

"PENSER PETAFLOPS"

SYNTHESE DES REFLEXIONS ET PREMIERES CONCLUSIONS

Jean-Claude André
Président du conseil scientifique *ad hoc*

1. Les objectifs et le déroulement de la réflexion

Par décision commune prise en février 2008, le CEA et le CNRS ont lancé la réflexion autour de la question de l'accompagnement de la première phase de la prospective nationale en matière de Calcul Intensif (CI), l'objectif spécifique de cette nouvelle phase de la réflexion étant la création, la structuration et le soutien d'une communauté dynamique d'utilisateurs :

- aptes à utiliser au mieux, à des fins de recherche scientifique, les machines de taille pétaflopique sur le point d'être disponibles, et
- permettant donc de positionner la France pour accueillir rapidement sur le territoire national, à l'usage de la recherche scientifique, une machine de cette puissance.

Il s'agissait, entre autres, d'identifier et de caractériser :

- les domaines scientifiques les plus aptes, aujourd'hui, à bénéficier du "pétaflop",
- le système intégré de machines et de réseaux qui optimisera la mise en œuvre du CI,
- les développements logiciels et technologiques qui en renforceront l'utilisation,
- l'organisation du fonctionnement de ce système (formation, environnement),
- les liens indispensables à créer entre utilisateurs et constructeurs, pour le futur du CI.

A ces fins un comité d'organisation a été mis en place, s'appuyant lui-même sur un conseil scientifique (voir les compositions en annexe 1). Le calendrier des travaux est donné en annexe 2.

A l'issue de la journée de lancement du 13 mai 2008, quatre ateliers ont ainsi été organisés, sur quatre thèmes *a priori* distincts :

- Atelier n°1 : Les infrastructures du CI, des mesocentres aux centres de calcul pétaflopique (Animateurs Dominique BOUTIGNY et Patrick MASCART) ;
- Atelier n°2 : La mutualisation des codes et des grands outils logiciels (Animateurs Jean-Philippe NOMINE et Denis VEYNANTE) ;
- Atelier n°3 : Quelles architectures et quels algorithmes pour quelles applications? (Animateurs Francis DAUMAS, Jean ROMAN et Philippe RICOUX) ;
- Atelier n°4 : Les métiers du CI: formation, recherche et débouchés (Animateurs Stéphane CORDIER et Serge PETITON). Il est à noter ici que ce thème a été traité dans le cadre conjoint de "Penser Pétaflops" et de l'ORAP, puisque cette dernière était déjà engagée dans une réflexion de long terme sur ces questions.

A travers un travail qui s'est mis en place et qui s'est déroulé sur la période de l'été et de l'automne, ces ateliers ont permis de consulter une large communauté (plus de 130 inscrits et participants). On trouvera en annexe 3 les comptes-rendus détaillés de ces 4 ateliers.

La journée de restitution du 13 novembre 2008 a permis quant à elle de confronter ces réflexions, d'en organiser la présentation en prenant en compte les quelques recouvrements, et, via des interventions des représentants du CEA et du CNRS de dégager de premières réponses aux diverses analyses et recommandations.

2. Une première série de questions et de recommandations

Il ne s'agit pas ici de reprendre dans leur totalité les recommandations faites dans le cadre de chaque atelier (cf. annexe 3), mais plutôt de proposer quelques très grandes lignes de réflexions et de pistes pour l'action, telles qu'elles résultent du travail de ces ateliers et de la discussion de synthèse qui s'est tenue le 13 novembre.

2.1. Sur les infrastructures du calcul intensif

2.1.1. Le rôle important des mesocentres (le Tier 2, géré par les universités) doit être souligné, tant pour la préparation de nouvelles communautés que pour organiser au mieux les interfaces avec les grands centres (Tier 0 pour le niveau pétaflopique, et Tier 1 pour les grands centres nationaux). Parmi les questions d'importance à traiter dans ce cadre :

- le partage d'expériences et de savoir-faire entre communautés différentes, certaines étant plus avancées que d'autres et pouvant donc agir comme éléments dynamisant. Ce point inclut à l'évidence des aspects de formation, très à même d'être traités très efficacement à ce niveau, en particulier pour ce qui concerne les étudiants et jeunes chercheurs (cf. atelier n°4);
- la mise à disposition partagée de configurations de calcul, et l'accès aux données générées (outils, grilles de données, ...), et, plus généralement la distribution des responsabilités sur la base d'un principe de subsidiarité.

Ces points concernant de multiples acteurs *a priori* indépendants, il est nécessaire d'engager au niveau national une réflexion débouchant sur une organisation aussi rationnelle que possible entre Tiers 0, 1 et 2. D. EGRET, chargé de mission auprès de la CPU, a proposé, en accord avec GENCI, de mener une telle réflexion en s'appuyant sur GENCI à titre de support opérationnel (sous réserve de confirmation de la CPU).

2.1.2. Il faut continuer à veiller à ce que les capacités des réseaux interconnectant non seulement les machines des Tiers 0 et 1 entre elles, mais aussi avec le Tier 2, soient et restent au niveau requis. La situation est aujourd'hui jugée comme tout à fait satisfaisante, grâce au service fourni par RENATER, mais il est très vivement recommandé que le CNRS et le CEA en restent d'actifs promoteurs et soutiens.

2.1.3. Le nécessaire accès aux architectures pétaflopiques pour permettre, avant les calculs "à pleine échelle", le test des codes qui seront utilisés, semble pouvoir être réglé plus par la mise en place de catégories spéciales de "jobs" dans les centres de Tier 0 que par l'installation de petites architectures dédiées dans les mesocentres.

2.2. Sur la mutualisation

2.2.1. Nombre d'équipes sont encore réticentes à mutualiser leurs codes, car elles voient souvent ce type de partage, pour elles synonymes de lourdeur, comme un frein à la créativité "bottom-up". Des actions spécifiques de type "top-down" de la part des organismes sont nécessaires ici, afin de valoriser au mieux les investissements humains nécessaires pour développer les logiciels capables de tourner efficacement sur les architectures pétaflopiques. La possibilité de "labelliser" les codes mutualisés, avec attribution ultérieure de moyens, surtout humains, est une piste prioritaire.

2.2.2. A côté des grands codes de simulation, la mutualisation peut aussi se faire efficacement autour de noyaux de codes, de bibliothèques, d'outils de pré- et post-traitement (dont ceux relatifs à la visualisation), des jeux de données produits, Il faut développer de tels éléments, de façon qu'ils passent, le mieux et le plus efficacement possible, à l'échelle. Des solutions de soutien doivent être recherchées, non seulement entre le CEA et le CNRS, mais aussi avec d'autres partenaires et avec la participation de l'ANR.

2.2.3 La constitution d'équipes pluridisciplinaires autour du calcul intensif, incluant à côté des physiciens des différents domaines concernés, des mathématiciens appliqués, des algorithmiciens et des informaticiens est reconnue comme de première importance. Elle représente un enjeu particulier, spécialement en France où le paysage est morcelé entre les différents acteurs et les différentes agences, notamment en termes d'affectations de moyens et de personnels. Le CNRS et le CEA sont encouragés à poursuivre leurs efforts de coordination et à les étendre avec d'autres partenaires, au premier titre desquels il faut citer l'INRIA et les Universités, et ceci afin de permettre l'émergence d'un réseau national e compétences.

2.3. Sur les architectures

2.3.1. L'utilisation des accélérateurs et des processeurs hybrides reste trop peu développée. L'existence d'architectures de ce type, en particulier aujourd'hui au CCRT, nécessite de mettre en place des actions spécifiques de soutien et de promotion pour en développer l'usage.

2.3.2. La "virtualisation" de l'architecture, sur une algorithmique passant efficacement à l'échelle et exploitant les différents niveaux de parallélisme, semble une voie particulièrement attractive, qui doit donc être encouragée.

2.3.3. La réflexion est toujours en retard pour ce qui concerne les actions de recherche ou de développement à partager avec les constructeurs. L'atelier n'a pas pu prendre en compte cette question, principalement par manque de temps et de disponibilité des personnes qui auraient pu contribuer à son instruction. La France apparaît malheureusement en retard sur ce point par rapport à ce qui se fait au Japon et aux Etats-Unis, où la collaboration entre constructeurs et scientifiques paraît beaucoup plus active, et donc mutuellement profitable. Il s'agit clairement ici d'un sujet à reprendre au-delà de "Penser Pétaflops"

2.4. Sur la formation

2.4.1. La formation des jeunes scientifiques au CI est reconnue comme de première importance. Les premières mesures annoncées, concernant par exemple la labellisation de certaines formations, vont très évidemment dans le bon sens. Au-delà de cette formation

initiale, ou de tout-début de carrière, l'organisation d'actions de formations spécialisées, de type "formation permanente", est vivement recommandée, par exemple par extension de ce qui se fait déjà dans le cadre des formations soit de l'IDRIS, soit du "Groupe Calcul", soit des "Ecoles CEA/EDF/INRIA", ...

2.4.2. A côté des aspects "formation", il est nécessaire de développer les actions de promotion du CI auprès des équipes de différents domaines qui en seraient potentiellement utilisatrices : séminaires et colloques sont une voie d'approche recommandée.

2.4.3. D'autres mesures sont recommandées, pour assurer l'attractivité des métiers du CI :

- reconnaissance et valorisation du travail fait autour des codes, par exemple par encouragement des publications scientifiques sur les codes de calcul eux-mêmes, et pas uniquement sur les résultats scientifiques qu'ils permettent d'obtenir ;
- encouragement à reconnaître l'importance et le rôle des ingénieurs "calcul" au sein des laboratoires de recherche, avec les possibilités de carrières associées, par exemple en termes de mobilité, de changement de discipline d'applications, ...

2.5. Sur la collaboration multi-organismes et au-delà

Nombre des recommandations précédentes mettent clairement en évidence le caractère transversal du CI, entre autres du point de vue des grands organismes qui en sont les acteurs ou qui ont vocation à l'être. Il est recommandé que soit poursuivie et amplifiée la politique de collaboration multi-organismes au-delà des seuls CEA et CNRS, politique seule apte à tirer le meilleur parti et à magnifier les richesses de chacun.

Au-delà, et pour des perspectives probablement à plus long terme du fait de la spécificité et de la difficulté de la question, il faut engager une action volontariste vers les PME. Pour ce qui concerne leur accès au HPC, et compte tenu de leurs particularités propres, il faudra qu'elles puissent disposer d'une chaîne complète (moyens de calculs, logiciels adaptés et personnels formés). Une démarche volontariste des acteurs du HPC est souhaitable, *via* par exemple les pôles de compétitivité, GENCI et les grands acteurs nationaux du HPC.

3. Au-delà de la réflexion actuelle

Les diverses recommandations présentées ci-dessus doivent encore faire l'objet d'une analyse et d'une instruction plus approfondies par le CEA et le CNRS. Peut-être la mise en place annoncée de la "Maison de la Simulation" représente-t-elle une opportunité particulière de mettre en œuvre nombre de celles-ci ?

Toutefois l'ouverture, et surtout la poursuite, de la réflexion ne pourront se faire efficacement que par extension à d'autres organismes et agences: CSCI, Universités, GENCI, ANR, INRIA, ... Le cadre du seul Ministère chargé de la recherche pourra aussi être bénéfiquement franchi, les applications industrielles représentant à l'évidence un enjeu de première importance.

Annexe 1 : Le pilotage

Comité d'organisation

Dominique Le Quéau (CNRS)
Pierre Guillon (CNRS)
Jean-Paul Duraud (CEA)
François Robin (CEA)
Stratis Manoussis (CNRS)

Conseil scientifique

Jean-Claude André (Président)
Edouard Audit,
Alain Bécoulet
Daniel Benoualide
Jacques Blanc-Talon
François Bouttier,
Razvan Caracas
Stéphane Cordier,
Pierre Lutz
Patrick Mascart,
Thierry Nkaoua
Olivier Pironneau,
Philippe Ricoux
Christian Saguez,
Philippe Sautet
Thomas Simonson,
Bruno Stoufflet
Denis Veynante

Annexe 2 : Calendrier

Le conseil scientifique s'est réuni physiquement les 27/02/08 et 10/04/08, et de façon téléphonique le 16/10/08 et le 11/03/09.

Le colloque de lancement s'est tenu le 13/05/08 à Paris (Institut Pasteur).

Les 4 ateliers ont travaillé durant l'été et l'automne, par messagerie, réunions téléphoniques et au moins une réunion physique.

Le colloque de restitution s'est tenu le 13/11/08 à Paris (CNRS).

"PENSER PETAFLUPS"

Annexe 3 : Rapports des ateliers

Annexe 3.1 : Rapport de l'Atelier "Infrastructure du calcul intensif"

Annexe 3.2 : Rapport de l'Atelier "Mutualisation des codes et des grands outils logiciels"

Annexe 3.3 : Rapport de l'Atelier "Architecture, Algorithmique, Applications : l'intégration"

Annexe 3.4 : Rapport de l'Atelier "Les métiers du calcul numérique : formation, recherche et débouchés"