

Rapport sur le calcul scientifique

par C. Bernardi (C.N.R.S. et Université Pierre et Marie Curie)

et le comité de rédaction: O. Daube (C.N.R.S. et L.I.M.S.I.)

P. Degond (Université Paul Sabatier)

P. Destuynder (C.N.A.M.)

P. Leca (O.N.E.R.A. et Université Pierre et Marie Curie)

O. Pironneau (Université Pierre et Marie Curie)

D. Serre (E.N.S. Lyon et I.U.F.)

Plus de 300 thèses soutenues en 1993 ont été recensées comme contenant du calcul scientifique: rien ne saurait mieux témoigner de l'énorme développement du travail de calcul dans tous les laboratoires scientifiques, des mathématiques à la biologie. Ce chiffre à lui seul suffit aussi à justifier pourquoi il n'est pas question, dans ce rapport traitant du calcul scientifique, de résumer les résultats, les méthodes, les applications qui y sont liés. Faute de pouvoir faire mieux, nous nous limiterons à quelques points que nous estimons fondamentaux, soit pour leur importance scientifique, soit pour la rapidité de l'évolution en cours sur le sujet.

Il nous a paru naturel, pour commencer ce travail, de donner une définition du calcul scientifique qui puisse servir de base à la discussion. On recense ensuite les domaines d'application, et on précise le rôle spécifique que jouent les mathématiciens appliqués vis-à-vis des autres disciplines scientifiques. On présente quelques idées concernant le rapport du calcul scientifique respectivement avec la preuve et l'expérimentation. Puis on résume le travail de calcul scientifique effectué dans d'autres organismes de recherche, publics ou semi-privés, et on tente de mettre en évidence la place que le C.N.R.S. peut prendre dans ce cadre. Les grands types de problèmes existant en calcul scientifique sont décrits, avec les méthodes actuellement utilisées pour les résoudre. On présente finalement les grands défis informatiques actuels en indiquant là encore les lieux où le C.N.R.S. doit être présent. La dernière partie, plus prosaïque, recense les besoins actuels les plus urgents des laboratoires C.N.R.S.

Le présent rapport a été écrit à la demande de la Section 01 du Comité National du C.N.R.S., avec l'approbation de la direction du département "Sciences Physiques et Mathématiques". Les chiffres qui y figurent proviennent d'un questionnaire envoyé aux directeurs de 144 laboratoires C.N.R.S., dont les 51 laboratoires relevant de la Section 01, 89 laboratoires ayant répondu. Un résumé des réponses est joint à ce rapport. Il est bien sûr impossible de tirer des informations statistiques des renseignements obtenus, mais les grands problèmes en cours, l'évolution des techniques informatiques et les besoins urgents des laboratoires y apparaissent clairement. On notera également la concordance de certains points de ce rapport avec l'article "*Le calcul scientifique*", rédigé sous la direction de R. Dautray et publié dans "La Vie des Sciences", *Comptes-Rendus*, série générale, tome 9 (1992), p. 63-83. Nous remercions D. Bernardi, P.G. Ciarlet, M. Dauge, R. Glowinski, Y. Maday, G. Pagès et F.-X. Roux pour leurs contributions à ce travail.

1. Une définition du calcul scientifique.

D'une manière générale, on peut définir le calcul scientifique comme l'utilisation de l'ordinateur en tant qu'outil de travail dans une discipline scientifique quelconque. Mais il est nécessaire de préciser les termes.

Calcul: En fait, le terme "calcul" peut être défini comme une succession d'opérations automatiques, basées sur des fonctions mathématiques telles que les opérations élémentaires ou la trigonométrie ou les logarithmes et exponentielles. En ce sens, le calcul a toujours existé et la machine de Pascal a été inventée pour faire du calcul. Ce que les ordinateurs ont apporté de révolutionnaire est, encore plus que l'automatisation, le changement d'échelle des problèmes à résoudre: l'exemple le plus frappant est sans doute ici la résolution de systèmes

linéaires, dont l'ordre était inférieur à 10 il y a cinquante ans et atteint aujourd'hui 10.000 lorsque la matrice est pleine, 1.000.000 lorsqu'elle est suffisamment creuse. La taille de mémoire et la capacité de calcul n'ont pas fini de grandir, la seule limite théorique dans la transmission des données étant la vitesse de la lumière. Il faut donc s'attendre à d'autres changements d'échelle dans les décennies à venir.

Le produit du calcul est le plus souvent une suite de nombres, mais peut également être une proposition mathématique. C'est déjà le cas pour le calcul dit "formel". Ne peut-on pas s'attendre à ce que l'ordinateur énonce un jour lui-même sa conjecture à partir des calculs qu'il avait reçu l'ordre d'effectuer? L'intelligence artificielle est un sujet au berceau, nul ne sait où il s'arrêtera.

Scientifique: La première remarque à faire est qu'il existe du calcul non scientifique, tel que la comptabilité d'une entreprise. Le calcul dit "scientifique" doit donc servir une démarche scientifique visant à l'élaboration d'une théorie ou à la confrontation avec la réalité. En ce sens, il sert de catalyseur aux nouvelles façons d'aborder les problèmes: nouveaux concepts, nouveaux types de raisonnement, nouvelles démarches de recherche. Dans une théorie, il produit le plus souvent des résultats quantitatifs mais aussi qualitatifs (par exemple, pour les systèmes dynamiques). Il peut ainsi jouer un rôle dans toutes les étapes d'un problème: élaboration et validation de modèles, choix et interprétation en temps réel d'expériences, réalisation et optimisation de produits, énoncé et vérification de conjectures. Il sert parfois à retrouver numériquement des résultats d'expériences, mais il a parfois de l'avance sur elles: citons pour l'instant la supraconductivité à haute température.

Avec cette définition relativement large, il semble que le rôle du calcul scientifique dans toutes les disciplines scientifiques ne peut que continuer à croître, et que les rares domaines non encore touchés par l'explosion informatique le seront dans les années à venir.

2. Domaines d'application et rôle des mathématiques appliquées.

Avant de passer en revue les domaines d'application, il faut insister sur le rôle spécifique que jouent les mathématiques appliquées dans ce cadre. D'après la définition précédente, tout calcul fait intervenir des objets mathématiques, des méthodes mathématiques de calcul. Les objets sont parfois très simples: systèmes linéaires, polynômes, séries de Fourier... Parfois, et même souvent, ceux-ci sont si compliqués qu'un travail de recherche très important est nécessaire à leur élaboration, faisant intervenir de la géométrie, de la topologie, de l'analyse fonctionnelle, des statistiques ou de l'analyse harmonique... Les mathématiciens appliqués, au sens où nous l'entendons, qu'ils soient analystes, numériciens, probabilistes ou statisticiens, travaillent dans le but que leur recherche débouche sur un calcul, même si plusieurs étapes intermédiaires de recherche sont nécessaires: les algorithmes permettant la résolution efficace des équations hyperboliques non linéaires viennent d'une étude approfondie de ces équations, l'idée des méthodes de cheminement est liée à la théorie du degré topologique d'un problème, l'algorithme de Strang et Fix, qui consiste à introduire un nombre fini de singularités d'une équation elliptique dans l'espace de résolution, requiert une bonne connaissance de ces singularités qui n'est pas encore acquise en dimension 3.

Un fait tout aussi important est que les techniques de calcul peuvent venir directement des applications: les méthodes particulières, les méthodes spectrales pour ne citer que celles-là. Au niveau algorithmique, il y a donc un aller et retour entre mathématiciens et "applicateurs". Bon nombre de physiciens comptent parmi les meilleurs calculateurs: il faut savoir qu'une intuition des résultats numériques est parfois bien nécessaire aussi bien pour construire un code que pour trouver les erreurs dans un programme.

On recense ici les principaux domaines d'application du calcul: la plupart figuraient dans le questionnaire, mais un certain nombre d'applications intéressantes sont apparues dans les réponses.

Mathématiques pures. Le développement du calcul scientifique en mathématiques est sans doute plus récent que dans d'autres disciplines, mais tout aussi important. En revanche, le type de calcul effectué semble différent des applications plus "matérielles": l'utilisation du calcul formel est presque systématique et le produit peut être aussi bien des développements en série entière que des suites de nombres. La recherche en mathématiques peut s'appuyer sur le calcul soit pour vérifier une théorie, soit pour énoncer des conjectures nouvelles. Citons pour finir l'existence de calcul totalement distribué: la décomposition de grands nombres en produit de facteurs

premiers peut s'effectuer par des essais indépendants lancés simultanément sur plusieurs milliers de machines de par le monde.

Statistiques. Les logiciels statistiques disponibles sur micro- ou mini-ordinateurs ont définitivement "démocratisé" l'usage des méthodes statistiques dans les diverses disciplines utilisatrices. On peut même penser qu'en retour, la banalisation de représentations graphiques tri-dimensionnelles et parfois animées n'est pas sans influence sur la recherche, notamment en statistique descriptive.

Mécanique des solides. Des progrès spectaculaires ont été réalisés dans la modélisation, l'analyse mathématique et numérique de nombreux problèmes. Ces progrès ont permis à leur tour de réaliser des simulations numériques convaincantes dans de multiples domaines autrefois inaccessibles. Citons par exemple les phénomènes non linéaires (matériaux incompressibles, pneus en grande déformation, flambage), les structures périodiques (calculs de treillis, de plaques composites), les structures avec un ou plusieurs "petits" paramètres pour lesquels toute la puissance de l'analyse asymptotique s'avère nécessaire (tour de refroidissement d'une centrale nucléaire, pales de turbine, panneaux solaires d'un satellite), la plasticité (écrasement d'une carrosserie automobile), la fissuration et la fatigue, les matériaux dits "intelligents", ...

Mécanique des fluides. S'il ne faut pas réduire la mécanique des fluides aux simulations numériques, c'est toutefois une discipline de base pour le calcul, remarquable par la variété des problèmes mathématiques qui viennent de lois physiques très simples (conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie). Le passage d'un type d'écoulement à un autre, par exemple de laminaire à turbulent ou de subsonique à supersonique, correspond à des changements profonds dans le système d'équations qui les modélise: le changement de signe d'un paramètre transforme une simple équation elliptique en un système hyperbolique, la présence d'un coefficient petit par rapport aux grandeurs caractéristiques du problème fait apparaître des couches limites. Avec le temps, la complexité des modèles traités s'accroît: écoulements à plusieurs phases ou réactifs, fluides non newtoniens, métaux en fusion, magnéto-hydrodynamique. Les domaines d'application sont bien entendu immenses: 72% de la surface de la terre sont couverts d'eau et toute atmosphère est fluide.

Météorologie. À la différence des autres disciplines, les prévisions météorologiques ne reposent pas sur l'expérience mais sur le calcul, effectué après recalage sur les mesures, ce qui est une grande différence par rapport aux autres disciplines. Les codes actuels sont gigantesques, traitent des modèles à l'échelle planétaire tout en tenant compte de phénomènes locaux. Le gain de quelques heures en prévision météorologique fiable ne sert pas seulement à déterminer qui doit emporter son parapluie, c'est un atout essentiel pour le lancement de satellites ou l'assemblage du pont de Normandie.

Physique. Le calcul scientifique, sans doute moins traditionnel en physique qu'en mécanique, traite à l'heure actuelle des problèmes d'une complexité mathématique extrême; il est parfois heureux que l'on puisse effectuer un calcul sans être sûr de l'existence de la solution! Il ne sert pas seulement à vérifier des résultats d'expériences, il contribue à la recherche sur des phénomènes physiques nouveaux: si la fusion thermonucléaire est un jour maîtrisée, les simulations numériques de ce siècle y auront sans doute joué un rôle non négligeable. Le nombre de phénomènes simulés augmente d'année en année: cristaux liquides, composants électroniques, supraconductivité, lasers de puissance, astrophysique, pour ne citer que quelques exemples.

Chimie. Réactions chimiques et détonations sont maintenant suffisamment bien modélisées pour être traitées sur ordinateur lorsque le nombre de composants reste raisonnable (il effraie toutefois les mathématiciens et conduit certains chimistes à utiliser des codes tout faits sans validation du calcul). Tout un travail de suivi d'ondes peut alors s'effectuer. Le calcul en chimie quantique se développe, par exemple celui des structures moléculaires et électroniques.

Biologie et médecine. Là encore, les applications sont d'une très grande importance. Toutefois, les biologistes français à de rares exceptions près ont malheureusement un faible niveau de formation mathématique; réciproquement, trop peu de mathématiciens s'intéressent à la modélisation de phénomènes biomécaniques, comme les déformations des vaisseaux sanguins en liaison avec le battement cardiaque par exemple. Il y a là des applications importantes à développer dans les années à venir. Il faut aussi noter que l'ordinateur est indispensable pour traiter les images médicales, en particulier celles obtenues par scanner ou résonance magnétique nucléaire.

Économie et finances. Apparemment, l'utilisation du calcul scientifique pour les problèmes économiques semble encore limitée. La raison est sans doute liée à la grande difficulté d'écrire des modèles fiables. Au niveau des finances, la modélisation de la dynamique des actifs financiers (actions, indices,...) et de la courbe des taux d'intérêt en vue de l'évaluation de produits financiers dérivés (options, produits obligataires divers) est un domaine de recherche en pleine expansion. La mise en oeuvre de ces modèles s'appuie toujours sur des méthodes numériques tant au niveau de la résolution (inéquations variationnelles liées à l'arrêt optimal par exemple) que de la validation statistique (statistique des processus).

Bien entendu, et c'est heureux, les mêmes techniques de calcul peuvent servir à des applications différentes: il est donc vital qu'un transfert d'information et de savoir-faire numériques se fasse entre des laboratoires de spécialités différentes. Pour prendre un exemple, l'interaction entre fluide et structures en grandes déformations intervient aussi bien dans le lancement d'Ariane que dans les battements du coeur humain. Il faut aussi noter que des chercheurs de spécialités différentes utilisent ou ont redécouvert les mêmes méthodes numériques, souvent sous des noms différents: les astrophysiciens utilisent depuis longtemps ce que les physiciens des plasmas ont appelé méthodes particulières, le schéma de saute-mouton est connu sous le nom d'algorithme de Verlet par les spécialistes de mécanique statistique... Ces échanges d'information scientifique existent: si presque tous les laboratoires sont en contact avec d'autres de la même spécialité, français ou étrangers, deux tiers d'entre eux travaillent avec des équipes d'autres disciplines. Les échanges semblent toutefois plus faciles au niveau numérique qu'au niveau de la modélisation, où l'utilisation de vocabulaires extrêmement différents rend la communication plus laborieuse et moins efficace. On notera toutefois l'effort, presque indispensable, effectué par un grand nombre de mathématiciens appliqués pour acquérir le vocabulaire d'une, voire deux, spécialités différentes. Peut-être est-ce à eux qu'il faut demander de continuer à jouer le rôle de plaque tournante dans les échanges concernant le calcul scientifique, même si certains reconnaissent d'ores et déjà être débordés par l'importance de la tâche.

3. Rapports entre le calcul et la preuve.

En 1976, le théorème des Quatre Couleurs, conjecturé presque un siècle auparavant, était démontré par Appel et Haken. Pour beaucoup, sa démonstration est restée la première preuve "numérique" de l'histoire. Qu'est-ce que cela signifie au juste? Les auteurs ont de façon remarquable réduit la démonstration d'un résultat mathématique à un nombre fini de cas particuliers sur lesquels ils ont ensuite lancé l'ordinateur. Par contre, si des simulations numériques ont pu faire croire que la théorie spectrale des opérateurs autoadjoints permettrait de démontrer l'hypothèse de Riemann, il s'agissait d'un artefact numérique. En effet, bien peu de problèmes mathématiques sont finis ou réductibles à un nombre fini d'opérations. Et il n'est pas inutile de répéter qu'un ordinateur ne sait pas faire plus, même si le nombre d'opérations dépasse maintenant le milliard par seconde.

Il convient de rappeler dans ce rapport que le calcul scientifique ne prouve rien, au sens mathématique du terme. Par contre, il est d'une aide incontestable pour l'énoncé de conjectures et leur vérification sur un grand nombre de cas, il fournit aussi des contre-exemples. Il sert aussi et peut-être plus souvent à valider des modèles mathématiques. L'analyse numérique joue dans ce sens un rôle important pour assurer la fiabilité d'un calcul, en permettant essentiellement d'affirmer que la solution sortie de l'ordinateur converge vers la solution de l'équation de départ lorsque le paramètre de discrétisation tend vers zéro. Mais qui dit calcul fiable ne dit pas preuve mathématique.

Pour être complet, il faut ajouter que certains logiciens s'intéressent au calcul propositionnel, dont un des buts est de réaliser des preuves de programmes. Mais les programmes ne sont pas des théorèmes.

4. Rapports entre le calcul et l'expérimentation.

Il y a une dizaine d'années, une idée relativement répandue était que la simulation numérique allait à brève échéance remplacer l'expérimentation en mécanique. Citons trois exemples classiques qui furent souvent évoqués: la mécanique des matériaux composites, l'emboutissage des tôles minces, les essais aérodynamiques. Nous allons montrer pourquoi les pronostics d'alors semblent aujourd'hui remis en question. Mais si l'expérimentation demeure indispensable, il y a des cas où elle est difficilement réalisable et souvent très coûteuse (par exemple l'étude du comportement des fluides en microgravité nécessite l'utilisation de satellites). La modélisation et le calcul peuvent alors permettre une préparation et une simplification des cas à traiter

expérimentalement.

Exemple 1: mécanique des milieux composites. L'homogénéisation a permis de rendre compte avec beaucoup de précision du comportement élastique des matériaux, mais la modélisation ne permet pas encore d'analyser convenablement les phénomènes d'endommagement, aussi bien au niveau microscopique qu'au niveau structural. Le calcul et la modélisation ont toutefois permis sur cet exemple d'aborder de nouveaux problèmes avec un minimum d'espoir de réussite, et ont conduit à mettre en place de nouvelles expérimentations dont l'utilité est devenue accessible aux mécaniciens (mais reste encore à construire), grâce à un couplage calcul-essais.

Exemple 2: emboutissage des tôles minces. Dans le procédé de fabrication des véhicules, une étape importante et sur laquelle on espère améliorer la maîtrise du processus est l'emboutissage de tôles minces (portières, capots, ...). Les mécanismes mis en jeu sont très complexes (grandes déformations, contact entre tôles et outils, plasticité, flambage, ...) et nécessitent à la fois des modèles et des calculs très élaborés. Si certains phénomènes peuvent être appréhendés par le calcul car ils relèvent des lois fondamentales de la mécanique, la rhéologie des matériaux et le contact entre tôles et outils nécessitent des expérimentations sophistiquées permettant de caractériser et d'identifier les lois de comportement: elles ont un sens dans la mesure où le calcul est capable d'en intégrer les résultats pour effectuer des simulations complexes qu'il convient, là encore, de recalculer sur des expériences d'emboutissage. Cet exemple montre que l'un sans l'autre, calcul et expérience ne peuvent exister pour certaines applications, ceci étant lié à la difficulté de dériver des modèles suffisamment performants des lois physiques ou mécaniques.

Exemple 3: essais aérodynamiques. La mesure des efforts aérodynamiques sur les structures (avions, fusées, ...) est effectuée en soufflerie depuis longtemps. Les codes de calcul récents qui résolvent les équations de Navier-Stokes tridimensionnelles ont fait naître de grands espoirs, au point de faire parfois croire que les "souffleries numériques" remplaceraient les grands moyens d'essais expérimentaux. En fait, les résultats obtenus à ce jour sont encore loin de représenter la réalité, et ceci pour plusieurs raisons, notamment la mauvaise prise en compte de la physique sous-jacente (turbulences, couches limites, instabilités d'écoulements). Le calcul peut néanmoins permettre, après "recalage" expérimental, de préparer ou d'interpréter des essais, à condition que les numériciens connaissent un minimum de physique et de mécanique. En effet, les schémas numériques doivent dans ce cas incorporer des informations physiques (intercorrélation de turbulence à distance, conditions aux limites semi-perméables, instationnarité des ondes de pression), notamment pour les problèmes à basse vitesse.

Deux autres aspects de la mécanique des fluides où le besoin de simulation se fait sentir sont l'aéroacoustique et l'aéroélasticité. Dans ce dernier cas, les problèmes, très complexes car instationnaires, peuvent se dérouler sur de grandes périodes en temps, et des expériences de dimensionnement sont indispensables pour recenser a priori les phénomènes importants et les ordres de grandeur. On voit d'ailleurs apparaître de plus en plus le calcul formel pour mener des analyses qualitatives mais aussi quantitatives de phénomènes dynamiques non linéaires liés aux comportements chaotiques qui ne sont pas encore accessibles par la simulation numérique traditionnelle. Le calcul numérique devient alors un outil de mesure de l'essai. Loin de s'exclure, calcul et expérimentation développent une nouvelle approche de phénomènes jusque là inabordables.

En résumé, l'effet de synergie qui se dégage du rapprochement expérience-calcul laisse entrevoir de nouveaux horizons pour le calcul scientifique. Mais il se pose le problème d'incorporer une double formation dans les cursus d'enseignement et de créer des laboratoires mixtes calcul-expériences. Dans la situation actuelle, l'un des deux aspects est souvent le parent pauvre de l'autre.

5. Le C.N.R.S. face aux autres centres de calcul.

Une quantité énorme de calcul est effectuée en France dans plusieurs centres de recherche tels que l'I.N.R.I.A. et l'O.N.E.R.A., d'autres institutions ont des départements entièrement consacrés au calcul. Mais la part de travail effectuée au C.N.R.S. est tout-à-fait conséquente: il ressort des réponses au questionnaire que le calcul scientifique existe dans plus de la moitié des laboratoires, ce chiffre étant sans doute bien inférieur à la réalité puisque 85 responsables d'unités C.N.R.S. sur les 89 ayant répondu et les 144 interrogés, ont indiqué que du

calcul s'effectuait dans leur laboratoire.

I.N.R.I.A. Du calcul scientifique s'effectue dans deux des centres de l'I.N.R.I.A. (Institut National de Recherche en Informatique et Automatique), qui représentent une communauté d'environ quarante personnes, thésards compris. L'I.N.R.I.A. ayant souvent eu des moyens de calcul lourds avant les centres universitaires, la taille des calculs est en général assez importante. Pourtant, dans les années 1980, l'I.N.R.I.A. participait au groupement Cray du Centre de Calcul Vectoriel pour la Recherche pour 10% et ne dépensait pas tout son quota: la raison est sans doute qu'il a été le premier centre à utiliser les stations de travail pour le calcul intensif.

Actuellement, les moyens propres de l'I.N.R.I.A. pour le calcul scientifique se résument ainsi: une trentaine de stations HP, Sun et DEC, un Convex 2, une CM200 (Connexion Machine), une KSR à 30 processeurs et une Paragon d'Intel.

Les calculs les plus coûteux concernent les fluides compressibles en trois dimensions et les modèles de Boltzmann en méthodes particulières, de volumes finis et d'éléments finis. Ces gros calculs sont effectués sur contrat avec un industriel (Peugeot, Dassault, S.E.P., ...) ou une agence gouvernementale (D.R.E.T.). La composante informatique à l'I.N.R.I.A. est faible, elle permet toutefois aux équipes de recherche de développer des outils fort utiles au reste de la communauté. Parmi les succès dans cette branche, citons la bibliothèque Modulef, le mailleur automatique EMC2 et son équivalent tridimensionnel actuellement en développement.

O.N.E.R.A. L'O.N.E.R.A. (Office National d'Études et Recherches en Aéronautique) a pour mission de mener des activités de recherche et de développement au bénéfice de l'industrie aéronautique et spatiale. Le calcul scientifique représente une partie importante du travail qui y est effectué, notamment dans les domaines de la mécanique des fluides (modélisation et simulation des écoulements internes et externes), de la mécanique des structures, de l'énergétique (écoulements avec effets chimiques) et de l'électromagnétisme.

De plus, l'O.N.E.R.A. possède des moyens d'expérimentation lui permettant de valider les résultats de la simulation numérique. Dans le domaine du calcul scientifique, une des particularités de l'O.N.E.R.A. est de développer, pour ses besoins propres et aussi pour certains industriels, des codes de calcul complets.

C.E.R.F.A.C.S. Créé en 1988, le C.E.R.F.A.C.S. (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique) est un Groupement d'Intérêt Public installé à Toulouse sur le site de Météo-France. Il est actuellement dirigé par R. Glowinski. Parmi ses membres, on compte l'I.N.R.I.A., l'Aérospatiale, Matra, Météo-France, l'Université Paul Sabatier, l'Institut National Polytechnique de Toulouse, le C.N.E.S., le C.E.A., la région Midi-Pyrénées; le C.N.R.S., membre jusqu'en 1993, s'est retiré du C.E.R.F.A.C.S., la collaboration entre les deux organismes passe maintenant par des mises à disposition de personnel dans le cadre des conventions entre laboratoires. La double vocation du C.E.R.F.A.C.S., recherche et formation, est assurée par le personnel scientifique qui se compose essentiellement de thésards et de chercheurs post-doctoraux supervisés par des chefs de projets.

L'activité scientifique du C.E.R.F.A.C.S. est structurée en projets, à savoir:

- parallélisation des algorithmes numériques,
- simulation numérique en mécanique des fluides,
- environnement et changement global,
- simulation numérique en électromagnétisme,
- visualisation et traitement d'images.

Il existe également une activité dans le domaine des méthodes numériques de la physicochimie, menée en

collaboration avec l'Université Paul Sabatier. Le C.E.R.F.A.C.S. participe activement à plusieurs G.D.R. du C.N.R.S. et collabore avec Électricité de France, l'Institut Français du Pétrole, l'O.N.E.R.A., TurboMeca, Dassault, ainsi qu'avec divers laboratoires et organismes européens dans le cadre des programmes "Esprit" et "Capital Humain et Mobilité".

Près d'une centaine de chercheurs participent à plein temps ou à temps partiel aux activités du C.E.R.F.A.C.S. Une grande partie des recherches en cours concerne le calcul parallèle, que ce soit la parallélisation des techniques existantes ou le développement de nouvelles méthodes.

Quelle est la spécificité du C.N.R.S. par rapport à ces centres? Tout d'abord, le paragraphe 2 de ce rapport met en évidence une très grande variété d'applications que n'ont pas forcément les autres centres de recherche; en particulier, le traitement des problèmes de l'ingénieur n'est pas négligé. C'est donc le rôle des chercheurs C.N.R.S., dispersés dans une grande partie des laboratoires de recherche en France, de faire le lien entre les diverses applications afin que les "calculateurs" de spécialités différentes qui utilisent les mêmes méthodes sans le savoir, puissent échanger des comparaisons de résultats ou mieux encore les derniers développements de leur technique.

D'autre part, sont représentées au C.N.R.S. des disciplines plus fondamentales que dans les autres centres, telles que les mathématiques pures ou la physique théorique. Il importe pour l'avenir de ces disciplines qu'elles ne restent pas à l'écart du développement des grands moyens informatiques et du profit qu'elles pourraient en tirer. Là encore, information et peut-être même formation sont nécessaires.

6. Les problèmes et les méthodes.

Il faut rappeler que les grandes avancées du calcul scientifique ne sont pas seulement dues à l'informatique! Si l'on voit de jour en jour croître la capacité mémoire et la puissance de calcul des ordinateurs, bon nombre de mathématiciens appliqués se rappellent le jour où la mise en oeuvre de tel ou tel nouvel algorithme a permis de multiplier par 10, parfois 100, la rapidité d'un calcul précis. La recherche se poursuit, non seulement pour inventer de nouvelles méthodes, mais aussi pour améliorer la fiabilité de celles existantes ou encore mieux les adapter aux nouveaux types de machines ou de problèmes.

Nous allons maintenant préciser la spécificité du calcul pour les mathématiques dites "pures" par rapport aux autres disciplines. Toutefois au moins deux choses sont communes à la plupart des laboratoires: le calcul formel et le traitement graphique.

Calcul formel. Plus de la moitié des laboratoires de mathématiques et le tiers des autres laboratoires ont recours à du calcul formel. Que permet le calcul formel? On citera comme exemples les développements de fonctions en séries entières, leur approximation par fractions rationnelles, les développements asymptotiques, la dérivation par programme indispensable en optimisation, le calcul de données pour des solutions analytiques permettant d'évaluer un code de calcul, il y en a bien d'autres encore. Il faut noter que, pour ce type de calcul, les scientifiques français utilisent majoritairement les grands logiciels américains, Maple, Axiom ou Mathematica, à l'exception du code "Pari" créé à l'Université de Bordeaux qui contient entre autres du calcul formel. Apparemment, ces logiciels conviennent à leurs besoins.

Traitement graphique. Bien sûr, les résultats d'un calcul sont une suite de nombres, mais peu de gens savent interpréter un tableau de nombres sans le transformer en un ou plusieurs dessins. L'informatique moderne permet de faire de ces dessins de véritables oeuvres d'art, en couleur et avec de belles représentations tridimensionnelles, mais ces représentations sont encore plus utiles pour un travail réel sur les résultats du calcul. Il existe dans les laboratoires presque autant de logiciels graphiques que de chercheurs et certains laboratoires fabriquent leur logiciel propre. Là encore, les logiciels existants sont bien adaptés aux scientifiques qui les utilisent, à quelques rares exceptions près, et évitent à des chercheurs de consacrer des jours de travail à la visualisation de leur recherche.

Utilisation du calcul en mathématiques pures. L'algorithme le plus connu de tous les scientifiques est sans doute celui d'Euclide, qui remonte à quelque vingt-trois siècles. Mais, de la recherche mathématique récente, il est sorti de nouveaux algorithmes, permettant de calculer toujours plus vite et toujours plus loin, avec ou sans

applications immédiates. Les mathématiciens travaillent souvent en précision infinie, c'est-à-dire sans limitation a priori du nombre de chiffres. L'ordinateur a permis de montrer au public certains aspects de la géométrie et de la topologie, par exemple le retournement de la sphère, et l'on évoque avec admiration ceux qui ont découvert les objets fractals sans les visualiser. On peut penser que ces outils de visualisation fourniront bientôt une assistance à la recherche en géométrie: la géométrie assistée par ordinateur est encore peu développée au moins en France.

Résolution des grands systèmes linéaires. Un grand nombre de mathématiciens appliqués vous le diront, la discrétisation numérique de presque toutes les équations de la mécanique, de la physique ou autres, vise à réduire un problème de dimension infinie à la résolution d'un système linéaire de grande taille: il en est ainsi de toutes les méthodes pour les équations aux dérivées partielles stationnaires et de presque tous les schémas en temps à cause du manque de stabilité des schémas explicites; en outre, le traitement de termes non linéaires s'effectue le plus souvent par résolution itérative d'un système linéaire. Pour les matrices dont ni l'origine ni les propriétés particulières ne sont connues, il existe un certain nombre d'algorithmes, directs ou itératifs, dont l'analyse n'est pas toujours complète. Mais, dans la plupart des cas, la résolution est grandement améliorée, en taille du système et en rapidité, par la connaissance de la matrice: la propriété de base est la symétrie, l'utilisation de préconditionnement permet une grande accélération de la convergence et la connaissance des structures des matrices creuses permet d'en augmenter la taille admissible jusqu'au vertige. Beaucoup d'algorithmes sont récents, mis au point et utilisés simultanément dans les laboratoires industriels et universitaires (citons les techniques de gradient conjugué et la Transformation de Fourier Rapide), et un travail de recherche est effectué actuellement sur la parallélisation des algorithmes, la première étape concernant le traitement de matrices diagonales par blocs issues par exemple de la décomposition en sous-domaines.

Traitement d'équations. Le dépouillement du questionnaire indique le type de problème le plus courant dans les laboratoires C.N.R.S.: les équations aux dérivées partielles, suivies d'assez loin par les équations différentielles, intégrales et intégro-différentielles. Un immense effort de recherche international a été effectué depuis plus de 30 ans sur la résolution numérique des équations aux dérivées partielles, plus ou moins intimement lié aux résultats d'analyse sur le sujet. Aux traditionnelles méthodes de différences finies, ont succédé d'autres techniques, parfois de type variationnel, telles que les méthodes d'éléments finis (approximation par des fonctions polynomiales par morceaux sur une triangulation du domaine) et les méthodes spectrales (approximation par des polynômes de haut degré), les méthodes de volumes finis (approximation des flux sur des cellules), les méthodes particulières (approximation par des combinaisons linéaires de masses de Dirac), les méthodes d'équations intégrales (réduction d'un problème posé à l'extérieur d'un domaine borné en équations sur la frontière), les schémas spécifiques aux problèmes hyperboliques (à variation totale décroissante par exemple), plus récemment les méthodes utilisant les ondelettes. La plupart de ces techniques sont couplées avec le traitement de géométries complexes (la construction de maillages tridimensionnels à faible coût qui puissent facilement s'adapter au calcul n'est pas encore satisfaisante), parfois avec des domaines variables ou des frontières libres. L'amélioration des algorithmes permet de traiter des équations de plus en plus complexes: dans les calculs de situations réelles, plusieurs équations de types différents sont couplées soit sur le même domaine soit sur des domaines adjacents. Il faut noter que les mathématiciens français se sont toujours tenus à la pointe du progrès en ce domaine: s'ils n'ont pas inventé toutes les méthodes, dont certaines étaient d'ailleurs connues par les ingénieurs, ils ont effectué sur chacune d'entre elles des travaux d'analyse numérique reconnus internationalement, peut-être plus encore pour leur validation que pour leur mise en oeuvre. Dans certains cas, il serait bon que cette analyse soit plus complètement exploitée, par exemple comme une aide au choix de méthodes optimales de résolution pour des spécialistes d'autres disciplines.

Méthodes stochastiques. On peut les classer *a priori* en deux catégories selon que le problème qu'elles résolvent est de nature déterministe ou stochastique (les méthodes déterministes de résolution de modélisation stochastiques ne sont évidemment pas évoquées ici). La plus célèbre des méthodes stochastiques de résolution de problèmes déterministes est sans nul doute la méthode de Monte-Carlo (ou algorithme de Metropolis). Peu performante pour des problèmes de faibles dimensions face aux méthodes numériques classiques, elle reste le seul recours lorsque la dimension augmente. À son actif, mentionnons aussi sa remarquable aptitude à la parallélisation. Son accélération par des nombres "mieux répartis" que les nombres au hasard fait l'objet de recherches à la croisée des probabilités numériques et de la théorie des nombres. Ces techniques d'accélération sont également étudiées pour la résolution d'équations intégro-différentielles, l'équation de Boltzmann par

exemple. Plus récemment, des méthodes de résolution d'équations aux dérivées partielles par des méthodes de particules aléatoires faisant intervenir des processus de diffusion (sans ou avec branchement) ont été développées: résolution de l'équation de Navier-Stokes par "vortex aléatoire", de l'équation Kolmogorov-Petrovski-Piskunov.

À cheval entre les deux catégories mentionnons les procédures d'approximation stochastiques et leurs applications. Ces méthodes ont été relancées depuis une dizaine d'années *via* la résurgence des méthodes connexionistes (les "réseaux de neurones"): machines de Boltzmann et traitement d'images "bas niveau", recuit simulé, algorithmes d'auto-organisation/quantification et reconnaissance de forme, ...

Depuis quelques années, avec l'émergence de l'informatique, une littérature abondante a été publiée en probabilités numériques sur la discrétisation des équations différentielles stochastiques: convergence, vitesse de convergence, conception de nouveaux schémas. Les perspectives numériques offertes par l'apparition d'objets nouveaux comme les équations non-anticipatives de Pardoux-Peng et leurs applications (contrôle,...) sont à leur tour très prometteuses. Outre la résolution d'équations, d'autres questions liées aux processus stochastiques suscitent des développements numériques: statistique des processus, simulations de processus non markoviens (Brownien fractionnaire,...). Les mathématiques financières constituent pour ces questions, sinon une motivation, du moins un champ naturel d'exemples et d'applications.

En conclusion, on observe sur les vingt dernières années un grand développement des méthodes numériques de toutes sortes. Ceci va de pair avec l'accroissement des moyens informatiques et avec la complexité des problèmes à traiter. À ce niveau on comprend que dans la plupart des laboratoires la part de calcul scientifique soit croissante, et il n'y a aucune raison de penser que ce gigantesque développement se ralentira ou s'arrêtera dans les années à venir.

7. L'évolution informatique et les grands enjeux.

Les réponses au questionnaire mettent en évidence une évolution de la pratique de l'informatique dans les années qui viennent de s'écouler.

L'utilisation de l'ordinateur. Hors du calcul scientifique, la plupart des chercheurs ont maintenant les doigts posés sur un clavier, au sens qu'ils possèdent une adresse électronique et qu'ils lisent régulièrement leur courrier. La plupart tapent même leurs articles! Les premiers journaux entièrement électroniques sont apparus d'abord en physique, il en existe maintenant en mathématiques et plusieurs G.D.R. envisagent d'avoir le leur propre. L'ordinateur multiplie les possibilités de contact, il permet d'effectuer un travail en commun à des milliers de kilomètres de distance. Plus encore que dans la vie courante, cela donne aux scientifiques l'occasion d'utiliser un ordinateur et peut-être pour certains le réflexe d'ouvrir un logiciel de calcul, formel ou non, pour résoudre un problème mineur.

L'évolution des langages. Il ressort du questionnaire que le Fortran, qui était il y a dix ans le langage majoritairement utilisé dans les laboratoires de science non informatique, est maintenant concurrencé par le C, le Pascal et le C++ étant également présents. Cela signifie sans doute des formes de programmation plus variées, plus modernes, plus réfléchies. Un problème subsiste cependant: il semble que la plupart des chercheurs soient autodidactes en ce qui concerne la programmation. Si ce fait ne nuit pas forcément à la qualité de leur travail de calcul, leur choix de langage repose sans doute simplement sur le fait qu'ils n'en connaissent qu'un ou deux et n'ont pas envie d'en apprendre un autre. Il est sans aucun doute indispensable de développer la présence d'informaticiens de formation dans les laboratoires, pour faciliter au maximum les échanges entre professionnels et semi-professionnels de la programmation.

Les réseaux. Nul doute que l'apparition toute récente de lignes à haut débit ne soit un outil très important pour l'avenir du calcul scientifique: cela signifie que les résultats numériques pourront voyager d'un laboratoire à un autre aussitôt obtenus, que les modifications des codes ou les nouvelles versions pourront être transmises presque instantanément. D'ores et déjà, du calcul sur un ordinateur éloigné du lieu de travail est pratiqué dans un grand nombre de laboratoires, ce qui va s'accroître du fait de l'arrivée des machines parallèles: il faudra sans doute quelque temps avant que chacun aligne mille processeurs dans son bureau.

Le calcul intensif. Le calcul intensif consiste à lancer une simulation numérique sur une ou plusieurs grosses machines, la plupart du temps sans savoir si un résultat en sortira ou tout au moins sans idée du résultat à obtenir. Dans certains cas, il a une vocation industrielle. Il est très pratiqué dans certaines disciplines telles la météorologie ou la sismologie, également en chimie ou pour la fabrication des grandes machines d'échecs, et très peu pratiqué dans les mathématiques françaises qu'elles soient pures ou appliquées. Par exemple, de nouvelles structures tourbillonnaires en mécanique des fluides ont été découvertes grâce à ce procédé et aussi un résultat mathématique de régularité est né, après plusieurs étapes, du calcul de taches de tourbillon. Bien entendu, un tel calcul n'a de sens qu'après un choix optimisé d'algorithmes. Il faut se demander si les mathématiciens français ne sont pas dans ce domaine trop circonspects, notamment par rapport aux Américains, et dans quelles spécialités il présente un véritable intérêt.

Les grands projets. Dans les projets récents, nationaux ou internationaux, la part de calcul n'a jamais été négligeable. On peut citer le projet Hermès comme un exemple du genre: mathématiciens et informaticiens y ont côtoyé des spécialistes de diverses disciplines, il en est ressorti un grand enrichissement pour les mathématiques tant du point des modèles que de la validation des méthodes. À ce niveau, il importe de recenser les grands programmes de recherche actuels ou lancés dans un futur proche (par exemple, les programmes spatiaux, de détection de rayons gamma, de retraitement de déchets radioactifs par irradiation) et d'expliquer le rôle que les mathématiques appliquées doivent y jouer. Ces programmes semblent avoir un impact important sur l'amélioration des techniques de calcul.

L'évolution des moyens de calcul. L'augmentation des capacités de traitement et de stockage des supercalculateurs, de même que la capacité de relier différentes machines par des réseaux à haut débit sur lesquels peuvent circuler tous les types d'information (données, images, ...) ouvre de nouveaux champs d'investigation à la simulation numérique, et pose simultanément de nouvelles questions aux chercheurs. Parmi les grands problèmes posés par l'évolution des calculateurs scientifiques, on peut citer:

- le couplage des modèles et des méthodes,
- le contrôle de précision et la robustesse des schémas,
- l'intégration de la simulation numérique dans une boucle d'optimisation multi-critères,
- la génération et le contrôle de la qualité des maillages,
- l'analyse multi-échelles (parfois liée au couplage de méthodes),
- l'analyse éventuellement en temps réel des résultats, ainsi que leur stockage (compression des données) et leur archivage (avec possibilité de "naviguer" dans les résultats d'une simulation),
- la fusion de données et la comparaison en direct d'une simulation avec l'expérience.

Ainsi l'évolution de tous les moyens de traitement, des stations de travail aux machines parallèles, la possibilité de relier efficacement un ensemble de machines pour former un "méta-calculateur" (permettant entre autres l'implémentation efficace du couplage de codes) et demain la possibilité de rapatrier sur la station de travail des chercheurs les résultats d'expériences doivent conduire à une autre façon d'aborder la simulation numérique. Des équipes multi-disciplinaires doivent être constituées dans ce but, regroupant en particulier des physiciens, des mathématiciens, des mathématiciens appliqués et des informaticiens.

Le grand défi du parallélisme. Il est aujourd'hui acquis que l'augmentation de la puissance de calcul passe par l'utilisation du parallélisme. Un algorithme efficace doit être capable de mettre en oeuvre un très nombre de processeurs pouvant varier de 100 à 1000. Fort heureusement certains algorithmes couramment utilisés sont naturellement parallèles, les schémas explicites ou la méthode de Monte-Carlo par exemple. Dans d'autres cas, il faudra prendre en compte cette contrainte à chaque niveau d'un travail débouchant sur du calcul scientifique:

modélisation, choix de la méthode, algorithme, mise en oeuvre. L'utilisation efficace de machines parallèles demande beaucoup de travail: de la part des informaticiens, sans doute, en premier lieu; mais aussi des mathématiciens appliqués. La recherche à ce sujet a commencé dans un certain nombre de laboratoires: il faut réinventer des algorithmes qui optimisent l'utilisation de la machine, d'une part par l'équilibre des tâches, d'autre part par la réduction du transfert de données entre les processeurs. Et bien d'autres techniques, même de base, doivent être entièrement reconstruites en vue des machines massivement parallèles. Comme dans chacune des grandes étapes scientifiques de ce siècle, les mathématiciens ont un rôle à jouer.

8. Les besoins spécifiques.

Un certain nombre de besoins ont été indiqués dans les réponses du questionnaire; ils apparaissent également comme une conséquence logique des pages qui précèdent.

Les machines. Tout un chacun a besoin de nouvelles machines, c'est évident. La rapidité de l'évolution de la technologie rend les machines d'hier si rapidement inadéquates qu'il faut sans cesse renouveler les stations pour faire du calcul, encore plus les micro-ordinateurs même simplement pour le traitement de textes. Mais une autre demande est au moins aussi importante: l'accès à des réseaux de haut débit pour multiplier le calcul sur machines lointaines et les contacts scientifiques.

L'assistance technique. La vision des scientifiques sur ce sujet n'est pas parfaitement claire: tous réclament de l'aide sans vraiment en préciser la forme. En effet, la maintenance d'un parc de stations de travail parfois important, l'achat de logiciels à des prix raisonnables, leur installation sur les machines et la mise à jour au fur et à mesure de l'apparition des nouvelles versions est une tâche lourde, réclamant à la fois compétence et disponibilité. La situation actuelle peut se résumer ainsi: quelques rares laboratoires de recherche mathématique possèdent un ingénieur compétent en informatique, ceux qui n'en ont pas affectent au travail d'ingénieur un universitaire ou un chercheur "formé sur le tas". Pour éviter la perte de travail de recherche que cela représente, il est nécessaire que chaque laboratoire soit muni, à très court terme, au moins d'un technicien informatique et, mieux, d'un ingénieur d'études, dépendant soit du C.N.R.S. soit de l'Université (l'appel à des sociétés privées est trop onéreux et souvent mal adapté à la tâche).

Le recrutement. Comme on l'a vu, la création et même dans certains cas l'utilisation de codes de calcul scientifique réclament la collaboration entre scientifiques de spécialités différentes. Une telle tâche ne peut être menée à bien que si les équipes de recherche ont une taille critique, soit pour que des applications à des problèmes issus de diverses disciplines scientifiques puissent s'effectuer au sein même du laboratoire soit pour qu'un échange de thésards et de chercheurs confirmés puisse être réalisé facilement sans nuire à la cohérence interne du laboratoire. En tout état de cause, il est nécessaire de recruter des jeunes chercheurs possédant une connaissance minimale en informatique et ayant acquis ou susceptibles d'acquérir rapidement une compétence en calcul scientifique. À ce niveau, le fait qu'une thèse contienne un vrai travail de calcul, nouveau et enrichissant, doit être un critère important pour le recrutement.

La formation. Mais d'autres chercheurs, à toutes les étapes de leur carrière, souhaiteraient acquérir des compétences en informatique, peut-être simplement parce qu'ils se rendent compte que leur sujet de recherche actuel nécessite du calcul. Quelle est la bonne solution à ce problème? Des stages, bien sûr, permettant dans un premier temps de se familiariser avec certains des logiciels existants et dans un second temps de les exploiter au mieux de leur possibilités. Mais les chercheurs sont des gens très occupés, souvent en déplacement pour des congrès scientifiques, peu enclins à quitter leur laboratoire pour une semaine de stage. Sans doute des séances de formation au sein même des laboratoires de recherche disposant de machines suffisantes, s'adressant au groupe de chercheurs intéressés par un sujet, seraient-elles plus efficaces et peut-être moins onéreuses.

Pour terminer ce rapport sur une note optimiste, il faut souligner qu'avec des moyens appropriés en machines, en personnel et en mathématiques appliquées dans les laboratoires de recherche, le calcul scientifique a un immense avenir devant lui, non comme remplacement de toute science mais comme outil indispensable dans la plupart des disciplines. La liste de ses applications n'est pas exhaustive et le rôle qu'il joue dans la recherche ne cessera sans doute de s'amplifier.