



Rapport du Comité Stratégique du Calcul Intensif

7 avril 2010

Sommaire



Résumé et recommandations	5
Membres du CSCI	7
Remerciements.....	9
1 Suivi des recommandations de 2008.....	10
2 Les activités du CSCI.....	11
2.1 Les missions du CSCI.....	11
2.2 Les activités du CSCI en 2009.....	12
2.3 Le Rapport.....	12
3 Les faits marquants	14
3.1 Tendances pour l'architecture des machines	14
3.2 Les outils logiciels	15
3.3 Les données.....	16
3.4 La place de la France dans le Top 500	17
3.5 La recherche française dispose en 2009 de 628 + 192 Tflops	18
3.6 Politique scientifique et accès aux ressources du calcul intensif.....	20
3.7 Les mésocentres	21
3.8 L'ANR.....	21
4 L'utilisation du calcul intensif.....	23
5 Promotion du Calcul Scientifique.....	26
5.1 La formation	28
5.2 Le calcul intensif et la DGA	29
5.3 Le calcul intensif dans l'industrie	29
5.4 Le projet PRACE : Bilan 2009	34
5.5 Les grilles de calcul	36
5.6 La Maison de la Simulation.....	36
5.7 Le calcul intensif au CEA.....	37
Le projet TERA100 et ses retombées	37
Le Centre de Calcul Recherche et Technologie.....	38
Les laboratoires.....	40
5.8 Actions et stratégie du CNRS en calcul intensif	41
5.9 Actions et stratégie de l'INRIA sur le calcul intensif	42
6 Le Problème du financement de la R&D industrielle	43
6.1 Évolution du matériel	43
6.2 Questions sur le logiciel.....	44
6.3 Financements de la R&D.....	45
7 Grands programmes et thématiques	47
7.1 ITER.....	47
7.2 La Météorologie et la Climatologie.....	48
8 Thèmes à traiter en 2010.....	51
8.1 Le programme de Nanosimulation au CEA.....	51
8.2 Astrophysique	53

8.3	La simulation des biomacromolécules.....	55
8.4	Génomique.....	58
8.5	Industrie Pétrolière.....	59
8.6	Les Grilles.....	61

Résumé et recommandations

Recommandation 1 : En 2009 la puissance des ordinateurs de pointe a encore doublé dans le monde, mais les équipements à la disposition des chercheurs français dans les 3 centres nationaux ont aussi doublé en puissance grâce à la coordination GENCI et l'effort financier du Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche. Par ailleurs avec le programme PRACE l'Europe sera bientôt dotée d'un centre de calcul comparable aux plus grands centres américains. *Ce doublement de puissance tous les 18 mois implique de continuer l'effort d'investissement pour renouveler le matériel faute de quoi nous serions à nouveau assez vite distancés.*

Recommandation 2 : Le CEA et Bull ont opté pour une architecture hybride, tout comme l'ont fait également la Chine et quelques centres aux USA. Cette stratégie résolument d'avant-garde a pour contrepartie une plus grande complexité de programmation. *Il est donc essentiel d'aider les chercheurs du calcul haute performance, d'abord en leur donnant la reconnaissance qu'ils méritent et surtout les moyens de faire grandir leurs équipes et de diffuser leur savoir-faire.*

Recommandation 3 : L'ANR joue un rôle essentiel sur les orientations de la recherche. En augmentant ses « programmes blancs » *l'ANR a diminué son appui aux programmes ciblés, et en particulier ceux dédiés recherche/industrie pour le calcul intensif, ce qui du point de vue du CSCI est regrettable dans une conjoncture où le nombre de chercheurs publics et privés dans le domaine est sous-critique. Une recommandation ministérielle à l'ANR pourrait améliorer cette situation.*

Recommandation 4 : Le projet PRACE va sûrement jouer un rôle majeur dans la recherche. Sa mise en place nécessite plus de publicité auprès des communautés utilisatrices. *Il faudrait soutenir les chercheurs français prêts à relever les défis que posent ces nouvelles architectures à base de parallélismes massifs ; En accompagnement un programme « exascale » comme le programme « petascale » devrait être plus clairement affiché et soutenu.*

Recommandation 5 : Le CSCI a auditionné certains acteurs majeurs en France du programme ITER. *Une puissance multi Pétaflopique sera nécessaire à l'horizon 2015 pour lever certains verrous technologiques. Pour s'y préparer il faudrait renforcer les équipes sur la simulation. Le recrutement des chercheurs ayant la triple compétence physique/calcul haute performance/informatique est un problème qui nécessite un effort de formation à long terme.*

Recommandation 6 : Le CSCI s'est aussi intéressé au travail des climatologues et météorologues français en liaison avec les impératifs du GIEC : Il apparaît que les codes actuels n'utiliseront qu'une faible partie de la puissance théorique des super ordinateurs ; Il conviendrait donc de profiter de la fenêtre 2011-2014 (préparation du 5^{ème} rapport du GIEC) *pour soutenir vigoureusement l'effort de parallélisation déjà entamé par les équipes françaises et favoriser le dialogue entre la communauté des climatologues et celles des numériciens de l'algorithmique parallèle.* Ces développements devront s'inscrire dans une

feuille de route au niveau européen (cadre ENES¹). *Ceci ne pourra pas se faire sans un effort sur la formation et le recrutement d'experts HPC au sein de la communauté météorologique.*

Recommandation 7 : Le CSCI a étudié les relations entre la R&D industrielle sur les architectures de machines et la recherche pour le calcul intensif ; sur le long terme ces deux thématiques sont liées. *Le CSCI recommande donc aux ministères de la recherche et de l'industrie d'étudier les financements des programmes de R&D dans le domaine des superordinateurs, en accord avec les règles européennes, pour ne pas défavoriser les entreprises françaises face à la concurrence internationale.*

Recommandation 8 : Les grilles de calcul sont aussi des outils pour la simulation de puissance. Le CSCI a déjà souhaité en 2008 que les communautés « grilles » et « calcul sur ordinateur de pointe » se connaissent mieux. Il est apparu cette année, par exemple, que les connaissances « grilles » pour l'archivage des données pouvaient profiter aux à la deuxième communauté ; *Le CSCI recommande à nouveau le rapprochement des deux communautés*

Recommandation 9 : Certaines communautés scientifiques comme celle de la L-QCD en physique théorique et une partie de la dynamique moléculaire en chimie profiteraient probablement de machines dédiées avec une architecture et/ou une unité de calcul adaptées. *GENCI pourrait être chargé d'étudier ces cas particuliers impossibles à satisfaire par les centres nationaux généralistes.*

Recommandation 10 : Les méso centres sont insuffisamment développés en France. La situation s'est un peu améliorée début 2010 avec, par exemple, le renforcement du mésocentre CALMIP à Toulouse mais *il en faudrait plusieurs de ce type en France car la formation en calcul intensif en dépend.*

Recommandation 11 : Pour certaines industries le calcul intensif est un investissement à trop long terme pour qu'elles puissent le prendre en charge seules. Comme nous l'avons déjà suggéré en 2008, *la création d'un programme d'incitation industrie-recherche pour le calcul intensif est nécessaire.*

¹ European Network for Earth-System modelling

Membres du CSCI

Comité stratégique du calcul intensif

NOR : ESRR0900446A
Arrêté du 3-11-2009
ESR - DGRI SPFCO B2

Par arrêté de la ministre de l'Enseignement supérieur et de la Recherche en date du 3 novembre 2009, sont nommés membres du comité stratégique du calcul intensif :

Au titre des personnalités qualifiées

- **Jean-Claude André**, directeur du CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique)
- **Daniel Benoualid**, directeur du centre de recherche corporate du groupe Hutchinson;
- **Jacques Blum**, professeur à l'université de Nice (algorithmique) ;
- **Dominique Boutigny**, dir. Centre calcul de l'Inst. nat. physique nucléaire et de physique des particules (Grid) ;
- **Françoise Combes**, astronome à l'Observatoire de Paris, et membre de l'Académie des Sciences;
- **François Coron**, chef de l'unité « ingénierie thermique et mécanique », à EADS ;
- **Laurent Crouzet**, assistant du dir. des sciences de la matière, chargé du C.S. et de l'informatique au CEA
- **Martin Field**, chef du lab. de dynamique moléculaire dans l'Institut de biologie structurale Jean-Pierre Ebel ;
- **Jean Gonnord**, chef de projet en charge du programme « simulation numérique et informatique » CEA/DAM ;
- **Jean-François Hamelin**, directeur des systèmes d'information à EDF Recherche et développement ;
- **Charles Hirsch**, prof. émérite à l'Université Libre de Bruxelles, président de Numeca Int. (+ académie Royale)
- **Argiris Kamoulakos**, directeur scientifique, ESI Group ;
- **Richard Lavery**, directeur de recherche, et dir. du dépt. de Biostructures Moléculaires IBCP-CNRS.
- **Boris Leblanc**, resp. adjoint de l'équipe de recherche et dev. « Equities & Derivatives » de BNP Paribas
- **Patrick J. Mascart**, directeur de l'École doctorale des sciences de l'univers, de l'espace et de l'environnement;
- **Hener Müller Krumbhaar**, directeur du dépt « sciences de la matière » au centre de recherches de Jülich ;
- **Olivier Pironneau**, prof. à l'université Paris-VI - Pierre et Marie Curie, membre de l'Académie des sciences ;
- **Alain Ratier**, directeur général adjoint à Météo-France (+centre de calcul);
- **Marie-Madeleine Rohmer**, directeur de recherche, directeur adjoint de l'Institut de Chimie de Strasbourg ;
- **Jean Roman**, DR à l'Institut national de recherche en informatique et en automatique ;
- **Stéphanie Schaer**, chef du bureau « Logiciel » au ministère de l'économie, de l'industrie et de l'emploi.

En qualité de représentant de la ministre de l'Enseignement supérieur et de la Recherche :

- **Laurent Desbat**, professeur à l'Université Joseph Fourier, imagerie médicale.

Olivier Pironneau est nommé président du comité.

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE**Arrêté du 2 août 2007 portant nomination au comité stratégique du calcul intensif**NOR : *ESRR0761885A*

Par arrêté de la ministre de l'enseignement supérieur et de la recherche en date du 2 août 2007, sont nommés membres du comité stratégique du calcul intensif :

1. Au titre des personnalités qualifiées

M. Daniel Benoualid, directeur du centre de recherche corporate du groupe Hutchinson ;
M. Jacques Blum, professeur des universités à l'université de Nice ;
M. Jean-Paul Bonnet, directeur de recherches, vice-président du conseil scientifique de l'université de Poitiers ;
M. Dominique Boutigny, directeur de recherches, directeur du centre de calcul de l'Institut national de physique nucléaire et de physique des particules ;
M. Philippe Chalon, directeur « économie, finance et informatique » à Total ;
M. Jean-Louis Coatrieux, directeur de recherches à l'Institut national de la santé et de la recherche médicale ;
M. François Coron, chef de l'unité « ingénierie thermique et mécanique », à EADS ;
M. Martin Field, chef du laboratoire de dynamique moléculaire dans l'Institut de biologie structurale Jean- Pierre Ebel ;
M. Benoît Formery, sous-directeur « composants, logiciels, électronique professionnelle » au ministère de l'économie, des finances et de l'emploi (direction générale des entreprises) ;
M. Michel Hugues de Gliniasty, directeur scientifique général à l'Office national d'études et de recherches aérospatiales ;
M. Jean Gonnord, chef de projet en charge du programme « simulation numérique et informatique » au Commissariat à l'énergie atomique ;
M. Jean-François Hamelin, directeur des systèmes d'information à EDF Recherche et développement ;
M. Boris Leblanc, responsable adjoint de l'équipe de recherche et développement « Equities & Derivatives » de BNP Paribas, responsable du développement de nouvelles modélisations des actifs financiers ;
M. Patrick J. Mascart, directeur de l'Ecole doctorale des sciences de l'univers, de l'espace et de l'environnement ;
M. Heiner Müller Krumbhaar, directeur du département « sciences de la matière » au centre de recherches de Jülich ;
M. Thierry Nkaoua, directeur de la gestion des contrats et des ressources humaines à la direction de l'énergie nucléaire du Commissariat à l'énergie atomique ;
M. Michele Parrinello, professeur de sciences des ordinateurs à l'Institut fédéral de technologie ETH Zurich ;
M. Olivier Pironneau, professeur des universités à l'université Paris-VI - Pierre et Marie Curie, membre de l'Académie des sciences ;
M. Alain Ratier, directeur général adjoint à Météo-France ;
M. Jean Roman, professeur en informatique à l'Institut national de recherche en informatique et en automatique ;
M. Bruno Stoufflet, directeur de la prospective au sein de la direction générale technique de Dassault Aviation.

2. En qualité de représentante du ministre chargé de la recherche

Mme Brigitte Rozoy, professeure des universités, université de Paris-XI - Orsay, adjointe au directeur du département « mathématiques, physique, nanos, usages, sécurité, STIC » au ministère chargé de la recherche.

Remerciements

Le Comité remercie Catherine Rivière, Alain Lichnewsky et Stéphane Réquena (GENCI), Christine Menaché (CCRT), Victor Alessandrini et Serge Fayolle (IDRIS), Francis Daumas (CINES), André Seznec et Eric Sonnendrucker (INRIA), Raymond Namyst (LABRI), Jean-François Lavignon (Bull), François Bodin (CAPS), Pierre Leca (CEA/DAM), Frédéric Imbeaux et Xavier Garbet (CEA/DSM), Dany Vandromme (RENATER) qui ont bien voulu répondre à ses questions, et ont fourni des éléments d'information utiles à ce rapport.

Il remercie la Direction Générale pour la Recherche et l'Innovation pour son support logistique, et particulièrement Michel Kern et Laurent Desbat, chargés de mission, pour leur assistance.

1 Suivi des recommandations de 2008

Dans son rapport le CSCI avait émis en Novembre 2008 les recommandations ci-dessous ; nous donnons quelques informations sur l'évolution de la situation face à ces recommandations:

1. *Pérenniser la dynamique nationale mise en place par GENCI pour coordonner les moyens de calcul nationaux et leur financement afin d'avoir une politique cohérente de renouvellement du matériel.*
Les équipements informatiques gérés par GENCI dépendent maintenant des lignes budgétaires «Très Grandes Infrastructures de Recherche». Le problème est donc partiellement réglé. Mais le budget nécessairement pluriannuel du programme PRACE est beaucoup plus difficile à réaliser. Nous recommandons de maintenir la constance du soutien au projet PRACE dans la durée.
2. *Faire émerger, en liaison avec le programme européen PRACE, une équipe pluridisciplinaire capable de développer des applications dans les disciplines qui le demandent, et de mettre en place les outils logiciels de base spécifiques au calcul intensif.*
Un accord CERFACS-INRIA prévoit de mettre en place une telle équipe mais ce n'est pas directement lié à PRACE et la *Maison de la Simulation* n'a pas encore abordé ce problème. Nous espérons qu'il le sera en 2011.
3. *Encourager et créer dans les universités et les écoles d'ingénieurs des formations longues en calcul intensif pour les jeunes chercheurs de toutes disciplines depuis Bac+3 jusqu'au doctorat.*
Pour le calcul intensif la situation n'a pas évolué ; pour le calcul hybride bon nombre d'universitaires se sont intéressés au problème ; cette recommandation reste d'actualité.
4. *Aider les industriels souhaitant tester le parallélisme massif en facilitant l'accès aux machines de grandes tailles par un programme technologique comparable au programme INCITE du DoE aux USA.*
Les acteurs du calcul intensif sont convaincus de la nécessité d'un tel programme et plusieurs actions devraient voir le jour en 2010.
5. *Encourager le financement d'équipements mi-lourds (notamment au niveau des régions et des universités) pour rétablir l'équilibre de la pyramide dite tier0-tier1-tier2.*
Le Méso-centre de Toulouse a été inauguré en Janvier 2010. Pour le reste la situation est inchangée ; cette recommandation reste d'actualité.
6. *Faciliter le rapprochement de communautés « grilles de calcul et données » et « supercalculateurs », notamment au niveau des accords de recherche, de PRACE, des initiatives nationales de grilles, et de l'organisation des bases de données.*
Pas de solution visible à ce problème en 2010 ; cette recommandation reste d'actualité.

2 Les activités du CSCI

La simulation - et le calcul intensif en particulier - sont des outils exceptionnels d'investigation pour la recherche et le développement technologique. La finesse des résultats dépend de la qualité du modèle mathématique, du talent de l'équipe de recherche pour l'implémentation et bien évidemment des ressources informatiques disponibles.

La puissance des superordinateurs a encore presque doublé en 2009 puisque la machine de l'ORNL (Oak Ridge USA) a atteint 1.75 Pflops contre 1 Pflops en 2008 et que le 2 Pflops est prévu pour bientôt.

Les moyens de calcul intensif à la disposition des chercheurs français ont aussi fortement évolué en 2009 grâce au Ministère de la Recherche, au CEA, CNRS, CINES et à la coordination de GENCI.

2.1 Les missions du CSCI

En 2006 le Ministère de la Recherche a reconnu l'importance de la simulation pour la compétitivité et l'innovation et constaté le retard de la France surtout pour les simulations extrêmes. Il a donc créé la société civile GENCI pour la gestion et l'harmonisation des moyens de calcul de puissance pour la recherche. GENCI a disposé en 2009 d'un budget de 25 M€. GENCI est doté d'un conseil d'administration pour les décisions à court et moyen terme ; en parallèle et pour la stratégie à long terme le ministère a créé le CSCI en octobre 2007.

La lettre de mission du Ministre de la recherche précise que

« Le Comité Stratégique pour le Calcul Intensif est chargé, en particulier, d'organiser le suivi des activités nationales et européennes dans le domaine du calcul intensif et de formuler des propositions sur l'organisation et le renouvellement des équipements de calcul intensif ainsi que les mesures permettant l'utilisation optimale de ces équipements, selon les domaines, en tenant compte notamment des activités d'enseignement supérieur. Il donne un avis sur la participation française aux programmes internationaux utilisant l'infrastructure de calcul ... Sa constitution entre dans le cadre d'une politique ambitieuse, destinée à affirmer la présence française dans le domaine de la simulation numérique et à améliorer en conséquence notre compétitivité dans les domaines scientifique et industriel. »

Le Comité Stratégique pour le Calcul Intensif a aussi pour mission de

- a) Donner un avis sur les centres de calcul nationaux, et leur évolution par rapport à l'initiative PRACE, les grilles et les équipements « mi-lourds » des communautés thématiques.
- b) S'assurer de la meilleure utilisation des ressources en coopération avec GENCI et l'ANR.
- c) Réfléchir à la manière d'améliorer l'impact industriel de la simulation numérique et du calcul intensif.

- d) Parallèlement le CSCI pourra aussi donner un avis sur les besoins en calcul intensif en relation avec les projets d'intérêt stratégique (comme ITER, le GIEC,...), les domaines disciplinaires « en émergence », les besoins de formation initiale ou continue et les perspectives de coopération internationale.

Les membres du CSCI sont, en proportion égale, chercheurs dans des laboratoires universitaires et dans des grands organismes ou dans des industries de pointes. Le CSCI ayant été renouvelé par décret en Novembre 2009, l'ancienne et la nouvelle liste des membres sont données en préliminaire de ce rapport.

2.2 Les activités du CSCI en 2009

Le CSCI s'est réuni les 14 Janvier, 11 Février, 11 Mars, 13 Mai, 10 Juin, 9 Décembre 2009 et 13 Janvier 2010 (les comptes rendus de séance sont disponibles sur demande) ; il n'a pu se réunir entre Juin et Décembre à cause du renouvellement par tiers de ses membres en Juillet mais acté seulement en Novembre. Les thèmes abordés ont été :

- L'avenir de la LQCD (Lattice Quantum Chromo-Dynamics)
- Le financement de la R&D pour les ordinateurs de pointe en France et en Europe.
- Le calcul intensif et le programme fusion ITER.
- Le calcul intensif pour la météorologie et la climatologie et les impératifs du GIEC.

Deux de ces thèmes ont fait l'objet de rapports intermédiaires à Catherine Rivière, présidente de GENCI. Ces rapports sont en annexes.

Plusieurs membres ont visité quelques grands centres internationaux comme le TACC (Texas), Los Alamos et le LLNL.

Enfin à titre divers les membres ont participé à de nombreuses réunions, ateliers de travaux et colloques sur des sujets touchants au calcul intensif et/ou en liaison avec l'ANR, le CEA, le CNRS, EDF, GENCI, ORAP, Cray Research, IBM et l'Union Européenne.

2.3 Le Rapport

Le premier rapport du CSCI (fin 2008) contient des généralités sur le calcul intensif que nous ne répéterons pas ici ; nous renvoyons le lecteur au site <http://www.genci.fr/> pour le téléchargement du document.

Ce rapport annuel 2009 décrit les évolutions du domaine et recadre la position de la France dans le paysage international de la recherche en simulation du point de vue du calcul intensif. Enfin il donne quelques recommandations pour une meilleure orientation des recherches et de leurs financements. Il traite des points suivants :

- L'évolution des trois grands centres de calcul français et les perspectives qu'ils offrent ;

- L'avenir du calcul pour les chercheurs français compte tenu du projet PRACE dans lequel la France est représentée par GENCI.
- L'impact du calcul intensif sur la recherche et l'industrie et le problème du financement de la R&D.
- Le calcul au sein de deux grands programmes de simulation : ITER et le GIEC.

Le rapport est organisé de manière à faciliter une lecture rapide des « recommandations » seulement ou des « faits marquants » seulement ou une lecture complète avec des paragraphes contenant de nombreux rappels destinés aux non spécialistes.

3 Les faits marquants

3.1 Tendances pour l'architecture des machines

Consommation électrique

Les architectes des machines pétaflopiques (10^{15} opérations en virgule flottante par seconde) sont conscients que la consommation électrique de leurs machines est très coûteuse : entre 1 et 3 mégawatts par Pflops plus au moins la moitié pour la réfrigération. IBM détient toujours le « green record » avec son architecture Blue Gene.

Bien que l'optimisation du rapport puissance électrique sur puissance informatique fasse l'objet d'efforts importants de la part des constructeurs et que l'on observe une diminution d'environ 30% par an de ce rapport, l'augmentation constante des besoins informatiques entraîne des difficultés d'infrastructure considérables. La plupart des salles informatiques conçues dans les dix ou vingt dernières années sont impactées, cela concerne autant les grands centres informatiques que les mésocentres.

Plusieurs compagnies à travers le monde développent des technologies visant à baisser la consommation électrique associée au refroidissement des machines (RITTAL, APC, BULL, EMERSON, KNÜRR, SCHROFF). De même le TGCC Très Grand Centre de Calcul) en construction à Bruyères le Chatel ainsi que l'extension du Centre de Calcul de l'IN2P3 ont été conçus pour pouvoir recycler l'énergie thermique via une circulation d'eau chaude, mais l'expérience de la dernière extension du CINES montre que ces solutions restent actuellement coûteuses.

GPGPU

L'avènement des machines hybrides à base de « General Purpose Graphic Processor Unit » était prévu. Cette année elles sont bien présentes parmi [les plus performantes du monde](#)². C'est surtout la Société nVidia qui occupe le devant de la scène avec sa nouvelle génération de cartes graphiques double précision (GT200 et Fermi) que la Société Bull a réussi à intégrer dans son architecture [BullX](#)³ comme une unité de coprocesseurs au sein d'une lame hybride.

Aux USA la machine Roadrunner de Los Alamos, l'ancien numéro 1 du classement du [top500](#)² utilise des coprocesseurs Cell mais la machine la plus rapide du monde actuellement (un système Cray XT5 à Oak Ridge) n'en utilise pas, donc le débat reste ouvert pour savoir si les difficultés de programmation accrues sont compensées par de meilleures performances par euro et/ou watt dépensés.

Il faut saluer la performance chinoise qui en 2 ans, avec 60M€ et une équipe de 200 scientifiques hisse le « Tianhe » en 5^{ème} position⁴ du top500^{Erreur ! Signet non défini.} ; c'est une machine hybride à base de CPU d'Intel et GPU de la compagnie AMD mais pour l'instant les tests de puissance n'utilisent pas la partie GPU.

² <http://www.top500.org/>

³ <http://www.bull.com/fr/extremecomputing/>

⁴ Il semble que la partie GPU n'ait pas encore été pleinement exploitée et que la machine soit capable de dépasser le Pflops, ce qui ferait de la Chine le deuxième pays dans cette catégorie.

En France, 2009 a vu la mise en production de la première machine hybride parallèle installée au CCRT et financée par GENCI. Cette machine fournie par BULL est composée de 1068 nœuds de calcul scalaire (103 Tflops crête) auxquels sont attachés 48 serveurs Tesla S1070 (192 Tflops simple précision crête). Après une série de grands défis menés de juin à décembre 2009 sur de vrais codes applicatifs portés sur architecture hybride, cette machine nommée Titane a été officiellement intégrée totalement (y compris sa partie hybride) dans le système unifié d'attribution d'heures.

Indépendance du matériel

Dans le secteur de l'électronique, les entreprises sont relativement fragiles financièrement. Ainsi la société SUN Microsystems a été rachetée par Oracle, SGI n'a pas résisté à la crise de 2008/2009 et a été rachetée par la société Rackable Systems spécialisée dans le Cloud Computing et on entend périodiquement parler de trous financiers chez nVidia et AMD.

Cray Research a démontré sa maîtrise du matériel en réussissant l'exploit de doubler la puissance de la machine Jaguar de Oak Ridge en changeant simplement les cartes processeurs AMD quadri cœurs par des cartes AMD hexacœurs.

L'alliance IBM-Sony a décidé, faute de volumes de vente suffisants, d'arrêter cette année le processeur Cell, mettant sans doute dans l'embarras Los Alamos et d'autres laboratoires européens.

En France, l'utilisation des outils de CAPS Entreprise (par exemple le Framework HMPP) devrait permettre de se prémunir partiellement contre une dépendance trop forte du matériel.

Les ordinateurs vectoriels

Très appréciées de certaines équipes pour leurs processeurs très puissants et leur niveau de performances atteignables les machines vectorielles semblent vouées à disparaître de la scène du calcul intensif parce que trop coûteuses et qu'il est de plus en plus difficile de créer des machines compétitives par rapport à celles dotées d'architectures massivement parallèles basées sur des composants de commodités avec un fort effet de volume. En 2009 la compagnie NEC (Japon), la dernière et la plus performante dans ce créneau, a décidé d'arrêter ses investissements sur sa ligne de machines vectorielles SX et s'est totalement désengagée du projet de supercalculateur Pétaflopique japonais « Keisoku » mené par RIKEN.

Par l'intermédiaire des Comités de Programme de GENCI, une campagne d'information auprès des utilisateurs a commencé pour les encourager à développer des codes plus adaptés aux machines massivement parallèles.

3.2 Les outils logiciels

Les machines parallèles sont difficiles à programmer. De ce point de vue la situation s'est plutôt détériorée en 2009 avec l'arrivée des machines hybrides.

Les deux langages de programmation les plus utilisés par les scientifiques sont le Fortran et le C/C++. L'outil le plus universel pour la parallélisation des codes est la bibliothèque MPI. Il est bon aussi d'utiliser OpenMP au niveau des tâches élémentaires

assignées aux blocs de processeurs travaillant sur un même banc mémoire sur les nœuds à mémoire partagée. Une programmation "hybride", c'est-à-dire mélangeant les échanges de messages avec la librairie MPI et la parallélisation à mémoire partagée OpenMP est de plus en plus souvent utilisée, au prix d'un effort de développement notable.

Pour accéder aux GPU de nVidia il faut utiliser CUDA, une extension propriétaire nVIDIA du C/C++ qui permet de séparer les tâches faites par le CPU de celles faites par le GPU. Orchestrer dans un même programme des tâches sur une machine ayant plusieurs GPU par carte multiprocesseur est un travail que seule une petite vingtaine de spécialistes en France savent faire.

En 2009, la compagnie AMD qui produit à la fois des CPU et des GPU, a marqué des points. D'ailleurs les machines jaguar de Oak Ridge et Tianhe (Chine) utilisent des processeurs AMD.

Cependant les GPU d'AMD ne se programment pas en CUDA (langage propriétaire de nVIDIA) mais en Brook+ ou en OpenCL qui est un standard apparu fin 2008 à l'initiative d'Apple pour les architectures hybrides et multi-coeurs. Le passage de CUDA à OpenCL n'est pas très difficile mais les outils de mise au point sont encore plus frustrés qu'avec CUDA de sorte que rares sont les spécialistes qui se lancent dans cette aventure.

Même si la compagnie CAPS Entreprise travaille sur un traducteur automatique en CUDA/OpenCL, on peut dire raisonnablement que l'écart entre les progrès matériels et les progrès logiciels s'est creusé en 2009.

Nous avons recommandé en 2008 que PRACE et la maison de la simulation prennent ce problème au sérieux en créant une équipe pluridisciplinaire capable de développer des applications dans les disciplines qui le demandent, et de mettre en place les outils logiciels de base spécifiques au calcul intensif. Par ailleurs, les équipes recherchent des collaborations avec les spécialistes du calcul intensif, comme il en existe à l'INRIA et au CERFACS. A cet effet, ces deux instituts ont créé un laboratoire commun centré sur la problématique du passage à l'échelle et plus spécifiquement sur les méthodes et algorithmes, projet dit « High-End Parallel Algorithms for Challenging Numerical Simulations ». Ce laboratoire commun, localisé à Bordeaux et à Toulouse, réunit les compétences complémentaires des 2 organismes afin de développer les méthodes algorithmiques indispensables pour tirer pleinement partie des architectures massivement parallèles et hybrides. Il rassemble une dizaine de chercheurs permanents, post-docteurs et doctorants, des 2 organismes.

3.3 Les données

La quantité de données produites par les supercalculateurs est directement reliée à la puissance de ceux-ci. Par exemple, dans le domaine de la climatologie, une campagne de simulation sur un calculateur pétaflopique pourra produire une masse de données de l'ordre du pétaoctet. Cette année, en demandant de stocker un To/jour les climatologues ont posé un problème au CCRT pour lequel une solution a du être mise en place (renforcement des serveurs disques, achat de baies de stockage).

La communauté de la physique des hautes énergies (ou physique des particules) a développé un savoir faire considérable dans le domaine de la gestion des masses de

données, en particulier avec la mise au point de techniques de grille qui permettent de distribuer et de gérer de très grandes quantités de données sur de multiples sites répartis géographiquement.

Il convient de distinguer les données qui doivent être stockées à proximité du calculateur qui les a engendrées, car elles sont destinées à être réutilisées par le même calculateur dans des phases de calcul successives, des données qui peuvent être distribuées vers les mésocentres ou les nœuds de grilles. Les deux types de stockage sont également importants.

Il est important de souligner le fait que la distribution des données suppose d'excellentes performances du réseau, tant pour le déplacement des données que pour l'accès à celles-ci. Ceci doit être regardé avec d'autant plus d'attention que les utilisateurs potentiels des données sont nombreux et répartis sur de nombreux sites.

3.4 La place de la France dans le Top 500

Le site www.top500.org liste les 500 ordinateurs les plus puissants, leurs caractéristiques et leurs localisations. Le critère de classement de cette liste, le « benchmark Linpack », qui est un standard accepté dans le domaine, même s'il ne mesure que très imparfaitement la puissance réellement disponible sur des applications significatives.

Les États-Unis sont plus que jamais en tête en 2009, et de très loin avec 8 machines dans le top 10, plus de 55% de la puissance installée (contre 5.2% en France) et 96% de la puissance fournie (notons, et c'est important pour la suite de ce rapport, que 100% de la puissance américaine installée l'est avec des constructeurs américains).

L'Europe est deuxième (30% de la puissance installée) et dans son sein l'Allemagne assez loin en tête, suivie par la France et la Grande Bretagne pour ce qui est des machines les plus puissantes (top 50 au lieu de top 500). Pour la recherche la Grande Bretagne a investi massivement dans une seule machine à l'EPCC (centre de calcul à Edimbourg), un Cray XT de 208 Tflops nommé Hector.

Il est à noter qu'en plus de la Chine citée précédemment avec la machine hybride Tianhe (5^{ème} position avec une performance soutenue de 563 Tflops par rapport à une performance crête de 1.2 Pflops), la Russie a fait aussi son apparition dans le top20 du top500 avec un cluster de 420 Tflops à l'Université de Moscou fourni par la société russe T-Platforms et une volonté de viser rapidement le Pflops pour soutenir l'effort de R&D industrielle dans le nucléaire, l'énergie et les nanotechnologies.

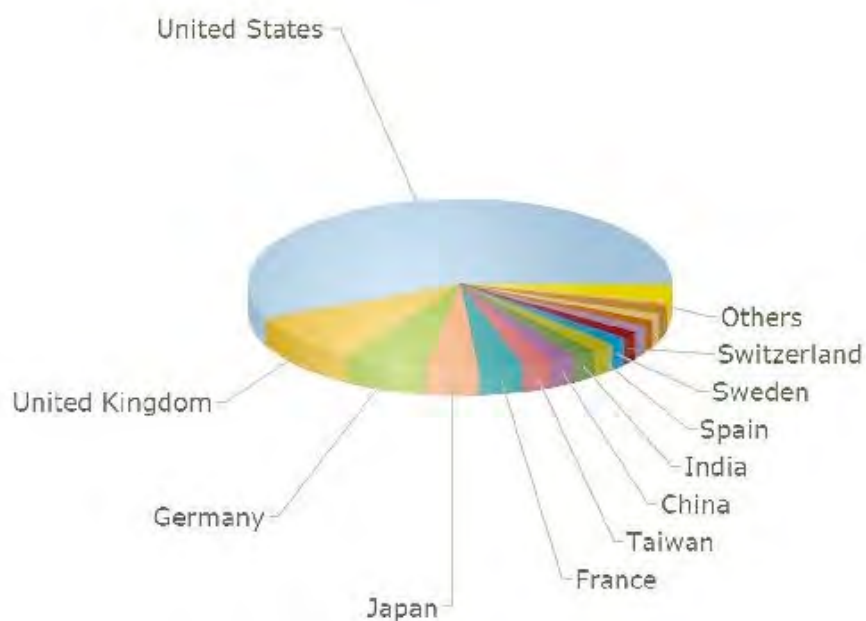


Figure 1: répartition de la puissance de calcul par pays en Novembre 2008

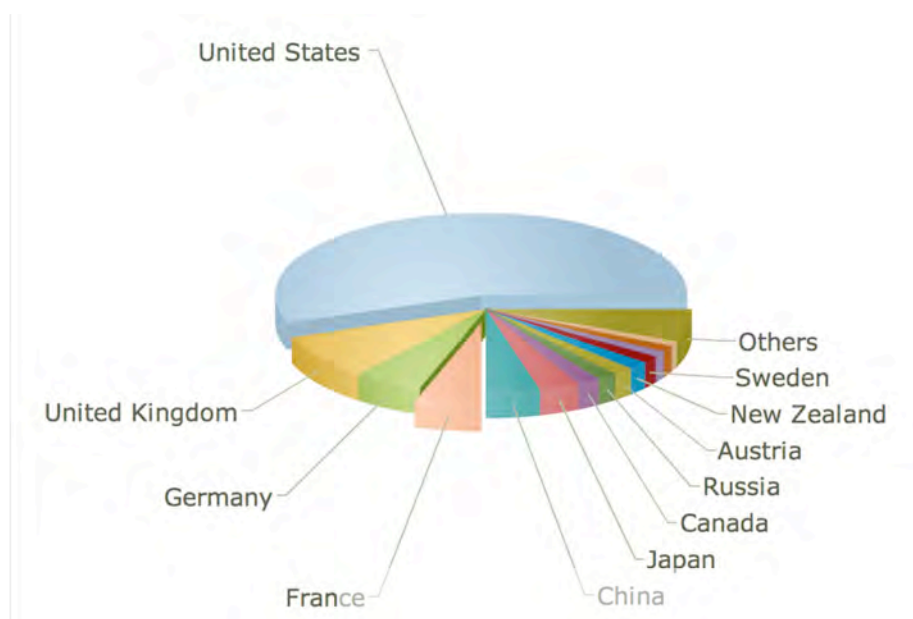


Figure 2: répartition de la puissance de calcul par pays en Novembre 2009

3.5 La recherche française dispose en 2009 de 628 + 192 Tflops

Une des missions de GENCI est la coordination des équipements des grands centres nationaux civils, c'est à dire, d'une part financer, acquérir et faire évoluer des équipements de calcul à haute performance et, d'autre part, attribuer les ressources informatiques sur ses équipements sur des critères d'excellence scientifique.

En 2009, le plan d'investissement a permis de doubler la puissance disponible pour la recherche publique française par rapport à 2008.

1. *Moyens de calcul de type vectoriel*
 - a. IDRIS : *Brodie*, NEC SX8, 10 nœuds, 80 procs, 1.2Tflops
 - b. CCRT : *Mercurie*, NEC SX8R, 8 nœuds, 64 procs, 2Tflops
 - c. *Non accessible à l'ensemble de la communauté scientifique (réservée GIEC, hors DARI)*: Extension NEC SX9, 3 nœuds, 48 procs, 5Tflops.
2. *Moyens de calcul de type cluster MPP*
 - a. IDRIS: *Babel*, IBM BG/P 40960 cœurs, 20To RAM, 800To disque, 139 Tflops
3. *Moyens de calcul de type cluster SMP nœuds larges*
 - a. IDRIS: *Vargas*, IBM-Power6, 3584cœurs, 16To RAM 800To disque, 67Tflops
 - b. CCRT: *Platine*, BULL, 7456 cœurs, 23To RAM, 420 To disque, 47 Tflops
 - c. CINES : *Anakin* IBM Power5, 80 cœurs, 0.6 Tflops
4. *Moyens de calcul de type cluster SMP nœuds fins*
 - a. CINES: *Jade*, SGI, 12288 cœurs, 49 To RAM, 500 To disque, 147 Tflops
 - b. CCRT : *Titane*, cluster hybride BULL/nVIDIA 8544 cœurs, 23 To RAM, 500 To disque, 100 Tflops + 48 serveurs nVIDIA Tesla, 192 GPU, 192 Tflops (simple précision)
5. *En Juin 2010 au CINES : 10752 cœurs supplémentaires + 48 To de mémoire = 120 Tflops de plus sur la machine Jade en février 2010, cette extension sera intégrée dans le système unifié d'attribution d'heures (DARI) en juin 2010.*

En doublant sa capacité de calcul intensif, la France fait preuve d'une des meilleures dynamiques de croissance mondiale en 2009.

Cet effort pour les ressources de calcul, sera suivi par la montée en puissance et la création de nouvelles équipes pour l'exploitation optimale de ces outils dans le cadre du programme Européen PRACE. La première machine de ce programme sera la machine du centre allemand de Jülich – la plus puissante en Europe – dont la moitié sera ouverte aux utilisateurs européens du projet PRACE. C'est une Blue Gene/P de 0.8 Pflops.

Pour conserver sa place en Europe, vu que les capacités de calcul doublent potentiellement tous les ans – au moins aux USA- il convient surtout de ne pas relâcher l'effort d'investissement et nous recommandons de :

Poursuivre la dynamique nationale mise en place par GENCI pour coordonner les moyens de calcul nationaux et leur financement dans le cadre d'un plan à long terme en accord avec les développements prévus dans PRACE. Par ailleurs nous espérons, comme prévu dans PRACE, que les chercheurs français qui arrivent en butée sur les machines nationales auront bien accès via les procédures de peer review européen à des ressources de calcul de plus de 500 Tflops en 2010 (« juste retour » sur PRACE).

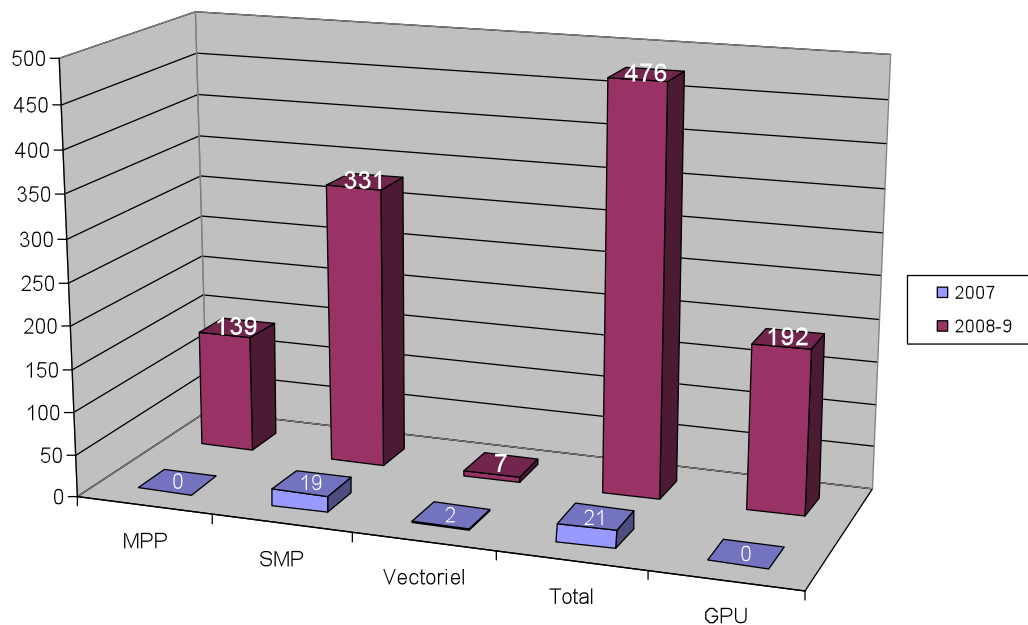


Figure 3: Évolution de la capacité de calcul disponible à l'ensemble de la communauté scientifique entre 2007 et 2009

3.6 Politique scientifique et accès aux ressources du calcul intensif

Tout chercheur d'un laboratoire français souhaitant utiliser une des machines GENCI fait une demande sur le site www.edari.fr. Sa demande est évaluée par le Comité d'Évaluation (principalement composé des Présidents des dix comités thématiques) et ses experts puis arbitrée par le Comité d'Attribution sous l'égide de GENCI. Ces deux comités se réunissent 2 fois par an et dans l'ensemble toutes les demandes raisonnables sont honorées. Cette année une décision a dû être prise pour modérer les demandes de calcul en chromodynamique quantique sur réseau (L-QCD) car les ordinateurs actuels ne suffisent pas pour le type d'étude demandée.

Le problème que nous ne savons pas encore résoudre est l'optimisation des ressources au niveau national entre les machines des mésocentres, les machines nationales et les machines dédiées même dans certains cas, comme il se profile en chimie ab-initio et peut être aussi en L-QCD. Le confort à l'utilisation doit être tel que les machines des mésocentres soient plus simples à utiliser pour l'initiation au calcul intensif et le développement de codes que les machines nationales. Nous sommes loin du compte et de ce point de vue, il y a encore beaucoup à faire. De même, si les machines dédiées s'avèrent plus efficaces, il faudrait un mécanisme de financement pour s'en procurer.

Par ailleurs plusieurs équipes calculent sur les machines américaines de pointe et non plus sur les machines japonaises devenues moins attractives.

3.7 Les mésocentres

Le 24 Septembre 2009, la CPU et GENCI ont organisé une journée présentation-débat sur les mésocentres français. De cette journée on peut faire les constats suivants :

1. Une vingtaine de mésocentres existent en France, de tailles très inégales.
2. Le plus réussi est sans doute le centre de Toulouse (CALMIP); cette réussite est due au dynamisme des responsables pour la gestion, la recherche de financement et la coordination avec les industries de la région de Toulouse.
3. Le financement est le problème majeur de ce dossier. Sans financement de la Région qui l'héberge, la seule possibilité est de ponctionner une partie des contrats de recherche des utilisateurs.
4. Certaines communautés ne sont pas hostiles à faire gérer leurs ressources informatiques par le mésocentre local car elles y trouvent des avantages pour
 - a. L'occupation des sols, puisque la machine n'est pas sur place
 - b. Les coûts d'installation et de fonctionnement, la climatisation en particulier, qui sont alors mutualisés
 - c. La gestion des machines puisqu'il n'y a plus besoin d'avoir sur place un ingénieur système.

En revanche les inconvénients à ce type de délégation est que

- a. Il n'y a plus d'expertise locale en calcul
- b. Le choix du matériel est parfois imposé par le mésocentre pour en simplifier la gestion.

3.8 L'ANR

La politique de l'ANR en matière de calcul intensif nous a été présentée par Madame Lecourtier, sa présidente, lors d'une rencontre avec O. Pironneau et L. Desbat.

Pour l'ANR la simulation numérique est évidemment très importante et un grand nombre de dossiers et contrats ont un volet de calcul. Le programme COSINUS concerne spécifiquement des recherches liées de près au calcul intensif et dans une certaine mesure le programme ARPEGE également.

Dans son enquête sur le Calcul Scientifique ("les cahiers de l'ANR, n°3") l'ANR a bien mis en évidence la présence du calcul dans un grand nombre de programmes. Pourtant, dans l'ensemble, le CSCI pense qu'il n'y a pas assez de programmes calcul intensif visibles à l'ANR. Seuls COSINUS et ARPEGE sont étiquetés comme tels. La décision d'augmenter la part des programmes blancs défavorise les projets collectifs en HPC et de fait, en 2009 l'ANR a diminué les ressources attribuées à COSINUS, car une des directives que l'ANR s'est donnée est de respecter un ratio d'un projet financé sur trois demandes de contrat, comme dans les ANR blanches.

L'ANR considère que globalement le calcul est bien doté car il intervient dans de très nombreuses demandes mais le CSCI n'adhère pas à cet argument car l'omniprésence du calcul ne participe pas plus aux progrès du domaine que ce rapport ne participe au patrimoine de la littérature française.

De fait les ressources que l'ANR affecte au calcul intensif semblent avoir diminué et/ou ont été diluées.

Nous espérons que l'ANR reviendra sur ses positions car il est évident que le financement des équipes universitaires par l'ANR est un facteur majeur de progrès pour le calcul intensif. L'ANR peut aussi jouer un rôle important dans le transfert des connaissances et des expertises en calcul haute performance dans l'industrie.

4 L'utilisation du calcul intensif

S'il est admis que la simulation est une méthode pour la recherche aussi importante que l'expérimentation, il est probable que les équipes de recherche sont loin d'utiliser toutes les ressources potentielles. Dans le rapport 2008 nous avons insisté sur la lenteur et la difficulté de cette reconversion culturelle. De fait il est probablement illusoire d'avoir un équilibre optimal « tier0-tier1-tier2 »⁵ tant que la simulation reste perçue comme difficile pour une bonne majorité des équipes de recherche.

Campagne d'attribution des ressources de calcul 2009

Une procédure unifiée (basée sur le DARI) à été mise en place pour les demandes d'heures de calculs sur les trois centres de calculs nationaux, et leur évaluation scientifique ainsi qu'une procédure unique d'allocation des heures sur les machines.




Cette nouvelle façon d'opérer a été très bien accueillie des chercheurs car elle simplifie l'accès aux machines ; elle permet aussi de vérifier que les ressources de calcul intensif allouées aux projets de l'ANR sont adaptées. L'ouverture aux industries utilisatrices de la simulation est encore à l'étude⁶.

Dans le cadre de la procédure unifiée d'attribution d'heures de calcul sur les moyens nationaux mis en place par GENCI, l'année 2009 aura permis d'attribuer l'intégralité des ressources de calcul disponibles (certains arbitrages ont été nécessaires notamment sur les machines Jade du CINES et Platine du CCRT ainsi que sur les machines vectorielles de l'IDRIS et du CCRT).

Il est important de noter que malgré la forte augmentation des moyens de calcul entre 2008 et 2009 la demande des scientifiques français a immédiatement conduit à un taux de remplissage de plus de 91% des machines généralistes.

Certaines de ces machines comme Babel, Jade, Titane, de par leur configuration et les modes d'utilisation mis en place par les centres nationaux, sont désormais à même de pouvoir préparer les scientifiques français à l'arrivée des machines européennes en les mettant dans les meilleures dispositions pour présenter des codes « scalables » au Peer Review européen.

Pour la machine IBM BlueGene/P de l'IDRIS qui est dotée d'une architecture plus spécialisée et adaptée à des simulations de très grande taille, il est à noter que le périmètre d'utilisation de cette machine s'est accru avec l'arrivée de la communauté de mécanique des fluides.

								
	IBM SP "Anakin"	SGI ICE "Jade"	IBM SP "Vargas"	IBM BG/P "Babel"	NEC SX8 "Brodie"	BULL IA64 "Platine"	BULL Xeon "Titane"	NEC SX8R "Mercure"

⁵ Par analogie avec la physique des hautes énergies, on désigne ainsi l'organisation pyramidale des moyens de calcul : le tier0 est une machine de très grande puissance de niveau européen, le tier1 un centre national, et le tier2 un mésocentre.

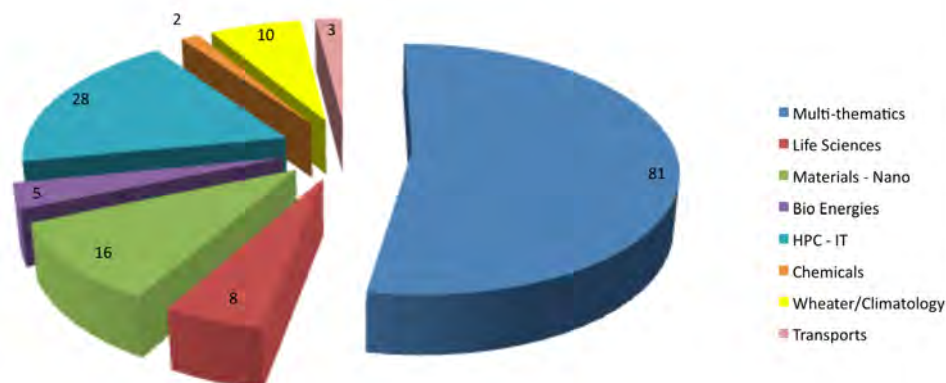
⁶ Directive numéro 72 du rapport Besson sur l'Economie Numérique 2012

<i>Total disp. en 2009 sur critères scientifiques</i>	2 600	72 000	23 000	245 000	520	4 000	14 500	114
Total attribué Première Session 2009	2 247	57 838	15 581	123 182	560	4 279	8 575	135
Total attribué Seconde session 2009	425	12 530	5 890	72 925	55,7	0	5 815	5
Total attribué en 2009	2 672	70 368+ 6 292*	21 471	196 107	615,7	4 279	14 390	140

Comité thématique	Nombre total de projets	Nombre de projets renouvelés	Nombre de nouveaux projets
1 Environnement	54	45	9
2 Mécanique des fluides	128	95	33
3 Biomédicale et santé	4	2	2
4 Astro et Géophysique	48	29	19
5 Physique théorique et plasmas	39	24	15
6 Informatique, algorithmique	21	11	10
7 Syst. Moléculaires et Biologie	56	31	25
8 Chimie quantique	121	81	40
9 Physique Chimie et matériaux	97	54	43
10 Nouvelles applications	7	0	7
Total	575	372	203

La distribution des demandes 2009 entre les différents comités thématiques montre un taux de renouvellement sur l'année 2009 de plus de 50% entre les projets 2008 renouvelés et les nouveaux projets. Ceci correspond à une augmentation de 10% (mais les codes prennent plusieurs années de développement) du nombre de dossiers mais presque le double en heures demandées avec une augmentation forte dans les thèmes 2, 7, 8 et 9.

GENCI a effectué une première analyse portant sur la campagne 2009, sur le nombre de projets ayant reçu à la fois un soutien ANR et une attribution d'heures :



Il apparaît que 150 projets (soit 28% du total des projets représentant 11% des heures attribuées en 2009) bénéficient également d'un soutien ANR. Sur ces 150 projets, 28 sont issus des programmes ANR fortement liés au calcul intensif : COSINUS « Conception et Simulation », ARPEGE « Systèmes embarqués et Grandes Infrastructures » et P3N « nanosciences, Nanotechnologies, Nanosystèmes » (catégorie HPC-IT), la très grande majorité provenant des programmes « blanc » et « Jeunes Chercheurs » (catégorie Multi-thematics).

Cette analyse a également montré que la totalité des projets bénéficiant d'un soutien ANR avaient obtenu une attribution d'heures.

Il est enfin à noter que les équipes françaises ne participent pas (sauf exception de celles du CERFACS) aux réponses aux appels à propositions émanant du programme américain INCITE du DoE⁷, ce qui devrait néanmoins être plus largement encouragé.

Par comparaison le site www.top500.org donne l'évolution des applications du calcul intensif dans le monde :

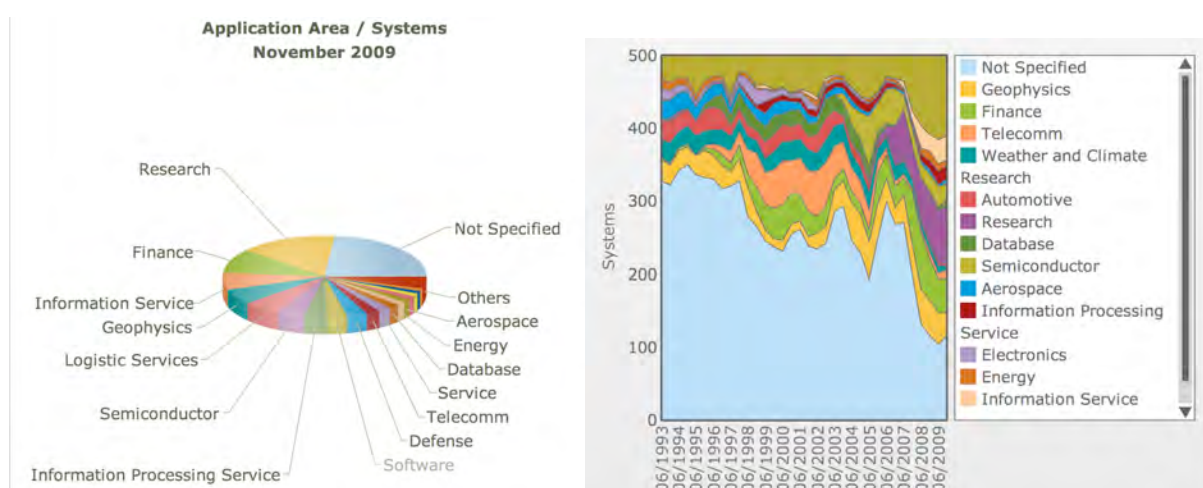


Figure 3 : Les domaines d'application du calcul intensif en 2009 ; évolution depuis 1993 (top500.org). Noter que la part des industriels ne cesse de croître.

⁷ Department of Energy

Dans un rapport intitulé « Breakthrough 2008 » un panel de scientifiques américains identifie les avancées probables par le calcul dans les prochaines années :

- Scientists Model the Molecular Basis of Parkinson's Disease
- Astrophysicists Discover Supernova Shock-Wave Instability and a Better Way to Spin Up Pulsars
- Designing Proteins at Atomic Scale and Creating Enzymes
- First-Principles Flame Simulation Provides Crucial Information to Guide Design of Fuel-Efficient Clean Engines
- Breakthrough Fusion Simulation Sheds Light on Plasma Confinement
- Closing In on an Explanation for High-Temperature Superconductivity
- Powerful Mathematical Tools Resolve Complex Simulations
- A Billion-Particle Simulation of the Dark Matter Halo of the Milky Way
- Exploring the Mysteries of Water
- Novel Solver Enables Scalable Electromagnetic Simulation

Ces conjectures scientifiques sont internationales et concernent aussi la recherche française. Peut-être manque-t-il néanmoins un volet sur les applications à l'environnement et au climat ?

5 Promotion du Calcul Scientifique

Grands Défis

Sous l'égide de GENCI, le CCRT a organisé à l'occasion de l'installation de la machine hybride Titane des « Grand Défis » qui ont permis pendant la phase de recette de la machine, à des scientifiques français de réaliser des avancées scientifiques par des simulations de grande taille à la fois sur la partie scalaire de Titane (plus de 8500 cœurs) et sur la partie hybride (composée de 48 serveurs nVIDIA Tesla).

Sur la partie scalaire on peut noter dans le domaine des sciences du vivant, une application relative au traitement du cancer et une sur la classification des protéines qui traduisent une implication forte et récente de ces disciplines dans le calcul et la simulation numérique.

Sur la partie hybride trois grands challenges se sont exécutés sur la partition hybride de Titane et ont permis de prouver l'adéquation et le potentiel de ce type d'architecture pour un nombre croissant d'applications scientifiques.

Cette campagne de grands défis sera de nouveau conduite par GENCI et le CINES lors de l'extension de la machine Jade de mars à juin 2010.

Le prix BULL Joseph Fourier

La Société BULL associée à GENCI, a créé un prix nommé Prix BULL Joseph Fourier afin de promouvoir la simulation numérique. En juin 2009 lors du forum Ter@tec les premiers lauréats de ce prix ont été :

- Grand Prix: Luigi Genovese (European Synchrotron Radiation Facility à Grenoble) récompensé pour ses travaux visant à améliorer les performances parallèles/hybrides d'un logiciel de modélisation moléculaire (BigDFT) par

ondelettes.

- 2ème Prix: Gabriel Staffelbach (CERFACS) pour la qualité de ses travaux sur la parallélisation du code de combustion AVBP.
- 3ème Prix: Dimitri Komatitsch (Université de Pau et INRIA) pour la parallélisation du code SPECFEM3D pour la prédiction des tremblements de terre et leurs répliques.

Ces opérations ont deux avantages : elles donnent plus de moyens à ceux qui en feront le meilleur usage (heures de calcul gratuites) et elles font connaître aux décideurs les experts, souvent trop jeunes pour en avoir une notoriété établie. Le prix Gordon aux USA a le même objectif.

Label C3I

La CPU (Conférence des Présidents d'Universités) et GENCI se sont associés afin de mettre en place en 2009 un label de compétences nommé [C3I](#) (Certificat de Compétences en Calcul Intensif)⁸ visant à améliorer la visibilité des docteurs ayant développé et appliqué pendant leur thèse des compétences en calcul intensif.

Une première série de labels sera annoncée lors du prochain forum de l'ORAP le 31 mars 2010, pour plus de renseignement sur ce label vous pouvez vous référer au site <http://www.genci.fr/> ([Annonce](#)⁹, [FAQ](#)¹⁰, [formulaire de candidature](#)¹¹).

Appel à projet CAPS/GENCI

CAPS Entreprise et GENCI ont mis en place en 2009 une collaboration de R&D afin d'élargir le périmètre d'utilisation des machines hybrides financées par GENCI comme le calculateur hybride Titane 192 gpus au CCRT et le cluster expérimental Iblis de 24 gpus au CINES.

Cette collaboration était axée autour de 3 volets :

- un financement des développements du Framework HMPP et notamment le backend OpenCL qui permet à un code HMPP de pouvoir générer une version compatible avec le nouveau standard OpenCL en s'affranchissant ainsi de la complexité de ce dernier.
- La mise en place de 3 sessions de formation (2 au CCRT et une au CINES) au langage CUDA et HMPP
- Le lancement d'un appel à projets commun CAPS/GENCI afin de sélectionner 3 applications scientifiques qui ont été portées sur machine hybride par CAPS en relation avec l'utilisateur du code (afin de pouvoir le former et assurer le transfert de technologie).
A l'issue de la phase de dépôt des candidatures, 25 demandes, académiques et

⁸ <http://www.genci.fr/spip.php?article58>

⁹ <http://www.genci.fr/spip.php?article58>

¹⁰ <http://www.genci.fr/spip.php?article60>

¹¹ <http://calcul.math.cnrs.fr/C3I/index.php?sid=79387&lang=fr>

industrielles, issues de domaines scientifiques variés, avaient été reçues par le comité de sélection.

Les 3 lauréats retenus pour l'optimisation et le portage de leur code sur machine hybride sont : F. Jezequel (LIP6) pour un code de physique atomique, R. Martin (Université de Pau/INRIA) pour un code de gravimétrie et HydrOcéan une PME issue de Centrale Nantes avec un code d'hydrodynamique par méthode SPH (Smoothed-Particle Hydrodynamics).

5.1 La formation

Ce problème a été étudié dans le précédent rapport dont nous rappelons la recommandation :

Encourager et créer dans les universités et les écoles d'ingénieurs des formations longues en calcul intensif pour les jeunes chercheurs de toutes disciplines, depuis Bac+3 jusqu'au doctorat.

Le problème de la formation est clairement un problème critique quand il concerne un savoir-faire scientifique et une technologie de pointe qui subissent de fortes évolutions dans des périodes de temps assez courtes et dont la maîtrise nécessite en plus une culture de fond pluridisciplinaire. La simulation numérique au sens large, qui est aujourd'hui un élément central de la démarche scientifique en recherche et qui a une très forte valeur ajoutée dans l'industrie de pointe, nécessite en effet des compétences de fond concernant à la fois la modélisation mathématique et le savoir-faire de l'informatique du HPC (langages, algorithmique, optimisation de codes). De manière complémentaire, elle nécessite aussi une bonne sensibilité applicative pour pouvoir idéalement discuter et comprendre les challenges scientifiques et industriels qui tirent aujourd'hui par le haut la simulation numérique.

Les cursus de formation correspondant à ces objectifs sont actuellement très peu nombreux, peu visibles et assez peu valorisants pour des étudiants car difficiles à situer par rapport à des cursus plus établis et mono disciplinaires. On trouvera en particulier sur le site du Groupe Calcul sous la rubrique « Formations » (<http://calcul.math.cnrs.fr/spip.php?rubrique10>) un état des lieux (partiel) des cursus de formation initiale (niveau LMD et Ecole d'Ingénieurs) qui montre bien qu'il y a beaucoup de travail à faire ! À noter que la proximité d'équipements de calcul parallèle est aussi importante pour la formation car les étudiants doivent mener à bien des mises en œuvre informatique de qualité pour acquérir une vraie compétence ; hormis quelques équipements spécifiques, par exemple dans certaines Ecoles d'Ingénieurs, les méso centres en général présents sur les sites universitaires doivent jouer ce rôle important de soutien logistique.

Au niveau de la formation avancée pour les chercheurs (souvent plutôt issus de disciplines applicatives) et qui souhaitent acquérir des compétences dans le domaine de la simulation numérique et du HPC, les initiatives déjà en place dans les centres de calcul nationaux du GENCI et dans les méso centres, au titre des écoles thématiques CEA-EDF-INRIA et du CNRS, ainsi qu'au niveau international (PRACE) doivent clairement être encouragées et soutenues. Le site du Groupe Calcul indiqué plus haut donne des pointeurs vers ces initiatives. A noter que la Maison de la Simulation mise en place à l'initiative du CEA, du CNRS et de l'INRIA sera aussi en charge d'animer des cycles de formations avancées thématiques qui s'adresseront aux chercheurs.

Enfin, il faut s'interroger sur le problème du transfert de compétences par la recherche

vers le monde industriel utilisateur en R&D de la simulation numérique et vers les PME innovantes. Un certain nombre d'actions de ce type sont en cours en particulier à l'INRIA (via des partenariats stratégiques et en collaboration avec GENCI pour les PME).

Pour conclure, on pourra se rapporter au compte-rendu de l'atelier 4 « les métiers du calcul numérique : formation, recherche et débouchés » du Colloque « Penser Petaflops » qui a donné ses conclusions fin 2008 et qui dresse un panorama précis des points indiqués dans cette section¹²

5.2 *Le calcul intensif et la DGA*

La DGA n'a pas souhaité s'exprimer devant le CSCI mais la défense est une utilisatrice majeure de calculs intensifs pour les problèmes de sécurité (cryptologie) et pour de nombreux domaines à haute technologie ; nous citons ici les thèmes déclarés sur <http://www.ixarm.com/Domaines-scientifiques> :

- Informatique, calculateurs et réseaux
- Traitement de l'information à hautes performances
- Calcul des structures, fatigue
- Écoulements fluides, contrôle et signature d'écoulements
- Écoulements réactifs : combustion, explosions, incendies, ...
- Couplages ondes et systèmes matériels
- Mesure et traitement, retournement temporel
- Génération, conversion et stockage d'énergie
- Techniques d'imagerie (haute résolution, hyperspectrale,...) et spectroscopie
- Manipulation d'atomes par laser (horloges atomiques, senseurs inertiels, ...)
- Comportement en conditions extrêmes (mécanique, thermique)
- Propriétés fonctionnelles spécifiques (chimiques, électromagnétiques, ...)
- Environnement urbain
- Changement climatique et développement durable, modèle fin en météo

5.3 *Le calcul intensif dans l'industrie*

Les besoins et attentes des industriels sont fortement dépendants bien sûr, de leur taille (leur capacité à intégrer le calcul intensif), de leur domaine d'activité (domaines où le calcul intensif est indispensable) mais aussi de leur stratégie en termes de logiciels.

En effet, certaines entreprises du secteur de l'énergie ou certains équipementiers, ont basé leur stratégie en matière de calcul intensif sur des applicatifs/logiciels développés en interne, s'appuyant sur des logiciels libres (Open source) et/ou des collaborations avec des instituts de recherche (exemples d'EDF, de Michelin, de TOTAL et Hutchinson, etc.). Dans la plupart des cas, cette démarche est justifiée entre autres pour capitaliser leur expertise, conserver une compétitivité et une différenciation dans leurs domaines d'activités. Celles-ci sont généralement déjà très impliquées dans le calcul intensif et s'équipent de leur propre puissance de calcul. *Dans ce cas là, l'accès à des machines Tier-0 leur est essentiel* afin de préparer l'adaptation de leurs applicatifs aux architectures

¹² Voir par exemple <http://calcul.math.cnrs.fr/Documents/DocOfficiels/Atelier4-Formation-Rapport-08.11.13.pdf>

massivement parallèles à l'état de l'art et de bénéficier des avancées dans ce domaine émanant du monde de la recherche, (adaptation des solveurs, algorithmiques, optimisation de codes, modélisation physique en rupture, etc.).

D'autres, comme dans le secteur automobile, ont choisi de ne pas développer de logiciels en interne et ont standardisé l'utilisation de logiciels du commerce. Elles sont donc fortement dépendantes des évolutions de ces logiciels qui ne sont pas encore réellement adaptés au calcul massivement parallèle et font face généralement à un problème de coût de déploiement. *Pour ces industriels, l'accès à l'infrastructure HPC doit s'accompagner soit de la mise à disposition de logiciels équivalents provenant du monde de la recherche soit – au moins pour les Sociétés françaises - d'une incitation forte à destination des éditeurs de logiciels à porter leurs environnements de simulation sur les architectures parallèles au meilleur niveau mondial.*

Les besoins en calculs de TOTAL dans le domaine de l'exploration et de la production sont de plus en plus importants. En effet le contexte pétrolier toujours de plus en plus concurrentiel et les structures géologiques explorées de plus en plus complexes imposent à l'industrie pétrolière à constamment innover en technologies d'exploration. Parmi ces technologies l'imagerie sismique et le calcul de réservoir sont de plus en plus utilisés.

Dans le secteur de l'aéronautique et de l'espace, les entreprises ont souvent choisi une approche mixte entre des codes internes et des codes du commerce suivant le domaine concerné. Ainsi Dassault-Aviation et EADS s'attachent à développer en interne ou en s'appuyant sur des grands organismes de recherche comme l'ONERA, le CERFACS ou le DLR des codes de calcul pour leurs cœurs de métiers (mécanique des fluides, calcul des structures, électromagnétisme) et recourent aux logiciels du commerce en partenariat avec les éditeurs comme DS-Simulia, MSC, Samtech, etc. Dans tous les cas, ces codes ont été mis dans un environnement industriel en y associant des pré-traitements (CAO, maillage) et des post-traitements avec une attention particulière pour la validation de ces outils et leur gestion en configuration. La rationalisation des investissements est en effet un souci constant. Dans ce cadre, Airbus cherche à rapprocher les deux filières de codes utilisées en mécanique des fluides l'une développée par le DLR (maillages non structurés) et l'autre développée par l'ONERA et le CERFACS (maillages structurés par blocs) afin de dégager des synergies. Quelle que soit la structure d'accueil de ces deux codes, il est essentiel que des développements logiciels continuent à être faits en France afin de soutenir les compétences dans le domaine de la modélisation physique, de l'analyse numérique, de l'algorithmique et de l'informatique.

Au niveau des applications, la mécanique des fluides constitue le domaine applicatif le plus consommateur de ressources suivi par le calcul de structures et les calculs d'électromagnétisme (furtivité, compatibilité électromagnétique) ou d'acoustique. Ces calculs interviennent tout au long de la vie des projets avec des niveaux de modélisation adaptés, en phase d'avant-projet avec de nombreux calculs multidisciplinaires pour optimiser les formes ou l'architecture, en phase de développement et de qualification avec des calculs plus fins sur des géométries réelles ou même pour la maintenance afin de permettre des investigations particulières.

L'ONERA s'est doté en octobre 2009 d'une machine parallèle superscalaire d'une puissance de 34 Tflops, qui offre une puissance dix fois supérieure à son prédécesseur et se place au 181^{ème} rang mondial.

- En parallèle, l'ONERA a bénéficié de l'éligibilité des EPICs aux appels d'offre GENCI pour proposer 4 projets de mécanique des fluides, qui ont été retenus pour une affectation globale de l'ordre de 3 millions d'heures CPU.
- L'utilisation des machines de très haute capacité souligne qu'il faut pouvoir disposer également de moyens adaptés de pré- et post-traitement virtualisé à proximité immédiate des calculateurs.
- Dans le futur, l'ONERA est intéressé, notamment pour ses grands codes aérodynamiques et multiphysiques elsA et Cedre, déjà utilisés par de nombreux partenaires, à accéder à de très gros moyens HPC comme c'est le cas avec GENCI ou également dans le cadre de l'Opération PROTOTYPE de PRACE (actions de type "coup de poing" pour accès à de très grosses machines dans divers centres HPC européens).

Il est intéressant de souligner que le CCRT (Centre de Calcul Recherche et Technologie) a intéressé en 2009 de nouveaux organismes (AREVA, INERIS) qui se sont portés candidats pour devenir membres à part entière à côté du CEA, d'EDF, de SNECMA, de Turboméca, d'ASTRIUM, et du CERFACS. L'ONERA s'est aussi doté en 2009 d'une machine massivement parallèle SGI ICE 8200 EX avec 384 nœuds de calcul (et un total de 3072 cœurs) avec une puissance de 34,4 Tflops crête. *De façon générale, plusieurs industriels ont une politique volontariste d'équipement en HPC avec une croissance forte de la puissance de calcul qui double environ tous les ans (Airbus, Eurocopter, Dassault Aviation, ...)*

Enfin, un programme technologique européen comparable au programme INCITE du DoE aux Etats-Unis serait un outil efficace afin de populariser l'infrastructure PRACE auprès des industriels et favoriserait les collaborations industrie/monde académique dans ce domaine.

Quelques besoins répertoriés :

Dans de nombreux domaines, les industriels sont en attente de puissance de calcul pétaflopique voire exaflopique mais aussi du savoir-faire en programmation pour pouvoir exploiter ces nouvelles architectures de supercalculateurs dotés de millions de cœurs parfois hétérogènes. Un bon couplage entre processeurs/architecture de machine et algorithme/application est alors indispensable pour relever un certain nombre de défis. Nous donnons ci-dessous quelques exemples :

Pour les industries pétrolières et gazières: résoudre des problèmes 3D de propagations d'ondes avec des maillages de plus en plus fins pour améliorer les prédictions de détection de gisement pétrolier, et modéliser les réservoirs à des échelles également de plus en plus fines pour garantir une meilleure exploitation de ces derniers.

Pour les centrales nucléaires, une prise en compte plus fidèle de la réalité industrielle des unités de production permet, par une estimation moins pénalisante des marges, leur exploitation plus efficace. A titre d'exemple, les calculs fins d'écoulement d'eau dans les cuves nucléaires, indispensables pour optimiser l'utilisation du combustible nucléaire, le fonctionnement des centrales et leur durée de vie nécessitent la représentation de détails géométriques de l'ordre du millimètre sur une zone étendue de la cuve soit plusieurs dizaines de milliards de points de calcul, là où précédemment on n'en calculait au maximum que quelques dizaines de millions. Cette tendance s'accroît avec la montée en puissance des études multi-physiques où l'on calcule simultanément l'ensemble des facteurs d'influence, en particulier les études d'interaction entre les écoulements fluides et la réponse mécanique des structures.

Le calcul massivement parallèle ouvre également des perspectives nouvelles dans le domaine de l'optimisation de la production d'électricité qui a pour but le calcul de stratégies de gestion des stocks (réserves hydrauliques, cycles de fonctionnement des centrales nucléaires) à des horizons temporels allant de l'heure à plusieurs mois tout en garantissant à tout moment l'équilibre production/consommation. En effet, le niveau d'optimisation est directement limité par la puissance de calcul disponible. La puissance des nouveaux supercalculateurs permet donc d'envisager une optimisation prenant en compte beaucoup plus finement la réalité du problème opérationnel (aléas de production et de consommation, finesse de représentation des stocks, ...).

Enfin, dans le domaine hydraulique de nouveaux codes de simulation, représentant les fluides sous la forme de milliards de particules permettent désormais de calculer les écoulements d'eau à surface libre très complexes; une application est en cours pour la re-conception des évacuateurs de crue des ouvrages hydrauliques suite aux réévaluations des débits milléniaux. Ces techniques permettront de limiter le recours aux maquettes traditionnelles, longues à construire, coûteuses et offriront la capacité à réaliser l'évaluation paramétrique des solutions.

Dans le secteur de l'automobile et de l'aéronautique, les challenges du calcul intensif sont multiples. Tout d'abord la modélisation de systèmes complexes dont l'objectif est

de simuler le composant ou le sous-système dans son environnement final, impliquant des modèles de taille de plus en plus importante et des problèmes multi-physiques. (Exemple de l'acoustique interne d'un habitacle d'avion). De plus, dans le cadre de ses innovations, Hutchinson par exemple, formule des alliages (Thermoplastique-thermoplastiques, thermoplastiques-élastomères et autres) donnant ainsi naissance à de nouveaux matériaux différenciateurs. La modélisation multi-échelle se rend alors indispensable pour prendre en compte correctement dans les simulations, ces structures composites de plus en plus complexes. Enfin, les techniques de plans d'expériences numériques, d'optimisation ou encore de calcul fiabilistes se généraliseront pour garantir des conceptions robustes dans un environnement très compétitif.

Bien entendu, pour ces trois domaines, le calcul intensif prend alors toute sa dimension, nécessitant d'une part une puissance de calcul conséquente (mais tout de même bien moindre que celle requise dans les domaines de l'énergie par exemple), mais également une évolution/adaptation importante des applications existantes. Et c'est pour cela que cette démarche doit impérativement s'accompagner d'un effort de portage et de modification des outils logiciels existants.

Enfin dans de le secteur de l'aéronautique et de l'espace, la réduction des cycles de développement, l'adaptation aux besoins changeants du marché et l'introduction de matériaux toujours plus performants, nécessitent un recours plus important à la simulation et au calcul intensif. L'accès à des machines Tier-0, dans un premier temps d'une puissance de quelques Pflops, permettra de préparer les changements radicaux dont l'industrie a besoin pour la conception et le développement de produits innovants et concurrentiels. La simulation multi-échelle, l'optimisation multi-niveaux et l'analyse robuste sont essentielles pour la certification des grandes structures composites. La simulation des écoulements instationnaires, la réalisation de plans d'expériences numériques adaptés aux écoulements et comportements de structures, non-linéaires, permettront l'utilisation intensive des techniques d'optimisation et l'émergence de l'optimisation multi-disciplinaire et de la réduction de marges par la gestion des incertitudes.

Dans une perspective d'avenir, les besoins en calcul intensif de la mécanique des fluides, liés à la simulation de la turbulence à l'échelle industrielle, dépassent les capacités des machines présentes et du futur immédiat.

Il s'avère que les phénomènes de combustion et l'aérodynamique avancée demandent des simulations, soit au niveau des Grandes Échelles (Large Eddy Simulation – LES), en attendant d'être en mesure de traiter des simulations directes (Direct Numerical Simulation – DNS) des fluctuations turbulentes.

Ceci requiert une stratégie proactive de progression des capacités HPC, à la disposition des chercheurs et de l'industrie dans ces domaines critiques.

Aider les industriels souhaitant tester le parallélisme massif en facilitant l'accès aux machines de grandes tailles par un programme technologique comparable au programme INCITE du DoE aux ÉTATS-UNIS. Il faudra également développer l'accès au calcul intensif pour les PME afin d'accroître leur compétitivité. Cette initiative impliquera GENCI, des pôles de compétitivité, et des structures comme Teratec et les mésocentres¹³.

Dans le cadre du Plan de développement numérique, France numérique 2012 (chapitre 2.9 « Accélérer le développement et l'usage de la simulation numérique ») plusieurs actions concernent directement GENCI dont notamment l'action n°71 :

« Elargir le champ d'action du GENCI à d'autres organismes publics (INRIA) et dans le domaine de l'industrie, notamment à des PME innovantes ».

A ce titre l'INRIA, GENCI et RENATER travaillent à l'élaboration d'un plan coordonné visant à faciliter l'accès au calcul intensif pour les PME afin de pouvoir accroître leur compétitivité.

5.4 Le projet PRACE : Bilan 2009

Dans sa deuxième et dernière année le projet européen PRACE aura permis notamment les réalisations suivantes

- Les statuts de la structure juridique PRACE ont été définis. Elle accueillera les 4 à 6 calculateurs qui seront mis à partir de mi-21010 à la disposition des partenaires de PRACE
- Dans le cadre des activités de dissémination et de formation du projet l'organisation de 5 « code porting workshops », dans la continuité des écoles d'été et d'hiver organisées par PRACE en 2008, ont permis des actions de formation sur les architectures avancées (hybride, massivement parallèle) et les techniques d'optimisation de code. PRACE s'est aussi associé au CEA, GENCI, INTEL, Total, INRIA et BULL pour participer à la rédaction d'un numéro spécial de La Recherche dédié au calcul à haute performance et largement diffusé à la fois dans sa version française et anglaise. Dans ce numéro plus « européen » que les numéros spéciaux précédents des scientifiques européens ont apporté un témoignage d'utilisation du HPC dans des domaines comme la climatologie, la bioinformatique, le traitement de l'eau, la fusion nucléaire ou le projet PRACE par lui-même. PRACE s'est aussi associé au projet DEISA pour organiser un séminaire scientifique qui a réuni en mai 2009 plus de 200 personnes à Amsterdam et a permis à des scientifiques de pouvoir exposer des résultats significatifs d'utilisation du calcul à haute performance et à différents représentants européens, américains, japonais ou australiens d'exposer leur vision sur le déploiement de grandes infrastructures de calcul. Enfin GENCI et son partenaire allemand de Juelich ont organisé en septembre 2009 à Toulouse, avec le support d'Airbus, du Grand Toulouse et de la Région Midi Pyrénées, le second séminaire industriel PRACE. Ce séminaire a rassemblé plus d'une centaine de participants issus de 21 pays et représentant plus de 57 sociétés. très majoritairement

¹³ Ce dernier point figure notamment dans le « rapport Besson » (France Numérique 2012) où l'action numéro 71 vise à élargir le champ d'action de GENCI en ouvrant les centres nationaux à la communauté industrielle et notamment les PME innovantes.

européennes. Il a permis à PRACE de présenter son avancement et de discuter avec les industriels de leur attentes et besoins quant à l'accès aux machines de Tier0 afin de pouvoir accroître leur compétitivité par la simulation numérique. Coté français à noter une forte affluence avec à la fois des grands groupes mais aussi des PME et des éditeurs de logiciels, tous issus de domaines industriels très variés allant de l'aéronautique à la finance en passant par l'énergie, les biotechnologies, l'automobile ou la chimie.

- Le projet a aussi mis en place toute la couche logicielle d'interconnexion avec les futurs sites Tier0 et déployé des prototypes de systèmes pétaflopiques d'architectures variées qui en complément des travaux menés en interne par le projet ont aussi été ouverts aux utilisateurs européens par le biais de 4 appels à candidature en 2009. Des séminaires technologiques en interne mais aussi en externe autour des infrastructures des centres de calcul ont été organisés par le projet.
- Des travaux visant à la caractérisation des applications scientifiques ont permis de mettre en place un benchmark PRACE regroupant 22 applications scientifiques utilisés par les centres européens et couvrant une grande partie des domaines scientifiques potentiellement utilisateurs des machines de Tier0 européennes. Il est intéressant de noter que sur les 22 applications retenues, 5 sont d'origine française dont 3 industrielles (AVBP du CERFACS/IFP, Code Saturne d'EDF et TRIPOLI4 du CEA), ce qui place la France dans les premiers contributeurs européens. En parallèle de ce benchmark des activités d'optimisation autour de ces codes ont été réalisées par le projet.
- Enfin dans le domaine de la veille technologique autour des nouvelles architectures matérielles et logicielles, des petits prototypes ont été mis en place : des accélérateurs de calcul (GPUs au CEA, cartes Clearspeed dans un prototype commun entre le CINES et le centre allemand LRZ, FPGA à EPCC, CELL pour la QCD à Juelich), de nouveaux modèles de programmation PGAS, des systèmes pour une baisse de la consommation électrique et l'amélioration des entrées-sorties.

Le CSCI souhaite que la France ait le rôle qui lui revient dans le programme PRACE. Pour cela elle doit être présente dans les comités scientifiques de PRACE mais ce n'est pas suffisant : il faut aussi que la communauté scientifique française prenne place avec ambition dans le projet pour que les recherches soumises soient au meilleur niveau. PRACE sera opérationnel en juin 2010 ; Il faudrait donc accroître rapidement les actions de communication sur PRACE (forum ORAP, journaux internes des organismes de recherche et des universités, CT de GENCI...).

5.5 Les grilles de calcul

Les grilles de calcul sont des structures distribuées de calcul et de stockage qui permettent de mettre en commun des ressources informatiques hétérogènes. Il existe deux types de grilles, les unes orientées vers la production et les autres vers la recherche dans le domaine des technologies de l'information. De manière à pouvoir fonctionner de manière cohérente, les ressources attachées aux grilles reposent essentiellement sur un système d'information et un intergiciel. Idéalement, une grille peut être vue comme un ordinateur unique sur lequel l'utilisateur soumet des tâches sans avoir à se soucier de la localisation des ressources.

Les grilles dépendent de manière cruciale du réseau sous-jacent. En France l'infrastructure réseau offerte par RENATER et les interconnexions vers le réseau européen GÉANT sont d'excellente qualité et permettent aux projets scientifiques de tirer tout le parti possible des architectures de grilles.

En 2010, l'Infrastructure Nationale de Grilles, la NGI France Grilles, se structure en un GIS dont l'Institut des Grilles du CNRS assurera le fonctionnement. Le NGI France Grilles représente la France dans sa participation au projet européen EGI (European Grid Initiative, qui poursuit l'œuvre du projet EGEE). En 2010 et 2011, le CSCI étudiera les synergies entre les grilles et le HPC, cf 8.5) avec pour objectifs :

- *Renforcer les liens entre les communautés des grilles de production et du HPC afin d'exploiter au mieux les complémentarités.*
- *Renforcer et favoriser les liens entre les grilles de production et les grilles de recherche*
- *Renforcer les liens entre la communauté des grilles et celle du calcul intensif afin de mettre en place des modèles de gestion des données performants et pouvant aisément passer à l'échelle.*

5.6 La Maison de la Simulation

La Maison de la Simulation sera créée sous la forme d'une USR-CNRS/CEA/INRIA (Unité de Service et de Recherche) temporairement dans les locaux du CNRS adjacents à l'IDRIS (Orsay) ainsi que dans un bâtiment du CEA à Orme les Merisiers. Ces installations comprennent en plus des bureaux, une salle de cours, une salle de visualisation et un multiprocesseur de 250 cœurs. Chaque organisme a nommé un responsable et il est prévu de démarrer en Septembre 2010 avec 3 équipes de recherche, des ingénieurs et des postes d'accueil, ceci afin d'être pleinement opérationnel en 2013 lorsque les bâtiments de la maison de la simulation du plan campus du plateau de Saclay (prévus pour 100 personnes) seront terminés et que PRACE sera aussi pleinement opérationnel. Il est aussi prévu de monter une activité d'expertise et d'aide au développement applicatif de haut niveau ainsi que des enseignements en partenariat, notamment, avec le master Modélisation et Simulation (INSTN, ENSTA, UVSQ, Ecole Centrale, ENS Cachan, Paris 7 ; D. Bouche).

Recommandations

Le CSCI souhaiterait que cette institution dispose de plus de ressources, en particulier des chercheurs affectés pour lui permettre d'être opérationnel dès 2011 et de s'appuyer sur les recommandations des rapports du CSCI pour les choix scientifiques. Cette institution est essentielle à la préparation de communauté scientifique à l'exascale.

5.7 Le calcul intensif au CEA

L'année 2009 est avant tout pour le complexe de calcul du CEA une année de préparation aux grands événements prévus pour 2010 :

- mise en service opérationnel de TERA100 première machine dépassant le Petaflops conçue et réalisée en Europe, après un effort sans précédent de R&D menée en commun par BULL et le CEA/DAM,
- livraison du TGCC (Très Grand Centre de Calcul),
- commande par GENCI, à la suite d'un appel d'offres mené en commun par GENCI et le CEA, de la première machine pétaflopique pour la Recherche,
- mise en place des laboratoires BULL/CEA et INTEL/CEA/GENCI/UVSQ,
- lancement de la Maison de la Simulation.

La réalisation de ces objectifs, conformément aux plannings annoncés, confortera la place du Complexe de Calcul Scientifique du CEA comme le premier en Europe et l'un des tout premiers au monde. Elle démontre la volonté du CEA d'être un acteur majeur dans ce domaine stratégique.

En complément à ces réalisations détaillées ci-dessous, l'effort de développement des codes massivement parallèles s'est poursuivi dans tous les domaines : fusion climat, nanomatériaux, génomique, physique nucléaire, énergie nucléaire et astrophysique.

Le projet TERA100 et ses retombées

Le partenariat avec BULL, annoncé en juillet 2008 pour la R&D nécessaire au développement d'une machine de production de plus d'un petaflop/s, a conduit à la réalisation d'un démonstrateur de 50 Téraflop/s installé avec succès en juin 2009. Dès la fin de l'année, BULL annonçait le lancement de sa nouvelle gamme de serveurs BULLX issue de cette R&D menée en commun. Cette nouvelle architecture a reçu, lors de SUPERCOMPUTING 2009 à Portland, le prix de meilleure architecture de l'année 2009 décerné par HPCWIRE le plus grand magazine du domaine et a permis à BULL d'enregistrer d'importantes commandes.

Le projet Très Grand Centre de Calcul

L'infrastructure du TGCC sera livrée comme prévue à la fin de l'année 2010. Avec ses 2600 m² de salles machines et une arrivée électrique de 60 MW, cette infrastructure de recherche pourra accueillir en 2011 la première machine dépassant le Petaflops du programme européen PRACE puis le Centre de Calcul Recherche et Technologie du CEA (CCRT).



Le démonstrateur TERA100

CEA/DAM-île de France

Le Centre de Calcul Recherche et Technologie

Avec l'installation en 2009 du calculateur Titane, fourni par BULL et financé par GENCI, le CCRT accroît considérablement sa puissance de calcul et propose à ses utilisateurs une architecture innovante basée sur le couplage de processeurs classiques avec des processeurs graphiques. Ce nouveau concept de calculateur, dit hybride, permet de décupler la performance de certaines applications bien adaptées mais aussi de préparer l'avenir de l'utilisation de processeurs de plus en plus parallèles dont les accélérateurs graphiques pourraient être les précurseurs. C'est la première configuration hybride aussi importante déployée en Europe. Pour mémoire, ce calculateur dispose de 1068 nœuds de calculs à base de processeurs Intel Nehalem (2.93 GHz) et de 48 serveurs Nvidia de type S1070. Il offre une performance crête de 103 Tflops sur la partie scalaire et de 192 Tflops, simple précision, sur la partie GPU.

L'ensemble occupe une surface inférieure à 100 m² et est refroidi par une technologie innovante de portes à eau développée par Bull.

Titane a été ouvert aux utilisateurs de la recherche au second semestre 2009, lors de la deuxième session de l'appel à projets « DARI ».

Par ailleurs, les 3 nœuds vectoriels NEC- SX9 mis à la disposition de la communauté de la climatologie en Juin 2009 leur permettent de tenir les engagements de la France dans le programme GIEC. L'augmentation du volume des données associées à ces simulations relance la problématique de la gestion des très gros volumes de données. Les

compétences reconnues du CEA/DAM dans ce domaine permettront de construire l'architecture « orientée données » des futures évolutions du centre de calcul.

Enfin la mise en service en avril 2009 d'un cluster de dépouillement, composé de 32 nœuds graphiques à grosse mémoire, fournit aux partenaires du CCRT, une solution pour le traitement graphique et la visualisation à distance de leurs données.

La puissance de calcul crête de l'ensemble des machines du CCRT atteint 350 Tflops.

Grands Challenges scientifiques

La période de mise en production d'une machine, en général entre 3 à 6 mois après la réception du calculateur, est particulièrement intéressante pour les chercheurs, puisqu'ils ont l'occasion – unique – de pouvoir accéder à des ressources de calculs pouvant aller jusqu'au calculateur entier, permettant la réalisation de simulations de très grandes tailles, appelées « grands challenges ». C'est ainsi que durant l'été 2009, seize grands challenges scientifiques ont été réalisés sur le nouveau calculateur Titane du CCRT.

Ils ont déjà permis la réalisation d'avancées majeures dans des domaines scientifiques à fort enjeu sociétal. En particulier, il est important de noter la présence de deux grands challenges des sciences du vivant, le premier concerne le traitement du cancer et le second la classification des protéines. Cela traduit une implication forte et récente de ces disciplines dans le calcul et la simulation numérique.

Les autres grands challenges intéressent des thématiques très variées allant de la simulation de l'utilisation d'impulsions laser ultra intenses, aux calculs sismiques pour appréhender les impacts des tremblements de terre au niveau local sur la construction de bâtiments et au niveau plus global sur l'évolution d'un continent, en passant par les modélisations de générateurs des centrales nucléaires de nouvelle génération, l'astrophysique et la physique des matériaux...

Enfin les trois grands challenges qui se sont déroulés sur la partition hybride de Titane ont permis de prouver l'intérêt et le potentiel de ce type d'architectures pour un nombre croissant d'applications scientifiques. Une dizaine de projets scientifiques ont d'ailleurs demandé et obtenu en 2010 des heures de calcul sur cet environnement GPU.

Journée scientifique CCRT

Les résultats de ces grands challenges GENCI-CCRT ont été présentés lors de la journée CCRT du 28 septembre 2009. Organisée sur le site CEA de Bruyères-le-Châtel, elle a rassemblé plus de cent cinquante participants issus du monde de la recherche et de l'industrie. Une revue, regroupant ces grands challenges a été réalisée. Elle est disponible sur le site www-ccrt.cea.fr.

Nouveaux partenaires

Deux nouveaux partenaires ont rejoint le CCRT début 2010, il s'agit d'INERIS et d'AREVA.

Le CCRT aborde l'année 2010 comme une année de transition, entre deux périodes de partenariats, propice à l'arrivée de nouveaux partenaires industriels. En effet, le CEA souhaite de cette façon consolider son rôle légitime de lien entre recherche et industrie. Le CCRT pourrait être, pour les industriels, un tremplin permettant un accès régulé à de très gros moyens de calculs.

Les laboratoires

Le Laboratoire « Externe Computing » créé initialement dans le cadre du contrat TERA100 a regroupé en 2009 plus de 100 ingénieurs et chercheurs sur les sites BULL des Clayes sous Bois, d'Echirrolles et sur le site Ter@tec. Avec pour objectif de reconquérir et pérenniser la capacité de concevoir et réaliser de grandes infrastructures de calcul en Europe, les effectifs du laboratoire devraient atteindre 200 à 300 ingénieurs et chercheurs en 2011, pour lesquels BULL a loué les surfaces nécessaires dans le futur Campus Ter@tec.

L'accord entre INTEL, CEA, GENCI et l'UVSQ a été signé en novembre 2009 permettant le démarrage du laboratoire sous la direction du Professeur William Jalby en 2010, dans des locaux provisoires à Saint Quentin. Le laboratoire, dont le financement est garanti pour les 5 prochaines années a pour objectif de développer certaines des technologies nécessaires à l'atteinte de l'exaflop/s.

Les projets en collaboration avec l'industrie

L'année 2009 a vu l'aboutissement du projet POPS (Peta Opérations Par Secondes), un des projets du pôle de compétitivité mondial SYSTEM@TIC PARIS-REGION piloté par Bull et mené en collaboration avec le CEA ainsi qu'avec plus d'une dizaine de partenaires industriels ou laboratoires de recherche.

Il s'agissait d'accompagner Bull dans la conception de systèmes capables d'atteindre le million de milliards d'opérations flottantes par seconde (Pflops) pour un large spectre d'utilisation afin de démocratiser l'accès à de tels moyens.

Des applications pilotes ont été partie intégrante du projet pour incorporer en amont les exigences futures des utilisateurs ainsi que les contraintes d'économie d'énergie. Ces applications ont la capacité d'utiliser la puissance parallèle apportée par les dizaines de milliers de processeurs qui constituent la base de tels supercalculateurs.

Web sémantique, très grandes bases de données pour les sciences du vivant, aide à la décision dans le domaine automobile, aide à la conception de médicaments, etc. Tous les domaines ou presque sont concernés, de l'industrie à la recherche fondamentale, de l'aéronautique à la finance et aux sciences de la vie, de la simulation numérique à l'optimisation.

L'ouverture internationale

L'année 2009 a été très importante pour l'ouverture internationale de TER@TEC. Au niveau Européen, l'association TER@TEC a poursuivi ses contacts avec les acteurs européens et de nombreux échanges ont eu lieu avec les responsables concernés de la Commission, qui ont participé très activement au Forum TER@TEC 2009. En Allemagne,

l'association TER@TEC a défini un partenariat avec le Centre de Recherches de Jülich et l'Université d'Aix-la-Chapelle, qui va permettre de réaliser progressivement des projets en coopération dans différents domaines du HPC ainsi que dans la formation (avec le futur Master de Calcul intensif qui sera implanté sur le Campus TER@TEC). Des discussions importantes ont eu lieu également avec les Fraunhofer Institutes (Pr. U. Trottenberg). Par ailleurs, les contacts se sont poursuivis avec le projet Européen PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe). Dans ce cadre, l'association TER@TEC est membre associée de STRATOS (PRACE advisory group for strategic technologies), groupe créé à l'initiative de PRACE en décembre 2008, et qui s'est réuni en juillet 2009 dans le cadre du Forum TER@TEC.

Avec les Etats-Unis, plusieurs opérations sont en cours. L'association TER@TEC et l'Office of Science du DOE (Département de l'Energie, en charge de tous les projets HPC aux Etats-Unis) ont défini des thèmes de coopération qui permettront d'établir des liens privilégiés entre les projets de recherche et les laboratoires installés à TER@TEC et les National Labs concernés de l'Office of Science (Argonne, Berkeley et Oak Ridge), ainsi que des échanges dans le domaine de la formation. L'association TER@TEC a également été associée au programme IESP (International Exascale Software Project), mené à l'initiative du DOE, et a été chargé d'organiser en juin 2009 à SUPELEC la conférence européenne de ce grand programme international destiné à fédérer les efforts pour l'atteinte des niveaux de puissance exaflopique en 2018-2020.

Forum TERATEC 2009

Le Forum TER@TEC 2009, placé sous le thème du calcul haute performance au service de la compétitivité et l'innovation, en réunissant plus de 600 personnes les 30 juin et 1er juillet à SUPELEC, a confirmé le dynamisme économique et scientifique de ce secteur autour des grands enjeux industriels et sociétaux et le rôle majeur que joue désormais la France dans ce domaine.

5.8 Actions et stratégie du CNRS en calcul intensif

Comme nous l'avons dit plus haut, le CNRS est fortement impliqué dans GENCI, dans la création de la Maison de la Simulation ainsi que dans les grilles de calcul. La nouvelle structure décentralisée du CNRS atomise l'effort sur chaque institut. En mathématiques (INSMI) le CNRS a créé le GdR « Calcul¹⁴ », dirigé par Violaine Louvet, dont l'objectif est de rassembler les chercheurs et utilisateurs du calcul. Un « réseau métier » Calcul¹⁵ a été créé pour regrouper tous les « ingénieurs calcul » du CNRS. GENCI et la CPU se sont associés au groupe Calcul¹⁶ pour aider à la structuration des mésocentres (journées mésocentres à l'IHP) et à la valorisation des logiciels de la recherche (RELIER¹⁷ et PLUME¹⁸). Le groupe Calcul est à l'initiative de la création d'ECOINFO¹⁹ dirigé par Françoise Berthoud (qui s'intéresse aux aspects « green Computing »)

¹⁴ <http://calcul.math.cnrs.fr/spip.php?rubrique42>

¹⁵ <http://calcul.math.cnrs.fr/spip.php?rubrique45>

¹⁶ <http://calcul.math.cnrs.fr/>

¹⁷ <http://www.projet-plume.org/relier>

¹⁸ <http://www.projet-plume.org/>

¹⁹ <http://www.ecoinfo.cnrs.fr/>

5.9 Actions et stratégie de l'INRIA sur le calcul intensif

L'INRIA est partenaire de GENCI depuis 2009. Plusieurs des priorités du plan stratégique 2008–2012 concernent maintenant le calcul intensif, qui est d'ailleurs l'un des thèmes de recherche historiques de l'INRIA. Les deux programmes « Simulation et visualisation scientifique pour l'environnement » et « Simulation des plasmas de fusion pour le programme ITER », reposent de façon essentielle sur le calcul haute performance. Par ailleurs les priorités de la direction scientifique « Programmer, communiquer, et interagir » concernent le calcul intensif, par des nouveaux langages, des intergiciels performants, et la visualisation de grands volumes de données.

En ce qui concerne le développement d'outils, les équipes s'intéressent entre autres à faciliter la programmation des systèmes parallèles, permettre le couplage entre visualisation et simulation, utiliser efficacement les réseaux haute-performance ou la conception d'environnements d'exécution. Au total, près d'une EPI sur 5 a des activités en rapport avec le calcul intensif.

Plusieurs actions importantes ont ponctué l'engagement de l'INRIA. Parmi celles-ci, citons l'Action d'Envergure Nationale [Fusion](#)²⁰ (qui développe des logiciels pour le projet Iter), l'Action coopérative [Green-Net](#)²¹ (pour des systèmes de grande taille capables d'adapter leur consommation électrique aux besoins) et le développement de l'infrastructure Grid'5000 dédiée aux grilles de recherches au travers de l'action de développement [Aladdin](#)²². Des laboratoires communs avec le CERFACS, qui prépare le passage à l'échelle pour les applications qui s'exécuteront sur les architectures de la prochaine génération, et un [laboratoire commun](#)²³ avec le NCSA (dont les premiers projets sont centrés sur les bibliothèques numériques, la tolérance aux pannes et les nouveaux modèles de programmation), ont été créés récemment. L'INRIA participe également au projet « [International Exascale Software Project](#)²⁴ », dont le but est de fédérer les recherches sur les algorithmes et les logiciels capables de répondre aux besoins des applications pour les futurs systèmes exaflopiques.

Les EPI de l'INRIA participent, et sont fréquemment leaders, aux projets de l'ANR dans le domaine du calcul intensif. Près de 2/3 des projets du programme Cosinus comprennent une équipe projet INRIA.

L'INRIA décline également son implication dans le calcul haute performance à travers ses partenariats industriels, et le transfert technologique. Des partenariats stratégiques avec de grandes sociétés (Bull pour la conception d'architectures, EDF et Total pour des défis applicatifs) permettent de trouver « l'échelle pertinente » pour poser les problèmes. Par ailleurs, le transfert de technologies développées dans les équipes-projet de recherche (en général commune avec d'autres partenaires de la recherche publique) est effectué via la création de sociétés issues de l'INRIA (comme Activeeon, Caps-Entreprise, Kerlabs, Scalable Graphics ou Sysfera). Des actions spécifiques sont dédiées aux PME, et l'INRIA en relation avec GENCI et Oseo met en place un programme « HPC

²⁰ http://www-math.u-strasbg.fr/ae_fusion/

²¹ <http://www.ens-lyon.fr/LIP/RESO/Projects/GREEN-NET/>

²² <https://www.grid5000.fr/mediawiki/index.php/Grid5000:Home>

²³ <http://jointlab.ncsa.illinois.edu/>

²⁴ <http://www.exascale.org/>

pour les PME » pour permettre un accès de ces dernières aux grandes infrastructures de calcul.

L'INRIA est partenaire dans la Maison de la Simulation et met en place un groupe permanent, qui pourra coordonner les actions des équipes de manière transverse aux différents domaines pour le calcul intensif.

6 Le Problème du financement de la R&D industrielle

6.1 Évolution du matériel

De nombreuses recherches sont effectuées actuellement pour optimiser les microprocesseurs et les architectures des ordinateurs. Elles sont motivées par la limitation de la puissance dissipée. Les solutions apportées par les fondeurs de processeurs font surtout appel au calcul parallèle, par exemple par l'introduction de processeurs multicœurs ou par l'utilisation d'accélérateurs, conduisant à des architectures hybrides. La conception de superordinateurs exploitant de manière optimale ces processeurs, et les réseaux d'interconnexion qui le relient, est un problème d'ingénierie d'un intérêt économique évident, même si le calcul intensif ne constitue qu'un débouché marginal pour les constructeurs. Par ailleurs, l'augmentation rapide du nombre d'unités de calcul oblige les développeurs d'applications à se confronter à la difficulté de programmer de manière efficace ces nouvelles architectures.

Personne ne sait actuellement ce que seront les processeurs de demain. Toutefois les succès des architectures des processeurs graphiques laissent penser qu'ils seront hétérogènes, auront des mémoires hiérarchiques, et auront plusieurs dizaines de cœurs.

La recherche sur les futurs microprocesseurs est concentrée essentiellement dans les laboratoires de quelques sociétés (Intel, IBM, Nvidia, ATI etc.), qui sont toutes américaines. La France, et en général l'Europe, ne participe pas directement à ces recherches, même si ces sociétés ont ouvert des laboratoires en Europe (comme Intel qui est sur le point d'ouvrir un laboratoire commun avec le CEA, GENCI et l'UVSQ consacré à l'« Exascale Computing ») Cependant le calcul scientifique est un débouché marginal pour les fondeurs. Une des conséquences est que les utilisateurs doivent apprendre à utiliser des architectures, parfois « exotiques », qui n'ont pas réellement été conçues pour les applications de simulation (un exemple est la difficulté de programmer les GPUs).

L'existence de plusieurs types de puces (p. ex. le Cell, les chips Nvidia et les processeurs x86-64 d'Intel et d'AMD) augmente énormément le nombre d'architectures possibles. Or les environnements de programmation ne sont pas encore suffisamment mûrs pour masquer ces différences. Cela s'ajoute à la course au parallélisme de sorte que le nombre total de cœurs dans un superordinateur dépassera bientôt le million à l'horizon 2018 avec l'Exaflops.

Enfin la consommation d'énergie est devenue un facteur majeur pour le succès commercial d'une machine. Les ordinateurs installés récemment au CINES et à l'IDRIS consomment respectivement 608 kW et 315 kW. D'autre part, construire une machine qui atteindra l'Exaflops (10^{18} opérations) avec une consommation inférieure à 20 MW est considéré comme un défi majeur.

Plusieurs problèmes devront aussi être résolus: la gestion des pannes (voir à la section suivante), l'augmentation de la bande passante des bus mémoires (une étude récente du laboratoire Sandia²⁵ montre que le manque de bande passante mémoire est la principale cause de la faible performance des puces multicœurs), la lecture des données dans les architectures hybrides pour le debugging ou plus globalement la gestion des entrées-sorties sur des systèmes de très grande taille.

6.2 Questions sur le logiciel

Les aspects logiciels sont naturellement fondamentaux, et en un sens la programmation des architectures telles que celles évoquées au paragraphe précédent est plus difficile que la construction d'une telle machine (le logiciel est un système complexe, le parallélisme ajoute un degré de complexité, et les contraintes ajoutées par les nouvelles architectures en ajoutent encore un autre).

On peut distinguer plusieurs niveaux de logiciels :

- Système d'exploitation, et services de « bas niveaux » (compilateurs, supports d'exécution,...)
- Logiciels de communication explicites (MPI, OpenMP) ou implicites (langages de type PGAS comme UPC)
- Bibliothèques génériques (Blas, Lapack, PasTiX, MUMPS, Sundials...) ou plus spécialisées (PETSc, TRILINOS).

Le premier niveau est souvent invisible à l'utilisateur. Même si les compilateurs sont des outils à la fois d'une utilisation courante, et d'une grande importance dans le processus de développement, nous n'en ferons plus mention. Il existe un petit nombre de standards de fait (compilateurs d'Intel, ou du Portland Group, en supplément du compilateur open-source gcc).

Les supports d'exécution spécifiques pour le calcul intensif, qui se situent à la frontière entre le système d'exploitation et les environnements de programmation, restent un champ de recherche fécond, comme cela a été indiqué par R. Namyst, lors d'une présentation au CSCI. Des améliorations dans MPI restent possibles, le placement et l'ordonnancement de tâches sur des machines hybrides sont des sujets cruciaux.

La tolérance aux pannes, dans la mesure où le nombre d'unités de calcul augmente de manière spectaculaire, devient également une préoccupation que l'on ne peut plus se permettre d'ignorer. La question du niveau de sa prise en charge (par le système d'exploitation, donc transparente mais sans lien avec l'application, ou au contraire par l'application, donc spécifique, et à la charge du programmeur mais plus optimale) n'est pas résolue.

²⁵ [More chip cores can mean slower supercomputing, Sandia simulation shows](#) (Communiqué de presse, 13 janvier 2009 du laboratoire Sandia).

L'utilisation des architectures hybrides (GPU, Cell,...) par des programmeurs d'applications non-spécialistes est difficile. L'utilisation d'outils de plus haut niveau, comme HMPP²⁶ est probablement un pas dans la bonne direction. Le principe d'isoler des morceaux de code (« codelets » dans la terminologie HMPP) a déjà fait ses preuves, par exemple pour la bibliothèque FFTW, et une variante est également proposée par le groupe de J. Demmel à l'Université de Berkeley. Il permet au programmeur d'exprimer avec un niveau d'abstraction convenable le calcul qu'il souhaite réaliser, tout en l'assurant qu'une implémentation adaptée à l'architecture sera choisie à l'exécution.

Le modèle de communication par échanges de messages, et en particulier sa réalisation dans le standard MPI, s'est imposé depuis 15 ans, et s'est montré robuste depuis. Il devrait toutefois atteindre ses limites sur les architectures hybrides et multi-cœurs, même si l'on constate encore qu'un modèle MPI seul sur ce type de machine reste encore plus efficace qu'un modèle mixte MPI-OpenMP. Même les plus fervents défenseurs de MPI pensent que ce modèle ne pourra pas aller au-delà de la prochaine génération de machines. Pour l'instant, la recherche d'un successeur à MPI est ouverte : les langages comme UPC (ou CAF) ne se sont pas imposés, et l'initiative autour des langages de « haute productivité²⁷ » lancée par la DARPA n'a pas encore abouti. Il est d'ailleurs à noter qu'il s'agit là d'une initiative purement américaine, chaque langage étant issu d'un constructeur (IBM pour X10, Cray pour Chapel et Sun pour Fortress). L'Europe n'est pas présente sur ce front.

La situation est quelque peu meilleure en ce qui concerne les bibliothèques numériques. Certains des projets cités plus haut sont issus de laboratoires français, et sont considérés parmi les meilleurs du domaine. D'ailleurs, ce n'est pas un hasard si les États-Unis ont cherché à associer l'Europe aux efforts de développements *logiciels* pour l'Exaflops.

Nous n'aborderons pas dans ce document les applications, en dépit de leur importance (le but des supercalculateurs est bien de faire tourner des applications), mais simplement parce que ce document se concentre sur ce qui est générique.

La discussion précédente montre bien que la programmation des architectures de classe petaflopique et au-delà, met en jeu l'ensemble de la chaîne logicielle, depuis les aspects systèmes jusqu'aux applications.

6.3 Financements de la R&D

Aux USA, le gouvernement finance la R&D dans le domaine du HPC pour environ 1,3 milliard de dollars par an (hors NASA), par l'intermédiaire de 3 programmes :

- DARPA High Productivity Computing Systems (HPCS)
- NSF avec les directions « Computer & Information Science* Engineering » (CISE) et « Office for CyberInfrastructure » (OCI) pour les infrastructures informatiques de la recherche
- DOE, par le programme ASCR (Advanced Scientific Computing Research),

Ces programmes subventionnent directement ou indirectement les principaux constructeurs américains : IBM (244M\$ en 2009), HP, Cray (250M\$ en 2009), SUN, Dell

²⁶ http://www.caps-entreprise.com/hmpp_fr.html

²⁷ http://crd.lbl.gov/~parry/hpcs_resources.html

et naturellement Intel. Par ailleurs tout achat par un organisme d'état d'un supercalculateur doit être avalisé par le congrès ([High Performance Computing R&D Act](#)), ce qui a pour effet d'inciter à l'achat de matériels américains, d'obliger les acquéreurs à prévoir 5 ans à l'avance le renouvellement de leur matériel, et de rédiger en commun les appels d'offres.

Au Japon, où 3 constructeurs NEC, Fujitsu et Hitachi étaient en compétition (entre temps NEC et Hitachi ont jeté l'éponge avec la crise), le financement est moindre, mais reste impressionnant : 820 M\$ sur 5 ans, pour le seul programme Kei-Soku. Une différence notable avec les programmes américains est la prise en compte dès le départ des aspects logiciels.

En France, et d'ailleurs en Europe, Bull est le seul acteur industriel de taille pour le matériel. En dehors du programme Tera100 du CEA DAM, il ne semble pas exister de programme de soutien à ce secteur, qui comme on l'a vu plus haut, est stratégique.

Le CSCI s'est déjà prononcé, dans son rapport 2008, sur la nécessité de soutenir, dans un cadre européen, les recherches sur le développement des applications des outils logiciels et des architectures des machines pour accompagner les ruptures architecturales qui ont été évoquées au paragraphe sur l'évolution du matériel. Toutefois, la France est dans une situation non-concurrentielle (une seule compagnie : Bull) qui pose un problème, en particulier au regard des règles européennes.

Il existe plusieurs précédents historiques sur des situations similaires :

1. le programme de la DRET sur les développements de calcul pour l'aéronautique dans les années 80 donnait un rôle privilégié aux constructeurs (chacun sur un thème spécifique) dans le choix des sujets de recherche. Ce programme est considéré comme un succès, car il a permis aux constructeurs de se hisser au premier rang pour la simulation, tout en focalisant les sujets de recherches sur les « vrais points durs ».
2. La coopération entre ST/Micro-électronics le LETI et les équipes théoriques sur les matériaux.

Dans les deux cas la clé du succès a été liée à une coordination recherche-application exemplaire. Dans le cas de l'industrie Bull, il suffirait d'identifier un laboratoire capable d'effectuer sous contrat les recherches appliquées que Bull ne souhaite ou ne peut financer que partiellement.

Il n'est pas exagéré de dire que le secteur de la R&D sur le matériel informatique pour les super ordinateurs est sinistré en Europe. Et, comme nous l'avons dit plus haut, ce secteur est devenu stratégique, dans la mesure où un nombre croissant d'industries dépendent de manière cruciale du numérique (voir le rapport « Mathématiques, Calcul Intensif, Numérique »²⁸ de la Stratégie Nationale de Recherche et d'Innovation pour une évaluation chiffrée). C'est en particulier le cas pour la simulation et le calcul intensif, qui nous concerne directement ici : le caractère stratégique du calcul intensif pour permettre à la recherche et à l'industrie française de conserver sa place dans un contexte compétitif n'est plus à démontrer.

²⁸ <http://forums.snri.enseignementsup-recherche.gouv.fr/IMG/pdf/SNRI-NCM-V1-2.pdf>

Dans ces conditions, subventionner ce secteur pour augmenter sa compétitivité est une nécessité, et Bull peut légitimement prétendre à ces subventions. Toutefois, la question de l'accès à un marché suffisant est problématique, et l'équilibre entre les « incitations d'état » et la concurrence commerciale reste à trouver. Il est en effet notable que les aides du gouvernement américain rappelées plus haut s'accompagnent d'une concurrence entre les différents constructeurs, dont on ne peut que constater qu'elle les rend compétitifs au plan international.

Des mécanismes de contrôle robustes doivent être trouvés pour éviter les groupes de pression orthogonaux aux besoins de la R&D. Il faut aussi assurer aux chercheurs et aux industriels utilisateurs les moyens de rester compétitifs, c'est-à-dire, de ne pas réduire leur capacité d'acquérir sur le marché les supercalculateurs correspondant à leurs besoins dans des conditions compétitives.

7 Grands programmes et thématiques

7.1 ITER

La fusion magnétique et ITER :

Les besoins en moyens de calcul dans le domaine de la fusion magnétique sont en particulier motivés par l'entrée en service d'ITER prévue en 2019, ainsi que la conception de DEMO (réacteur de démonstration), prévu dans les années 2050. Les thèmes majeurs de recherche concernent la physique des plasmas (stabilité, transport turbulent, chauffage), l'interaction plasma-paroi ainsi que l'étude des matériaux sous irradiation. Ces simulations sont gourmandes en temps de calcul, par exemple en MHD (magnéto-hydrodynamique) tri-dimensionnelle, du fait des disparités des échelles de temps et d'espace, qui conduisent à des maillages très fins. L'approximation dite gyro-cinétique induit des simulations en 5 dimensions, ce qui conduit par exemple pour ITER à un maillage constitué de 100 milliards de points.

Au début des années 2000, la puissance de calcul disponible était largement insuffisante. Dans les années 2005 à 2007, un premier progrès a été réalisé dans le cadre des Grands Challenges du CEA-DAM sur TERA 10, ainsi que sur la machine Platine, permettant aux codes en développement au CEA-DSM (gyro-cinétique et MHD non linéaire) d'accéder à plusieurs milliers de processeurs. La montée en puissance de 2008 a été appréciable, en particulier grâce à la machine JADE au CINES. Cinq millions d'heures ont été attribués par GENCI au domaine de la fusion magnétique en 2009, concrétisant l'amélioration des performances et l'extensibilité de ces codes de simulations, maintenant au meilleur niveau européen voire mondial. En 2009, un calculateur de 100 TFlops à 1080 nœuds, soit 8640 processeurs, a été mis en service à Jülich en Allemagne, purement dédié à la fusion magnétique européenne. Cette machine offre un temps de calcul de 72 millions d'heures, dont 85% sont consacrés à des projets scientifiques. Plus de la moitié du temps de calcul en 2009 a été affecté au transport turbulent, alors que 20% sont affectés aux matériaux et à l'étude du plasma de bord. Dans le cadre de l'approche élargie Europe-Japon, un centre de calcul et de modélisation est prévu à Rokkasho au Japon (IFERC : International Fusion Energy Research Center). Dans ce cadre, le CEA devra fournir, pour le compte de l'Europe, un calculateur d'une puissance supérieure ou égale à 1Pflops et

ouvert aux utilisateurs européens et japonais de la communauté Fusion au début de l'année 2012.

Un effort tout particulier a été réalisé sur la modélisation intégrée, visant à réaliser un Tokamak numérique, décrivant la physique du plasma et ses sous-systèmes. Depuis 2008, la plate-forme européenne qui s'occupe de ce sujet dispose d'un cluster de calcul à Portici pour fournir des codes au standard de la modélisation intégrée et valider ces codes à partir de données expérimentales. La structure européenne EUFORIA rassemble des laboratoires de fusion et des installations de clusters et de calcul haute performance : elle vise à définir une architecture et à fournir les ressources pour faire tourner sur grilles et sur des outils de calcul haute performance des modélisations intégrées.

En conclusion, même si la situation s'est améliorée en termes de puissance de calcul, on est encore bien loin de la possibilité de simuler la micro-turbulence avec électrons et ions (seuls les ions sont pris en charge dans l'approche gyro-cinétique actuelle) et les besoins en temps de calcul croissent exponentiellement, d'autant que d'autres domaines que la turbulence (matériaux, plasma de bord, chauffage...) sont appelés à se développer. Très peu de codes de fusion sont parallélisés en France. Il faut donc des experts en calcul intensif, capables de développer des codes adaptés aux futures machines pétaflopiques.

R1 : Une puissance multi-pétaflopique est requise à l'horizon 2015.

R2 : Résoudre le problème du recrutement de chercheurs ayant la triple compétence physique/calcul haute performance/informatique, surtout pour le parallélisme nécessaire au vu des facteurs d'échelle à prendre en compte.

7.2 La Météorologie et la Climatologie

La prévision numérique du temps repose sur des codes de simulation numérique du comportement de l'atmosphère, qui sont également utilisés, moyennant des adaptations spécifiques (paramétrisation physique, résolution, etc.) comme l'une des composantes des systèmes couplés de modélisation du « Système Terre » utilisés dans le cadre du GIEC, pour simuler le changement climatique en fonction des scénarios d'émission de gaz à effets de serre. Parmi les autres composantes des modèles du « Système Terre » il faut citer en premier lieu les modèles d'océan mais aussi, au-delà, les modèles pour la cryosphère, la végétation, la biochimie, ...

Les communautés de recherche nationales actives dans ces deux domaines se recoupent donc largement, avec deux pôles principaux, l'Institut Pierre-Simon Laplace et des composantes (LMD, LSCE, LOCEAN, LATMOS) en région parisienne, et le pôle Toulousain qui associe le groupe d'étude de l'atmosphère météorologique (GAME), unité de recherche associée du CNRS accueillie par Météo-France, des laboratoires du PRES Université de Toulouse, notamment le Laboratoire d'Aérodynamique et le LEGOS, et le CERFACS.

Ces communautés exploitent à la fois les moyens de calcul fédérés par GENCI et ceux de Météo-France, définis autour d'exigences opérationnelles, de façon à permettre l'évaluation des nouveaux modèles dans l'environnement des bases de données

opérationnelles, puis la « bascule » opérationnelle. Elles occupent un rang mondial, puisque, l'IPSL et Météo-France participent aux travaux du GIEC, en produisant de nombreuses simulations de scénarios climatiques, et que le modèle de prévision du temps de Météo-France est, avec le modèle du Met Office britannique, le meilleur sur l'Europe, pour les courtes échéances.

Dans le domaine météorologique, où les enjeux se situent à la fois sur la modélisation globale, et sur la modélisation régionale ou locale à haute ou très haute résolution (de 10 kilomètres à quelques centaines de mètres), la puissance de calcul constitue un facteur décisif de compétitivité, dans la mesure où la prévision opérationnelle impose de disposer, à échéance planifiée ou à la demande, de la puissance nécessaire pour produire des prévisions en temps réel. De ce point de vue, Météo-France dispose d'une puissance de calcul (NEC SX8-R et SX9) sensiblement inférieure à celle de ses concurrents britanniques et allemands, ce qui est d'autant plus pénalisant que cette puissance n'évoluera plus d'ici 2013.

Dans le domaine des simulations du changement climatique, les équipes de Météo-France et de l'IPSL développent et exploitent de façon coordonnée des modèles distincts du Système Terre, qui partagent certaines composantes (modèles d'océan), et dont les différences conduisent à des sensibilités différentes, ce qui est essentiel pour appréhender l'espace des possibles, dans l'approche multi-modèles retenue par le GIEC (21 modèles utilisés pour le 4^{ème} rapport d'évaluation). Les équipes travaillent selon les cycles d'activités du GIEC : elles mettent actuellement au point les modèles qui seront exploités en 2010/2011 pour réaliser des simulations prescrites par le GIEC pour le 5^{ème} rapport d'évaluation dont la publication est prévue en 2013. Les résultats de ces simulations sont ensuite analysés et partagés avec d'autres équipes (Livre blanc escrime, projet DRIAS), notamment pour les simulations à plus haute résolution et les études des impacts du changement climatique nécessaires à la définition des politiques d'adaptation, qui devient un enjeu croissant. En Europe, le travail de cette communauté repose sur la combinaison de codes de simulation des composantes du Système Terre (océan, atmosphère, cryosphère, biosphère, cycles géochimiques, etc.) développés par des équipes différentes, ce qui donne une importance majeure au coupleur qui gère les échanges de données entre les différentes composantes, tel le coupleur OASIS développé par le CERFACS. En conséquence, l'optimisation des codes de simulation du Système suppose à la fois la parallélisation des codes de simulation des différentes composantes et celle des échanges entre les composantes via le coupleur, avec l'ambition d'une optimisation plus globale.

Dans les deux domaines, du point de vue du calcul intensif, on distingue des enjeux à court et moyen terme. Les enjeux à court terme sont centrés au premier ordre sur la parallélisation et l'optimisation des différentes composantes des codes, notamment la composante atmosphérique, devenue indispensable et urgente pour tirer le meilleur parti des architectures massivement parallèles, et sur la nécessité d'aborder la « parallélisation couplée » c'est-à-dire l'optimisation globale des codes de simulation du Système Terre. L'effort nécessaire pose un problème à la communauté, qui doit disposer au moins temporairement d'un soutien accru d'ingénierie des codes, pour ne pas pénaliser sa productivité scientifique.

Cette étape supposée franchie, l'augmentation de la puissance de calcul et des moyens de stockage associés est un enjeu majeur, dans la stratégie scientifique qui s'impose au niveau mondial, celle dite de la modélisation « sans couture » permettant de traiter un spectre d'échelles et de paramétrisations physiques de plus en plus étendu avec la même famille de codes.

Pour la météorologie, il s'agit d'aborder de façon cohérente toutes les échéances et les échelles de prévision, de quelques heures à plusieurs jours en mode déterministe et en mode « probabiliste » (c'est-à-dire en utilisant des ensembles de runs à partir d'états initiaux perturbés, ou d'autres méthodes stochastiques), en absorbant des volumes croissants d'observations issues des radars et des satellites météorologiques. Par extension le domaine météorologique couvre également la « prévision saisonnière » des conditions climatiques à attendre dans les mois à venir, réalisée en mode probabiliste à l'aide de modèles couplés du système océan-atmosphère très proches de ceux utilisés pour la simulation climatique. En fonction des résultats des recherches sur la prévisibilité de la variabilité climatique à l'échéance de 5 à 30 ans, des prévisions de ce type pourraient se développer.

Pour la simulation du changement climatique, il s'agit d'accroître la résolution des modèles de deux ordres de grandeur pour représenter explicitement certains processus décisifs (nuages, 1 km, envisageable à l'horizon 2020) associés aux phénomènes les plus intenses (cyclones, systèmes convectifs, etc.) et, plus généralement, pour aborder les échelles fines auxquelles se traduisent les impacts du changement climatique. Un autre objectif est l'étude de la prévisibilité de l'évolution du climat à échéance de 10 à 30 ans, à partir d'une connaissance plus fine de l'état de l'océan.

Dans les deux cas :

- la stratégie scientifique s'oriente vers la prévision ou la simulation d'un spectre de plus en plus large d'échelles spatio-temporelles, avec une modélisation « sans couture » (« seamless ») basée sur des codes flexibles, capable de traiter tout le spectre des échéances de façon cohérente ;
- il deviendra indispensable, au-delà de l'effort à court terme de parallélisation, d'adopter une approche d'adaptation permanente de la stratégie scientifique aux architectures et aux capacités des futures machines, ce qui suppose le renforcement des ressources d'ingénierie logicielle des équipes et des interactions plus poussées avec les communautés plus généralistes de l'écosystème HPC.

R1 : profiter de la fenêtre 2011-2014 qui suivra la réalisation des simulations climatiques pour le 5^{ème} rapport du GIEC pour **soutenir l'effort de parallélisation des codes**, à mener par les équipes de l'IPSL et de Météo-France. Cet effort devra déboucher sur 3 ans afin de leur permettre de s'adapter, avant 2015, aux architectures massivement parallèles devenues sans alternative, sans pénaliser leur production scientifique et sans entraver leur participation au probable rapport suivant du GIEC (6^{ème} rapport).

R2 : parallèlement, et dans une perspective à plus long terme (5 à 10 ans), favoriser le dialogue entre les communautés météorologiques et climatologiques et celles des mathématiques appliquées et des numériciens, pour explorer de nouvelles méthodes de discrétisation spatiale (grilles) et de résolution numériques (solveurs). Ces innovations

devront permettre de lancer la construction de nouveaux « cœurs dynamiques²⁹ » pour les modèles de la prochaine génération. Ces développements devront s'inscrire dans une feuille de route au niveau européen (cadre ENES³⁰).

R3 : en corollaire aux deux précédentes recommandations, *favoriser la formation et le recrutement d'experts HPC au sein de la communauté météo-climatologique, et la mise en réseau de ces experts, de façon à aborder de façon transversale les questions d'ingénierie et d'optimisation des codes et d'optimiser la stratégie d'utilisation des moyens de calcul « Tier 0 » (PRACE).*

8 Thèmes à traiter en 2010

Le CSCI prévoit d'enquêter sur plusieurs thèmes dont les suivants pour lesquels nous donnons quelques informations préliminaires.

8.1 Le programme de Nanosimulation au CEA

Proposé par L. Crouzet

Le programme nanosimulation a été lancé en 2009 suite à une analyse menée en 2008 dégageant une vision stratégique du développement de la nanosimulation au CEA, recherchant à la fois l'excellence scientifique et l'appui aux programmes de développement industriel. Il vise à coordonner les efforts en nanosimulation pour la nanoélectronique et les nouvelles technologies de l'énergie au CEA.

Dans un certain nombre de thématiques relevant des programmes CEA en nanosciences et nanotechnologies, il apparaît que seules les méthodes de simulation atomistique sont à même d'apporter les réponses quantitatives souhaitées sur les propriétés physiques ou chimiques des nano-objets et nanomatériaux à la base des dispositifs innovants (transistors ultimes, nano-capteurs, photocommutateurs, mémoires moléculaires, cellules photovoltaïques, nano-actionneurs, convertisseurs d'énergie, ...).

Les objectifs du programme nanosimulation, mis en place au sein du programme transversal nanosciences, pour répondre à cette constatation dans un contexte national et international de forte accélération des moyens de simulation sont d'une part d'acquérir une vision et une compréhension approfondie des phénomènes physiques (et quantiques) sous-jacents, et d'autre part, d'aider à concevoir et à dimensionner les futurs nano-dispositifs, grâce au développement d'outils prédictifs et de calibration s'appuyant en particulier sur des approches multi-échelles et multi-physiques.

Le programme Nanosimulation regroupe l'activité de 40 chercheurs permanents (environ autant de non permanents). Il s'insère également dans la stratégie globale de la simulation au CEA et établit un lien fort avec la simulation des matériaux pour le

²⁹ Le « cœur dynamique » est la partie du code qui résout les équations de Navier-Stokes en géométrie sphérique, partie la plus délicate du point de vue de l'efficacité en parallélisme massif

³⁰ European Network for Earth-System modelling

nucléaire en particulier. Les axes du programme Nanosimulation, sont définis au regard des priorités des directions opérationnelles concernées, DSM et DRT :

- Pour ce qui concerne les défis scientifiques, simulation des systèmes ouverts jusqu'à quelques centaines de milliers d'atomes, description réaliste de la matière et du transport électronique dans les nanodispositifs, simulation réaliste des états excités des électrons ainsi que des interactions avec les phonons et des corrélations électroniques, simulation des procédés.
- Pour les domaines d'applications, électronique, électronique organique, photovoltaïque, thermoélectricité et catalyse pour les PEFMC bénéficieront des avancées en nanosimulation.

Au regard des forces existantes au CEA en nanosimulation, le programme est structuré en trois centres de compétence

- simulations ab initio,
- nanoscope numérique (simulation des propriétés matériaux)
- nanospectromètre numérique (simulation des propriétés systèmes)

En 2009, outre le soutien apporté à des actions scientifiques dans ces trois domaines, le programme nanosimulation a préparé une montée en puissance de la simulation sur les NTE, a mené une réflexion sur les modèles de valorisation des codes, a préparé l'arrivée des capacités pétaflopiques, et a renforcé les liens avec le CNRS (GDR « calcul de structure électronique », workshop commun CEA-CNRS-DOE-NSF notamment).

8.2 Astrophysique

Rédigé par F. Combes

La recherche en astrophysique aujourd'hui vit une évolution très rapide, suite à la révolution des technologies des télescopes et des détecteurs, de la puissance de calcul, et des méga-infrastructures. La taille et la complexité des données astronomiques devenant disponibles rendent nécessaire des simulations numériques toujours plus performantes. L'observation elle-même requiert des supercomputers, comme par exemple les nouvelles technologies radio de reconstruction électronique de lobe, (achat d'un IBM Blue Gene, pour LOFAR aux Pays-Bas), les instruments considérés actuellement produiront chacun de l'ordre du Terabyte par seconde (Large Synoptic Survey Telescope LSST, satellite GAIA, Square Kilometer Array SKA..).

La feuille de route européenne du programme de prospective en astronomie, ASTRONET, a consacré un de ses 5 panels à la théorie, simulations numériques et observatoires virtuels, ces derniers se développant par une collaboration mondiale, pour mettre en réseaux les données disponibles à toutes les longueurs d'onde, y compris les résultats des simulations numériques lourdes. Le panel a identifié en 2008 les différents secteurs pour lesquels les simulations de haute performance jouent un rôle crucial, car très souvent les simulations remplacent l'observation impossible à réaliser, ou orientent les observations nouvelles à engager. Ces domaines de grand défi sont, de la plus petite échelle aux plus grandes:

- la physique du soleil et l'interaction avec son environnement
- la formation des étoiles et des systèmes planétaires
- l'évolution des étoiles, et leur explosion en supernovae
- la physique des trous noirs, et la gravité relativiste
- la formation et l'évolution des galaxies
- la cosmologie et la formation des structures

Récemment quelques applications remarquables de ces codes ont fait la Une. Par exemple, l'explosion des supernovae après l'effondrement de leur coeur en étoiles à neutrons a pu être réalisée pour la première fois en 2009, après plus de 10 millions d'heures de calcul. Pourtant, ces simulations sont à 2D, et n'expliquent pas encore l'explosion des étoiles très massives, où les neutrinos, responsables du transfert d'énergie, retombent piégés par la gravité. Des simulations 3D à la limite des possibilités des supercomputers devront être réalisées dans le futur pour comprendre le problème. Les plus grandes simulations cosmologiques ont été effectuées ces dernières années par le consortium VIRGO (la simulation du Millenium) le projet Horizon (en France), ou OWLS (OverWhelmingly Large Simulation) aux Pays-Bas. Chacune utilise près d'un million d'heures de calcul et produit plusieurs dizaines de Terabytes de données. La simulation de la fusion d'un trou noir binaire a montré que le trou noir final pouvait être éjecté de sa galaxie à des milliers de km/s, par un effet relativiste. La simulation « Via

Lactea » de notre Galaxie (la Voie Lactée), a utilisé un milliard de particules de matière noire.

Dans la plupart des domaines de l'astrophysique, le besoin de ressources informatiques augmente rapidement. Gagner un facteur 10 en puissance dans les prochaines années est estimé comme un minimum, parce que la résolution spatiale des simulations actuelles est toujours loin d'être suffisante pour modéliser l'intérieur des étoiles et leurs atmosphères, les galaxies et les amas de galaxies d'une manière réaliste. Des simulations satisfaisantes peuvent seulement être effectuées avec des super ordinateurs à puissance soutenue de ~100 Tflops, bien qu'un progrès significatif puisse être prévu déjà avec des machines plus lentes. Les simulations de formation d'étoiles et de planètes, les explosions stellaires, les jets astrophysiques et disques d'accrétion, résolvant le transfert de rayonnement et la MHD, auront besoin de super ordinateurs avec plusieurs centaines de Teraflop/s jusqu'au Petaflops de puissance soutenue, qui pourraient devenir disponibles au-delà de 2010.

En plus d'une infrastructure européenne de super-computers (organisée en tiers0-1-2), le logiciel scientifique développé par les divers groupes d'astrophysique devient de plus en plus important d'un point de vue stratégique. Alors qu'il y a dix ans chaque groupe de recherche pouvait développer ses propres codes, de nos jours la complexité et la sophistication des codes ont pris une telle ampleur que beaucoup de groupes comptent sur les logiciels scientifiques publics, comme « instruments de recherches ». De plus, la gamme des utilisateurs s'élargit des théoriciens aux observateurs, qui doivent employer la simulation pour interpréter des données complexes.

Les logiciels

Il est clair aujourd'hui que les logiciels de simulation sont un outil essentiel qu'il n'est plus possible de développer individuellement, étant donné leur complexité intrinsèque, et la difficulté de leur portage sur des architectures sans cesse renouvelées, afin d'obtenir les meilleures performances. Le panel d'Astronet a donc recommandé la création d'un ASL "Astrophysical Software Laboratory", pour encourager les équipes à développer de nouveaux logiciels ou d'implémenter les existants, et de distribuer largement les expertises, à la fois pour leur création et leur utilisation par la communauté.

Ce laboratoire sans mur pourrait financer les développements de logiciels, employer des doctorants, des post-docs, diffuser largement leur connaissance et leur utilisation par des réseaux de formation et ces codes seraient du modèle open-source. Ci-dessous, quelques-uns des codes les plus utilisés en astrophysique, sur ce modèle. La plupart utilisent la parallélisation massive, soit avec MPI ou OpenMP.

Cette liste n'est pas exhaustive, mais donne un aperçu dans les diverses branches. Voir les sites web : <http://astro-sim.org/> -- <http://ascl.net/> (Astrophysics Source Code Library), pour plus de détails.

- ASH (Anelastic Spherical Harmonic) pour la convection et les oscillations solaires, d'abord créé aux USA, et aujourd'hui développé par des astronomes Européens
- CESAM (Code d'Evolution Stellaire Adaptatif et Modulaire), développé essentiellement à Nice, avec collaboration européenne
- NBODY (versions 1 à 6) méthode d'Aarseth pour les systèmes stellaires denses (UK)

-
- GADGET code cosmologique N-corps/SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) pour la formation des structures, massivement parallèle
 - RAMSES code cosmologique, AMR=Adaptive Mesh Refinement, développé au CEA
 - FLASH (Hydrodynamique, créé pour résoudre les explosions thermonucléaire sur la surface des étoiles compactes comme les étoiles à neutrons et les naines blanches, où leurs intérieurs (par exemple explosions des supernovae de Type Ia). Développé à Chicago, USA.
 - ZEUS : code MHD de la famille Eulérienne (à grille) avec transfert de rayonnement (en géométries cartésienne, cylindrique ou sphérique), développé aux USA et en Europe
 - PLUTO: code de dynamique des fluides modulaire, de type Godunov, pouvant traiter la dynamique classique ou relativiste, la MHD, en géométrie cartésienne ou coordonnées curvilignes, à dimensions multiples, développé en Italie
 - PENCIL inclut l'hydrodynamique, les champs magnétiques, le rayonnement, l'ionisation, la chimie et la formation des poussières par coagulation, développé au Danemark
 - CLOUDY: code de simulation des plasmas, transfert de rayonnement et spectres (UK)
 - LORENE: (Langage Objet pour la RELativité Numérique) code pour résoudre des problèmes variés en relativité générale. Utilisant les méthodes spectrales multi-domaines, LORENE traite des matrices, tenseurs, et objets astrophysiques, comme les étoiles et les trous noirs (Observatoire de Paris).

8.3 La simulation des biomacromolécules

Rédigé par R. Lavery

Contexte

Les biomacromolécules, acteurs principaux de la vie cellulaire, sont typiquement constituées de **plusieurs dizaines de milliers d'atomes**, tandis que leurs assemblages fonctionnels atteignent facilement des millions d'atomes. Elles sont structurées par des interactions faibles (van der Waals, liaisons d'hydrogène, ...) et sont, par conséquent, **flexibles et fragiles**. Une dizaine de kcal/mol suffisent pour les déstructurer. De surcroît, elles sont **fortement influencées par leur environnement** (solvant, température, salinité, pH, ...). Les interactions avec d'autres molécules, notamment avec des molécules du solvant, engendrent des dynamiques avec des temps caractéristiques allant de la femtoseconde à la milliseconde, tandis que leur structuration et leur fonctionnement biologique s'effectuent sur des temps plus longs (secondes à minutes).

Enjeux

La simulation des biomacromolécules et de leurs assemblages tente de comprendre les facteurs physico-chimiques qui sous-tendent leur formation, leurs propriétés thermodynamiques et cinétiques et la nature de leurs interactions avec d'autres espèces. Les résultats aident, de façon ubiquitaire aujourd'hui, dans **l'obtention des structures**, soit à partir des informations à haute résolution, obtenues par cristallographie aux rayons X ou par spectroscopie RMN, ou à basse

résolution, obtenues par microscopie (microscopie électronique, tomographie, ...), spectroscopie (SAXS, FRET, ...) ou biochimie (pontage, ultracentrifugation, ...). Il devint également relativement facile de prédire la structure des protéines à partir de la structure des homologues (protéines ayant des séquences d'acides aminés similaires). Des approches de même type, mais moins avancées existent pour prédire la structure des acides ribonucléiques. La prédiction de structure *ab initio*, c'est-à-dire à partir de la seule séquence primaire des biopolymères progresse, mais pose encore des difficultés (1). **La prédiction des interactions** est aussi un but majeur. Dans le cas des protéines, des bons résultats sont obtenus si la structure des partenaires isolés est connue et qu'elle ne change pas significativement lors de leur interaction (2). Pour savoir quelles protéines interagissent, des techniques expérimentales capables d'analyser des cellules entières existent, mais elles sont souvent entachées d'erreurs (3). La prédiction des réseaux d'interaction à partir des données structurales reste donc un enjeu important. Finalement, la prédiction de la structure et de la stabilité des complexes entre des protéines et des petites molécules restent d'actualité grâce aux applications pharmacologiques. Dans ce domaine, le but de bloquer le fonctionnement d'une protéine évolue vers la recherche de molécules capables de perturber des interactions entre deux protéines. Dans le domaine des structures et des interactions, il faut aussi signaler le challenge soulevé par des **protéines partiellement ou totalement désordonnées** (4). On sait aujourd'hui que ces protéines sont fréquentes au sein des génomes des organismes évolués, mais leur flexibilité intrinsèque complique significativement la simulation de leurs propriétés.

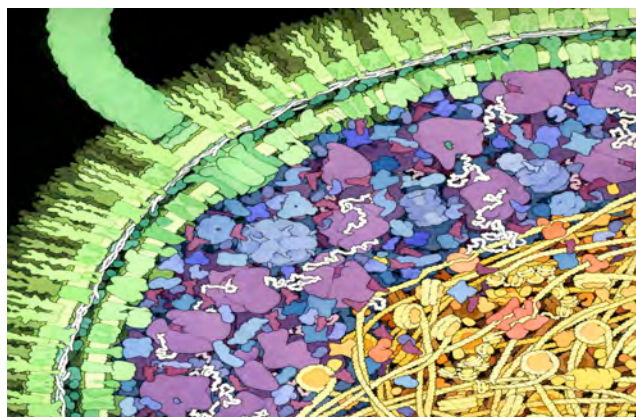


Figure 1

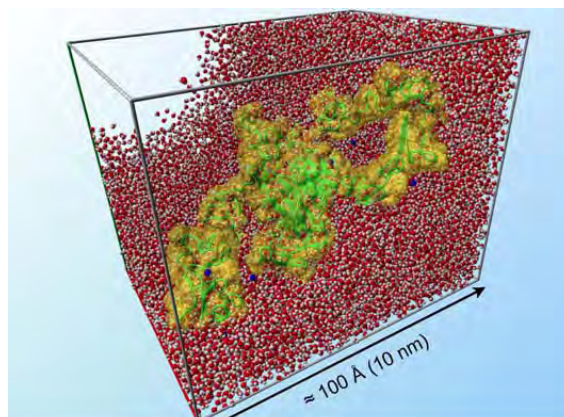


Figure 2

Jusqu'à récemment, la plupart des simulations ont impliqué une ou deux macromolécules. Il est clair que pour approcher la réalité du milieu cellulaire il faut maintenant **simuler des assemblages beaucoup plus importants (fig1)** tels que le ribosome (siège de la synthèse des protéines), le pore nucléaire (voie de passage vers le noyau) et la chromatine (responsable de l'empaquetage de l'ADN génomique). Il faut aussi **tenir compte de l'environnement très complexe à l'intérieur des cellules**, à la fois dense (étant constitué d'environ 30%-40% de macromolécules) et très compartimenté. Ce milieu exerce de fortes influences sur la stabilité et les interactions des biomacromolécules, influences qui commencent à peine d'être comprises. Finalement, il est important d'atteindre des simulations beaucoup plus longues pour accéder aux mouvements fonctionnels des macromolécules. En résumé, on peut voir les applications biologiques de la simulation comme un nouveau type de microscope, complémentaire aux techniques expérimentales, capable de sonder finement des aspects physicochimiques du monde macromoléculaire et, dans le meilleur des cas, capable de suggérer comment le comportement des biomacromolécules peuvent être modifié en vue d'améliorer des études expérimentales, des approches thérapeutiques, ou des développements technologiques.

Méthodologies

La taille des biomacromolécules impose l'utilisation de potentiels empiriques pour calculer des énergies en fonction de la conformation du système. Pour les représentations au niveau atomique ces potentiels assument l'additivité des différentes contributions physiques (déformation des liaisons, angles de valences et torsions, interactions Lennard-Jones et électrostatiques) et la transférabilité selon le type d'atome (typiquement une cinquantaine de types sont utilisés). Jusqu'à récemment des effets de polarisation ont été exclus. De tels potentiels impliquent l'ajustement de centaines de paramètres sur la base de données expérimentales et de calculs quantiques. En parallèle avec ces potentiels dits "physics-based", on développe des potentiels ajustés directement sur un ensemble de structures qui reflètent (on espère) une distribution Boltzmannienne d'énergie (potentiels dits "knowledge-based"). Les représentations atomiques des macromolécules sont généralement associées à une représentation explicite des molécules du solvant. Il n'est pas rare que le traitement du solvant consomme 95% du temps de calcul. Pour aborder des systèmes les plus grands (et des processus plus lents), plusieurs d'équipes développent des potentiels gros-grains, qui remplacent un ensemble d'atomes (typiquement de l'ordre de quatre) par une seule pseudo particule (5). En association avec une représentation continue ou gros-grain du solvant, ces potentiels permettent d'accélérer significativement les calculs. Des modèles gros grains posent encore des problèmes pour le retour vers une représentation atomique du système et pour analyser des cinétiques. Il y a aussi besoin de plus d'effort pour implémenter des simulations hybrides où deux (ou plusieurs) représentations co-existent et interagissent.

Pour simuler le comportement des biomacromolécules on exploite principalement la dynamique moléculaire (fig2). Les vibrations rapides des liaisons chimiques et les chocs interatomiques imposent des pas d'intégration de l'ordre de la femtoseconde. Jusqu'à récemment cette contrainte a limité les trajectoires à des fractions de microseconde (impliquant environ 10^9 calculs d'énergie et de forces atomiques). De telles durées sont généralement insuffisantes pour bien explorer l'espace conformationnel des systèmes flexibles ou pour calculer des énergies libres. Plusieurs techniques (lourdes en terme de temps de calcul) existent pour améliorer l'échantillonnage (simulated annealing, parallel tempering, locally enhanced sampling, umbrella sampling). Plusieurs versions d'échantillonnage Monte Carlo sont également exploitées, souvent combinées avec des minimisations d'énergie pour explorer des hypersurfaces conformationnelles. Il faut aussi citer le calcul des modes normaux qui couplé aux représentations simplifiées des protéines (réseaux élastiques), a permis de mieux comprendre leurs propriétés mécaniques et leurs mouvements fonctionnels. Finalement, la dynamique stochastique (dynamique Brownienne, dynamique de Langevin) est largement exploitée pour analyser la cinétique des interactions macromoléculaires (6). Les simulations classiques de dynamique moléculaire sont peu adaptées au parallélisme et, pour des systèmes typiques (10-50 Katomes) il a été difficile d'exploiter plus de quelques dizaines de processeurs. Par conséquent, la plupart des simulations ont été effectuées sur des clusters Linux de taille modeste (aujourd'hui associés aux réseaux Infiniband). Les algorithmes récents (de type domain decomposition) permet de pousser ces limites à plusieurs centaines, voir aux milliers, de processeurs et permet une exploitation accrue des centres de calcul. Malgré plusieurs tentatives de créer de processeurs spécifiques

pour les calculs de dynamique (par exemple, MDGrape au Japon) les performances n'ont pas permis des avancées majeures. Cette situation a changé récemment avec le développement de la machine d'Anton par Shaw Research qui, en combinant des processeurs spécialisés aux développements algorithmiques significatifs a permis les premières simulations d'un système biologique atteignant la milliseconde (7, 8). Ce saut qualitatif (1000x) va certainement nécessiter des travaux pour améliorer des potentiels et les algorithmes de dynamique, mais il offre, pour la première fois, la possibilité de simuler la gamme de temps la plus importante en biologie. Une machine Anton va être mise à la disposition des chercheurs aux États-Unis bientôt. Il semble important que les chercheurs Européens obtiennent également la possibilité de travailler avec ce type de machine. Finalement, il faut signaler l'importance croissante des grilles informatiques pour plusieurs familles de problèmes en biologie qui nécessitent l'étude de nombreux systèmes moléculaires en parallèle (conception de médicaments, étude des interactions protéine-protéine, etc.) (9, 10)

Références

1. M. Ben-David, O. Noivirt-Brik, A. Paz, J. Prilusky, *et al.*, *Proteins* **77 Suppl 9**, 50-65 (2009).
2. C. Pons, S. Grosdidier, A. Solernou, L. Pérez-Cano, J. Fernández-Recio, *Proteins* (2009)
3. E. Sprinzak, S. Sattath, H. Margalit, *J Mol Biol* **327**, 919-23 (2003).
4. V. N. Uversky, *J Biomed Biotechnol* **2010**, 568068 (2010).
5. S.J.Marrink, H. J. Risselada, S.Yefimov, D. P.Tieleman, A. H. de Vries, *J Phys Chem B* **111**, 7812-24 (2007).
6. R. R. Gabdoulline, R. C. Wade, *Curr Opin Struct Biol* **12**, 204-13 (2002).
7. R. O. Dror, M. O. Jensen, D. E. Shaw, *Conf Proc IEEE Eng Med Biol Soc* **1**, 2340-2 (2009).
8. J. L. Klepeis, K. Lindorff-Larsen, R. O. Dror, D. E. Shaw, *Curr Opin Struct Biol* **19**, 120-7 (2009).
9. S. Sacquin-Mora, A. Carbone, R. Lavery, *J Mol Biol* **382**, 1276-89 (2008)
10. M. Den Besten, A. J. Thomas, R. Schroeder, *J Biomed Discov Collab* **4**, 5 (2009)

8.4 Génomique

Proposé par Laurent Crouzet

Dans le domaine des sciences du vivant, les progrès récents de la génomique avec l'apparition de séquenceurs à haut débit marque un avancée majeure, avec de fortes retombées attendues à court et moyen terme tant au niveau de la prévention que de la thérapie. Cette évolution représente un défi important pour la bio-informatique, qui va devoir faire face à un déluge de données à stocker et à analyser. Toutefois, connaître avec précision le code (séquence) génétique d'un organisme ne permet pas de répondre à toutes les questions. En effet, ces séquences dirigent la synthèse de polymères d'acides aminés, les protéines, qui portent la fonction biologique associée à ces séquences. Cette fonction est étroitement liée à la structure tridimensionnelle des protéines. En conséquence, être capable de prédire la structure 3D d'une protéine associée à une séquence génétique donnée constitue l'un des challenges majeurs de la biologie moderne.

La direction des sciences du vivant du CEA soutient actuellement un projet de prédiction de telles structures (avec identification de leur fonction associée). Une première étape a consisté à employer massivement les moyens de calculs mis à disposition par GENCI au CEA afin de prédire les structures de protéines associées à des séquences dont la

fonction est inconnue (ce qui est le cas pour 2/3 des génomes des organismes vivants actuellement connus), à l'aide d'algorithmes courants. Ce travail, qui a fait l'objet d'un Grand Challenge GENCI sur le calculateur TITANE, a permis d'identifier des séquences qui codent des protéines présentant des structures (motifs) géométriques similaires, et qui correspondent donc à des fonctions potentiellement proches. Ce travail novateur va maintenant être poursuivi en y intégrant des algorithmes de prédiction et de raffinement de structures plus performants (en particulier basés sur des simulations microscopiques du type dynamique moléculaire), algorithmes qui seront couplés à des outils d'analyse structure/fonction basés sur des comparaisons de motifs avec des structures de protéines connues (et répertoriées dans la base PDB). L'objectif technique est ici de pouvoir disposer d'un outil apte à tirer parti de la puissance de calculateurs de classe pétaflopique.

8.5 Industrie Pétrolière

Proposé par Daniel Benoualid.

Les besoins en calculs de TOTAL sont en croissance constante. Parmi les technologies dont l'utilisation augmente, nous proposons d'examiner cette année l'imagerie sismique et le calcul de réservoir.

1/ L'imagerie sismique est de loin la plus consommatrice en ressources HPC. Elle nécessite la mise au point de nouveaux algorithmes capables d'analyser et d'exploiter les données sismiques acquises qui ne cessent d'augmenter grâce au progrès spectaculaires réalisés dans le domaine de l'acquisition. Les algorithmes utilisés en imagerie profondeurs sont CPU et data intensifs, les contraintes de temps de traitements ne peuvent être abordés que dans le cadre d'une vision calcul très haute performance mettant en œuvre des solutions hautement parallèles dans un environnement équilibré en terme de ratio calcul vs communications et accès aux données ce qui nécessite une architecture bien adaptée. Les besoins en calculs devraient être multipliés par 50 à 100 d'ici 5 ans en raison de la complexité des algorithmes à mettre en œuvre et aussi des types de traitements sismiques à réaliser. La contrainte actuelle la plus forte réside dans les lieux de résidence de données: les acquisitions modernes sont passées de quelques centaines de GB fin des années 90 quelques dizaines de TO en 2010. L'accès et la résidence de ces données pose à la fois de problèmes logistiques et de sécurité. Pour anticiper les évolutions algorithmiques nécessaires pour l'imagerie profondeur du futur la R&D que nous devons mener doit pouvoir explorer à la fois les nouvelles méthodes numériques adaptées au problème à résoudre mais également aborder suffisamment tôt le problème HPC. Pour cela il est important de pouvoir avoir accès en avance à la Roadmap des constructeurs ainsi qu'aux nouveaux modèles de programmations. Avoir accès à de telles ressources est en effet primordiales pour TOTAL. Actuellement cela est réalisé par l'intermédiaire de collaborations avec des constructeurs, universitaires et sociétés très spécialisées dans le domaine des méthodes de programmation. Dans ce contexte les nouvelles structures de R&D européenne pourrait être utiles à TOTAL dans le cadre la R&D HPC, de l'exploration de nouveaux paradigmes, d'échanges avec la communauté HPC, de tests de comportement de nos algorithmes principaux existant ou à venir sur les nouvelles architectures, ainsi que le passage à l'échelle si les ressources sont suffisamment importantes. Mais il semble peu probable qu'une elle structure ne

puisse servir autrement qu'à ces actions de R&D car à la fois nos volumes de données, la taille des problèmes à traiter et les problèmes des sécurités liées aux données ne peuvent pas permettre d'envisager un traitement sur des ressources dédiées et proches de ces données.

2/ Il en va autrement pour le calcul de réservoir qui n'a pas les mêmes contraintes liées aux données que l'imagerie profondeur. La nature même des problèmes à résoudre, la mise en œuvre parallèle ne peut être abordée de la même manière qu'en imagerie profondeur qui est naturellement massivement parallèle et les besoins en termes de HPC en simulation de réservoir sont moins importants. Par contre la problématique de l'implémentation de solveurs parallèles est très forte. TOTAL utilise aujourd'hui principalement des simulateurs du marché et est donc contraint par les évolutions imposées par les éditeurs de logiciel. Par contre depuis peu TOTAL investit dans la mise au point d'un simulateur de réservoir. Dans ce contexte l'accès à différentes ressources HPC dans la structure présentée pourrait être très utile à la simulation de réservoir, notamment par l'intermédiaire des contacts avec les différents laboratoires travaillant sur les solveurs creux.

8.6 Les Grilles

Proposé par Dominique Boutigny

Les grilles de production

Les grilles dites de production sont destinées à fournir des moyens informatiques pour des projets scientifiques ayant besoin de mobiliser une grande quantité de ressources (CPU et/ou stockage) sur des périodes plus ou moins longues. Le projet européen EGEE (Enabling Grid for Escience) met en œuvre une grille de production mondiale pluridisciplinaire sur laquelle s'appuient de nombreux projets, notamment le "Worldwide LHC Computing Grid" (W-LCG) qui structure les ressources de calcul nécessaires pour le traitement des données des expériences installées sur l'accélérateur LHC du CERN. EGEE est également très utilisée dans des domaines aussi variés que les sciences du vivant, les sciences de la terre, la chimie, ou encore les sciences humaines et sociales.

D'autres grilles plus légères du point de vue de la mise en œuvre et de l'opération existent également, elles permettent de servir des thématiques dédiées, comme le projet DECRYPTHON initié par l'Association Française contre les Myopathies, IBM et le CNRS, ou encore de fournir des moyens de calcul supplémentaire à destination de communautés scientifiques (projet CiGrid par exemple).

Les grilles de recherche

Les grilles de recherche offrent aux chercheurs en informatique, une infrastructure dédiée leur permettant de mener des expérimentations à grande échelle. Ces grilles permettent de mettre au point les intergiciels qui serviront pour les grilles de production de demain, elles permettent également d'aborder des thématiques tels que l'ordonnancement, le déploiement de nœuds de grille à grande échelle, les problèmes de latences et de contentions au niveau du réseau, etc. La France a la chance de disposer de l'architecture ALADDIN-G5K qui interconnecte environ 5000 nœuds répartis sur 9 sites en France et récemment étendu sur un 10^{ème} site au Brésil.

De même que pour les grilles de production, l'infrastructure du réseau est cruciale et les liaisons RENATER à 10 Gb/s dédiée qui relie les sites sont indispensables au succès d'ALADDIN-G5K.

Activités récentes et perspectives sur les grilles

La création de l'Institut des Grilles du CNRS en 2007 a permis de structurer les activités liées aux grilles au CNRS et de favoriser les passerelles entre les grilles de production et les grilles de recherche. L'Institut des Grilles du CNRS a mené une mission de prospective nationale sur les grilles de production qui s'est concrétisée par la tenue d'un colloque en octobre 2008 et par la production d'un livre blanc disponible sur : <http://www.idgrilles.fr/IMG/pdf/livreBlancecran.pdf>. L'Institut des Grilles a reçu en 2010 un financement de près d'1 M€ via les Très Grands Équipements du CNRS qui permettra, entre autre, à de nouveaux nœuds de grilles d'émerger.

La 3^{ème} et dernière phase du projet européen EGEE arrive à son terme en avril 2010. Le projet EGI (European Grid Initiative) va prendre la suite et aura pour objectif de déployer une architecture de grille pérenne s'appuyant sur des Infrastructures de Grilles Nationales (NGI) qui auront un certain niveau d'autonomie, mais qui seront aussi chargées de fournir des services d'intérêts communs pour la grille européenne. En

France, la grille nationale de production se structure autour du Groupement d'Intérêt Scientifique France-Grille qui regroupe le MESR, le CNRS (via l'Institut des Grille), le CEA, l'INRIA, l'INSERM, l'INRA, la CPU et RENATER et qui devrait être signé au cours du premier trimestre 2010.

Relations entre les grilles de production et les supercalculateurs

Les grilles de productions ne doivent pas être considérées comme une alternative aux supercalculateurs. En effet les grilles sont essentiellement destinées à l'exécution de milliers de tâches simultanées et indépendantes (parallélisme non couplé). La grille DEISA qui relie plusieurs supercalculateurs entre eux ne permet qu'un report de charge d'un calculateur vers un autre et ne permet pas de coupler des tâches s'exécutant simultanément sur plusieurs calculateurs (la latence étant le facteur limitant).

Par contre, les grilles de production sont complémentaires des supercalculateurs dans le sens où elles peuvent prendre le relais afin d'exécuter des post-traitements sur des données produites lors d'une campagne de calculs HPC. Les grilles offrent également une infrastructure robuste de distribution et de stockage réparti des données.

Les grilles permettent de mettre en œuvre un modèle intéressant de tolérance aux pannes et de sauvegarde des données. En effet, le caractère distribué des traitements et du stockage permet de basculer automatiquement d'un site vers un autre en cas de défaillance. Dans le cas des données des expériences installées auprès du LHC, celles-ci sont distribuées mondialement sur onze centres de premier niveau avec une duplication automatique d'un centre vers un autre, qui garantit la disponibilité des données même en cas de panne ou de désastre dans un des centres. Il faudrait envisager la mise en œuvre de ce modèle dans les très grands centres de calcul. La duplication d'un centre vers un autre est certainement plus robuste et peut-être moins coûteuse que le renforcement du niveau de disponibilité et de fiabilité de chaque centre pris individuellement.

Objectifs :

- *Renforcer les liens entre les communautés des grilles de production et du HPC afin d'exploiter au mieux les complémentarités.*
- *Renforcer et favoriser les liens entre les grilles de production et les grilles de recherche*
- *Renforcer les liens entre la communauté de la physique des hautes énergies et celle du calcul intensif afin de mettre en place des modèles de gestion des données performants et pouvant aisément passer à l'échelle.*
- *Améliorer la bande passante des laboratoires amenés à accéder aux données produites par les supercalculateurs. Améliorer les formats de données, définir/utiliser des formats standard, développer des middleware communs pour l'accès aux données et leur traitement.*