



# Idées débats, tribunes

## Sébastien Candèl

PHYSICIEN, PRÉSIDENT  
DE L'ACADÉMIE DES SCIENCES

### Le calcul parallèle met des questions inaccessibles à portée humaine

Dans le cadre de notre partenariat avec l'Académie des sciences, des académiciens vont expliquer les nouvelles dimensions de l'observation scientifique en ce XXI<sup>e</sup> siècle. Une série pour comprendre comment, grâce aux progrès scientifiques et technologiques, se révèle un monde nouveau.

■ Comment effectuer en un seul mois des simulations nécessitant des millions d'heures de calcul – plus d'une centaine d'années ?

Une révolution le permet désormais : le calcul haute performance. Mettant des questions jusqu'ici inaccessibles à la portée de la simulation, il ouvre des perspectives inédites pour les sciences et leurs applications. Explications de Sébastien Candèl, président de l'Académie des sciences, physicien, spécialiste des sciences de l'ingénieur, en pointe sur ces recherches.

L'idée de grand instrument scientifique évoque des télescopes, des synchrotrons, des accélérateurs de particules, etc. On pense, par exemple, au très grand télescope européen (Very Large Telescope) ou à la machine du Cern désignée sous le nom de Large Hadron Collider (LHC) qui permet d'atteindre les très hautes énergies nécessaires à l'étude des particules élémentaires. On pense moins aux instruments qui permettent de réaliser des simulations numériques de problèmes complexes.

#### *Une révolution qui ramène un temps de calcul d'une centaine d'années à un petit mois.*

Et pourtant, ces instruments existent sous la forme d'ordinateurs puissants qui rendent des services étonnants à l'ensemble de la communauté scientifique. Ces moyens gérés depuis 2007 par le Grand Équipement national de calcul intensif (Genci) sont utilisés pour réaliser les simulations qui nécessitent les performances les plus élevées. Des puissances encore plus importantes sont disponibles dans le cadre d'un partenariat européen qui porte le nom de Prace (Partnership for Advanced Computing in Europe). On sait que la loi de

Moore (1) prévoit une augmentation exponentielle des puissances de calcul, mais c'est le traitement parallèle qui a permis de tirer profit des possibilités offertes par l'électronique et qui constitue une véritable révolution, que je vais tenter d'illustrer ici.

#### **SIMULATION « FRONTIÈRE »**

Dans ce que l'on désigne désormais par l'acronyme HPC (High Performance Computing), le calcul est réalisé à des niveaux de performance qui sont de l'ordre du péta-

1 000 000 000 000 000 (le chiffre 1 suivi de 15 zéros). Cette puissance phénoménale est obtenue en rassemblant dans la même machine des dizaines de milliers d'unités de calcul (on parle de « cœurs de calcul »). Une des machines du grand instrument Genci (technologie cluster Bullx) comporte ainsi plus de 80 000 cœurs et une mémoire de plus de 320 téraoctets (320 000 000 000 000 000 octets). Mais comment peut-on profiter de cette extraordinaire puissance d'exécution ? Il faut pour cela organiser le calcul pour qu'il puisse être effectué de façon distribuée sur plusieurs milliers de processeurs simultanément. Pour mieux saisir l'intérêt de cette méthode, je prendrai l'exemple d'une simulation « frontière », réalisée récemment par mon équipe. Il s'agit de l'allumage complet d'une chambre de combustion annulaire de laboratoire (formée par deux cylindres concentriques), représentant sous forme idéalisée les foyers utilisés dans les moteurs d'avion ou les turbines à gaz. La chambre comporte une série d'injecteurs qui alimente chacun le système en réactifs (dans ce cas particulier, il s'agit d'un mélange d'air et de propane) et imprime à l'écoulement un mouvement de rotation permettant de stabiliser la combustion. Le débit de ces injec-



BRIGITTE EYMANN / ACADEMIE DES SCIENCES

## *Des perspectives de progrès inédites pour toutes les questions scientifiques mais aussi dans l'industrie.*

teurs est fixé et on allume la chambre à l'aide de l'étincelle d'une bougie. On simule ici une centaine de millisecondes d'un écoulement qui est turbulent et dans lequel la combustion est réalisée au travers d'une série de réactions chimiques qui dégagent une grande quantité de chaleur (on dit que ces réactions sont fortement exothermiques). La phase d'allumage est évidemment critique et il faut qu'elle conduise à une combustion stabilisée pour la bonne marche du moteur ou de la turbine à gaz. La flamme se propage dans le foyer annulaire et la combustion s'établit en moins d'une cinquantaine de millisecondes.

### **CŒURS DE CALCUL**

Pour simuler ce système, il faut représenter le mouvement du fluide et les réactions chimiques et, pour cela, utiliser un jeu d'équations décrivant la mécanique des fluides et la dynamique de la flamme. Ces équations sont résolues en tous

points d'un maillage très serré qui recouvre l'ensemble du foyer. Ce maillage comporte dans ce calcul environ 55 millions de nœuds, 310 millions d'éléments et il sert à traiter non seulement les variables qui décrivent l'écoulement turbulent, mais aussi celles qui représentent la combustion. Cette simulation fait intervenir une variété de phénomènes physiques et chimiques complexes dans une géométrie qui est aussi complexe.

Le calcul nécessiterait un million d'heures, s'il était réalisé sur un seul processeur. Or il n'y a que 8 760 heures dans une année (c'est évidemment très peu car une année, d'après notre expérience collective, est toujours trop vite passée). Le calcul sur un seul cœur prendrait plus d'une centaine d'années et il faudrait donc plus d'une vie pour obtenir un seul résultat. C'est toute l'extraordinaire puissance du calcul parallèle que de permettre de répartir le calcul sur

plusieurs milliers de processeurs pour obtenir la solution en moins d'un mois. Il faut pour cela programmer le calcul pour qu'il puisse être effectué simultanément sur un grand nombre de cœurs. Les choses paraissent simples, mais cette programmation est d'une grande complexité car il faut l'adapter à l'architecture des machines parallèles pour tirer pleinement profit des milliers de cœurs de calcul disponibles.

### **APPLICATIONS**

Grâce au calcul à haute performance (HPC), beaucoup de questions, qui étaient il y a encore peu de temps inaccessibles, sont désormais à la portée de la simulation, une combinaison extraordinairement subtile et efficace (a) de modèles, (b) de méthodes de résolution (c), de ressources informatiques et (d) de capacités de calcul parallèle. Le calcul à haute performance (HPC) permet des progrès sur toutes les questions scientifiques, mais il a aussi une utilité pratique incontestable dans le domaine de la conception et du développement industriels.

La simulation désormais incontournable a remplacé pour une bonne part des processus d'essais plus classiques qui étaient la norme dans les développements techniques. On fait toujours des essais, mais en moins grand nombre, et ils sont désormais guidés par la simulation. La simulation permet de comprendre, maîtriser, tester, améliorer, comparer et optimiser. Un objectif fondamental de la recherche en HPC est d'explorer par des simulations « frontières » ce que seront les méthodes de conception de demain, faire que les moyens développés par la recherche deviennent des outils utilisables en conception, que les résultats des simulations soient pertinents pour les applications. ★

(1) Cofondateur d'Intel, Gordon Moore avait prévu, il y a plus de quarante ans, que le nombre de transistors par unité de surface de circuits intégrés allait doubler tous les dix-huit mois. Cette tendance confirmée en pratique a conduit aux processeurs actuels comportant plusieurs milliards de transistors et à une croissance du même ordre en termes de performance de calcul.

■ POUR EN SAVOIR PLUS

LE SITE DE L'ACADÉMIE DES SCIENCES

[www.academie-sciences.fr](http://www.academie-sciences.fr)

LE SITE DU GRAND ÉQUIPEMENT NATIONAL DE CALCUL INTENSIF

(Genci) propose de nombreuses informations sur ce sujet :

[www.genci.fr](http://www.genci.fr).

LA SIMULATION DE L'ALLUMAGE

décrite dans cette tribune peut être visionnée sur :

<http://www.em2c.ecp.fr/>

[le\\_laboratoire\\_em2c/video/movies](http://www.em2c.ecp.fr/le_laboratoire_em2c/video/movies) et sur

<https://vimeo.com/83945547>

À venir :

« LES SIMULATIONS "FRONTIÈRES" EN MÉCANIQUE DES SOLIDES ET DES FLUIDES »

Colloque organisé par l'Académie des sciences, le 9 mai 2017.

Les vidéos des quatre exposés seront disponibles sur

[www.academie-sciences.fr](http://www.academie-sciences.fr)