BENOÎT BLOSSIER
Laboratoire de Physique Théorique (LPT) (UMR 8627, UPS/CNRS)
UFR Sciences

# Jouer aux dés pour percer les secrets ultimes de la matière

© CNRS PHOTOTHÈQUE / CNET / LACTAMME - COLONNA JEAN-FRANÇOIS

En physique, l'expérience seule ne suffit pas. Encore faut-il en comprendre les résultats et être capable de les formaliser. Tel est le rôle de certains théoriciens de la physique qui tentent de décrire le monde en réalisant des simulations sophistiquées sur de puissants calculateurs.

Photo : De l'infiniment petit à l'infiniment grand. Des particules élémentaires (bas gauche) à l'Univers (haut droite).

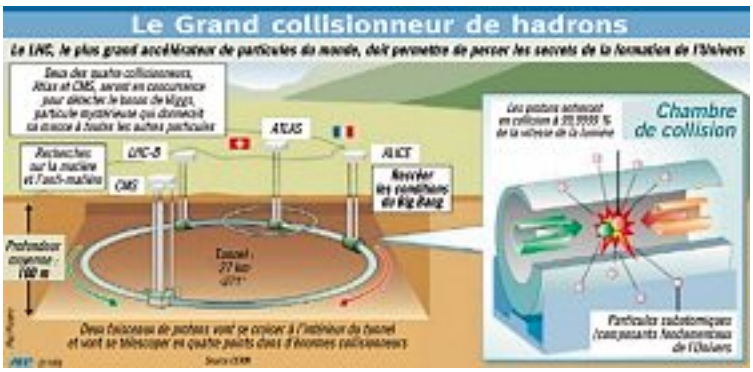
Depuis quelques mois le Grand Collisionneur de Hadrons (LHC pour *Large Hadron Collider*) est entré en fonctionnement, à la grande satisfaction de toute une communauté de physiciens et d'ingénieurs qui attendait ce moment avec beaucoup d'impatience, voyant ainsi récompensés les efforts consentis sur deux décennies. Ce gigantesque instrument scientifique **(figure 1)** d'une complexité extraordinaire a pour but d'explorer les propriétés de la matière à l'échelle de $10^{-18}$ m, là où on s'attend à ce que le Modèle Standard de la Physique des Particules (MS), théorie élaborée par les scientifiques dans le courant de la deuxième moitié du XX$^{e}$ siècle **(figure 2)**, atteigne sa limite de validité. Ces derniers temps on a construit de nombreux modèles rendant compte de possibles désaccords à ces très courtes distances ou, autrement dit, à de grandes énergies, entre les observations et les prédictions du MS : toutefois certains sont fortement contraints par le fait que la quasi-totalité des données expérimentales recueillies jusqu'à maintenant auprès de divers collisionneurs, à des énergies moins élevées que celle que le LHC va atteindre (14 TeV), a parfaitement pu être expliqué par le MS. Les effets de la Nouvelle Physique (NP) sont donc assurément faibles. C'est pourquoi il faut veiller à éliminer le maximum d'incertitudes, expérimentales ou théoriques, sur la mesure de processus de désintégrations de particules susceptibles de mettre en évidence cette NP. C'est crucial pour l'expérience LHCb, l'un des quatre détecteurs installés autour du LHC : elle a comme mission prioritaire de comprendre pourquoi nous vivons dans un Univers qui semble être constitué entièrement de matière, sans aucune présence d'antimatière. De fait il s'agit d'explorer au niveau microscopique les différences entre matière et antimatière en étudiant un type de particules, les quarks, constituants élémentaires des protons et des neutrons par exemple. Selon la théorie baptisée Chromodynamique Quantique (QCD pour *Quantum Chromodynamics*) **(encadré 1)**, ces quarks sont soumis à un potentiel d'interaction confinant **(figure 3)** et s'agrègent en particules composites qu'on appelle des hadrons ; par conséquent on ne les observe dans les expériences que de façon indirecte. Cela engendre une incertitude rendant potentiellement caduque l'espoir d'y détecter les effets de la NP et on doit faire appel à des simulations numériques de grande envergure pour rendre compte de ce confinement et le quantifier avec le maximum de précision possible. Cet objectif ambitieux nécessite d'énormes capacités de calcul : c'est l'un des axes de recherche du groupe de physique de particules au sein du Laboratoire de Physique Théorique d'Orsay.

## Une question de symétrie

L'un des aspects fascinants de la physique des particules concerne l'antimatière. Les propriétés de l'antimatière sont reliées à celles de la matière par des « symétries » (on dit aussi des « invariances »). Celles-ci jouent un rôle central dans la formulation de la théorie du Modèle Standard et plus généralement de la physique théorique moderne. Ainsi, on suppose que si on effectue une expérience hier, aujourd'hui ou demain, on obtiendra dans les mêmes conditions expérimentales les mêmes résultats. On parle alors d'invariance dans le temps des lois physiques. Certaines sont moins intuitives. Trois types de transformations ont particulièrement attiré l'attention des physiciens des particules : de parité **P** qui consiste à observer une expérience dans un miroir ; de renversement du temps **T** qui revient à permuter les états initial et final d'un processus ; de conjugaison de charge **C** qui consiste à comparer un processus entre particules et un processus mettant en jeu leur antiparticule respective (par exemple l'électron a pour antiparticule le positron). Les trois opérations **C**, **P** et **T** peuvent s'effectuer dans n'importe quel ordre et elles ne sont pas censées modifier les lois physiques. On a longtemps cru que

**FIGURE 1**

Vues aérienne et en coupe du LHC installé au CERN, à cheval sur la frontière franco-suisse près de Genève.



toutes les lois de la physique étaient invariantes sous ces trois transformations. Or il n'en est rien. Si les interactions forte et électromagnétique se sont révélées être invariantes sous **P**, **C** et **T**, on a découvert dès les années 1950 que l'interaction faible n'était invariante ni sous **P** ni sous **C**, puis en 1964 qu'elle ne l'était même pas sous la combinaison **CP**, donc sous **T** non plus, **CPT** étant par principe une symétrie exacte quelle que soit l'interaction. Les résultats expérimentaux ont en effet montré que la probabilité de transition du méson « $K^0$ » vers son antiparticule « $K^0 bar$» était différente de la probabilité de transition de « $K^0 bar$ » vers « $K^0$ ». Cela a mis en émoi la communauté des physiciens car c'était la première fois que la Nature affichait au niveau microscopique son caractère asymétrique par rapport à l'écoulement du temps. Le Modèle Standard contient-il une brisure de la symétrie **CP** ? La réponse est affirmative grâce au mécanisme de Kobayashi-Maskawa, ce qui a valu à ces deux auteurs le prix Nobel de Physique en 2008 pour leurs travaux inspirés par Cabibbo. Ce mécanisme est basé sur un mélange de trois familles de quarks et une matrice décrit les modalités selon lesquelles s'effectue ce mélange **(figure 4)**. Cette matrice a la remarquable propriété d'introduire naturellement la violation de symétrie **CP** dans le Modèle Standard. Trente-cinq ans après l'observation de l'asymétrie **CP** dans le système des kaons $K^0$–$K^0 bar$, on a découvert que le système des mésons « $B^0$– $B^0 bar$ » (« $B^0 bar$ » étant l'antiparticule du « $B^0$ ») était lui aussi sujet à la violation de **CP**, marquant ainsi de manière éclatante le succès du Modèle Standard à décrire les interactions faible, forte et électromagnétique.

## 1 La Chromodynamique Quantique, une théorie haute en couleurs

La Chromodynamique Quantique (ou QCD, de l'anglais *Quantum ChromoDynamics*), est la Théorie Quantique des Champs* qui décrit l'interaction forte. Elle a permis d'expliquer pourquoi les quarks sont toujours groupés - confinés - par deux ou par trois au sein des particules effectivement observées (les protons, neutrons... appelés génériquement hadrons), à cause des échanges de gluons (ainsi nommés car ils « collent » les quarks dans les hadrons). L'interaction forte est très différentes des autres forces qui existent dans la Nature : faible lorsque les quarks sont très proches (on appelle cela la liberté asymptotique), elle devient de plus en plus grande lorsque leur distance augmente. Il est donc impossible d'extraire un quark de son environnement et de l'observer librement. Les expérimentateurs ont étudié les processus impliquant les quarks au sein d'accélérateurs de particules (diffusion électron-proton, collisions proton-proton...). Les prédictions théoriques et les mesures expérimentales sont en bon accord numérique, ce qui a confirmé QCD comme étant la théorie de l'interaction forte. La Chromodynamique Quantique est ainsi nommée parce qu'elle repose sur le concept de « couleur » (« chroma » en grec). Cette couleur n'a rien à voir avec la lumière qui colore le monde qui nous entoure ; dans le monde des particules élémentaire, il s'agit d'un nombre quantique (une sorte d'étiquette), tel que la « couleur » d'une particule composite doit toujours être « blanche » c'est-à-dire neutre. Pour cela, les particules s'arrangent en associant trois couleurs différentes (comme les baryons), ou bien une couleur et son anti-couleur (comme les mésons). La Chromodynamique Quantique a été proposée en 1972 par Harald Fritzch, Herbert Leutwyler et Murray Gell-Mann. En 1973, David J. Gross, David Politzer et Franck Wilczeck ont montré que cette théorie comportait la propriété de liberté asymptotique, en parfait accord avec les données expérimentales recueillies quelques années auparavant au collisionneur SLAC installé en Californie, ce qui leur a valu le prix Nobel de Physique en 2004.

## Où est l'antimatière ?

Les observations astrophysiques et cosmologiques montrent la prédominance de la matière sur l'antimatière dans l'Univers. Or, quand l'Univers était tout jeune, quelques instants après le Big Bang, on pense qu'il contenait autant de matière que d'antimatière. Certes, comme on vient de le voir, le Modèle Standard contient une source de violation de symétrie **CP**, une des conditions nécessaires formulées en 1967 par Sakharov pour expliquer l'apparition de cette asymétrie matière-antimatière (également appelée baryogénèse) à un moment encore inconnu de l'Histoire de l'Univers ; toutefois, même en y incluant le fait que les neutrinos sont massifs, la théorie brise insuffisamment **CP** et ne parvient pas à expliquer l'excès observé de matière. Beaucoup d'alternatives sont proposées dans la littérature spécialisée, comme l'existence de quarks supplémentaires, de particules dites "supersymétriques", tous ces modèles incluant le Modèle Standard comme théorie effective valable à une échelle de distance supérieure à $10^{-18}$ m. L'expérience LHCb va peut-être nous permettre de comprendre pourquoi nous vivons dans un monde où la matière est ultradominante par rapport à l'antimatière. En outre, elle sera chargée d'effectuer des observations contraignantes sur ces modèles et pourrait même détecter des particules élémentaires non encore répertoriées à ce jour. Notons enfin que le Modèle Standard n'explique pas le contenu en "matière noire*" de l'Univers, ni n'incorpore la gravitation qui semble être l'interaction dominante à l'échelle de Planck, c'est-à-dire à des temps antérieurs à $10^{-43}$ s. près le Big Bang où à des distances inférieures à $10^{-35}$ m.

## Le monde en équations

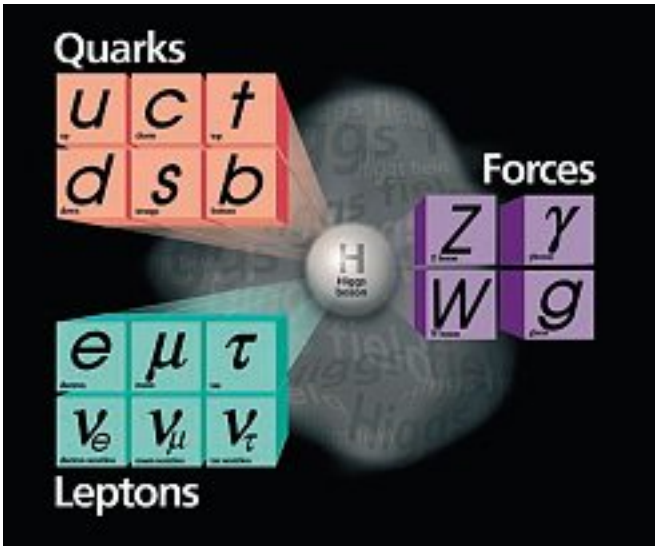
Les particules élémentaires soumises à l'interaction forte forment des états liés. Il s'agit de systèmes dont l'étude est très complexe car l'intensité de l'interaction entre les constituants empêche tout calcul en perturbations comme cela est le cas dans l'étude de l'interaction électromagnétique. Pour y parvenir, il faut appliquer les premiers principes de la théorie des champs à la Chromodynamique Quantique, une théorie très sophistiquée qui permet de décrire l'interaction entre quarks et gluons. Au sein du LPT, le groupe de physique des particules travaille sur les équations qui en découlent. Les physiciens n'ont pas encore réussi à obtenir une solution aux équations de QCD en termes de fonctions mathématiques connues. Ce genre de difficulté est fréquent en sciences, et une approche très populaire revient à résoudre numériquement le problème sur ordinateur. Physiquement, les calculs sont effectués grâce à des processeurs installés sur des cartes électroniques reliées par des systèmes de connexion élaborés. Ces « nœuds » ont une capacité de calcul bien supérieure à ce qui existait il y a une dizaine d'années. La simulation consiste à découper l'espace et le temps en petits intervalles de longueur fixée et on résout les équations sur la grille (ou réseau) ainsi formée. La solution obtenue sur réseau n'est qu'une approximation de la solution réelle mais elle sera proche de la réalité si la grille est suffisamment fine vis-à-vis des dimensions du problème. La QCD sur réseau adopte une telle approche pour résoudre les équations de l'interaction forte.

## Les grands traits de la simulation

Concrètement, la QCD sur réseau assimile l'Univers à une boîte à quatre dimensions. On crée un réseau de points, représentés par quatre coordonnées (une temporelle et trois spatiales). Le champ associé à une particule est décrit par un multiplet de nombres dont les valeurs varient en chaque point du réseau **(figure 5)**. Celui-ci a une taille physique de l'ordre de quelques femtomètres ($10^{-15}$ = 0,000 000 000 000 001 mètre), typique de l'échelle de confinement hadronique. Il faut ensuite faire appel au formalisme de l'intégrale fonctionnelle de la théorie des champs, qui consiste à calculer des fonctions de corrélation. En pratique on calcule des valeurs moyennes par rapport à *une distribution de probabilité de type Boltzmann** sur les configurations de champs de quarks et de gluons, qui constituent le système statistique que l'on étudie. L'énergie de ce système est donnée par l'action du Modèle Standard restreinte à l'interaction forte. Les paramètres de la simulation sont uniquement la masse des quarks et la constante de couplage fort, cette dernière faisant office de "température" dans la distribution de Boltzmann. On intègre formellement les champs de quarks, représentés par des variables de Grassmann*. On travaille alors seulement avec les champs de gluons. Le nombre de variables du problème considéré, à savoir l'échantillon statistique de ceux-ci sur lequel on effectue les moyennes, dépasse plusieurs dizaines de millions. Heureusement la loi de distribution est telle que, en fait, peu de configurations de champs de gluons vont contribuer à ces moyennes : les

**FIGURE 2**

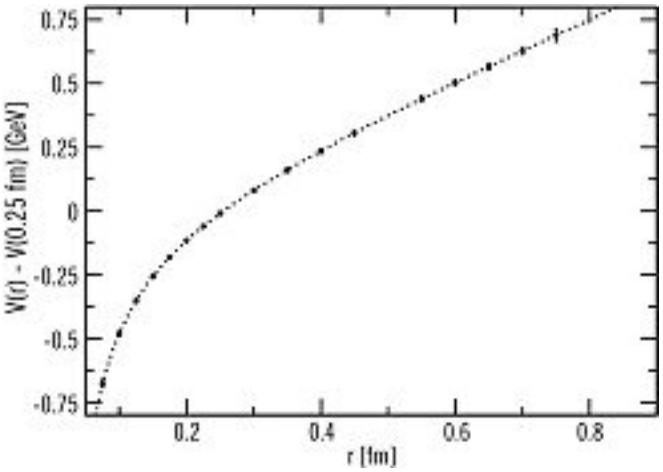
On pense que la dynamique de l'Univers est gouvernée par quatre forces fondamentales. Trois de ces interactions (la quatrième étant la gravité) régissent le monde subatomique ; il s'agit de l'interaction électromagnétique, responsable par exemple de l'agrégation des molécules ou de la conductivité des métaux, l'interaction forte qui assure la cohésion des noyaux atomiques, et l'interaction faible qui rend possible la fission nucléaire. Le Modèle Standard comporte douze particules de matière (six quarks, trois leptons chargés électriquement, dont l'électron, et trois leptons neutres), chacune d'entre elle ayant son antiparticule, qui interagissent en s'échangeant des sortes de messagers qu'on appelle des bosons vecteurs de l'interaction (boson de jauge) ; elles sont agencées en trois familles. Les quarks subissent les trois interactions mentionnées plus haut, les leptons chargés sont sujets aux interactions électromagnétique et faible tandis que les leptons neutres (neutrinos) ne subissent que l'interaction faible, et heureusement parce que nous sommes traversés chaque seconde par environ un milliard d'entre eux au $cm^3$, en provenance notamment du Soleil. Les leptons existent en tant que particules libres tandis que les quarks sont confinés dans les hadrons : soit des baryons, particules à trois quarks comme le proton ou le neutron, soit des mésons, particules composées d'un quark et d'un antiquark comme les mésons $\pi$, *K*, découverts dans les gerbes de rayons cosmiques, ou *B*, produit et étudié dans les collisionneurs depuis une trentaine d'années. On prédit aussi l'existence d'une particule supplémentaire, le boson de Higgs, engendrant la masse des autres particules élémentaires.



autres vont être éliminées parce qu'elles ont un poids exponentiellement petit à cause de leur grande énergie. En principe il suffit donc de construire un échantillon de quelques milliers de configurations,

**FIGURE 3**

Le potentiel d'interaction entre quarks est confinant car il croît linéairement avec la distance r de séparation entre les quarks lorsque celle-ci dépasse 0.5 fm. Silvia Necco, 2003




## 2 Hybrid Monte Carlo (HMC), un cocktail d'aléatoire et de déterminisme

L'idée de HMC consiste à fabriquer une trajectoire dans l'espace des configurations de champs de gluons suivant les équations de Hamilton de la mécanique analytique définies par rapport à un temps fictif $\tau$. C'est donc un algorithme de dynamique moléculaire classique. On exponentie le déterminant de l'opérateur de Dirac en introduisant des variables auxiliaires, on associe aux variables représentant les champs de gluons leur moment conjugué et on dérive l'Hamiltonien de la théorie. On discrétise $\tau$ afin de résoudre les équations du mouvement. Celles-ci font apparaître la matrice inverse de l'opérateur de Dirac : il faut optimiser les algorithmes d'inversion car on doit appliquer cette procédure à plusieurs centaines de reprises le long de la trajectoire. Les variables auxiliaires et les moments conjugués au temps 0 de celle-ci sont choisis aléatoirement suivant une loi de probabilité gaussienne. Les erreurs de discrétisation de la trajectoire induisent une différence d'énergie des états initial et final : on peut alors appliquer un test Metropolis pour décider d'accepter ou non la transition. Au cours d'une simulation on effectue à plusieurs reprises des tests de réversibilité des trajectoires : c'est un moyen très puissant de détecter d'éventuels problèmes.

à l'équilibre thermique, pour avoir une bonne estimation des moyennes avec une erreur statistique identifiable à l'écart-type gaussien, en vertu du théorème de la limite centrale. Cela nécessite un choix minutieux des algorithmes utilisés pour obtenir une configuration $\{U_{n+1}\}$ depuis une configuration $\{U_n\}$. En particulier les taux de transition doivent vérifier la condition de bilan détaillé* pour garantir l'évolution du système vers l'équilibre thermique, la condition d'ergodicité forte (c'est-à-dire être strictement positifs) de façon à permettre d'atteindre une configuration donnée à partir de n'importe quelle autre en un nombre fini d'étapes. L'algorithme de Metropolis est un élément de base de la simulation. Le taux de transition vaut 1 si l'énergie du système diminue, ou dépend exponentiellement de la différence d'énergie entre les états $\{U_{n+1}\}$ et $\{U_n\}$: on tire alors au hasard un nombre compris entre 0 et 1 pour décider si on accepte la transition ou non; cela signifie qu'en fait on réalise *une simulation Monte-Carlo**.

## Les quarks, objets d'une attention toute particulière

Il faut incorporer dans la distribution de probabilité les effets de création-annihilation de paires quark-antiquark, au travers du déterminant d'une matrice de taille typique $10^8$ x $10^8$, l'opérateur de Dirac, représentant l'interaction entre quarks et gluons. Vu que ce déterminant est un objet impliquant tous les points du réseau, deux configurations consécutives obtenues par l'algorithme Metropolis seront fortement corrélées. Une solution consisterait à multiplier substantiellement le nombre de tests Metropolis, mais le coût en temps de calcul du déterminant serait prohibitif. Pour pallier cette difficulté et explorer un grand volume d'espace des phases pendant la transition $\{U_n\} \rightarrow \{U_{n+1}\}$ sans pour autant avoir un taux d'acceptance ridiculement faible à cause d'une trop grande variation d'énergie, on a recours à un algorithme très évolué qui s'appelle Hybrid Monte Carlo (HMC) **(Encadré 2)**. De fait on doit inverser l'opérateur de Dirac à plusieurs millions de reprises au cours d'une simulation. C'est une matrice creuse, c'est-à-dire que seuls les plus proches voisins dans le réseau sont connectés par l'interaction, mais elle est mal conditionnée, c'est-à-dire que le rapport de ses valeurs propres minimale et maximale est inférieur à $10^{-4}$, ce qui a comme conséquence que les algorithmes classiques d'inversion d'une matrice sont inefficaces. Toutefois le caractère très creux de cette matrice incite à paralléliser le problème, puisqu'un grand nombre de points du réseau ne communiquent pas directement entre eux. Plusieurs directions de recherche ont été poursuivies par les physiciens pour réduire le temps de calcul de l'inversion, soit dans l'adaptation au cas qui nous intéresse ici des algorithmes d'inversion déjà existants, soit dans la mise au point d'architectures informatiques inno-

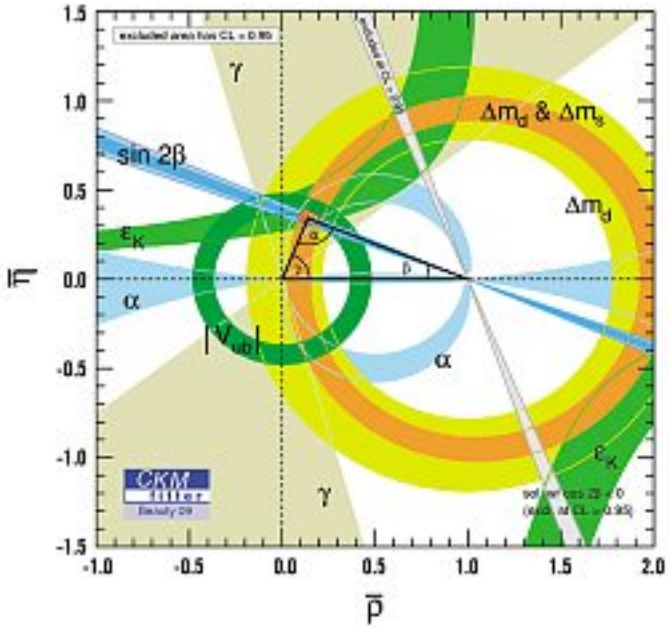
vantes afin d'utiliser au mieux le caractère hautement parallèle du problème posé. Le Laboratoire de Physique Théorique d'Orsay a joué un rôle pionnier dans celle-ci.

## De nouvelles architectures informatiques pour les résoudre

Dans les années 1980, plusieurs physiciens des particules italiens, parmi lesquels Cabibbo et Parisi, qui avaient contribué de manière tout à fait significative aux développements du Modèle Standard, ont construit une puce de calcul dédiée à la solution des équations de la Chromodynamique Quantique. Dans leur projet initialement nommé Array Processor for an Emulator et par la suite rebaptisé Array Processor Experiment (APE), ils ont insisté sur le parallélisme* de leur machine. A la fin de la décennie l'APE 100 voyait le jour. Au début des années 1990 un groupe de physiciens allemands a rejoint le projet APE, et vers 1995, notre Laboratoire a débuté sa participation, en compagnie de l'Institut de Recherche en Informatique et Systèmes Aléatoires installé à l'Université de Rennes. En 10 ans, deux autres générations de machines ont été mises au point, l'APEmille et l'APEnext **(Encadré 3) (figure 6)**, à l'élaboration de laquelle nous avons notablement contribué. D'autres projets similaires à APE ont existé dans le monde. On ne mentionnera que celui mené à la Columbia University par Christ et Terrano : c'est le plus abouti, IBM y était associé, la dernière version de la machine que l'on appelle QCD On a Chip (QCDOC) a des performances et une architecture voisines de l'APEnext. Il a été un banc de test pour les calculateurs de la génération BlueGene qui ont longtemps été en tête du classement "top 500" des machines les plus puissantes : la communication ne se passe qu'entre nœuds voisins les plus proches, la fréquence d'horloge est faible – inférieure à 1 Ghz – ce qui permet d'installer un nombre élevé de nœuds avec une consommation de puissance électrique limitée. *Le travail sur les architectures entrepris pour optimiser les simulations numériques de QCD a donc contribué de façon cruciale au développement des supercalculateurs par les grandes compagnies informatiques*. Ces derniers sont maintenant beaucoup utilisés par la communauté scientifique pour effectuer des simulations de propagation d'ondes sismiques, étudier les phénomènes de turbulence ou bien prédire l'évolution du climat. Le Laboratoire de Physique Théorique d'Orsay utilise encore pour ses recherches les 1024 nœuds d'APEnext achetés en 2004 et 2005 par le CNRS (INP et IN2P3) et l'ANR, en particulier dans le cadre du projet ANR blanc "QCDNext". Cependant avec l'apparition sur le marché de supercalculateurs ayant une performance crête de plusieurs centaines de Tflops*, tels que BlueGene/P, le laboratoire a diversifié ses moyens de calcul. Il est notamment un gros consommateur des 40960 processeurs BlueGene/P installés sur le campus de l'Université Paris-Sud au centre de calcul IDRIS du CNRS. Ayant une longue expérience des calculs massivement parallèles, il utilise des programmes informatiques particulièrement performants sur ce calculateur : en effet une performance soutenue* d'environ 20 % a été atteinte, ce qui est un record sur BlueGene/P. Le facteur limitant pour tout calcul scientifique sur Clusters de PCs est en général le temps de communication entre unités centrales : disposer de processeurs rapides (2 GHz ou plus) est en fait souvent inutile et on peine à atteindre les 10 % de performance soutenue.

**FIGURE 4**

La matrice de Cabibbo-Kobayashi-Maskawa est paramétrée par trois angles de mélange et une phase qui est la source de violation de CP. Comme cette matrice est unitaire, on peut écrire plusieurs relations entre ses éléments, ce qui se représente géométriquement par six triangles. L'un d'entre eux est particulièrement intéressant car il n'est pas plat, reflétant ainsi la violation de CP par le Modèle Standard. Comme CP est une symétrie exacte de l'interaction forte, on peut retracer ce qui se passe au niveau des quarks en étudiant expérimentalement des processus impliquant des hadrons, en particulier les mésons *K* et *B*, pourvu qu'on puisse quantifier correctement par un calcul théorique le confinement des quarks. Les bandes colorées apparaissant sur la figure sont des contraintes venant de processus très différents les uns des autres mais elles conduisent toutes à un triangle ayant des caractéristiques déterminées à 4 % près. Les incertitudes théoriques sur la quantification du confinement des quarks dans les hadrons se retrouvent dans la taille des bandes colorées : un travail considérable est donc nécessaire pour réduire ces incertitudes au même niveau que les erreurs expérimentales et ainsi tester les caractéristiques du triangle à 1 % près.



## 3 Au plus profond de la matière avec APEnext

Pour obtenir la puissance de calcul de la machine APEnext il faudrait combiner plusieurs milliers d'ordinateurs de bureau entre eux! APEnext a atteint un tel niveau de performance en exploitant astucieusement les avantages du calcul parallèle: un grand nombre de processeurs travaillent simultanément sur le même calcul. Un aspect important est que le réseau de communication, sous la forme d'un tore à trois dimensions, est particulièrement performant avec une faible latence de l'ordre de 100 ns. De plus les calculs peuvent s'effectuer en même temps que des données sont communiquées. Un langage informatique de haut niveau (langage TAO) a été écrit pour cette machine; les fonctions spécifiques au parallélisme (sommes globales, diffusion des données à tous les nœuds, communications entre nœuds voisins les plus proches) y sont définies, ainsi que l'extension d'opérateurs simples aux objets mathématiques intervenant en QCD (matrices unitaires 3 x 3, vecteurs de nombres complexes à 12 composantes). Après optimisation d'un code assembleur intermédiaire, du microcode est généré, agencé et compressé. La performance soutenue d'un programme HMC tournant sur cette machine avoisine les 50%. Ce chiffre élevé résulte de l'architecture même du calculateur, dessinée uniquement pour résoudre les équations de la Chromodynamique Quantique: cela n'est bien évidemment pas le cas de BlueGene qui est un calculateur destiné à des thématiques de recherche très différentes les unes des autres.

## Que va-t-il se passer dans l'avenir?

On pense que les machines futures seront hétérogènes, par exemple avec un mélange d'unités Centrales de calcul et de Cartes graphiques (GPU): ces dernières ont le gros avantage d'être très bon marché et offrent des possibilités intéressantes concernant le calcul parallèle car elles peuvent accomplir un nombre élevé de tâches indépendantes. C'est d'ailleurs une machine composée de GPU's qui occupe à présent la tête du classement "top 500" (Tianhe-1A NUDT, installée à Tianjin, Chine). Il faudra donc disposer de codes optimisés pour des calculateurs ayant des caractéristiques relativement différentes les unes des autres du point de vue de l'architecture. La manière dont les programmes sont compilés est également un critère important pour atteindre une efficacité intéressante. Notons finalement que d'autres simulations numériques en Théorie Quantique des Champs* connaissent actuellement un développement florissant: par exemple sur la physique du boson de Higgs, en physique nucléaire ou pour étudier le diagramme de phase de la Chromodynamique Quantique à haute température et haute densité (conditions proches de celles du Big Bang ou dans les collisions d'ions lourds) où les aspects non perturbatifs de la dynamique jouent certainement un rôle crucial. ■

**FIGURE 5**

Description schématique de la Chromodynamique Quantique (QCD) régularisée sur un réseau : les champs de quarks sont définis aux nœuds du réseau tandis que l'interaction est véhiculée par les champs de gluons définis sur les liens du réseau et représentés par des matrices complexes de taille 3 x 3, unitaires et de déterminant 1. A la fin d'une simulation on peut par exemple extraire la masse d'un hadron : en effet elle est donnée par la pente exponentielle d'une fonction de corrélation à 2 points *C(t)*. Il est impossible de calculer cette quantité par la théorie des perturbations. Il faut compter entre 3 et 5 ans de travail (simulations et analyse) et de puissants ordinateurs pour obtenir un résultat ayant une incertitude théorique compétitive par rapport aux erreurs expérimentales sur des processus hadroniques pouvant mettre en évidence de la Nouvelle Physique.

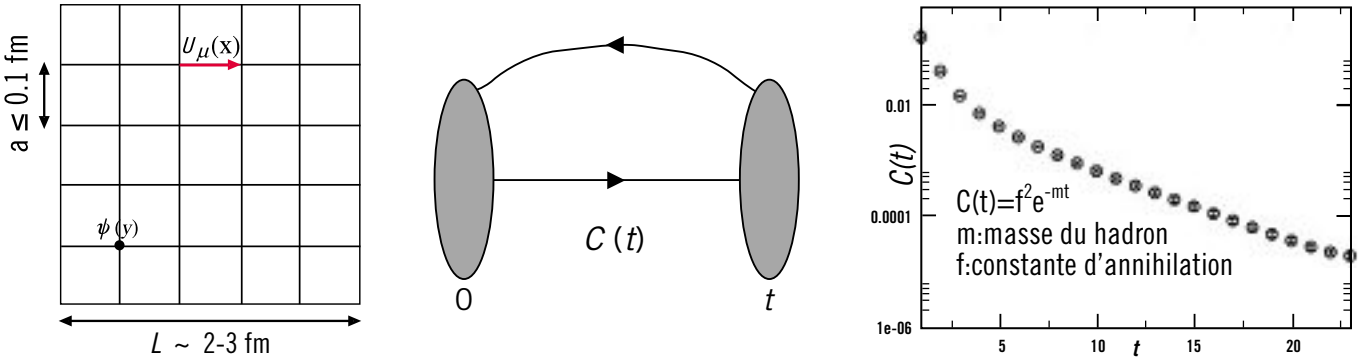
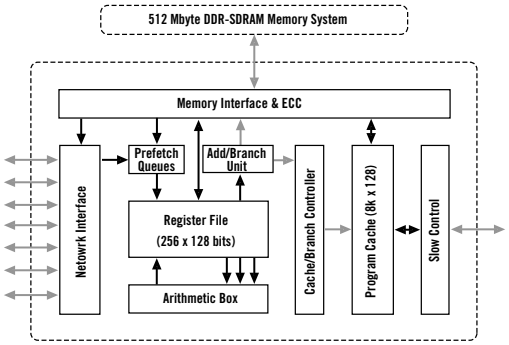
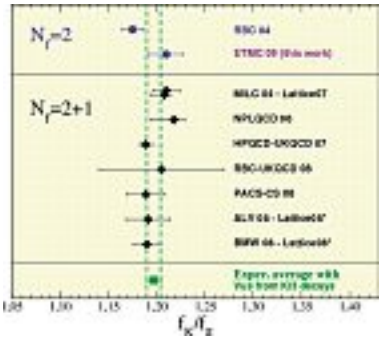


FIGURE 6

Un processeur d'APEnext et son schéma de fonctionnalités. On a également montré un résultat récent obtenu par différentes collaborations, regroupant chacune d'entre elles quelques dizaines de physiciens théoriciens généralement répartis sur plusieurs pays d'un même continent, voire de plusieurs. En particulier le groupe de QCD sur réseau du LPT Orsay est membre fondateur de la collaboration ETMC rassemblant des physiciens de 8 pays Européens, chaque groupe ayant à sa disposition des moyens de calcul divers. Le calcul des fonctions de corrélation nécessaires à l'extraction de $f_K/f_\pi$, rapport des constantes de désintégration des mésons *K* et $\pi$, a été effectué sur des machines de 256 processeurs d'APEnext. La valeur de ce rapport, proche de 1.2, combinée à d'autres résultats aussi bien théoriques qu'expérimentaux, indique que le Modèle Standard n'est pas mis en défaut dans le secteur des quarks légers *u*, *d* et *s*.




## Glossaire

### *Matière noire :*

La matière noire (ou matière sombre), traduction de l'anglais *dark matter*, désigne une catégorie de matière hypothétique jusqu'à présent non détectée, invoquée pour rendre compte d'observations, notamment les estimations de masse des galaxies, des amas de galaxies et les propriétés des fluctuations du fond cosmologique.

### *Théorie quantique des champs :*

La théorie quantique des champs, qui réunit relativité restreinte et mécanique quantique, est notamment à la base de la description des forces régissant la physique des particules élémentaires. La validité de cette description a été vérifiée jusqu'à un niveau de précision remarquable.

### *Distribution de Boltzmann :*

un système à l'équilibre thermique a une probabilité d'être dans un état d'énergie E inversement exponentielle à cette énergie. On doit au physicien mathématicien Wightman d'avoir établi la relation entre une Théorie Quantique des Champs et une Théorie Statistique des Champs à 4 dimensions ayant cette distribution de probabilité, en particulier par un prolongement analytique vers un temps imaginaire des fonctions de corrélation de la première.

### *Variable de Grassmann :*

C'est un objet mathématique abondamment utilisé en physique, notamment lorsqu'on s'intéresse aux particules de spin demi-entier comme l'électron ; la propriété fondamentale est que 2 variables de Grassmann anticommutent (a*b = - b*a).

### *Bilan détaillé :*

On dit qu'une loi de probabilité respecte la condition de bilan détaillé si tous les taux de transition d'un état *i* vers un état *j* du système $W_{ij}$ vérifient $P_i^{eq} W_{ij} = P_j^{eq} W j_i$, $P^{eq}$ étant la distribution de probabilité du système à l'équilibre. Employer ce type de loi de probabilité pour le système statistique de champs de quarks et de gluons assure qu'il va évoluer vers l'équilibre thermique, ce qui est crucial dans le calcul des fonctions de corrélation.

### *Méthode de Monte-Carlo :*

On appelle méthode de Monte-Carlo toute méthode visant à calculer une valeur numérique et utilisant des procédés aléatoires, c'est-à-dire des techniques probabilistes. Le nom de ces méthodes fait allusion aux jeux de hasard pratiqués à Monte-Carlo.

### *Parallélisme :*

Le parallélisme consiste à réaliser de manière simultanée des tâches indépendantes les unes des autres, de manière à diminuer le délai de réalisation de l'ensemble. En informatique, on réalise souvent la parallélisation en subdivisant des tâches en opérations atomiques qui s'effectuent de manière indépendante sur un même ordinateur ou par calcul réparti.

### *Performance soutenue :*

Puissance réelle de calcul d'un ordinateur estimée en exécutant un code de référence comme « Linpack » par exemple.

### *Tflop :*

Le Tera Flop ou Tflops est une unité de mesure, flops ou flop/s étant un acronyme signifiant « opérations à virgule flottante par seconde » (en anglais, FLoating point Operations Per Second). Un Tflops est équivalent à 1 000 milliards de calculs par seconde. Il s'agit donc d'une puissance atteinte par des supers ordinateurs.