T ? Telles sont les questions auxquelles ce projet tente de répondre à l'aide d'une approche de biologie systémique intégrant immunologie, mathématiques et statistiques.

Approche intégrative de techniques immunologiques, mathématiques et statistiques

Ce projet utilise des souris transgéniques lymphopéniques (Rag1^{-/-}) chez qui sont transférées des cellules spécifiques (OT-1, F5). L'évolution de la division des cellules au cours du temps est mesurée grâce au marqueur cellulaire spécifique CFSE (Carboxy Fluorescein diacetate Succinimidyl Ester). Ce marqueur a effectivement la capacité de se diviser également dans chaque cellule fille après une division, l'intensité de la fluorescence étant donc divisée par deux dans chaque cellule. L'interprétation de ces données nécessite l'utilisation de modèles mathématiques qui permettent le calcul du temps moyen jusqu'à la première division, entre deux divisions, du taux de décès des cellules. Plusieurs types de modèles mathématiques, traduction de modèles biologiques différents, peuvent être proposés. Afin d'estimer les paramètres de ces modèles à partir des données mesurées (CFSE et autres mesures phénotypiques), il est nécessaire d'utiliser des outils statistiques adaptés à la complexité des données, des modèles et des expérimentations.



1. Exemple de données de CFSE reproduisant le nombre de cellules (ordonnée) selon le nombre de divisions effectuées (abscisse)
2. Exemple de modèle (Smith-Martin) de cycle cellulaire comportant deux phases : une phase stochastique A (pas de division, phases G0 et G1) et une phase déterministe B (division active, phases S, G2 et M).

« RHOMEO Research on peripheral T-Lymphocyte Homeostasis » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'équipe « Biostatistique » du centre INSERM U897. Il associe aussi l'Institut de Mathématiques de l'Université Bordeaux 1, l'unité « Immune Cell Biology » du National Institute for Medical Research à Londres et l'unité « Immunobiology » de l'Institute of Child Health à Londres. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 208 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,4 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

L'un des premiers résultats obtenus a été la confirmation de l'intérêt d'un modèle stochastique tel que le modèle de Smith-Martin par rapport à d'autres modèles proposés dans la littérature (Gett-Hodgkin). Des extensions de ce modèle sont en cours d'élaboration. Sur le plan méthodologique, plusieurs approches d'estimation des paramètres, notamment basées sur la maximisation de vraisemblance, ont été développées et éprouvées dans le cadre de travaux de simulation.

Production scientifique et brevets

Des résultats préliminaires ont été présentés à l'atelier « Lymphocyte kinetics in health and disease » (19-20 May 2008, London, UK).

Yates et al. Journal of Immunology 2008.

Programme « Vulnérabilité Milieux Climat », édition 2007

Projet MEDUP

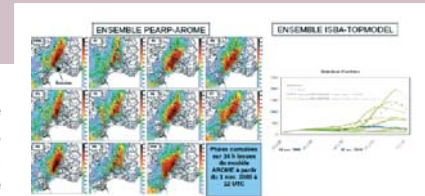
Les sources d'incertitudes de la modélisation des événements intenses en Méditerranée

Quantifier et mieux prendre en compte les incertitudes des prévisions et projections climatiques dans l'évaluation des impacts des événements climatiques intenses

L'arc Méditerranéen est plus que toute autre région française soumise à des événements météorologiques intenses : pluie intense entraînant des crues-éclair à l'automne, vents forts en hiver et sécheresses propices aux feux de forêt l'été. Le projet MEDUP porte sur l'identification et la quantification des sources d'incertitudes associées à la prévision numérique du temps et à la simulation climatique de ces événements intenses. Il a pour objectif de réduire ces incertitudes et de prendre en compte leurs propagations dans les méthodes d'évaluation des impacts de ces événements climatiques. Une originalité forte de MEDUP est de traiter au sein d'un même projet des modélisations météorologiques à différentes échelles de temps, la prévision numérique du temps (1-4 jours), la prévision saisonnière (1-3mois) et les scénarios climatiques (50-100 ans) ; en développant une approche de descente en échelle commune aux trois composantes et basées sur l'identification des régimes de temps propices aux événements intenses. Une autre originalité du projet est de considérer toute la chaîne des incertitudes allant de la simulation des événements météorologiques intenses à la vulnérabilité des milieux à ces événements.

Simulations hydrométéorologiques d'ensemble

Les méthodes de quantification des incertitudes en modélisation atmosphérique (ou en modélisation hydrologique) reposent sur la réalisation d'ensemble de simulations. Le projet développe de nouvelles méthodes de perturbations pour générer ces ensembles afin d'échantillonner au mieux les différentes sources d'incertitudes aux différentes échelles de temps et d'espace (conditions initiales, conditions aux limites, modélisation des processus) à partir d'un nombre de membres de l'ensemble compatible avec la puissance des supercalculateurs de Météo-France ou de l'IDRIS utilisés dans le projet. La quantification des incertitudes des projections climatiques et de leurs impacts prend en plus en compte différents scénarios d'émission, différents modèles de climat et différentes méthodes de descente en échelle. Les incertitudes sur l'évolution de la végétation avec le changement climatique sont aussi considérées dans l'évaluation des impacts sur les surfaces continentales que ce soit en terme de sécheresse ou de crues. L'analyse de la propagation des incertitudes sur la vulnérabilité des milieux fait appel à des outils d'analyse économique et de risque ainsi que des analyses de la chaîne d'alerte et des interviews de ses acteurs.



Simulations d'ensemble hydrométéorologiques élaborées à partir du modèle atmosphérique à fine échelle AROME

(à gauche) forçant le modèle hydrologique ISBA-TOPMODEL (à droite). Les débits simulés ($m^3.s^{-1}$) sont estimés à l'exutoire du bassin versant du Gardon. Les observations pluviométriques de cumuls de pluie sont représentées par des carrés et les observations de débits par des croix.

Le projet « MEDUP Forecast and Projection in climate scenario of Mediterranean intense events: Uncertainties and Propagation on environment » est coordonné par GAME/CNRM. Il associe LMD (Laboratoire de Métécologie Dynamique de l'IPSL), LTHE (Laboratoire d'Etude des Transferts en Hydrologie et Environnement), LA (Laboratoire d'Aérodynamique), CIRED (Centre International de Recherche sur l'Environnement et le Développement). Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 834 k€ pour un coût global de l'ordre de 4,8 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

La première partie du projet a consisté à développer et configurer les expériences de modélisation atmosphérique et hydrologique aux différentes échelles et à produire les premières simulations numériques météorologiques qui sont actuellement utilisées en entrée des modèles hydrologiques ou des logiciels de descente en échelle. Ces expériences de modélisation mettant en œuvre des modèles numériques de climat (ARPEGE et ALADIN de CNRM/Météo-France, LMDZ de l'IPSL) et des modèles atmosphériques à méso-échelle (MESO-NH, modèle de recherche communautaire français, AROME modèle opérationnel de Météo-France et WRF mis en œuvre par l'IPSL) sont très consommatrices de temps de calcul sur les supercalculateurs utilisés par la communauté atmosphérique française, soit de par leur durée, soit de par leur résolution qui nécessite des pas de temps d'intégration très courts.

Production scientifique et brevets

Citons notamment :

- Argence, S., D. Lambert, E. Richard, J.-P. Chaboureaud and N. Söhne, 2008: Impact of initial condition uncertainties on the predictability of heavy rainfall in the Mediterranean: a case study. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.*, 134, pp. 1775-1788.
- Créton-Cazanave L., 2009, Warning! The use of meteorological information during a flash-flood warning process. *Adv. Sci. Res.*, 3, 99-103, www.adv-sci-res.net/3/99/2009/
- Michelangeli, P.-A. M. Vrac, H. Loukos (2009). Probabilistic downscaling approaches: Application to wind cumulative distribution function. *Geophysical Research Letters*, 36, L11708, doi: 10.1029/2009GL038401.

Programme « Calcul Intensif et Grilles de Calcul », édition 2005

Projet CICLE

La puissance des super-calculateurs au service de la modélisation du climat

CICLE: Calcul Intensif pour le Climat et l'Environnement

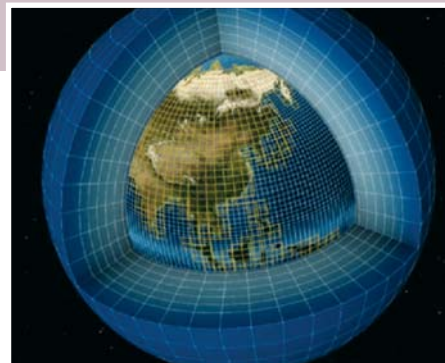
Le changement climatique est au cœur du débat de société. Il est nécessaire de comprendre les mécanismes essentiels qui gouverneront l'évolution du climat et notamment le lien entre émissions anthropiques, dynamique des surfaces continentales, utilisation des sols et le changement de climat.

L'enjeu de la recherche climatique dans les prochaines années sera de déterminer les éléments clés du système Terre en fonction des échelles de temps et d'espace, d'évaluer l'impact de l'Homme sur le changement climatique aux échelles globales et régionales et d'évaluer le risque de "surprises climatiques" dans le futur. Le projet CICLE a pour objet de développer une nouvelle génération de modèles informatiques capables de tirer pleinement parti des supers calculateurs actuels et futurs afin de réaliser des « simulations frontières » qui permettront des avancées majeures tant dans la compréhension des phénomènes physiques que dans nos capacités de prévision.

La parallélisation des modèles de climat : une utilisation de tous les niveaux de parallélisme

Les calculateurs actuels ont une organisation hiérarchique pour exploiter en parallèle un grand nombre de composants. Plusieurs cœurs de calcul sont réunis au sein d'un même processeur. Ces processeurs sont assemblés sur un nœud, grâce à un réseau d'accès à une mémoire partagée. Ce réseau peut être plat ou hiérarchique. Enfin, un réseau, plat ou hiérarchique lui aussi, relie ces nœuds. D'autres niveaux de parallélisme peuvent exister, à travers les co-processeurs graphiques ou les processeurs vectoriels multi-pipes par exemple.

Au cours du projet CICLE, nous avons exploité toutes les possibilités de parallélisme dans les modèles climatiques. Tout d'abord, les codes sont vectorisés. Un niveau de parallélisme en mémoire partagée (OpenMP) permet de profiter de l'architecture multi-cœurs et multi-processeurs des nœuds. La parallélisation en mémoire distribuée (MPI) permet de distribuer le calcul sur plusieurs nœuds de calculs. Enfin, les calculs sont distribués entre plusieurs codes traitant chacun un milieu ou un phénomène spécifique (voir la figure) et travaillant sur des nœuds différents; l'échange d'information à l'interface de ces codes parallèles est assuré par un coupleur parallèle.



Écorché d'un modèle climatique. Un modèle de climat est l'assemblage de plusieurs composantes, chacune prenant en charge la modélisation d'un milieu ou d'un processus : dynamique de l'atmosphère, dynamique de l'océan, chimie atmosphérique, biogéochimie marine, aérosols, glace de mer, calotte de glace, végétation, hydrologie, etc. Il est possible d'emboîter dans un modèle global de climat un modèle régional qui permet une résolution plus fine, et plus précise, de ces phénomènes sur une région limitée du globe.

« CICLE Calcul Intensif pour le Climat et l'Environnement »

est un projet de recherche fondamentale coordonné par Olivier Marti. Il associe aussi l'IPSL (Institut Pierre Simon Laplace), le CERFACS (European Centre for Research and Advanced Training in Scientific Computation), CNRM-GAME (Centre National de Recherches Météorologiques- Groupe d'Étude de l'Atmosphère Météorologique). Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 42 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 356 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,7 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

A partir de l'automne 2009, et pendant 18 mois, plusieurs équipes dans le monde réaliseront des simulations des climats présent et futur. Ces simulations seront un élément majeur d'expertise pour le GIECC (Groupe d'Experts Intergouvernemental sur l'Évolution du Climat). Grâce aux parallélisations des codes réalisées pendant CICLE, les codes de climat français tireront partie des super-calculateurs français (IDRIS et CCRT) et étrangers pour fournir un grand nombre de simulations, qui permettront d'investiguer plusieurs aspects de la physique du climat.

Production scientifique et brevets

Le projet a conduit à deux articles dans des revues à comité de lecture, et à huit communications à des conférences internationales. Les codes développés pendant le projet sont mis à la disposition de la communauté scientifique sous des licences libres (GPL et CeCILL).

Programme « Conception et Simulation », édition 2008

Projet OSIFIOST

Vers la synthèse d'images optiques sous-marines réalistes

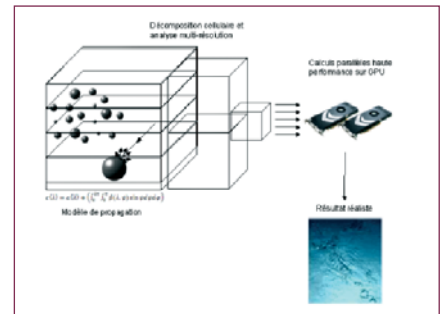
La synthèse d'images sous-marines au service de l'innovation scientifique et technique

Les données optiques constituent un outil essentiel pour l'étude de l'environnement sous-marin ainsi que pour le positionnement des engins sous-marins dans leur environnement. Cependant, les données acquises lors d'opérations en mer montrent que la qualité des images dépend des caméras utilisées ainsi que de l'environnement, en particulier de l'éclairage et de la turbidité de l'eau qui est à l'origine de l'absorption et de la diffusion de la lumière. Le traitement des images sous-marines constitue donc un enjeu de plus en plus important. Cependant, les techniques classiques de traitement d'image dépendent fortement des conditions d'acquisition. La plupart d'entre elles ne prennent pas en compte les spécificités liées aux images sous-marines et en particulier les phénomènes physiques à l'origine de leur formation.

L'objectif du projet OSIFIOST est de concevoir et développer un système de simulation 3D qui permette de synthétiser des images sous-marines optiques réalistes. Les images générées serviront de données test pour le développement et la validation de nouvelles méthodes de traitement d'image adaptées au milieu sous-marin, pour la conception d'instrumentation innovante, ainsi que pour la simulation et la préparation des missions des engins sous-marins.

Une simulation basée sur une modélisation multi-niveaux des phénomènes physiques

Afin d'obtenir les images les plus réalistes possibles, il est nécessaire de prendre en compte les phénomènes physiques intervenant dans la formation des images : propagation de la lumière dans l'océan, diffusion. Selon les applications et les besoins, l'image sera modélisée au plus proche de la physique en considérant les propriétés physiques et optiques des particules en suspension dans l'eau. Cependant, cette modélisation fait intervenir de nombreux paramètres et il peut être intéressant de simplifier les modèles en proposant plusieurs degrés de raffinement. En considérant des niveaux de raffinement plus faibles, des modèles de formation d'images plus grossiers mais plus simples à paramétrer seront développés. Ces modèles permettront également de générer des scènes réalistes mais ils nécessiteront uniquement le réglage de quelques paramètres. Le simulateur pourra donc être facilement manipulé par un utilisateur non-expert ou lorsque certains paramètres physiques sont inconnus. Cette modélisation multi-niveaux ainsi qu'une architecture matérielle et logicielle parallèle devraient permettre d'aboutir à une simulation quasi temps réel, permettant ainsi à l'utilisateur de tester facilement l'influence des différents paramètres physiques.



« OSIFIOST Outil de Simulation pour la Formation des Images Optiques Sous-marines en milieu Turbide » est un projet de recherche industrielle coordonné par Ifremer. Il associe aussi l'Institut Fresnel (CNRS, Aix-Marseille Université, Ecole Centrale Marseille), le Laboratoire d'Océanographie de Villefranche-sur-Mer (CNRS, Université Pierre et Marie Curie) et l'entreprise Prolexia. Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 570 k€ pour un coût global de l'ordre de 800 k€.

IMPACTS
Résultats majeurs

Les résultats escomptés dans le cadre du projet sont de plusieurs ordres : tout d'abord, une meilleure compréhension des phénomènes physiques de propagation de la lumière dans l'océan qui permette une modélisation de la formation des images sous-marines avec plusieurs niveaux de raffinement, le développement d'un simulateur d'images sous-marines intégrant ces différents modèles et reposant sur les concepts d'analyse multi-résolution, de modélisation cellulaire et de calculs parallèles haute performance sur GPU (Graphics Processing Unit), et enfin, la démonstration de l'utilité d'un tel simulateur sur des applications en amont d'expérimentations en mer (préparation de mission, développement et validation de méthodes de traitement d'images...).

Programme « Systèmes Complexes et Modélisation Mathématique », édition 2009

Projet STATOCEAN

Réduction de la complexité et amélioration des modèles numériques grâce à la mécanique statistique

La dynamique des océans : une des clés du système climatique et de sa simulation numérique

Les écoulements géophysiques externes, océans et atmosphère, sont une des composantes majeures du climat, et ont également des conséquences importantes sur les activités humaines et leurs économies. Ces écoulements turbulents font intervenir un très grand nombre de degrés de liberté, et une variété d'échelles spatiales et temporelles. Il est donc naturel et nécessaire de chercher à réduire cette complexité. Nous proposons ici une approche par la physique statistique.

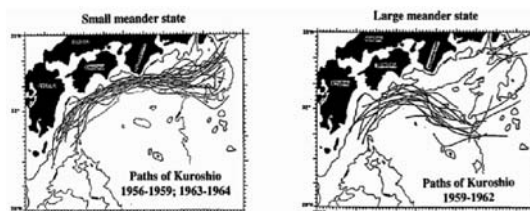
Nous nous intéressons à la dynamique des courants océaniques, plus précisément à la bistabilité (préférence pour deux états très distincts) de certains courants de bord ouest, en particulier le Kuroshio (à l'est du Japon). Notre choix pour ce courant a été guidé par son importance dans la circulation océanique (transport d'énergie vers les pôles dans la région pacifique), mais aussi parce que le Kuroshio montre une situation de bistabilité que nous expliquerons par la proximité d'une transition de phase hors équilibre.

Réduction de la complexité par la mécanique statistique

Grâce aux progrès exceptionnels obtenus ces vingt dernières années par les océanographes, ces phénomènes sont maintenant raisonnablement reproduits dans une hiérarchie de modèles de complexité croissante, avec une utilisation massive de calcul intensif. Le but d'une approche de physique statistique est de développer :

- i) des idées théoriques expliquant et prédisant l'auto-organisation de ces écoulements,
 - ii) des outils de caractérisation précise de la statistique de la dynamique hors équilibre de ces écoulements (grandes déviations),
 - iii) la mise au point de modèles numériques avec moins de degrés de liberté, donc utilisables pour des modèles climatiques, mais reproduisant cependant de façon satisfaisante les phénomènes.
- Cette réduction de la complexité numérique, à qualité de modélisation constante, rendra les approches basées sur le calcul intensif plus efficaces.

La théorie d'équilibre statistique expliquera la bistabilité du Kuroshio. Cette approche réduit drastiquement la complexité, elle est donc essentielle. Elle sera complétée par le développement et le transfert d'outils les plus modernes de la physique statistique hors équilibre, tenant compte de la dynamique : la théorie des grandes déviations ou des approches de type thermodynamique des histoires (formalisme de Ruelle) adaptées à ce contexte océanographique.



Le courant Kuroshio, à l'est du Japon, change de trajectoire de façon aléatoire (bistabilité) avec un temps caractéristique de plusieurs années. Ces deux figures illustrent les deux états possibles. Ce phénomène et les modifications associés du transport d'énergie vers les pôles ont un impact climatique important (images tirées de Schmeit et Dijkstra, JPO 2001).

« STATOCEAN Mécanique statistique hors équilibre de courants océaniques » est un projet coordonné par l'INLN-CNRS. Il associe aussi deux grands laboratoires d'océanographie français : LPO (Brest) et LEGI (Grenoble). Le projet a commencé en janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 332 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,6 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Le projet n'a pas encore débuté. Il n'a donc pas encore produit de résultats.

En terme de dynamique des océans, le projet regroupe des équipes spécialistes des simulations numériques à tous les degrés de complexité, des modèles les plus académiques aux plus réalistes, et une équipe expérimentale mondialement reconnue pour ses apports à la mécanique des fluides géophysiques.

Il est cependant basé sur une série de résultats majeurs obtenus dans les années précédentes : une description théorique par les mécanismes statistiques de l'auto-organisation des écoulements géophysiques (R. Robert et J. Sommeria, Phys. Rev. Lett.), la modélisation de Grande Tache Rouge de Jupiter (un anticyclone géant) par la mécanique statistique (F. Bouchet and J. Sommeria, J. Fluid. Mech.), l'obtention de courant océaniques comme le Kuroshio comme point selle de la maximisation d'entropie (A. Venaille et F. Bouchet), l'obtention de la bistabilité d'écoulements turbulents (F. Bouchet and E. Simonnet, Phys. Rev. Lett.) publiés dans les meilleures revues scientifiques.

Les résultats majeurs attendus sont une explication de la bistabilité des courants océaniques comme le Kuroshio, une diminution de la complexité des modèles décrivant ce type d'écoulement tout en gardant une représentation adéquate des propriétés physiques comme les transports d'énergie, essentiels pour les problèmes de type climatique.

Programme « Conception et Simulation », édition 2008

Projet VODA

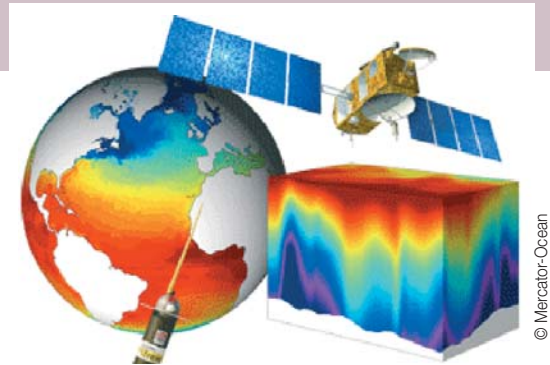
Comprendre et prédire la dynamique océanique

Mise en place d'un système d'assimilation de données pour des applications multi-résolution en océanographie

L'importance clé de l'assimilation de données pour l'océanographie et en particulier l'océanographie opérationnelle est maintenant bien reconnue. Un large spectre de recherches et d'applications dépend de la disponibilité rapide de produits informatiques océaniques. Le domaine de l'océanographie physique a maintenant atteint une maturité suffisante pour permettre de combiner les informations issues des modèles numériques et celles issues des observations au moyen des méthodes dites d'assimilation de données. Cela permet de fournir des analyses et des prévisions océaniques pour diverses échelles temporelles et spatiales. L'objectif du projet VODA est de développer et mettre en place des techniques avancées d'assimilation de données basées sur des méthodes de contrôle optimal, appliquées à la plateforme de modélisation océanique européenne NEMO (Nucleus for European Modelling of the Ocean) et sur des configurations allant de l'océan global basse résolution à des domaines régionaux à haute résolution. Outre les applications opérationnelles, ce projet permettra de fournir une plateforme de recherche précieuse pour la communauté scientifique de l'océanographie numérique.

Une méthode avancée d'assimilation de données pour la plateforme de modélisation océanique européenne NEMO

Dans la méthode proposée (le 4D-Var) le problème d'analyse est défini par la minimisation au sens des moindres carrés d'une fonctionnelle représentant l'écart entre les observations du système et leur équivalent dans les sorties du modèle. Le gradient de cette fonctionnelle, nécessaire pour effectuer la minimisation, est obtenu au moyen de méthodes adjointes. L'assimilation de données variationnelles présente de nombreux avantages : elle permet une plus grande flexibilité pour assimiler différents types d'observation, elle fournit un cadre plus général pour la représentations des covariances d'erreur, etc. Les difficultés pour la mise en place d'un tel système sont d'ordre technique et scientifique. Cela requiert des développements très substantiels comparé aux autres méthodes, en particulier le développement des modèles linéaires tangent et adjoint du modèle dynamique océanique ainsi que des opérateurs de covariance d'erreur efficaces. Le 4D-Var n'a été utilisé pour l'océan que dans le cadre de configuration simplifiée ou basse résolution. Dans le cadre d'une application réaliste à haute résolution, le coût en calcul et la présence de fortes non-linéarités rendent le problème très délicat.



© Mercator-Ocean

« VODA Assimilation variationnelle de données pour des applications océaniques multi-échelles » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'IMAG. Il associe aussi l'INRIA, le CERFACS, le LEGI, le LPO et LOCEAN. Le projet a commencé janvier 2009 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 608k€ pour un coût global de l'ordre de 2,3 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Durant les huit premiers mois de ce projet, un premier prototype des modèles linéaires tangent et adjoint du moteur dynamique océanique de NEMO a été développé et validé en mono et multi-processeur et des améliorations importantes pour l'efficacité en terme de calcul du cœur de la méthode d'assimilation de données ont été apportés.

Production scientifique et brevets

Un article présentant NEMOVAR, le système d'assimilation variationnelle de données pour NEMO a été publié : Kristian Mogensen, Magdalena Balmaseda, Anthony Weaver, Matthew Martin, Arthur Vidard : NEMOVAR : A variational data assimilation system for the NEMO ocean model, ECMWF newsletter N° 120, été 2009.

Programme « Jeunes chercheurs, Jeunes chercheuses », édition 2007

Projet ColonSGS

Dispersion de graines in silico pour comprendre la diversité génétique en fin de colonisation

La dispersion à longue distance appauvrit-elle la diversité génétique ?

Une espèce végétale peut, en quelques générations, coloniser un nouvel espace (introduction d'espèce, invasion biologique ou recolonisation d'un espace abandonné par une autre espèce compétitrice) ou changer d'aire de répartition (suite aux modifications du climat ou du milieu). Les événements rares de dispersion de graines à longue distance sont prépondérants dans la dynamique de la colonisation et peuvent aussi avoir un impact fort sur la distribution de la diversité génétique dans l'espace à la fin de la colonisation (la structure génétique spatiale). En effet, un événement de dispersion à longue distance peut appauvrir localement la diversité génétique (effet de fondation), mais l'accumulation de tels événements peut au contraire aboutir à un plus grand brassage de la diversité génétique et à une structure moins marquée. La modélisation mathématique, la simulation informatique et le calcul physique du transport de graines nous aideront à mesurer ces effets. Comprendre cette dynamique de la diversité génétique est particulièrement nécessaire pour la gestion des espèces forestières (à longue durée de génération) dans le contexte actuel des changements globaux rapides.

Modèles mathématiques, simulations informatiques et résolution numérique des écoulements d'air

Notre projet propose une approche pluridisciplinaire avec l'étude mathématique d'équations aux dérivées partielles modélisant la colonisation d'une espèce (réaction-diffusion, équations intégrales-différentielles), la simulation informatique de modèles individu-centrés et l'étude écologique de deux cas d'études (cèdre et hêtre). Le projet inclut également des simulations de dispersion de graines dans un paysage hétérogène (hétérogénéité spatiale de la densité de végétation et de la hauteur de la canopée) en utilisant un modèle de particules transportées dans des écoulements d'air calculés. Ces derniers sont obtenus en résolvant les équations de Navier-Stokes par une approche de simulation des grandes échelles, les super-calculateurs du LANL et le code HI-GRAD de calcul des écoulements d'air ayant été utilisés à cette fin. Ces calculs nous permettront de déterminer si l'hétérogénéité de la structure du couvert végétal affecte la dispersion à longue distance et la structure génétique spatiale qui en résulte.

La colonisation du cèdre (en violet-gris sur cette photo infra-rouge) sur le Mont-Ventoux est un des deux cas d'études du projet. Introduit dans la parcelle verte en ~ 1860 il s'est étendu en deux générations et on trouve des descendants à ~1.5 km aujourd'hui.



Le projet « ColonSGS Mise en place d'une structure génétique spatiale au cours d'une colonisation : modèles mathématiques et cas d'études chez deux espèces forestières (cèdre et hêtre) » est un projet coordonné par l'INRA d'Avignon (Biostatistique et Processus Spatiaux et Écologie des Forêts Méditerranéennes) et un chercheur en Mathématiques de Marseille. Il associe aussi Los Alamos National Laboratory (Nouveau-Mexique). Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 110 k€ pour un coût global de l'ordre de 700 k€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Une approche par simulations individu-centrées a montré que la dispersion à longue distance réduit l'importance des effets de fondation au cours d'une colonisation dans un couloir. Mais l'ensemble de la distribution des distances de dispersion est important et pas seulement l'existence d'événements de dispersion à longue distance.

D'autre part, l'étude mathématique d'équations de réaction-diffusion a montré que la présence de dispersion à longue distance n'est pas la seule explication possible à une colonisation rapide et qui s'accélère : la présence de populations reliques dispersées aboutit aux mêmes solutions pour la dynamique de colonisation.

Production scientifique et brevets

Ce projet a déjà produit deux articles acceptés dans *Journal of Evolutionary Biology* et *Discrete and Continuous Dynamical Systems Series A*. Les résultats ont été présentés dans plusieurs conférences dans des domaines scientifiques variés (Mathématiques, Biologie évolutive, Écologie forestière) et cinq manuscrits sont soumis.

Programme « Calcul Intensif et Simulation », édition 2007

Projet MICAS

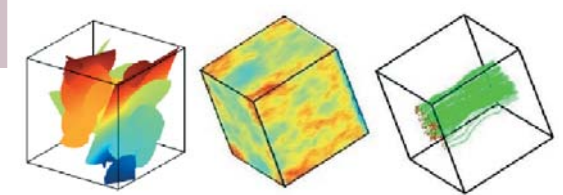
Les supercalculateurs vont-ils remplacer la baguette du sourcier ?

Des modèles numériques pour comprendre les propriétés hydrauliques des nappes phréatiques

La surexploitation des eaux souterraines hypothèque la pérennité et la qualité des réserves en eau douce de la planète. La modélisation numérique est une démarche fondamentale pour la gestion et la réhabilitation des aquifères. Les formations géologiques naturelles sont très hétérogènes, ce qui conduit à des chemins d'écoulements préférentiels et à des régions de stagnation. La dispersion de polluants est fortement conditionnée par ces distributions irrégulières de la vitesse de l'eau. Notre objectif est de contribuer aux débats, au meilleur niveau, sur la macro-dispersion, l'interprétation des essais de puits, les interactions entre roches et fractures, etc. Le calcul à haute performance est la clé du succès. Un des défis est de réaliser des simulations numériques à grande échelle, à l'aide d'algorithmes innovants. Le projet MICAS se focalise sur l'étude et l'analyse du champ de vitesse et du panache de pollution par dispersion. Les résultats permettront de mieux comprendre les phénomènes hydrauliques. A plus long terme, les retombées seront une contribution pour aider à gérer les ressources en eau et à réhabiliter des sites pollués. Nous développons sur un mode collaboratif la plateforme logicielle H2OLAB, qui est une vitrine de l'avancement du projet.

Une approche pluridisciplinaire pour modéliser et simuler les phénomènes hydrauliques souterrains

Pour prendre en compte la connaissance imparfaite des caractéristiques géologiques et l'hétérogénéité naturelle, le projet MICAS s'appuie sur des méthodes non intrusives de quantification des incertitudes. Avec cette approche stochastique, il faut lancer un grand nombre de simulations numériques, qui consistent à générer aléatoirement les propriétés physiques du milieu, à calculer le champ de vitesse dans des grands domaines spatiaux et à résoudre le transport de solutés sur de très longs intervalles de temps. Nous développons des méthodes de sous-domaines pour résoudre les très grands systèmes linéaires (milliard d'inconnues). Nous développons un parallélisme à plusieurs niveaux pour lancer des centaines de simulations stochastiques, où chaque simulation est en soi du calcul intensif. L'étude des milieux fracturés soulève plusieurs questions numériques, liées à la génération du maillage, à la méthode de discrétisation, au couplage entre milieu poreux et réseau de fractures. Nous développons des méthodes spécifiques associant algorithmes géométriques, schémas non conformes, modèles à double milieu.



Le projet MICAS permet d'analyser la charge hydraulique (à gauche) et le champ de vitesse (au centre) dans des aquifères 3D. Les milieux géologiques sont des réseaux de fractures (à gauche) ou des milieux poreux hétérogènes (au centre). Le champ de vitesse est nécessaire pour analyser la dispersion d'un polluant (à droite) dans le cas d'un milieu poreux hétérogène. Les modèles sont stochastiques, avec des données et résultats définis par des probabilités.

© Université du Havre, CNRS et INRIA

« MICAS Modelling and Intensive Computation for Aquifer Simulations »

est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'INRIA de Rennes. Il associe aussi l'Observatoire de Recherche Environnementale (ORE), l'UMR Géosciences du CNRS à l'Université de Rennes 1 ; l'UMR Institut Camille Jourdan du CNRS à l'Université de Lyon 1 ; le Laboratoire des Ondes et Milieux Complexes du CNRS à l'Université du Havre. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 704 K€ pour un coût global de l'ordre de 1,8 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

La plateforme H2OLAB est un portail web pour utiliser une base de données des résultats et les logiciels PARADIS, MP_FRAC, GW_NUM et GW_UTIL (enregistrés à l'APP). Le logiciel PARADIS est exploité pour analyser la macro-dispersion dans des milieux poreux 3D hétérogènes. Il utilise le calcul intensif pour calculer le champ de vitesse et simuler le transport de particules par advection et dispersion. Le logiciel MP_FRAC permet d'étudier les structures d'écoulement dans les réseaux de fractures 3D. Il utilise des algorithmes spécifiques pour générer le réseau, le mailler, résoudre le système linéaire.

Production scientifique et brevets

Publications : dix articles de journaux et proceedings internationaux.

Conférences : cinq conférences plénières, deux organisations de conférences, vingt-cinq contributions (sur sélection, avec actes des résumés)

Logiciels : quatre dépôts APP.

Grand public : un article dans La Recherche (mai 2009, cahiers de l'INRIA), formation à la plateforme (2009), cours à l'école UNESCO du CIMPA (mai 2008), rencontres avec les lycéens (2008 et 2009), fête de la science (2008, maquette et démo), posters.

Programme « BLANC », édition 2007

Projet HEXECO

La modélisation de l'hydrodynamique liée aux événements météorologiques extrêmes

Une vision intégrée Mesures – modèles – validations pour une meilleure prévision des surcotes en cas de tempêtes

Environ la moitié de la population mondiale vit sur une bande littorale de 200 km de large. Les usages du littoral se multipliant, infrastructures et vies humaines sont régulièrement mises en danger par des phénomènes hydrodynamiques extrêmes comme les cyclones ou les tempêtes. Ces événements se traduisent principalement par la formation de vagues exceptionnelles, une montée du niveau de l'eau sur le littoral (surcote) et un envahissement des terres émergées. Les dégâts humains et matériels peuvent être considérables. Aujourd'hui, la modélisation de l'hydrodynamique liée à ces événements extrêmes est insuffisante. Par exemple, la prévision des surcotes peut être sous-estimée dans le cas de fortes tempêtes (source Météo France), conduisant à une sous-estimation des dégâts potentiels. Ce projet a pour objectif l'amélioration de la prévision des événements et de leurs conséquences, par une meilleure compréhension de l'hydrodynamique et son interprétation en termes de forçage adaptés aux modèles opérationnels Français. Les outils englobent l'observation, la mesure, la modélisation théorique, la simulation numérique et la validation expérimentale.

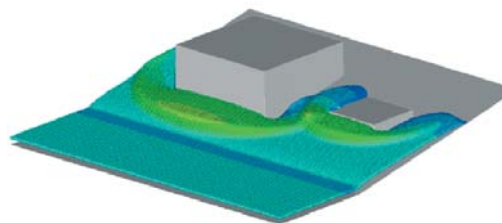
La modélisation du large vers la côte par l'imbrication de différents modèles physiques

Les phénomènes physiques mis en jeu, les formulations mathématiques et les verrous scientifiques associés sont de nature différente lorsque la profondeur d'eau diminue.

Au large, pour les modèles de grande emprise, le forçage atmosphérique par vent très fort, est mal pris en compte. Ceci est dû aux difficultés d'observation des vents forts et à la limite de validité du paramétrage de la tension du vent en surface dans ces cas.

En zone côtière, dans des conditions météorologiques extrêmes, de nombreux problèmes restent ouverts tels que la paramétrisation de la tension du vent en surface ou la formation de vagues exceptionnelles. De plus, la génération d'ondes infragravitaires ainsi que le caractère aléatoire des hauteurs, des longueurs d'onde de vagues et des points de déferlement sont insuffisamment modélisés, alors qu'ils induisent sur le rivage des mouvements importants du niveau de l'eau.

Sur le littoral, les modèles sont d'emprise plus faible, et les prévisions concernent l'invasissement des terres par la mer (runup), la cinématique et la dynamique du front de vague sur la plage. Les problèmes ouverts restent l'effet de la friction du vent fort sur l'invasissement, l'effet des ondes longues infragravitaires sur le runup, la relation entre l'état de mer et le niveau moyen à la côte.



Exemple d'invasissement d'une côte simplifiée avec 2 bâtiments, modèle SPH/Boussinesq LMF/ECN

Le projet « HEXECO Hydrodynamique EXtrême du largE à la Côte » est un projet coordonné par l'Ecole Centrale Marseille (ECM). Il associe les laboratoires suivants : l'IRPHE/UMR6594 (CNRS), le CMLA/UMR8536 de l'Ecole Normale Supérieure de Cachan, le LMF/UMR6598 de l'Ecole Centrale de Nantes, le GAME/URA1357 de Météo France ainsi que le SHOM et l'IFREMER. Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 480 k€ pour un coût global de l'ordre de 2,9 M €.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Chaque élément de la chaîne de connaissance est en cours d'acquisition ou de développement par un ou plusieurs partenaires. En partant de mesure satellitaire de vagues et de vent (IFREMER) à la mesure in situ (Campagnes Iles de Banneg Mer d'Iroise/ plage du Truc Vert Aquitaine SHOM). De l'amélioration de la paramétrisation des modèles grandes échelles (WaveWatchIII SHOM, VAG/MFWAM Météo France), vers la modélisation en milieu côtier (VOLNA CMLA, HOS LMF) jusqu'à la modélisation littorale (BOUTDU ECM, BIEM/vent IRPHE, SPH/Boussinesq LMF). De la validation des modèles locaux (Campagne plage au 1/30 et vents forts IRPHE, génération de vagues extrêmes ECM).

Production scientifique et brevets

Au terme de dix-huit mois, ce projet nous a permis d'obtenir : quinze publications internationales dans des revues scientifiques de rang A (dont trois publications multipartenaires) et douze communications internationales avec actes et comité de lecture (dont deux communications multipartenaires).

Programme « Calcul Intensif et Grilles de Calcul », édition 2005

Projet INLOES

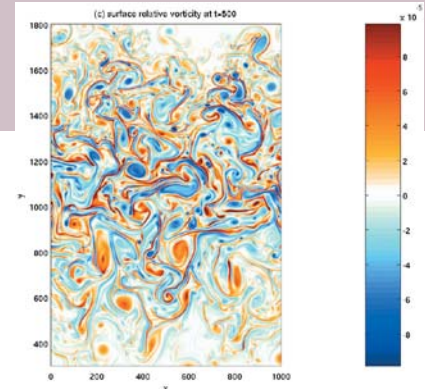
Importance des petites échelles sur la circulation générale océanique

Challenge scientifique des dix années à venir : impact des petites échelles océaniques

Le grand challenge scientifique des dix années à venir pour les sciences de géophysique externe (atmosphère, océan et climat) consiste à adopter une approche multi-échelles compte-tenu des fortes non-linéarités qui caractérisent la dynamique de ces fluides. Le but de ce projet était de mettre en évidence des mécanismes dynamiques océaniques nouveaux liés à l'impact des petites structures d'échelles inférieures à 10 km sur les plus grandes, mécanismes dont nos résultats ont montré l'importance pour la circulation générale océanique (> 6000 km), la biogéochimie marine et le couplage avec l'atmosphère. Notre approche a consisté à étudier les régimes dynamiques de régions océaniques jouant un rôle essentiel pour la circulation générale océanique en utilisant une résolution numérique jamais atteinte jusqu'à présent. Ils concernent plus particulièrement les régimes tourbillonnaires aux latitudes tempérées, la dynamique équatoriale profonde, la dynamique couplée océan-atmosphère dans les régions tropicales, ainsi que les conséquences sur la biogéochimie marine dans les couches supérieures. Les résultats sont extrêmement importants pour la définition des futurs modèles de climat.

Utilisation du Earth Simulator, machine vectorielle massivement parallèle

L'approche multi-échelle dans le cadre des fluides atmosphériques et océaniques ne peut se faire sans l'accès à des outils informatiques extrêmement puissants du fait des fortes non-linéarités mentionnées précédemment. L'accès au Earth Simulator Japonais nous a permis de relever ce défi car cette machine nous permet d'étudier des problèmes impossibles à aborder sur d'autres machines à l'heure actuelle. Le Earth Simulator est en effet une machine vectorielle massivement parallèle particulièrement adaptée pour nos codes d'hydrodynamique : ces codes atteignent une performance de l'ordre de 50 % sur ces machines vectorielles et seulement 5 à 6 % sur les machines scalaires massivement parallèles. L'accès au Earth Simulator Japonais a été rendu possible grâce à un accord (M.O.U.) entre la France et le Japon (impliquant le CNRS, l'IFREMER et le Earth Simulator Center du JAMSTEC). Cet accès nous a offert une opportunité unique de faire des avancées majeures en examinant des problèmes de taille multipliée par un facteur de 100 à 1 500 par rapport à ceux étudiés auparavant.



Carte de vorticité (index dynamique) en surface résultant d'une simulation océanique de très haute résolution (1 km sur l'horizontale et 200 niveaux verticaux pour un domaine de 2000 km*3000 km et de 4000 m de profondeur). Cette carte illustre l'importance dynamique des filaments de moins de 10 km de large, jusqu'à présent totalement ignorés dans les simulations numériques de plus basse résolutions.

Le projet « INLOES Etude des interactions non-linéaires des échelles océaniques grâce au Earth Simulator » est coordonné par le LPO-IFREMER-CNRS. Il associe aussi l'IPSL, l'UPMC-CNRS. Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 4 ans : il bénéficie d'une aide ANR de 360 k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Des résultats importants ont été obtenus dans les quatre études impliquées dans INLOES. Un exemple de résultat : Nous avons montré que la présence des petites échelles (de 1 km à 10 km, cf. figure) modifient de manière déterminante la dynamique à l'échelle des bassins océaniques (elles expliquent plus de la moitié des flux verticaux globaux de matière, de chaleur et de quantité de mouvement). Une retombée de nos résultats a été de montrer que, du fait des propriétés dynamiques de ces petites échelles, les données des futurs altimètres de très haute résolution comme « SWOT » permettraient de restituer non seulement les courants de surface mais également les courants tridimensionnels dans les 500 m premiers mètres, ce qui représenterait une avancée majeure.

Production scientifique et brevets

Ce projet a fait l'objet d'une vingtaine de publications scientifiques publiées dans des revues internationales de rang A dont la moitié de ces publications co-signées par nos collègues du Earth Simulator Center avec lesquels nous avons interagi de manière fructueuse. D'autres publications sont en cours de rédaction. Ce projet a aussi fait l'objet de trois articles grand public (deux dans le Monde et un dans la Recherche). Les résultats ont par ailleurs fait l'objet d'un grand nombre de conférences dans des colloques internationaux dont plusieurs conférences « invitées ».

Programme « Catastrophes Telluriques et Tsunamis », édition 2005

Projet TSUMOD

Comment comprendre et prévenir les tsunamis par les moyens de la simulation numérique ?

Confronter les méthodes de simulation aux données issues du tsunami de 2004 dans l'Océan Indien pour mieux prévenir les risques dans le futur

Le séisme exceptionnel de 2004 a généré un tsunami dans l'Océan Indien, pour lequel les observations sont innombrables, ce qui en fait le tsunami moderne le mieux observé, pour la quantité comme la variété des données.

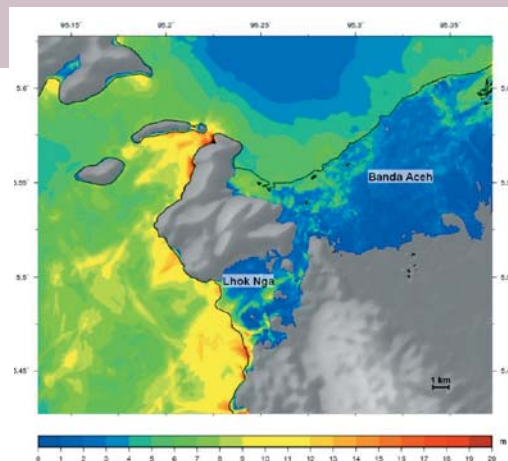
Depuis les années 1980, les processus et impacts des tsunamis sont étudiés au moyen des outils de simulation numérique, avec un niveau de détail toujours croissant. Le projet TSUMOD visait à exploiter les données du tsunami de 2004 pour tester ces méthodes, et en améliorer certaines parties délicates, notamment en ce qui concerne le déclenchement par le séisme, et plus particulièrement pour l'impact sur les côtes.

Les méthodes de simulation ont également été appliquées à des sites potentiellement exposés, en particulier en Méditerranée. À terme, les méthodes adaptées pour les calculateurs parallèles permettront une approche plus complète de la caractérisation et de la prévention de l'aléa tsunami, tenant compte des incertitudes. Dans le cadre du calcul temps réel, de telles méthodes optimisées pourront intervenir pour caractériser un tsunami en cours de propagation, en support aux systèmes d'alerte aux tsunamis.

Innovation dans les approches numériques et perspectives de calcul rapide

Des approches originales ont été étudiées dans le projet TSUMOD pour modéliser le déclenchement par les grands séismes de subduction. À la côte, la reproduction des inondations, notamment sur les grands zones de faible pente, a pu être discutée en fonction des paramètres les plus influents et de leurs incertitudes (la magnitude du séisme à l'origine, la nature de la rugosité du sol à l'arrivée...). Des méthodes hydrodynamiques innovantes ont été adaptées pour modéliser le déferlement des tsunamis, lorsque le « mur » des vagues du tsunami se brise et produit un écoulement turbulent. Le comportement du tsunami au large a également été étudié par le biais des données satellitaires exceptionnelles recueillies lors de l'événement, et la faisabilité d'une détection radar a été abordée, à la fois par une approche expérimentale en bassin et par des outils numériques.

Le projet TSUMOD a aussi relancé des études d'aléa tsunami en Méditerranée (Chypre, Nice) et a soutenu une campagne de recherche d'observations de tsunamis aux Baléares, dans une région où les événements historiques, rares, sont méconnus.



Résultat d'une simulation des inondations de 2004 dans la région de Banda Aceh (Sumatra nord). Les couleurs représentent la hauteur de la mer par rapport au repos (en mer) ou par rapport au sol (à terre), et sont cohérentes avec les observations.

Le projet « TSUMOD Tsunamis : amélioration de la modélisation numérique et de la connaissance des processus de génération, propagation et amplification » est un projet de recherche fondamentale coordonné par le CEA. Il associe aussi l'ENS (Paris), Géosciences Azur (Nice), le CEMAGREF (Grenoble), et les Universités de Toulon et de Perpignan. Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 36 mois : il a bénéficié d'une aide ANR de 500 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,2 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

En utilisant des scénarios de source validés, et si des données de haute résolution existent au littoral, la simulation permet de cartographier l'aléa tsunami pour des côtes exposées. Grâce au projet TSUMOD, qui a fédéré une partie de la communauté nationale travaillant sur le sujet, les méthodes de simulation ont été testées et validées, et ont permis d'expliquer une majeure partie des observations du tsunami de 2004. De telles méthodes, incontournables pour les études de risque, sont aujourd'hui en cours d'adaptation pour le calcul temps réel, dans le cadre de l'alerte aux tsunamis.

Production scientifique et brevets

En termes de publications, le projet TSUMOD a donné lieu à vingt communications dans des congrès, onze articles dans des revues à comités de lecture, ainsi qu'à de nombreuses conférences invitées et de vulgarisation. Une dizaine de doctorants, postdoctorants et stagiaires ont bénéficié d'un soutien pour leur formation dans le cadre du projet TSUMOD.

Programme « Chaires d'excellence », édition 2006

Projet COHERSiS

Développement d'une infrastructure pour l'analyse des données géophysiques modernes

Vers l'exploration complète des observations géophysiques

L'observation continue en géophysique, au sol et spatiale, représente un volume rapidement et continuellement croissant avec l'installation des grands réseaux de stations sismologiques et géodésiques aux Etats Unis, en Europe, au Japon ainsi que dans des autres régions dans le Monde. Ces nouvelles observations ouvrent des nouvelles perspectives pour la recherche en sciences de la Terre. Elles permettent d'améliorer la précision de la tomographie sismique et d'extraire ainsi de nouvelles informations sur la structure, la composition et la dynamique internes de la Terre. Les enregistrements continus en temps ont permis le développement de nouvelles méthodes d'analyse comme l'imagerie basée sur le bruit sismique ambiant et l'étude de l'interaction entre la Terre Solide, l'Océan et l'Atmosphère. Les réseaux géophysiques modernes constituent un outil essentiel pour la surveillance des volcans, des séismes et des tsunamis.

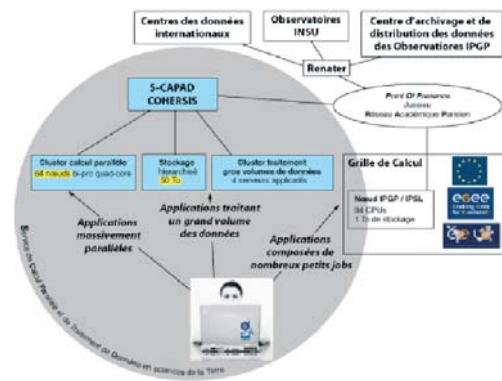
L'exploitation de ces volumes d'observation croissants posent aujourd'hui de nouveaux défis méthodologiques et technologiques. Notre capacité à analyser rapidement ces très grands volumes de données est devenu un enjeu de la recherche géophysique. Un des principaux objectifs du projet COHERSiS est de développer des solutions de calcul et de stockage, ainsi que des nouvelles méthodes d'analyse, pour le traitement intensif des données.

Solutions de calcul et de traitement des données au service des sciences de la Terre

Ces gros volumes de données impliquent une évolution en termes d'infrastructure et de solutions informatiques pour le traitement et la modélisation en Sciences de la Terre. Ces infrastructures doivent aujourd'hui associer trois axes au cœur de COHERSiS :

- Des ressources de stockage importantes, hiérarchisées et intégrées à des ressources de calcul adaptées à la simulation numérique et à l'analyse des données (observations et synthétiques). Ces ressources doivent également être interoperables avec les centres de données existants.
- Des ressources locales de calcul intensif adaptées aux besoins spécifiques de la simulation numérique, du traitement et de l'analyse des données (observations et synthétiques), combinant des architectures parallèles différentes en termes de mémoire, de processeurs et de communication. Ces ressources doivent disposer d'accès hiérarchisés et rapides aux ressources de stockage.
- Des ressources intégrant les nouvelles technologies de Grille de calcul et de données permettant à certaines applications de type

paramétrique de pouvoir disposer ponctuellement de très nombreuses ressources distribuées de calcul et de stockage aux échelles européenne et internationale.



« COHERSiS Vers une approche cohérente du signal sismique complet » est un projet de recherche scientifique coordonné par Institut de Physique du Globe de Paris (IPGP). Il associe aussi le Laboratoire de Géophysique Interne et Tectonophysique de l'Université de Grenoble et le CNRS, Géosciences Azur de l'Université de Nice. Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 600 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,2 M €.

IMPACTS

Résultats majeurs

Un des résultats majeurs du projet COHERSiS a été la mise en place à l'IPGP d'une plateforme pour le traitement de très grand volume des données géophysiques. Ce moyen est utilisé très activement par des chercheurs de l'IPGP et leurs partenaires en France et dans le Monde et a déjà permis d'analyser des jeux de données très importants parvenant des plusieurs réseaux d'observation. Cette analyse a aidé à mener des études sur l'origine du bruit sismique ambiant, d'effectuer la tomographie sismique à des différentes échelles et de développer des nouvelles approches à la surveillance des volcans et des failles actives.

Production scientifique et brevets

Quinze papiers ont été publiés dans des revues internationales à comité de lecture, incluant un dans Nature Geosciences et un dans Science. Les résultats ont été aussi présentés lors des nombreux congrès internationaux.

Programme « Catastrophes Telluriques et Tsunami », édition 2005

Projet QSHA

Les ondes sismiques dans la croûte terrestre pour une estimation fine du mouvement du sol

Les ondes sismiques auteurs de destructions massives en cas de séisme quantifiées grâce à la modélisation numérique

Les ondes sismiques génèrent des destructions massives en cas de séisme. Il est donc important de mettre au point des outils simulant la propagation des ondes dans des milieux hétérogènes atténuants en complément des autres stratégies plus empiriques dans l'approche conventionnelle PSHA.

Au travers du projet ANR QSHA dans le programme CATELL, la mise au point de méthodes de modélisation de la propagation des ondes a permis des inter-comparaisons de solutions de méthodes différentes comme les méthodes de différences finies, d'éléments finis continus et discontinus, d'éléments distincts et d'équations intégrales. Les étapes nécessaires pour la validation des outils de modélisation ont été ainsi identifiées et les leçons à en tirer pour l'estimation du mouvement du sol ont conduit à proposer de combiner les approches déterministes réclamant la connaissance du milieu de propagation et empiriques qui se fondent essentiellement sur les données observées pour des séismes particuliers. Des applications sur le bassin grenoblois et dans la baie des anges à Nice illustrent le potentiel de telles modélisations à condition que le milieu traversé soit connu.

Propagation numérique des ondes sismiques par une technique numérique de résolution des équations aux dérivées partielles de l'élastodynamique.

Un développement spécifique a été entrepris pour des modélisations 3D de la propagation des ondes sismiques à partir de méthodes de différences finies, d'éléments finis continus et discontinus et d'éléments distincts pour les approches volumiques et à partir des équations intégrales par l'approche des moments pour les méthodes surfaciques. En raison du nombre de degrés de liberté (ddl) important (plus de 100 millions de ddl), l'intégration dans le temps se fait sans inversion de matrices même locales.

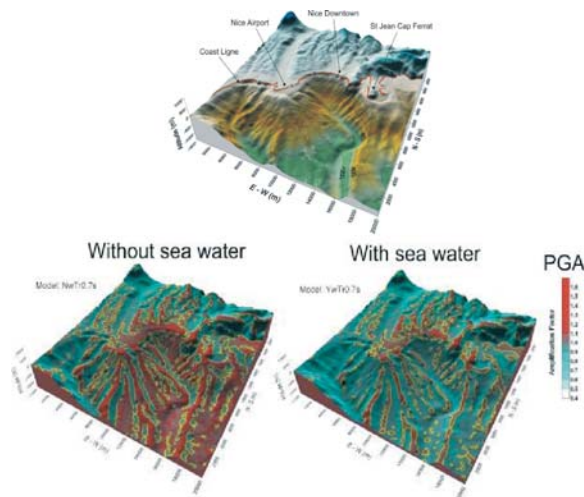


Figure 1 : Région de Nice dans un volume de 20 km par 20 km et 10 km de profondeur avec des topographies complexes et la présence de la Mer (modèle dans le panneau A). Une estimation du pic d'accélération du sol (PGA) pour un séisme de référence avec la couleur jaune indiquant une amplification unitaire par rapport à l'accélération observée à l'aéroport de Nice. L'estimation dans le panneau B à gauche sans la Mer est à comparer à celle dans le panneau C à droite avec la Mer.

Le projet « QSHA Quantitative seismic hazard assessment » est coordonné par l'INSU-CNRS GEOAZUR UMR 6526 et l'INSU-CNRS LGIT UMR 5559 et a les partenaires suivants : CEA/DASE, BRGM, LCPC. Le projet a démarré en décembre 2005 et s'achève en septembre 2009. Il bénéficie d'une aide ANR de 450 K€

IMPACTS

Résultats majeurs

Modélisation par différentes méthodes de la propagation des ondes et application à la propagation dans le bassin grenoblois et sur la Côte d'Azur.

Production scientifique et brevets

Beauval C., Honoré L., and F. Courboulex (2009), On the use of empirical Green's functions for probabilistic seismic Hazard Assessment, Bull. Seism. Soc. Am., 99, 2992-3002.

Chaillat S., M. Bonnet, J.-F. Semblat (2008), A multi-level fast multipole BEM for 3D elastodynamics in the frequency domain Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 197, 4233-4249

Salichon J., Kohrs-Sansorny C, Bertrand E. and F. Courboulex (2009), A Mw 6.3 earthquake scenario in the city of Nice (South-East France): Ground motion simulations, J. Seismology, accepted.

Programme « BLANC », édition 2005

Projet SEISCOPE

L'imagerie sismique haute résolution : un enjeu pour la connaissance du sous-sol (gestion des ressources et des déchets)

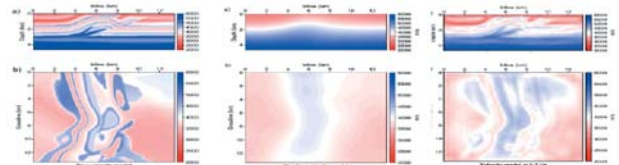
Les ondes sismiques sont utilisables pour l'imagerie crustale avec une résolution sans précédent grâce à des efforts dans l'acquisition des données et à l'augmentation des moyens informatiques pour interpréter ces grands jeux de données

Les ondes sismiques apportent des informations sur les milieux superficiels quand elles sont émises par des sources artificielles et enregistrées par des capteurs en grand nombre. Pour la reconstruction du milieu traversé par les ondes, il est important de mettre au point des outils simulant la propagation des ondes dans des milieux hétérogènes atténuants efficaces car l'imagerie réclame plusieurs centaines de simulation pour une image.

Au travers du projet ANR SEISCOPE du programme blanc, la mise au point de méthodes de modélisation de la propagation des ondes efficaces a permis la reconstruction des hétérogénéités en vitesse du milieu traversé avec une résolution qui tend vers la moitié de la longueur d'onde propagée en dépit d'un éclairage défavorable puisque l'on ne peut observer les ondes que sur la surface de la Terre ou proche de celle-ci. Cette reconstruction se fait des échelles lithosphérique (profondeur de 30 km sur 100 km d'étendue) aux échelles crustales (profondeur de 5 km sur 20 km d'étendue), voire des échelles encore plus faibles de l'ordre de la dizaine de mètres.

Reconstruction du modèle de vitesse grâce à l'interprétation de tout le sismogramme enregistré aux différents capteurs en utilisant des modélisations efficaces en fréquence pour la propagation des ondes et une méthode d'optimisation par la méthode de l'adjoint pour reconstruire les vitesses

Des développements spécifiques pour des modélisations de la propagation des ondes sismiques à partir de méthodes de différences finies (en 3D) et d'éléments finis discontinus (en 2D). La résolution du système linéaire en fréquence par des solveurs directs très efficaces permet la création d'une image haute résolution des vitesses du milieu grâce à un grand nombre de simulations pour toutes les sources et pour chaque acquisition par source. Des exemples synthétiques mais aussi des exemples réels montrent ce gain en résolution qu'apporte l'interprétation de l'ensemble des sismogrammes.



Reconstruction d'une structure 3D de la vitesse des ondes qui est représentée en coupes verticale et horizontale à droite. Cette reconstruction se fait en expliquant les sismogrammes observés à la surface du sol. Le panneau du milieu donne le milieu initial qui pourrait être reconstruit par une tomographie des temps d'arrivée. Notez le contenu basse fréquence. Le panneau de droite donne le milieu reconstruit final illustrant l'accroissement de la résolution en dépit du faible nombre de sources.

« SEISCOPE Imagerie sismique multi-échelles / multi-paramètres à partir de dispositifs "global-offset" » est un projet coordonné par GEOAZUR, en partenariat avec l'IPGP et le BRGM. Le projet a démarré en janvier 2006 et s'achève en septembre 2009. Il bénéficie d'une aide ANR de 450 K€ pour un budget total de 1,05 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Imagerie sismique haute résolution pour l'acoustique en 3D et pour l'élastique en 2D. L'optimisation pour ajuster les sismogrammes s'effectue par la méthode de l'adjoint tandis que la simulation de la propagation des ondes sismiques est réalisée par des méthodes de différences finies ou d'éléments finis discontinus en fréquence. Des applications à des exemples référencés en industrie pétrolière montrent le potentiel d'une telle approche.

Production scientifique et brevets

- Ben Hadj Ali, H., S. Operto et J. Virieux. Velocity model building by 3D frequency-domain full-waveform inversion of wide-aperture seismic data, *Geophysics*, 73, P. VE101-VE117, 2008.
- Brossier, R., S. Operto et J. Virieux, Seismic imaging of complex structures by 2D elastic frequency-domain full-waveform inversion, *Geophysics*, 74 (6), in-press, 2009.
- Operto, S., J. Virieux, A. Ribodetti et J.E. Anderson, Finite-difference frequency-domain modeling of visco-acoustic wave propagation in 2D tilted transversely isotropic (TTI) media, *Geophysics*, 74 (5), T75-T95, 2009.
- Virieux, J. et S. Operto, An overview of full-waveform inversion in exploration geophysics, *Geophysics*, 74 (6), in-press, 2009, Special issue: New advances on seismic imaging and inversion.

Programme « Agriculture et Développement Durable », édition 2006

Projet AUTREMENT

Modélisation de l'impact du changement climatique sur les systèmes agricoles

Comprendre l'impact du changement climatique

Les systèmes agricoles sont intimement liés au changement climatique. D'une part, ils seront affectés par ses différentes manifestations, d'autre part, les espaces ruraux sont également des contributeurs nets au changement climatique

Les principales questions qui sous-tendent nos travaux sont :

- ◆ du côté de l'adaptation :
 - Comment mesurer cette vulnérabilité pour l'agronomie, l'hydrologie et l'économie ?
 - Comment va évoluer cette vulnérabilité au cours du XXI^e siècle ?
 - Comment peut-on anticiper une éventuelle aggravation de cette vulnérabilité ?
- ◆ du côté de la mitigation :
 - Comment quantifier la contribution de l'agriculture au bilan net des gaz à effet de serre ?
 - Les stratégies d'adaptation de la gestion des agrosystèmes sont-elles neutres vis à vis de la propre contribution du secteur au changement climatique ?

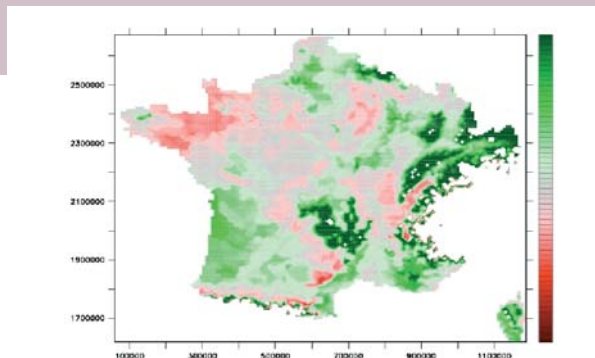
Développement d'une plateforme de modélisation couplée climat/agronomie/économie.

Le projet AUTREMENT est structuré en trois volets. Le premier volet concerne le développement de la plateforme intégrée de modélisation.

L'objectif du second volet du projet est d'évaluer si des prévisions saisonnières peuvent servir à une meilleure gestion des itinéraires techniques.

Dans le troisième volet deux scénarios contrastés du changement climatique futur nous permettront de quantifier (i) la réponse du système agricole-sylvicole-prairial, (ii) les conséquences en termes de coût des différentes filières, et (iii) de proposer des trajectoires d'évolution des filières techniques et de l'utilisation des terres.

« **AUTREMENT Aménager l'Utilisation des Terres et des Ressources de l'Environnement en Modélisant les Ecosystèmes aNTropiques** » est un projet de recherche fondamentale coordonné par le Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement (LSCE). Il associe aussi le CIREN, l'INRA et le LOCEAN. Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 44 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 322 K€ pour un coût global de l'ordre de 1,1 M€.

**IMPACTS****Résultats majeurs**

Les premiers résultats marquants à cette étape du projet ont été la mise au point de la plateforme de modélisation et les premiers couplages au modèle économique IMACLIM-R/NEXUS. L'analyse des prévisions saisonnières a montré qu'en l'état actuel ces prévisions ne sont pas assez fiables pour être exploitées de façon opérationnelles afin d'adapter les itinéraires techniques. Enfin, les premières simulations des réponses des cultures sur la France dans le cadre du scénario climatique A1B indique vers la fin du XXI^e siècle un accroissement du rendement du blé l'effet de fertilisation du CO₂ venant contrebalancer un plus fort stress hydrique. En revanche, pour le maïs beaucoup plus sensible au stress hydrique estival, on constate une baisse de rendement sensible excepté dans les zones de moyenne altitude où l'accroissement des températures rend possible la culture du maïs, la ou elle n'est pas possible actuellement. Enfin la variabilité interannuelle du rendement est beaucoup plus forte qu'aujourd'hui.

Production scientifique et brevets

Davin E. L. de Noblet-Ducoudré N. Friedlingstein P. (2007) Impact of land cover change on surface climate : Relevance of the radiative forcing concept ; GEOPHYSICAL RESEARCH LETTERS, VOL. 34.

Gervois S. Ciais P., de Noblet-Ducoudré N., Brisson N., Vuichard N., Viovy N. (2008) Carbon and water balance of European croplands throughout the 20th century ; GLOBAL BIOGEOCHEMICAL CYCLES, VOL. 22.

Smith P.C., De Noblet-Ducoudré N., Ciais P., Peylin P., Viovy N., Meurdesoif Y., Bondeau A., 2009. European-wide simulations of croplands using an improved terrestrial biosphere model, Part 1 : phenology and productivity. J. Geophys. sous presse.

Vuichard N, Ciais P, Beletti L, Smith P, Valentini R 2008 Carbon sequestration due to the abandonment of agriculture in the former USSR since 1990 ; GLOBAL BIOGEOCHEMICAL CYCLES, 22,4 GB4018.

Programme « Vulnérabilité : Climat et Milieux », édition 2006

Projet IRCAAM

La puissance de calcul de Météo-France et du CNRS pour mieux comprendre l'origine des canicules

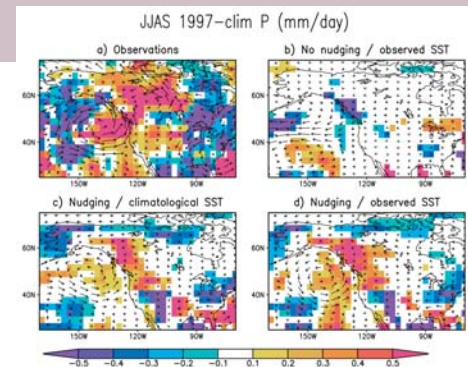
Comprendre l'influence des Tropiques sur le climat des moyennes latitudes

Alors que les modèles de climat sont aujourd'hui utilisés de manière quasi-opérationnelle, aussi bien pour prévoir des anomalies saisonnières que pour réaliser des scénarios du XXI^e siècle, la variabilité climatique naturelle recèle encore de nombreux secrets. Le projet IRCAAM vise à comprendre en quoi la variabilité du climat estival observée sur l'Europe et le bassin Méditerranéen est en partie influencée par la circulation atmosphérique tropicale. Les échelles de temps considérées vont de quelques jours à quelques mois et une attention particulière est accordée aux vagues de chaleur telles que l'Europe en a connu pendant l'été 2003. L'enjeu est en effet de savoir si certains phénomènes extrêmes observés aux moyennes latitudes présentent des précurseurs tropicaux, notamment dans les régions de mousson.

Le nudging en point de grille : un outil original de compréhension du climat

La méthode originale mise en œuvre dans le projet IRCAAM consiste à contraindre la circulation tropicale simulée grâce à une relaxation (en anglais « nudging ») vers des ré-analyses atmosphériques, c'est à dire une combinaison optimale d'observations et de prévisions météorologiques à courte échéance. L'objectif est ensuite d'évaluer l'impact de ce guidage sur le climat des moyennes latitudes de l'hémisphère Nord. L'identification de la réponse extratropicale nécessite de réaliser des ensembles de simulations relativement coûteux en temps de calcul. Ce n'est qu'à ce prix que l'on peut en effet isoler l'influence tropicale du reste de la variabilité naturelle des moyennes latitudes. Les expériences sont réalisées soit en imposant des températures de surface de la mer (TSM) observées, soit en imposant des TSM climatologiques (pas de forçage océanique), soit en couplant le modèle avec un océan interactif de manière à savoir si les surfaces océaniques contribuent à amplifier les signaux tropicaux détectés sur l'Atlantique Nord ou le Pacifique Nord.

Comparaison de la moyenne d'ensemble (30 simulations pour chaque type d'expériences) des anomalies de vent à 850 hPa (vecteurs en m/s) et de précipitations (couleur en mm/j) simulées pendant l'été 1997 aux anomalies observées : a) observations, b) expérience de contrôle sans nudging (avec TSM observées), c&d) expériences nudgées dans la ceinture tropicale (avec TSM climatologiques ou observées). Le nudging permet de reproduire l'anomalie de circulation cyclonique observée sur le Pacifique Nord et les fortes précipitations associées (en rouge) sur l'Amérique du Nord.



Le projet « IRCAAM Influence Réciproque des Climats d'Afrique de l'ouest, du sud de l'Asie et du bassin Méditerranéen » est un projet coordonné par le CNRM-GAME. Il associe aussi le CERFACS, le LEGOS, le LMD, le LOCEAN. Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 280 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,4 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Les expériences numériques de référence réalisées dans le cadre du projet IRCAAM montrent d'abord qu'une meilleure représentation de la convection et de la circulation tropicale permettrait aux modèles atmosphériques globaux d'améliorer la simulation du climat extratropical, en particulier le positionnement climatologique des ondes stationnaires c'est à dire des asymétries zonales (le long d'un cercle de latitudes) qui caractérisent la circulation des moyennes latitudes. De plus, les études de cas réalisées sur quelques étés particuliers (dont l'été 2003) suggèrent que ces ondes, parfois associées à des vagues de chaleur, peuvent être modulées par la variabilité tropicale et amplifiées par des facteurs plus régionaux (rôle des températures de surface de la mer du proche Atlantique et de l'humidité du sol sur l'Europe).

Production scientifique et brevets

Premières publications :

- Bielli S., H. Douville, B. Pohl (2009) Understanding the West African monsoon variability and its remote effects : an illustration of the grid point nudging methodology. *Climate Dyn.*, doi: 10.1007/s00382-009-0667-8.
- Douville H., S. Bielli, C. Cassou, M. Déqué, N. Hall, S. Tyteca, A. Voltaire (en préparation) Tropical influence on boreal summer variability in the northern hemisphere mid-latitudes.
- S. Bielli, C. Cassou, H. Douville (en préparation) Influence of tropical circulation on the summer 2003 heat wave over Europe.

Programme « PNANO », édition 2007

Projet SIMONANOMEM

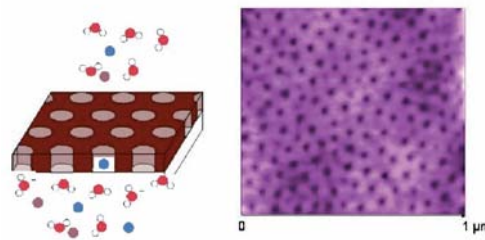
Etude fondamentale des membranes nanoporeuses pour le dessalement des eaux saumâtres et de mer

L'utilisation de la modélisation à l'échelle nanoscopique pour aider à l'élaboration de nouvelles membranes nanoporeuses et leur optimisation dans des procédés de nanofiltration

Les membranes artificielles de nanofiltration sont de plus en plus utilisées pour des procédés industriels de filtration, purification et séparation (traitement des effluents industriels, production de l'eau potable par dessalement de l'eau de mer... Il existe également des applications particulièrement importantes en biologie et en pharmacie. L'amélioration de leurs performances est nécessaire afin de rendre les procédés de nanofiltration plus efficaces et économiques. Notre objectif à long terme est d'utiliser la modélisation et la simulation à l'échelle nanoscopique pour aider à l'élaboration de nouvelles membranes de nanofiltration mieux adaptées pour, par exemple, le dessalement à moindre coût de l'eau de mer (une application d'importance majeure à cause des problèmes mondiaux d'approvisionnement en eau potable). Notre approche de modélisation multi-échelle sera validée par comparaison entre l'étude expérimentale sur les matériaux modèles et la modélisation moléculaire.

L'expérience, théorie et modélisation en synergie pour mieux comprendre la physico-chimie de l'eau et des ions dans des nanopores afin d'optimiser la sélectivité des membranes de nanofiltration

Des techniques d'autoassemblage de copolymères à blocs sont utilisées et perfectionnées pour obtenir des membranes modèles de nanofiltration afin de mieux comprendre les mécanismes de transport. A terme, grâce aux allers-retours entre la modélisation et l'expérience, nous nous proposons d'utiliser ces mêmes techniques pour élaborer des nanomatériaux avec des propriétés de transport conçues pour une application industrielle donnée via une meilleure compréhension des interactions soluté-soluté et soluté-nanomatériel. Dans le domaine des membranes nanoporeuses, la méthode empirique d'essai erreur ne permet pas encore de conduire de façon satisfaisante économiquement à l'optimisation de procédés. Parce que des connaissances scientifiques fondamentales manquent à l'échelle nanométrique et que la simulation moléculaire n'est pas encore capable d'atteindre l'échelle macroscopique, nous avons mis en œuvre l'approche synergique suivante dans le but de mieux maîtriser la fabrication et les propriétés de transport des membranes nanoporeuses : 1. Préparation et caractérisation expérimentales de membrane modèles, 2. Théorie et modélisation au delà des méthodes de milieux continus, 3. Simulation moléculaire.



SIMONANOMEM : La modélisation moléculaire et la théorie du transport au travers des matériaux membranaires modèles nanoporeux (à gauche) fabriqués à partir de copolymères à blocs (à droite).

« SIMONANOMEM Simulation and Modeling of the transport across Polymeric Nanoporous Membranes prepared by self-assembly of block copolymers »

est un projet de recherche fondamentale coordonné par Laboratoire de Physique Théorique (LPT) de Toulouse (CNRS - Université de Toulouse). Il associe aussi trois autres laboratoires : l'Institut Européen des Membranes (IEM) de Montpellier (CNRS-ENSCM-Université Montpellier 2) ; le Laboratoire Chimie Provence (LCP) de Marseille (Université de Provence) ; l'Institut Charles Gerhardt (ICG) de Montpellier (CNRS-ENSCM-Université Montpellier 2). Le projet a commencé en janvier 2008 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 401 k€ pour un coût global de l'ordre de 1,4 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Nos travaux ont déjà porté leurs fruits sur le choix des structures des copolymères à blocs, à la caractérisation macromoléculaire de polymères triblocs et à la mise au point des conditions de leur auto-organisation. Des membranes ont été élaborées par dépôt de film mince à la surface de membranes poreuses commerciales et l'étude de leur auto-organisation est en cours. Nous avons également mené à bien des simulations moléculaires dans des nanopores modèles. Ces résultats ont permis de mieux comprendre les effets dus à la température et aux caractéristiques spécifiques des molécules et des ions (taille, charge, polarisabilité).

Production scientifique et brevets

Une thèse a été soutenue sur la modélisation moléculaire et deux articles publiés (dans *Macromolecules* et *Desalination and Water Treatment*) sur l'élaboration des matériaux et la simulation multi-échelle de la nanofiltration (d'autres en cours de rédaction). Des communications orales et par affiches ont été présentées dans des conférences internationales, telles que : Engineering with Membranes 2008, Euroromembrane 2009, Diffusion Fundamentals III, Journées Simulation Numérique'09, International IUPAC conference POC'09).

Programme « Technologies Logicielles », édition 2007

Projet GEOLOGIE NUMERIQUE

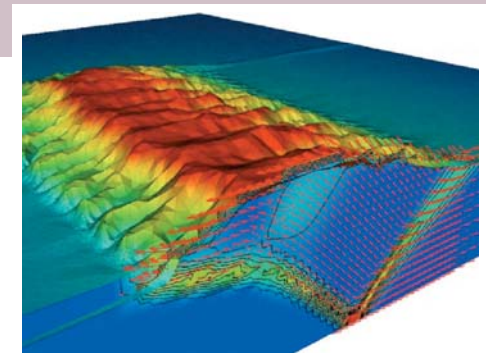
De la physique, des maths et des ordinateurs pour expliquer la formation des montagnes

La formation des chaînes de montagnes

Les chaînes de montagnes sont sans doute les objets géologiques les mieux étudiés mais la nature exacte des processus menant à leur formation reste, à ce jour, relativement obscure : s'agit-il simplement de la collision frontale entre deux blocs continentaux ou le manteau sous-jacent joue-t-il un rôle moteur prépondérant ? La surface d'une montagne est façonnée par l'effet combiné de forces tectoniques verticales et des processus d'érosion par les torrents et les glaciers. Une des questions fondamentales qui agite la communauté des sciences de la Terre est de savoir si il existe un ou des couplages entre ces processus : les forces tectoniques sont-elles sensibles à l'effet de l'érosion ? La surrection tectonique influence-t-elle suffisamment le climat pour que, par l'intermédiaire de la distribution des précipitations locales, l'intensité de l'érosion soit modulée par les processus tectoniques. Le projet de Géologie Numérique a pour but de répondre à certaines de ces questions grâce à une approche quantitative, c'est-à-dire basée sur les lois de la physique et la résolution d'équations les représentant.

Simulation numérique

Pour y parvenir, nous avons développé des outils numériques, c'est-à-dire des logiciels permettant de résoudre ces équations pour des objets géologiques (montagnes, bassins, vallées, etc.) de géométrie complexe. Ceci a nécessité d'intégrer dans des méthodes relativement classiques de nouvelles technologies numériques permettant de représenter avec précision les géométries des objets étudiés tout en tenant compte des interactions physiques entre des processus évoluant à des rythmes différents (millions d'années pour les processus tectoniques, milliers d'années pour les processus d'érosion). Nous avons également adapté ces outils numériques aux nouvelles technologies informatiques utilisant un grand nombre de processeurs (ordinateurs) en parallèle.



Exemple d'une simulation numérique où la croûte terrestre a été déformée sous l'effet de forces tectoniques (subduction du manteau sous-jacent) ; on voit la formation d'un relief composé de vallées et de collines ainsi que deux failles majeures ; l'une d'entre elles est plane, tandis que l'autre est déformée par la présence du relief sus-jacent.

« **GEOLOGIE NUMERIQUE Prédire, intégrer et enrichir la géologie par la modélisation numérique** » est un projet de recherche fondamentale coordonné par l'Université de Grenoble-Joseph Fourier. Il associe aussi de nombreux partenaires locaux, nationaux et internationaux. Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 500k€ pour un coût global de l'ordre de 920k€.

IMPACTS

Résultats majeurs

Nous avons démontré l'importance du couplage entre tectonique et érosion, par l'intermédiaire de la perturbation de l'orientation des contraintes causée par la présence d'un relief qui entraîne une déformation importante des structures (failles) sous-jacentes. Nous avons également mis en évidence l'importance des mouvements tectoniques horizontaux sur l'advection des vallées et autres éléments des reliefs montagneux et donc sur leur stabilité temporelle. D'autres résultats ont également été obtenus concernant la dynamique du manteau sous-jacent, la datation des reliefs (leur âge et la vitesse à laquelle ils se sont formés), ainsi que l'évolution des reliefs dans les zones non-orogéniques caractérisant par exemple le continent africain.

Production scientifique et brevets

Sur les quatre années du projet, l'équipe menée par Jean Braun a produit dix-sept publications dans des revues internationales de rang A et un livre. Le logiciel développé dans le cadre de ce projet a été distribué sous forme de logiciel libre et est utilisé par un grand nombre d'équipes de recherche en France et à l'étranger. Jean Braun a été invité à de nombreux congrès, séminaires et écoles thématiques (trente-cinq interventions entre 2006 et 2009)

Programme « Vulnérabilité : Climat et Milieux », édition 2006

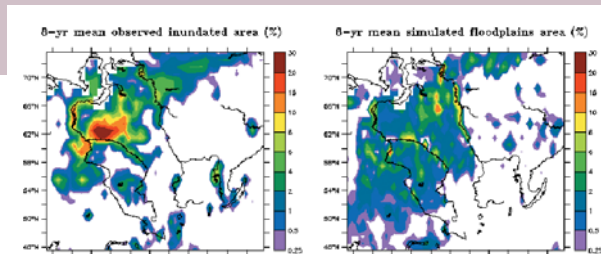
Projet IMPACT BOREAL

Rôle des zones humides boréales dans le changement climatique au XXI^e siècle ?**Quantification de l'impact du changement climatique sur l'évolution des zones humides boréales et le méthane associé**

Il est attendu que le changement climatique affecte tout particulièrement les zones boréales, avec des répercussions importantes sur les cycles hydrologiques et biogéochimiques. Les zones marécageuses boréales sont une source importante de méthane (CH₄) atmosphérique (~25 % des émissions totales naturelles et anthropiques), un puissant gaz à effet de serre qui a contribué à ~20 % du réchauffement au cours du siècle dernier. Ces zones humides ont probablement déjà joué un rôle clé dans les variations naturelles du méthane au cours des derniers cycles climatiques. L'objectif de ce projet est donc d'améliorer les modèles hydrologiques et biogéochimiques, pour quantifier l'impact du changement climatique sur la distribution des zones inondées et la production de CH₄ associée. Les modèles seront testés sur des observations des dernières décennies et sur de nouvelles données des évolutions rapides du CH₄ à la dernière glaciation. Le but ultime est d'estimer avec plus de fiabilité l'évolution des émissions de méthane au cours du XXI^e siècle. La rétroaction climat-CH₄ liée au changement d'émission sera aussi analysée.

Développement de nouvelles paramétrisations des zones inondées et des émissions de méthane dans les modèles et évaluation avec des observations

La méthode consiste tout d'abord à développer de nouvelles paramétrisations des zones inondées dans les modèles de surface ISBA et ORCHIDEE. Un modèle de routage a été couplé au modèle hydrologique, entre autre pour simuler l'évolution des zones inondées. Un module pergélisol sera à terme ajouté. La production et l'oxydation du méthane dans les zones marécageuses, ainsi que son transport vers l'atmosphère seront modélisés. Les variations annuelles et inter-annuelles des paramètres hydrologiques seront en parallèle estimées à partir d'observations multi-satellites. Une climatologie de la distribution des étendues inondées et de leur saisonnalité sera établie et évaluée, sur les 15 dernières années. Ces cartes seront confrontées à des simulations hydrologiques forcées par des flux atmosphériques combinant observations et prévisions météorologiques à courte échéance. Les flux de CH₄ estimés seront évalués par rapport aux inversions des mesures atmosphériques issues des réseaux d'observation. Part ailleurs, de nouvelles données seront acquises sur l'évolution de CH₄ durant les variations rapides de la dernière glaciation, grâce à un dispositif mis au point au cours de ce projet. Elles seront comparées à de nouvelles simulations des zones marécageuses et leurs émissions de CH₄ sur ces mêmes événements.



Comparaison sur l'ouest de la Sibérie entre les surfaces inondées vues par satellite (gauche) et celles simulées à 1° de résolution par le modèle hydrologique ISBA (droite). Les étendues sont données en pourcentage et les moyennes sont établies sur la période 1993-2000.

Le projet « **IMPACT BOREAL IMPACT of Climate on hydrology and methane production in anaerobic soils in BOREAL Regions** » est un projet coordonné par l'Observatoire astronomique de Paris-Meudon-Nancay. Il associe aussi le LERMA, le LSCE, le LGGE, le GAME/CNRM, le LEGOS. Le projet a commencé en janvier 2007 pour une durée de 36 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 331 k€ pour un coût global de l'ordre de 2,2 M€.

IMPACTS**Résultats majeurs**

Les zones inondées ont été simulées par les modèles de surface et comparées aux observations satellites et in situ. La comparaison des tendances annuelles des débits observés et simulés montre que les tendances observées à l'échelle du globe sont en grande partie expliquées par les fleuves boréaux. Par ailleurs, les flux de méthane ont été modélisés sur les dernières années et comparés aux inversions atmosphériques. Des simulations des émissions de méthane issues des zones humides et de la fonte des pergélisols sont en cours pour le XXI^e siècle. En parallèle, un nouveau spectromètre a été mis au point pour l'analyse du CH₄ et montre d'excellentes performances.

Production scientifique et brevets

- Alkama et al., soumis JH, 2009.
- Biancamaria et al., sous presse, JH, 2009.
- Biancamaria et al., RSE, 2008.
- Decharme et al., soumis, JH, 2009.
- Kirpotin et al., IJES, 2009.
- Kouraev et al., SG, 2008.
- Koven et al., GRL, 2009.
- Papa et al., JGR, sous presse, 2009.
- Papa et al., SG, 2008.
- Papa et al., JGR, 2007.
- Ringeval et al., en révision GBC, 2009.
- Zakharova et al., IJES, 2009.

Programme « Calcul Intensif et Grilles de Calcul », édition 2005

Projet NUMASIS

Optimisation des simulations sismiques sur ordinateurs massivement parallèles

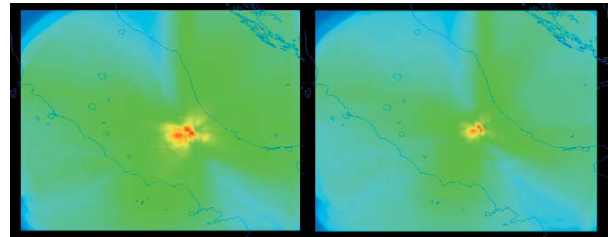
Simuler pour mieux comprendre les séismes, leurs effets et les répliques

La simulation de tremblement de terre s'appuie principalement sur la modélisation de la propagation des ondes sismiques dans des milieux géologiques complexes. A partir de la source estimée d'un séisme, il faut donc calculer comment les ondes vont se propager dans les différentes couches géologiques terrestres. Cette propagation tient évidemment compte de la nature de ces couches. Le projet NUMASIS a étudié les séismes à une échelle locale (ville, agglomération) mais aussi à une échelle plus globale (planète). A une échelle plus locale, il est particulièrement important de tenir compte de la topographie pour prendre en compte ce qu'on appelle les effets de site (amplification ou déperdition des effets des ondes). Un séisme n'aura pas les mêmes effets si il trouve son origine dans une vallée encaissée ou bien dans espace sans relief comme une plaine. Les partenaires du projet NUMASIS étudient différents modèles numériques comme les éléments spectraux (Magique3D Pau), les différences finies (BRGM, CEA) et les éléments finis (BRGM). Ces simulations manipulent de très gros volumes de données et peuvent avoir des temps de calcul très importants suivant la précision avec laquelle on veut reproduire le séisme.

Les enjeux de telles simulations sont multiples ; comprendre les effets des séismes en surface pour anticiper les niveaux de protection des constructions, identifier les risques de répliques après un séisme, identification de réserves pétrolières (TOTAL)...

Simuler plus vite en tenant compte de la hiérarchie mémoire des ordinateurs parallèles

Les architectures des plates-formes de calcul sont devenues des architectures très complexes à programmer avec l'émergence des processeurs multicœurs (plusieurs unités de traitement sur un même composant), une certaine hétérogénéité (CPU, GPU) et surtout une organisation mémoire complexe et hiérarchique. Toutes ces caractéristiques doivent être prises en charge au niveau de l'algorithmique (par exemple les solveurs numériques comme PaStiX) mais également au niveau des environnements de programmation et de compilation. Les équipes INRIA du projet (Runtime à Bordeaux et Mescal à Grenoble) ont développé de nouveaux paradigmes au niveau des environnements OpenMP pour mieux appréhender la hiérarchie mémoire des machines NUMA. Ces environnements ont été utilisés dans les codes sismiques du BRGM (Ondes3D), du CEA (ProDIF).



Cartes de vitesse maximale du sol illustrant l'aléa sismique pour deux des quatre scénarios de répliques possibles du tremblement de terre de L'Aquila en Italie du 6 avril 2009, qui auraient pu se produire dans les jours suivants et qui ont été simulées sur la machine de calcul du CINES. En rouge, les zones qui seraient fortement touchées.

En jaune, impact moyen. Les zones en vert ou bleu sont a priori sans risque. On voit clairement que le scénario de la figure de gauche produit plus de dégâts potentiels que celui de la figure de droite.

Le projet « NUMASIS Adaptation et Optimisation des Performances Applicatives sur architectures NUMA. Etude et Mise en œuvre sur des Applications en SISmologie » est un projet de coordonné par l'IMAG. Il associe aussi l'INRIA Rhône-Alpes (Grenoble), le BRGM (Orléans), Bull (Echirrolles), le CEA-DAM (Bruyères le Chatel), l'INRIA Sud-Ouest (Bordeaux), l'INRIA Sud-Ouest (Pau), l'IRISA (Rennes), Total (Pau). Le projet a commencé en janvier 2006 pour une durée de 48 mois : il bénéficie d'une aide ANR de 603k€ pour un coût global de l'ordre de 2,7 M€.

IMPACTS

Résultats majeurs

D. Komatitsch (Université de Pau) et SPECFEM3D ont remporté le 3^e prix sur la simulation numérique (Prix Bull Fourier Genci) <http://www.prix-bull-fourier.fr/2009.html>

Solveur PaStiX : <http://www.labri.fr/perso/ramet/pastix/>

ForestGOMP : <http://runtime.bordeaux.inria.fr/forestgomp>

Minas : <http://sites.google.com/site/pousachristiane/minas>

Production scientifique

Un article dans le journal JPDC, une bonne quinzaine d'articles dans les conférences internationales IPDPS, HPDC, Cluster, ICSE, ParCO, EuroPar, PMAA, PARA, IWOMP, SBAC-PAD

Notes :

Notes:

Notes :

Création : Sally Lewis
Réalisation - Impression : Navis

Dépôt légal à parution
ISSN en cours

AGENCE NATIONALE DE LA RECHERCHE
ANR

212 rue de Bercy - 75012 Paris
Tél. : +33 (0)1 78 09 80 00
www.agence-nationale-recherche.fr



« Au service de la science et de la technologie, l'ANR apporte sa pierre à l'édifice des connaissances et des innovations afin de répondre aux besoins de notre société.

Les Cahiers de l'ANR devraient permettre au plus grand nombre d'appréhender les actions de recherche soutenues par l'ANR sur des sujets essentiels pour notre futur. »

Jacqueline Lecourtier,
Directeur général de l'ANR

le calcul intensif : technologie clé pour le futur

Une révolution puissante est en marche. Cette révolution est celle du Calcul Intensif. Technologie clé, stratégique pour le futur, le calcul intensif concerne non seulement la puissance de calcul des supercalculateurs mais aussi une très large gamme d'applications.

Un ordinateur « pétaflopique » a aujourd'hui une capacité de calcul équivalente à 100 000 exemplaires de l'ordinateur portable le plus rapide. Au-delà de la puissance, apparaît au premier plan l'intelligence humaine. Les recherches portent sur les technologies, les matériels et les logiciels, les architectures informatiques et les langages, par exemple.

L'intelligence humaine est aussi en œuvre avec la modélisation, la simulation. À l'origine de l'essor du calcul intensif figure la simulation nucléaire qui a permis de faire cesser les essais réels. Aujourd'hui, les applications favorisent découvertes et innovations dans de nombreuses disciplines scientifiques (de la physique... à la géophysique, en passant par la biochimie), dans le secteur de l'énergie et du nucléaire, dans le domaine de la santé ou de l'environnement ainsi que dans de multiples secteurs industriels.

www.agence-nationale-recherche.fr

AGENCE NATIONALE DE LA RECHERCHE
ANR

