

Amphithéâtre Becquerel, École Polytechnique, Palaiseau



Accréditation des résultats de la Recherche

Vendredi 19 décembre 2014



Coordination scientifique :

- *Christophe Denis* (EDF)
- *Éric Goubault* (École Polytechnique)
- *Thiên-Hiệp Lê* (ONERA/DSNA)
- *Patrick Moreau* (INRIA)



Renseignements, programme ... <http://www.association-aristote.fr>

aristote
À la croisée des révolutions numériques

Accréditation des résultats de la Recherche

La vérité est ailleurs ?!



19 décembre 2014, Amphi Becquerel, École Polytechnique, Palaiseau



Pour cette troisième et dernière journée du cycle 2014, Thiên Hiệp Lê (Aristote) accueille la trentaine de participants. Après une journée sur les équations de Navier-Stokes et une autre intitulée ROC and ROM (Reduced Order of Complexity & Reduced Order of Model), la journée porte sur la validation des résultats. Le mot qui reviendra souvent aujourd'hui est « vérité ». Qu'y a-t-il derrière ce mot ? Les équations de Navier-Stokes est une vérité révélée, car non démontrée. Les modèles réduits représentent d'autres vérités. L'objet d'aujourd'hui est la clé de voute (de doute ?) de la recherche : validation, accréditation, big data. La vérité est-elle être reconnue par les pairs ? Si oui, seulement cela ?



Alain Merlen (Onera) présente la journée. Le monde est incertain, l'avenir est incertain, mais l'incertitude ne fait pas peur. C'est la base même de la physique. De plus, dès qu'il y a la moindre non-linéarité, on ne sait plus prévoir à long terme. Le sujet d'aujourd'hui traite des incertitudes, de Navier-Stokes (donc de la non-linéarité) et des résultats qui diffèrent suivant les machines ou les modèles. Mais la question de la validité des résultats touche aussi celle de la fraude. Depuis 2005, le nombre d'articles rétractés a été multiplié par 5. La question est d'abord morale car, si débrancher un générateur automatique de faux articles est possible, que faire si le fautif est un chercheur ? Faut-il laisser la presse juger les scientifiques ? Le système de *peer-review* est-il aussi à revoir ? Mais si la fraude augmente c'est aussi un problème de structure et de modes de financement. La concurrence permanente, les appels d'offres, les expertises croisées conduisent à cette mauvaise tendance et rien d'étonnant à ce que le sujet soit abordé également dans ce colloque à travers ses aspects juridiques.

En conclusion, Alain Merlen souhaite à tous de bonnes fêtes et, pour 2015, de nombreux résultats sincères, vérifiés et pleins de vérité.

Choisir un modèle adapté à l'endroit et à l'instant : application en mécanique des fluides

Clément Cancès (UPMC/Laboratoire Jacques-Louis Lions)



Dans ce travail de groupe, la motivation est de bien hiérarchiser les modèles, par exemple dans le cas de systèmes hyperboliques avec relaxation. Et de voir si le système marche.

Dans la simulation d'un circuit d'eau à eau pressurisée, l'écoulement est multiphasique (liquide, vapeur, air) et hétérogène (multi-échelles, gouttes). Selon les échelles, le modèle sera différent. Il faut utiliser des modèles moyennés (réduits) et les coupler. Et tous doivent se parler. Il faut donc comprendre leur hiérarchie. En mécanique des fluides, le modèle-père est Navier-Stokes 3D, mais on n'arrive pas à le simuler. Clément Cancès utilise alors des modèles réduits en négligeant les petites échelles. Ils sont résolubles facilement, mais sont moins précis. Où est le bon compromis ? Dans le cas de deux modèles, on a un modèle fin qui voit les petites échelles et un modèle grossier. Il faut coupler les deux pour utiliser le modèle fin là où les petites échelles jouent un rôle. Mais dans quelle zone peut-on se contenter du modèle grossier ? Clément Cancès considère qu'on peut construire un indicateur qui indique la distance entre les deux modèles. Dans le cas des systèmes hyperboliques avec relaxation, il faut parfois résoudre les équations, tandis que, d'autre fois, considérer que le système veut atteindre un équilibre. Mais l'indicateur entre les deux modèles peut être nul.

On ne peut pas raffiner le modèle grossier. Il est possible de le faire par un développement de Chapman-Enskog. Est-ce valide ? Mathématiquement, on a une obstruction majeure. Il n'y a pas de théorie satisfaisante. On peut quand même justifier l'utilisation de Chapman-Enskog sur des modèles simplifiés en contrôlant les erreurs par les processus de modélisation adaptatifs. Pour faire une étude rigoureuse, il y a encore du travail à faire. Mais Clément Cancès et son groupe peuvent justifier leurs résultats par des simulations numériques. L'indicateur permet de dire où il faut utiliser le modèle fin par rapport au grossier.

Ils peuvent donc contrôler les erreurs commises en utilisant un modèle grossier et un modèle fin pour quelques parties. En perspective, l'utilisation de plus que deux modèles et le raffinement en parallèle des modèles et du maillage.

Incertitudes vibro-acoustiques dans le domaine transport

Eric Savin (ONERA/ Ecole Centrale de Paris)



Le travail d'Eric Savin court sur une dizaine d'années, avec de nombreux chercheurs et post-doctorants. Si on veut résoudre la propagation d'ondes élastiques, il faut connaître les hétérogénéités du milieu pour voir où l'onde se reflète. Plusieurs exemples : dans le cas d'une excitation sur une structure de fuselage d'avion, il existe des modes propres de vibration. En augmentant la phase, le milieu devient très perturbé. Comment caractériser cela avec les hétérogénéités de la structure que sont les hublots, les rivets etc. ? D'autres exemples font intervenir, dans le secteur automobile, la pression acoustique sur l'oreille d'un conducteur sous l'effet des vibrations des pneus, ou dans le spatial, les vibrations générées par les explosifs qui séparent la coiffe d'un lanceur, vibrations qui pourraient endommager la charge utile. C'est aussi le cas quand on déploie les panneaux solaires. Pour voir comment cela se passe, il faut caractériser le tenseur acoustique qui varie dans l'espace. On forme une densité énergétique en considérant que l'énergie est conservée. Les approches des ingénieurs sont l'analyse statistique (SEA) utilisée lors des missions Apollo, des méthodes avec des phases complexes et leur extension que sont les modèles cinétiques. L'idée de base est de travailler dans l'espace des phases. On passe alors à un niveau macroscopique par rapport au niveau microscopique qu'est la propagation de l'onde. La simplification de modèle est fait par ce passage des équations d'ondes vers le transport radiatif.

Estimation de la reproductibilité numérique grâce à l'arithmétique Stochastique

Fabienne Jézéquel (Laboratoire d'Informatique, UPMC)



On peut avoir des problèmes de reproductibilité numérique quand on change d'architecture ou d'ordinateurs. Ce peut être du à la suite des instructions ou être l'effet de bugs. Comment distinguer les unes des autres ? Exemple, la propagation d'une onde acoustique dans l'exploration pétrolière. Avec deux schémas différents (l'un augmente au fur et à mesure les dimensions, l'autre implémente les zones), les résultats peuvent avoir de 0 à 7 chiffres en commun. Les différences sont-elles dues aux erreurs d'arrondis ? L'arithmétique stochastique donne des arrondis aléatoires. Si on fait plusieurs fois le calcul, les résultats vont être différents. Comment estimer le nombre de chiffres corrects ? Avec la méthode CESTAC, on fait n fois le calcul et on estime en 3 itérations le nombre de chiffres corrects. Le résultat est appelé un zéro-informatique. C'est soit du bruit numérique soit un vrai zéro.

Fabienne Jézéquel présente la bibliothèque CADNA qui implémente l'arithmétique stochastique. Une de ses versions permet le contrôle de la qualité numérique dans les environnements hybrides CPU-GPU. L'utilisation de cette bibliothèque Cadna permet de contrôler la qualité numérique. Il apparaît que les résultats en valeur absolue élevée ont une erreur d'arrondis correcte contrairement à ceux en valeur absolue faible.

Arithmétique par intervalles : avancées récentes et perspectives

Nathalie Revol (INRIA - LIP, ENS de Lyon - Université de Lyon)



Le principe du calcul par intervalles est de manipuler, non des nombres, mais des intervalles qui contiennent les valeurs exactes. C'est un calcul dit garanti. Cela a été introduit pour prendre en compte les erreurs d'arrondis, puis les valeurs d'entrées et les gros ensembles de données. Cela a été utilisé en géométrie algorithmique pour savoir où se trouve un point par rapport à une droite. On peut résoudre tous les problèmes par arithmétique par intervalles. Les deux succès : la preuve de la conjecture de Kepler par Tom Hales (l'empilement d'orange le plus dense est l'empilement régulier habituel des vendeurs). Ou la preuve que l'attracteur de Lorenz a un attracteur étrange. On manipule un intervalle fermé connexe. Exemple : Pi est une valeur comprise dans un intervalle. Cela peut être aussi un vecteur ou une matrice. Une opération qui utilise la monotonie s'effectue sur chaque coordonnée de l'intervalle. Il y a des difficultés. Comme un carré n'est pas comme une multiplication (un carré est toujours positif), on surestime le nombre d'objets. Un serpent in par exemple sera représenté par un rectangle qui le contient. On perd le fait que deux variables sont les mêmes. C'est aussi plus complexe. La plupart des problèmes sont NP-durs. D'autre part, les erreurs d'arrondis sont majorées. C'est bien car ils sont tous pris en compte, mais c'est un facteur de ralentissement des calculs.

En revanche, si on a une zone de valeur sûre et une zone contrôlable, on est certain que tous les calculs sont contrôlables.

Si on cherche les zéros d'une fonction f (Newton), on réduit au fur et à mesure les intervalles possibles en construisant des cônes incluant la courbe et dont les côtés sont les tangentes minimales aux points de l'intervalle. Le zéro sera sur une partie du cône donc dans un intervalle plus petit. Et on recommence.

L'histoire de l'arithmétique par intervalles est sujette à débat. En remontant le temps, on en trouve des traces partout. Tsunaga (Japon) a commencé le travail en 1958, mais on trouve des précurseurs tel un Polonais en 1956 et une Américaine en 1931. Tout compte fait, c'est Archimède qui a commencé. Mais ça a été popularisé par l'allemand Ulrich Kulisch en 1980. L'arithmétique par intervalles devrait être normalisée en 2015 (IEEE P1788) au niveau mathématique avec la représentation des objets, les opérations et les prédicats, jusqu'à l'implémentation sur machine avec les formats d'échanges.

Traitement des incertitudes en simulation numérique pour la maîtrise de procédés industriels

Bertrand Iooss (EDF-R&D)



Quand on veut asseoir un code de calcul, il faut déterminer les incertitudes. Celles du modèle, celles de l'approximation numérique, puis celles sur les données d'entrées (incertitudes stochastiques) et les incertitudes épistémiques sur les paramètres. À EDF, les ingénieurs cherchent à comprendre un phénomène, à calculer un risque de défaillance à l'aide du code de calcul afin d'optimiser et maîtriser les performances d'un système. En entrées, les incertitudes portent sur les variables environnementales, les paramètres physiques et ceux du processus. En sortie, le code donne une distribution des réponses, une probabilité de défaillances et un résultat sur les entrées les plus influentes. Bertrand Iooss et ses collègues essaient d'obtenir des indicateurs statistiques sur les erreurs en sortie. Ils effectuent une analyse d'incertitude, de sensibilité et de fiabilité dans laquelle ils cherchent des événements rares ou des domaines de défaillance. Pour des problèmes simples, ils utilisent des méthodes analytiques et des méthodes statistiques pour les plus compliqués. Mais le coût de calcul est élevé pour des événements rares.

L'utilisation de méta-modèles consiste en une fonction statistique du code de calcul et une approximation à partir de plusieurs simulations. Cela permet de faire de la planification adaptative. Exemple : lors d'un accident de perte de réfrigérant sur un réacteur nucléaire, on cherche à ne pas dépasser une valeur critique de la température de la gaine.

La stratification contrôlée permet de trouver un quantile de confiance sur un méta-modèle avec un temps de calcul très raccourci.

Analyse statique de programmes et systèmes numériques - Fluctuat

Sylvie Putot (Ecole Polytechnique/LIX - CEA)



Dans les domaines comme l'espace, l'aviation ou le nucléaire, les ingénieurs conçoivent des programmes et veulent en analyser le comportement numérique. S'il y a des itérations, il faut bien choisir son critère d'arrêt du programme. Sylvie Putot cherche des méthodes automatiques de validation du programme pour aider numériquement à quantifier les erreurs d'arrondis et les incertitudes. Un programme est un système discret avec des points de contrôles et un système d'équations qui décrit comment se comporte le programme. En collectant des valeurs, on cherche des points fixes du système. Il faut une structure ordonnée pour le faire. On part d'un ensemble vide et on itère le programme jusqu'à obtenir le point fixe. Le principe est d'utiliser des « zonotopes », des surfaces limitées par des fonctions affines, qui surestiment l'intervalle. Par exemple, pour les filtres récurrents linéaires, on peut trouver une itération qui prouve que le nombre d'itérations est borné. Ceci est appliqué dans l'analyse de briques élémentaires de programme de contrôle-commande.

Est-ce que le climat simulé par un modèle climatique est le même sur différents calculateurs?

Marie-Alice Foujols (IPSL)



L'Institut Pierre-Simon Laplace (IPSL) est un ensemble de cinq laboratoires qui modélise le climat dans un code appelé Système Terre. Il intègre l'atmosphère, les sols, l'océan, la végétation, la chimie, l'hydrologie, etc. en différents modèles couplés. Système Terre comporte 372 327 lignes de code. Le programme est lancé dans certaines conditions (anciennes ou actuelles) avec composition atmosphérique, existence des calottes glaciaires, etc. Il calcule un climat du futur validé par le climat passé ou actuel. Les rapports du GIEC (groupe intergouvernemental sur l'évolution du climat) donnent l'état des connaissances sur le climat tous les 5 ou 6 ans (bases physiques, risques, atténuation, résumé pour décideurs). Le projet international CMIP (coupled model intercomparison project) tente de comparer les différents modèles. Nous avons le choix entre un futur où on arrive à limiter ou non les émissions de gaz à effet de serre (GES). CMIP a comparé les résultats de 32 groupes (32 modèles). Ils sont comparables en ce qui concerne la moyenne de température de surface, mais pas pour les précipitations. Des simulations donnent un diagnostic et une compréhension de la cause des écarts faibles ou forts entre les modèles. Un ordinateur vectoriel NEC SX9 Mercurie a été consacré pendant 3 ans et demi à ces simulations de l'IPSL. Mais peut-on changer de calculateur au cours d'une étude ? Est-ce qu'un même modèle donne les mêmes résultats sur un autre calculateur ? En gros oui, sauf si des calculateurs ont des erreurs (un fichier avait une ligne de 0). Sur 7 calculateurs, le groupe a testé un climat moyen fictif. Les trajectoires sont différentes, mais le climat étant statistique, cela ne veut rien dire. Pour la température, la pression au niveau de la mer et les précipitations, le groupe a calculé des distances entre les variables. Plus les périodes sont longues, plus les simulations se rapprochent pour les températures, mais la pression et les précipitations ne convergent pas vraiment. Sauf si on dépasse la période de 200 ans. Reste un manque : il serait bien de mettre un peu plus de mathématiques dans ce domaine.

Vérification numérique de code de calculs industriels

Christophe Denis (EDF)



Après avoir remercié ses doctorants et ses stagiaires sans qui rien ne se fait, Christophe Denis revient sur les besoins industriels. Il indique que les simulations numériques sont effectuées en calcul flottant. Les incertitudes qui y sont liées sont le point de départ de toute analyse des incertitudes globales. Le calcul flottant est un modèle calcul réel (ensemble infini et continue de valeurs) sur un ensemble discret et un nombre fini de valeur. Problème : la représentation des réels n'est pas exacte. Les industriels veulent un intervalle de confiance sur les résultats, optimiser la consommation mémoire et la consommation électrique et aussi comprendre les différences de résultats selon l'environnement de calcul utilisé. Il faut donc évaluer la qualité numérique automatiquement et pouvoir déboguer. L'analyse inverse permet de répondre à la question. Certaines bibliothèques de calcul fournissent des estimations d'erreurs inverses. La bibliothèque Cadna utilise un mode arrondi aléatoire. Le nombre de chiffres significatifs en commun dans trois calculs fournit la précision et confirme la présence d'instabilités tout en les analysant et en les corrigeant. Cela a été fait lors de la thèse de S. Montan soutenue en 2013. L'outil Verrou va permettre de prendre en compte toutes les erreurs générées par les opérations arithmétiques. Un autre travail en cours consiste à détecter les sources de non-reproductibilité du code industriel.

Génération et détection automatique de faux articles scientifiques

Cyril Labbé (Université Joseph Fourier)



« Publish or perish » est le mot d'ordre des scientifiques. Le h-index et le taux d'impacts des articles scientifiques sont des indices pris en compte dans la poursuite des carrières. Ils sont calculés par des éditeurs (qui font payer ce service) ou des entreprises comme Google Scholar qui le fait gratuitement. Cela pousse les scientifiques à publier beaucoup, quitte à générer des articles artificiellement. Ce sont des programmes qui doivent écrire une grammaire très lourde comme l'ont fait 3 étudiants du MIT en 2005. On peut même créer un chercheur qui publie et qui a un taux de citations remarquable. Il suffit de créer des articles qui se citent mutuellement dont l'un cite des personnes réelles. C'est le cas d'Ike Antkare qui a « vécu » en 2013. On peut donc spammer Google Scholar. Pour trouver les faux, des logiciels regardent la similarité de certains textes avec d'autres. La méthode a été mise en ligne sur un site de démonstration du laboratoire d'informatique de Grenoble <http://scigendetection.imag.fr>. À noter qu'il n'y a pas d'articles scigen dans arXiv.

Impacts of the digital revolution on two main activities of scientists: communicating and qualifying

Claude Kirchner (INRIA)



Les scientifiques doivent connaître, apprendre, transmettre. Ils ont besoin d'accéder à l'information, la chercher, publier et échanger des informations. Ce n'est pas nouveau. En 1665, il existait déjà « *le journal des sçavans* ». Les journaux font partie du processus de recherche, renseignent sur la paternité des résultats, les enregistrent. Ils sont utilisés pour évaluer les personnes, les équipes les institutions, les nations et fournissent une source big data des connaissances. En 2012, il y avait 28 000 journaux actifs avec 1,8 millions d'articles publiés/an. Et à voir les bénéfices d'Elsevier, cela rapporte. Le monde est numérique. Certains sites vous permettent d'être visibles, d'échanger avec les autres scientifiques (ResearchGate, Mendeley, etc.).

Publier (tout le monde peut le faire), qualifier (originalité, intérêt...), certifier (donner un label). Les auteurs sont responsables. Pour un article, ce seront quelques centaines de lecteurs qui donneront leur profil superficiel. Pour un MOOC, ce seront quelques dizaines de milliers (ou plus) qui devront donner leur profil profond, c'est-à-dire avec leur niveau de connaissance, leur comportement sur les réseaux...Ce sont des informations stratégiques.

Aujourd'hui il y a les archives ouvertes (arXiv, Hal...), ouvertes 7/7, 24/24, éternelles. Elles permettent des vérifications et des certifications. Les politiques demandent la mise en *open access* de toute la production scientifique.

Ces articles sont aussi soumis aux EPI-Journaux qui sont des plates-formes de recueil d'articles en vue d'évaluation et de discussion. Mais quels sont leurs modèles économiques, leur qualité et comment choisir qui soutenir? Le Centre pour la communication scientifique directe (CCSD) a commencé ce travail avec le soutien du CNRS, de l'Inria et de l'université de Lyon. Il met en place un méta-comité d'évaluation pour plusieurs journaux. L'avenir est à l'*open access* et aux réseaux sociaux des scientifiques. Elsevier a tout compris en devant un trou noir attirant toute la production scientifique. Pourtant de nouvelles organisations et modèles économiques doivent être trouvés pour permettre leur partage équitable.

La Fraude – une porte fermée

Alexei Grinbaum (CEA)



Dans un colloque, un physicien portait avec un tee-shirt où était écrit une liste de moyens d'arriver à la fraude. Où commence le sacrilège ? Effectivement, 28% des scientifiques avouent avoir gardé des données inadéquates, 0,3% ont trafiqué leurs données pour arriver aux bons résultats. Selon qu'on soit en milieu ou au début de carrière, cela change. 20,6% des milieu de carrière disent qu'ils ont changé la méthode ou les résultats d'une étude suivant le financement de l'étude, deux fois plus que les jeunes.

Mais qu'est-ce la vérité ? Ponce Pilate se posait déjà la question. Pour nous, c'est ce qui va s'opposer au mensonge. La fraude n'est pas une notion absolue. Henry Atlan, dans *de la Fraude*, utilise le mot « Onaa ». La fraude est « *un dommage qui atteint à la fois l'individu que la communauté dans l'organisation commune des échanges qui en assure la stabilité* ». Mais la fraude peut aussi stabiliser. Le mensonge ferme des portes mais cette fermeture est différente selon les traductions de la Bible. Le Grec Trucydide dit qu'il arrive un moment où plus personne ne croit aux mots qui changent de sens. Le mensonge fait basculer l'ordre social. Il y a un rapport étroit entre vérité scientifique et vérité morale. Il n'y a pas de vérité absolue, mais celle construite par les hommes pour sauvegarder la cohésion du groupe social.

C'est intéressant pour la science pratiquée aujourd'hui, car elle est dans une phase où le mensonge fait partie du monde. Un projet scientifique n'est qu'une promesse. Par cette porte entre la vérité humide des Grecs, c'est-à-dire un certain degré de fraude. Le Talmud dit que la fraude est acceptée si elle vaut moins de 40% du prix, mais il parle du commerce et non de la science.

Aspects juridiques de la reproductibilité des résultats

Patrick Moreau (Inria)



Un phénomène grandissant est de pouvoir reproduire les résultats donc de mettre à disposition son code source et ses données. Cela permet d'améliorer la qualité des résultats et de les archiver mieux. C'est le cas du *Journal of biological chemistry*, d'IPOL ou de PNAS qui demandent aux auteurs leur code source ou leur programme. Cela pose un problème de droit, car une licence est parfois imposée. Quels sont les impacts ? Mais ouverture du code n'implique pas forcément un open source. L'ouverture du code permet aux *reviewers* de vérifier la méthode. L'open source est défini par la liberté d'exécuter le programme, l'étudier, l'adapter, le redistribuer. Tout code ouvert n'est pas forcément libre. Patrick Moreau propose de ne pas octroyer au licencié davantage de droits nécessaires à l'intention initiale. Dans le cadre d'une publication scientifique, seul le code exécutable est licencié afin de pouvoir reproduire les résultats. Pour permettre à un pair d'étudier le code, c'est le code source qui doit être licencié. Le choix d'une licence libre n'est valable que s'il s'agit d'obtenir des retours d'utilisateurs, des contributions, de devenir la communauté de référence, d'avoir un impact sur la société ou de rechercher une standardisation. Pour avoir un impact optimal, le logiciel doit être générique. La licence libre est simple à mettre en œuvre car c'est un contrat connu et reconnu par l'Open source initiative (OSI) ou la FSF. Les instituts de recherche doivent proposer une licence d'ouverture de code à des fins de recherche aussi simple à mettre en œuvre.

À 18 heures, Thiên Hiệp Lê clôt le séminaire en appelant les participants à aider à monter des séminaires et en signalant que l'association Aristote est ouverte à toute proposition.