



# Rapport du Comité Stratégique du Calcul Intensif

Décembre 2008



## Remerciements

Le Comité remercie Catherine Rivière, Président Directeur Général de GENCI, Christine Menaché, Responsable du CCRT, Victor Alessandrini, Directeur de l'IDRIS, Francis Daumas, Directeur du CINES et Bertrand Braunschweig, responsable du programme Conception et Simulation de l'ANR, qui ont bien voulu répondre à ses questions, et ont fourni des éléments d'information utiles à ce rapport.

Il remercie la Direction Générale de la Recherche et l'Innovation pour son support logistique, et particulièrement Michel Kern, chargé de mission, pour son assistance dans la rédaction de ce rapport.

---

## Résumé et recommandations

Dans l'ensemble le Comité Stratégique pour le Calcul Intensif (CSCI) se félicite de constater les progrès immenses réalisés en 2008 en équipements et les projets pour 2009.

Toutefois un problème profond existe chez les chercheurs, comparable à la fracture numérique qui divise encore actuellement les français : trop de domaines scientifiques ont du mal à intégrer la culture du calcul intensif et beaucoup de scientifiques et d'industriels éprouvent des difficultés pour l'utilisation du calcul intensif.

Le CSCI note que le plan du gouvernement « France Numérique 2012 »<sup>1</sup>, proposé par le Secrétaire d'État chargé de la Prospective, de l'Évaluation des politiques publiques et du Développement de l'économie numérique Éric Besson, a abouti à une conclusion similaire, et proposé des actions pour y remédier. Le CSCI est totalement en accord avec les actions proposées.

Le CSCI émet les recommandations suivantes à l'attention des décideurs :

1. Poursuivre la dynamique nationale mise en place par GENCI pour coordonner les moyens de calcul nationaux et leur financement, formant une politique cohérente de renouvellement du matériel dans une optique de pérennité et de progression régulière.
2. Faire émerger, en liaison avec le programme européen PRACE, des équipes pluridisciplinaires capables de développer des applications dans les disciplines qui le demandent, et de mettre en place les outils logiciels de base spécifiques au calcul intensif.
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.
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 Department of Energy aux États-Unis.
5. Encourager le financement d'équipements mi-lourds (notamment au niveau des régions et des universités) pour rétablir un équilibre de la pyramide dite tier0-tier1-tier2, propice au développement du calcul intensif.
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.

---

<sup>1</sup> <http://francenumerique2012.fr/>

# 1 Les activités du CSCI

Même si elle n'est pas pratiquée par toutes les équipes de recherche, et c'est un des objets de ce rapport, la simulation est reconnue par tous comme le troisième volet du triptyque de la recherche avec la théorie et l'expérience.

Pour le chercheur et pour l'ingénieur les outils pour la simulation sont d'abord le poste de travail individuel, puis le cluster de l'équipe, le mésocentre, et enfin les super ordinateurs et grilles de calcul nationaux ou européens. Par ailleurs l'accès aux bases de données se fait aussi par l'intermédiaire de ces centres.

## 1.1 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 2008 d'un budget de 25 M€ GENCI est doté d'un conseil d'administration pour les décisions à court 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. »*

Pour la première année de sa création 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. La liste des membres est donnée en annexe.

## **1.2 Les activités du CSCI en 2008**

Le CSCI s'est réuni en moyenne une fois par mois (les comptes rendus de séance sont disponibles sur demande) ; il a d'abord statué sur trois problèmes urgents

- l'avenir du CINES,
- La pertinence du programme européen PRACE,
- Les formations en calcul scientifique.

Ces thèmes ont fait l'objet de deux rapports intermédiaires à Madame la ministre fin 2007 et début 2008. Ces rapports sont en annexes.

Plusieurs de ses membres ont visité quelques grands centres internationaux comme le TACC (Texas) et le LLNL (Livermore, États-Unis).

Enfin certains membres ont participé à de nombreuses réunions, ateliers de travaux et colloques sur le sujet en liaison avec l'ANR, le CEA, le CNRS, EDF, GENCI et ORAP.

## **1.3 Projet pour 2009**

Le CSCI se penchera sur le problème de la croissance d'une industrie européenne pour les super-ordinateurs tant du point de vue matériel que du point de vue *middleware*.

Puis il étudiera en profondeur un ou deux thèmes applicatifs, par exemple ITER et/ou la climatologie pour évaluer les perspectives de développement de la simulation pour ces thèmes.

## **1.4 Le Rapport**

Ce rapport annuel 2008 recadre la position de la France dans le paysage international de la recherche en simulation du point de vue du calcul intensif. Il traite des points suivants :

- Les trois nouveaux grands ordinateurs français et les perspectives qu'ils offrent ;
- L'avenir compte tenu du projet PRACE dans lequel la France est représentée par GENCI, de la mise en place de l'Institut du Calcul Intensif « Jacques Louis Lions », de la Maison de la simulation et de la construction du Très Grand Centre de Calcul et du Campus Ter@tec;
- Le rôle des universités et des écoles d'ingénieur et le problème des formations ;
- L'impact du calcul intensif sur la recherche et l'industrie.

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

---

## 2 Les faits marquants

### 2.1 Tendances

Pour les calculs de pointe l'année 2008 restera dans nos mémoires l'année « Petaflops » (un million de milliard d'opérations en virgule flottante par seconde) tout comme l'année 1997 fut l'année Teraflops (mille fois moins). En effet en juin de cette année les tests Linpack<sup>2</sup> ont tourné à cette vitesse dans la machine surnommée « Roadrunner » construite par IBM pour le laboratoire de Los Alamos du DoE (Dept. of Energy). Ce facteur 1000 en gain de performance après 11 ans de recherches fait penser que l'Exaflops sera possible entre 2017 et 2022.

Disposer de tels outils c'est s'assurer une position dominante dans de nombreux domaines de la recherche à condition toutefois que les logiciels et les équipes suivent, car ces superordinateurs sont de plus en plus difficiles à utiliser: mémoires hiérarchisées autour de nœuds de calcul eux même distribués dans des structures arborescentes et bientôt hétérogènes car l'année 2008 est aussi celle des premiers processeurs graphiques [GPGPU](#) (general purpose graphic processing unit), font le FX 5600 du serveur [Tesla](#) de Nvidia, du processeur Cell de IBM/Sony, et bientôt du [Larrabee](#) d'Intel, avec les nouveaux langages de programmation pour ce qu'on appelle le stream computing: CUDA chez Nvidia, OpenCL chez Apple/AMD/IBM/nVIDIA (disponible en 2010), et [brook+](#) chez AMD.

Notons que tous les domaines de la science sont concernés par les calculs de pointe mais que l'astrophysique, la géophysique, la chimie moléculaire, la biologie et la médecine ont fait des progrès spectaculaires récemment grâce à ces outils. Pour les grands défis sociétaux, les grands calculs sont particulièrement importants en climatologie, en sciences de l'environnement pour la pollution, et en sismologie (pour les tremblements de terre). Pour les applications industrielles et commerciales, l'industrie du pétrole pour l'analyse des sous-sols et les banques pour le pricing des produits financiers semblent être les plus demandeurs. Pour les moteurs en aéronautique la compagnie Safran a fait un investissement logiciel impressionnant. Il n'est pas possible de mentionner toutes les avancées faites en 2008 car elles sont nombreuses mais aussi parce que le CSCI n'a pas essayé cette année des les inventorier ; il le fera en 2009, dans la mesure du possible.

### 2.2 L'action de GENCI et la place de la France

#### Action de GENCI

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, répartir les ressources informatiques sur ses équipements sur des critères d'excellence

En une année, le plan d'investissement mis en œuvre par GENCI, en complément des investissements réalisés par le CNRS ont permis de multiplier par un facteur 24 la puissance disponible pour la recherche publique française. Cela correspond à un démarrage très rapide

---

<sup>2</sup> Un ensemble de programmes tests d'algèbre linéaire, comme la résolution d'un grand système d'équations linéaires, censés être représentatif d'un programme complet de simulation.

---

et une réactivité importante qui n'auraient pas été possibles sans le statut de droit privé et le dynamisme de GENCI.

Pour 2009, GENCI a mis en place une procédure unifiée d'évaluation des demandes d'heures de calculs sur les trois centres de calculs nationaux, sur critères scientifiques ainsi qu'une procédure unique d'allocation des heures de calcul à partir des évaluations faites.

Cette nouvelle façon d'opérer est très bien accueillie des chercheurs car elle simplifie l'accès aux machines ; elle devrait également faciliter la fourniture de ressources de calcul intensif pour les projets de l'ANR qui le requièrent. L'ouverture aux industries utilisatrices de la simulation sera possible, (dans les limites fixées par le caractère civil de la société GENCI).

Cette vision unifiée de la position française est concrétisée au niveau européen par la représentation de la France par GENCI dans le projet PRACE dont nous parlerons plus loin.

Ainsi, en complément des centres nationaux, il sera possible de donner accès aux mêmes chercheurs aux moyens européens.

## Place de la France

Le site [www.top500.org](http://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 en tête, et de très loin avec plus de 50% de la puissance installée et 95% de la puissance fournie (notons de plus que 100% de la puissance américaine installée l'est avec des constructeurs américains), l'Europe est deuxième et dans son sein la Grande Bretagne, suivie de la France et de l'Allemagne; mais la France était fort mal placée jusqu'à l'année dernière !

Ce changement est dû à trois nouveaux équipements en renouvellement des machines de recherche, réalisé par GENCI au CINES<sup>3</sup>, et au CCRT<sup>4</sup> et par le CNRS à l'IDRIS<sup>5</sup> :

- Février 2008 : un IBM Blue-Gene/P avec 40000 cœurs de calcul de 140 Tflops est livré à l'IDRIS
- Juin 2008 : un SGI Altix 8200 de 150 Tflops est livré au CINES
- Septembre 2008 : un Power6 IBM de 70 Tflop est livré à l'IDRIS
- Février 2009 : une extension de la machine BULL du CCRT fera passer sa puissance à plus de 150 Tflops
- Avril 2009 : un cluster de GPGPU sera adjoint à la machine du CCRT avec une puissance théorique de 200 Tflops.

**Ainsi de par ces investissements réalisés en 2008 la France présente avec la Chine la dynamique de croissance la plus forte du dernier classement du top500.**

Cet effort pour le matériel, dont 30% a été fourni par le constructeur BULL, sera suivi, nous l'espérons, par la montée en puissance et la création de nouvelles équipes pour l'exploitation optimale de ces outils et par un effort européen comme PRACE. Pour conserver cette

---

<sup>3</sup> Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur, à Montpellier.

<sup>4</sup> Centre de Calcul pour la Recherche et la Technologie du CEA civil, à Bruyère le Chatel.

<sup>5</sup> Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique du CNRS, à Orsay.

---

seconde place<sup>6</sup> en Europe 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 formant une politique cohérente de renouvellement du matériel dans une optique de pérennité et de progression régulière.**

Cette recommandation correspond, par exemple, à la présence en France fin 2009 d'une machine d'une puissance de 200 à 250 TFlops.

Il conviendra aussi en 2009 de se pencher sur le problème de la maîtrise des technologies du HPC en Europe pour pallier à la dissymétrie criante entre le marché du HPC (plus de 30% en forte croissance en Europe) et la capacité de produire les technologies correspondantes (plus de 95% aux États-Unis)

### **2.3 Les problèmes posés par le calcul intensif**

Le côté gigantesque des nouveaux ordinateurs effraie : bientôt des millions de processeurs programmés par des outils radicalement différents comme OpenMP, MPI, ou UPC et demandant une spécialisation absorbante, des consommations électriques de plusieurs mégawatt, des installations dédiées avec des circuits de refroidissement coûteux et une gestion des données aussi complexe que géante.

Toutefois le prix de ces machines reste modéré pour un grand équipement<sup>7</sup> et l'équipe technique opératrice aussi (une dizaine d'ingénieurs). Ce qui effraie réellement, et à juste titre, c'est l'effort de conversion requis des utilisateurs. Pour la recherche on peut penser que la compétitivité internationale obligera nécessairement les chercheurs à s'adapter, comme c'est le cas actuellement pour les climatologues encore attachés au calcul vectoriel, et dont il faut encourager la reconversion. Dans certaines industries, aéronautiques et automobiles en particulier, les réticences sont très fortes et chacun attend de voir si le concurrent se jettera à l'eau avant lui ou si l'état payera les coûts d'investissement. L'histoire montrant que l'architecture des super ordinateurs se translate après quelques années sur celle des mini/clusters en 5 ans et sur les PC de bureau, en 10 ans, les investissements seront presque sûrement rentables. A moins qu'une autre technologie ne remplace l'électronique sur silicium (fort peu probable mais rien n'interdit les ordinateurs quantiques dans le futur), le calcul massivement parallèle est inévitable.

### **2.4 Quels sont les utilisateurs du calcul intensif ?**

Les utilisateurs traditionnels, ceux qui ont suivi les développements de l'informatique depuis son début, utilisent les super ordinateurs quand les calculs prennent, disons, plus de 12 heures, sur leurs stations de travail. La logique voudrait qu'ils migrent d'abord sur les clusters avant de se diriger vers les machines des centres nationaux. Toutefois pour de

---

<sup>6</sup> Voir la Figure 1, plus bas. La France est derrière la Grande-Bretagne et devant l'Allemagne, de peu. Mais dans un Top100, la France serait 2<sup>ème</sup> en Europe derrière l'Allemagne.

<sup>7</sup> Entre 1 et 2 million € pour une machine téraflopique, sachant que les machines du top 5 (plus de 300 Tflops) valent plus de 50 million €

multiples raisons ces utilisateurs ne font pas toujours le dernier pas si on ne les y encourage pas.

Les nouveaux utilisateurs, applications biomédicales par exemple, sont en général dans un environnement numérique pauvre et préfèrent souvent calculer directement sur les super ordinateurs des centres nationaux.

Une utilisation optimale des ressources nationales suppose donc que la pyramide des moyens de calcul « tier0-tier1-tier2 »<sup>8</sup> soit bien dimensionnée et que les utilisateurs puissent être orientés vers l'architecture qui correspond à leurs besoins, ce qui implique en particulier l'accès pour tous à la connaissance de la science du calcul. A cet effet nous faisons la recommandation suivante, très importante pour optimiser nos ressources:

**Encourager le financement d'équipements mi-lourds (notamment au niveau des régions et des universités) pour rétablir un équilibre de la pyramide dite tier0-tier1-tier2, propice au développement du calcul intensif.**

## 2.5 L'importance des données

L'augmentation de la taille des calculs entraîne l'augmentation du nombre des données en entrées et en sortie ; inversement des analyses sur une très grande base de données peut être très couteux en calcul. L'archivage des données est un problème capital car elles sont chères à générer et elles sont réutilisables par de nombreuses équipes. En physique théorique le CERN a pris conscience assez tôt du problème et a opté pour une stratégie distribuée et interconnectée par une grille de calcul. En biologie on s'oriente plutôt vers des grands centres de données « data centers » comme le [HGC](#) de Cambridge UK et le [BSGC](#) du Lawrence Berkeley Lab. En climatologie il semble que la communauté scientifique se dirige vers une structure mixte organisée autour d'instances internationales comme le GIEC. Il n'est pas exclu de penser que les grands centres de calculs soient bientôt plus importants par leur rôle d'archive et de traitement des données numériques, plutôt que par leurs capacités de calcul ! L'ANR a semble-t-il bien pris conscience du problème et encourage les recherches sur l'analyse des données pour ou issues du calcul intensif. Par ailleurs nous avons heureusement, avec Renater, un excellent réseau pour la recherche.

## 2.6 Les outils logiciels

L'outil de programmation le plus simple, OpenMP, n'est pas adapté aux machines massivement parallèles car elles ont des mémoires distribuées ; l'outil le plus populaire est MPI, un ensemble de fonctions d'envois et de réceptions de message dans un modèle où chaque processeur exécute sa tâche indépendamment de ses voisins sauf s'il doit échanger des données avec eux, ou s'il lui est imposé d'attendre les autres.

Ce modèle risque d'être trop frustré pour la prochaine génération de super ordinateurs aux millions de processeurs *hétérogènes* et des réseaux d'interconnexion qui pourraient devenir programmables. La communauté s'orienterait alors vers des langages de programmation de plus haut niveau comme UPC (Unified Parallel C) ou CoArray Fortran (CAF, récemment

---

<sup>8</sup> 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 (les centres nationaux), le tier1 un mésocentre, et le tier2 un cluster départemental.

normalisé dans Fortran 2008) où la mémoire est en partie distribuée, en partie localement partagée, ou des langages adaptés aux architectures hétérogènes, comme CUDA (langage propriétaire de la compagnie NVIDIA) ou OpenCL, un standard en cours d'élaboration pour les accélérateurs de calcul. Pour l'instant assez peu d'applications écrites dans ces langages ont tourné sur un grand nombre de processeurs. L'algorithmique pour ces architectures complexes est un vrai casse-tête ; il est donc clair qu'elle fera l'objet de nombreuses recherches aboutissant à des outils publics probablement sous forme de bibliothèque.

En France les chercheurs capables d'écrire un code optimisé sur plusieurs milliers de processeurs sont en nombre très insuffisant. La situation n'est pas meilleure dans les autres pays. *Il y a donc un besoin urgent d'outils plus conviviaux ; soit de nouveaux langages soit de bibliothèques qui cachent le bas niveau du parallélisme, soit de logiciels applicatifs un peu généraux.* Comme la France s'équipe de machines originales — comme les Novascale de Bull— une partie de ces développements lui sont nécessaires, comme ce fut le cas par exemple pour adapter le logiciel LUSTRE au CEA/DAM, et même s'ils sont dans l'environnement des logiciels libres il est sage de pouvoir disposer d'équipes qui puissent faire ces recherches sur le sol national ; *le programme COSINUS de l'ANR est le bon outil pour encourager la recherche dans ce domaine mais trop peu de propositions lui sont faites.* Par ailleurs à notre connaissance aucun organisme en France n'est capable de soutenir une recherche non-contractuelle sur ce sujet très appliqué pendant une décennie, alors que c'est précisément la raison du succès des équipes des laboratoires du DoE aux États-Unis. Nous faisons donc la recommandation suivante :

**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.**

## 2.7 La formation

La formation en calcul scientifique est un problème difficile à résoudre. Pour de nombreux domaines scientifiques la simulation est une technique nouvelle et la génération au pouvoir dans les universités et les écoles d'ingénieur ne la connaît pas. Rajouter des cours dans une filière est toujours très difficile ; recruter des enseignants / chercheurs dans une matière étrangère au jury est encore plus problématique ! Il semble donc, à l'instar d'université comme UC-Berkeley, plus facile d'offrir aux doctorants un complément de formation en calcul scientifique adapté à sa recherche ; mais là encore il faut être conscient de la difficulté d'enseigner l'algèbre linéaire à un spécialiste d'une science qui n'est pas un mathématicien ; non pas qu'il ne soit pas au niveau mais parce que ce n'est pas sa priorité première. Il faut donc créer des lieux de rencontre, des instituts du calcul par exemple, disposant de ressources incitatives, comme une mention « calcul scientifique » sur le diplôme, comme des bourses industrielles, des chaires prestigieuses etc. Tout ceci reste à faire car pour l'instant, en France, à de rares exceptions (comme le mastère HPC conjoint à UVSQ, ECP, ENS-Cachan, ou la troisième année de l'ENSEIRB sur le parallélisme à Bordeaux) seules existent les formations de courtes durées sur des thèmes restreints, comme la programmation MPI, CUDA....d'où notre avant dernière 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.**

## 2.8 Le calcul intensif dans l'industrie

Les industriels sont de sérieux utilisateurs du calcul scientifique : une fois la culture absorbée aucun ne revient en arrière, même si certaines équipes de développements ont été externalisées chez des sous-traitants ou au profit de logiciels « sur étagères » pour des raisons de coûts.

Deux obstacles s'opposent à l'adoption du calcul parallèle dans les industries qui pratiquent déjà la simulation :

- a) Les coûts et la faible scalabilité des logiciels commerciaux
- b) Les coûts ingénieurs de formation et d'exploitation

On ne peut résoudre le a/ qu'en ayant un partenariat privilégié avec l'éditeur du logiciel ; mais l'expérience avec des logiciels comme Fluent ou Gaussian montre que l'adaptation est longue, obligeant parfois l'industriel à abandonner le vendeur au profit de logiciels libres (c'est le choix fait, par exemple, par Hutchinson).

Pour le point b/ l'État peut avoir une grande influence en mettant en place des programmes incitatifs pour aider les industriels à réduire les coûts de la transition vers le calcul intensif. Citons par exemple les conventions CIFRE ou la possibilité de participer à des projets financés par l'ANR. Toutefois nous constatons que l'accès aux machines massivement parallèles pour les industriels (et surtout les PME) n'est pas facile. Certes, plusieurs groupements appuyés sur les organismes de recherche publique permettent de pallier à cette difficulté, tels que l'association Ter@Tec (appuyé sur le CEA) ou le CERFACS (avec la participation du CNES et de l'ONERA).

Enfin, pour un industriel, le calcul n'est pas une fin en soi, mais doit s'intégrer dans une chaîne complexe de conception. Force donc est de constater qu'il n'existe pas de programme technologique pour le portage et l'adaptation d'une chaîne de calcul industrielle à une algorithmique massivement parallèle, comparable au programme INCITE du DoE américain. Nos dernières recommandations proposent de :

**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 mésocentres<sup>9</sup>.

## 2.9 Le colloque Penser le Pétaflops

Le CNRS a organisé en Mai 2008 un colloque suivi de 4 ateliers de travail pour identifier les problèmes que pose l'utilisation des futures machines pétaflopiques et de leurs cent milles nœuds de calcul. Ces 4 ateliers sont les suivants :

1. L'infrastructure du calcul intensif : des mesocentres aux centres de calcul pétaflopiques ;

---

<sup>9</sup> 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.

2. Mutualisation des codes et des grands outils logiciels ;
3. Quelles architectures et quels algorithmes pour quelles applications ? ;
4. Les métiers du calcul intensif : formation, recherche et débouchés.

Ces ateliers ont fait l'objet de rapports qui seront prochainement disponibles sur le site du colloque<sup>10</sup>

Parmi les discussions qui ont eu lieu lors de la journée de restitution des ateliers de travail de « Penser le Petaflops » organisée en novembre 2008 on peut retenir :

- Le besoin d'élargir le périmètre du calcul intensif aux industriels et notamment aux PME en leur proposant une offre de service intégré (accès sécurisé et performant aux supercalculateurs, licences logicielles, formation, information, support, ...). Le rôle de GENCI, des pôles de compétitivité mais aussi des mésocentres lien de proximité essentiel vers les PME a été mis en avant.
- La proposition de la CPU de mener une réflexion avec l'aide de GENCI autour de la structuration du réseau des mésocentres français.

## **2.10 L'ANR**

A l'occasion de la réorganisation des programmes « STIC » de l'ANR, le programme « Conception et Simulation » (Cosinus) a pris en 2008 la suite du programme « Calcul Intensif et Simulation », avec un périmètre plus vaste. Pour sa première année, 16 projets ont été sélectionnés, sur un total de 56 projets soumis, pour un montant d'aide accordée d'environ 15 M€. Des projets comportant une partie de calcul ont probablement été soumis à d'autres programmes, mais leur dispersion rend délicate une évaluation précise. Nous ne disposons pas de statistiques précises à ce jour.

Le CSCI souligne l'importance de ce programme, dont l'existence doit être maintenue, tout en augmentant la visibilité des axes liés au Calcul Intensif dans le programme. Étant donné l'importance stratégique du calcul intensif et de la simulation numérique pour, et du retard pris les années précédentes, il serait souhaitable que ce programme puisse financer plus de projets. Pour cela, il pourrait être utile de fixer le seuil d'acceptation usuel de l'ANR à une valeur plus élevée pour ce programme, tout en conservant naturellement un niveau de qualité convenable.

## **2.11 Les infrastructures françaises**

### **La situation fin 2007**

Jusqu'à fin 2007, la situation française concernant l'équipement en supercalculateurs était préoccupante : avec 3,4% de la puissance totale du classement du Top500, la France se classait loin derrière le Royaume-Uni (9,6%) et l'Allemagne (6,2%). La capacité totale des centres nationaux était de 21 Tflops, et seules deux machines se classaient dans le Top500, aux 459<sup>ème</sup> et 480<sup>ème</sup> places. Et encore, si la France pouvait faire illusion dans ce classement, c'était en grande partie grâce aux deux machines Bull-Novascale du CEA (classées 19<sup>ème</sup> et 26<sup>ème</sup>), et aux industriels, puisque 11 machines figuraient dans ce classement.

L'IDRIS était à cette période équipé principalement par un IBM Power-5, et un NEC-SX8 (vectorel, d'une puissance de 1,3 Tflops). Le CINES possédait un IBM Power-4 et une ferme HP, d'une puissance totale de 4 Tflops. Une machine SGI avait été arrêtée en 2007,

---

<sup>10</sup> <http://www.insu.cnrs.fr/co/penser-petaflops/colloque>

après 7 ans de fonctionnement. Les deux centres de calcul n'avaient pas renouvelé leurs matériels depuis plusieurs années. Notons que le CCRT disposait à ce moment d'un calculateur Bull d'une puissance de 42 Tflops.

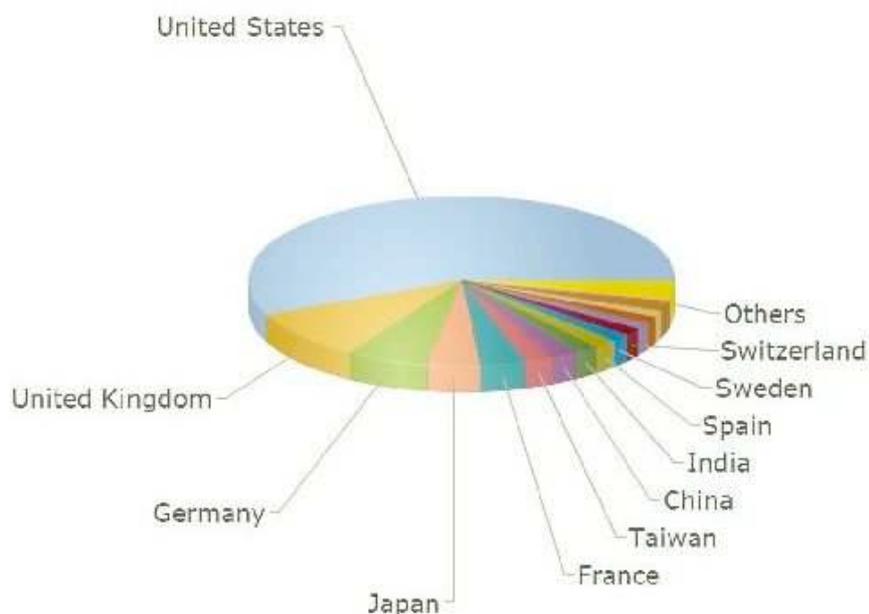


Figure 1: répartition de la puissance de calcul par pays en Novembre 2007

Cette insuffisance de moyens était durement ressentie par la communauté scientifique du calcul intensif. Lors d'une séance du CSCI, le président du Comité des Utilisateurs du CINES avait déclaré que d'une part la communauté censurait ses demandes pour s'ajuster à l'offre disponible (ce qui fait que cette demande ne fournissait pas un élément pertinent pour dimensionner les futures machines), allant même jusqu'à ne pas recruter de doctorants dans ces sujets ; d'autre part qu'un nombre croissant de chercheurs « quittaient la France », virtuellement, pour calculer sur des machines situées à l'étranger, privant ainsi la France des fruits d'une partie de la recherche dans ce domaine. Les résultats de projets français à forte visibilité, comme le projet Horizon en astrophysique, ou AVBP en combustion ont été obtenus sur des calculateurs situés à l'étranger.

## Les investissements 2008

La stratégie d'équipement des centres nationaux (le CCRT<sup>11</sup> pour le CEA, l'IDRIS<sup>12</sup> pour le CNRS et le CINES<sup>13</sup> pour les Universités) fait l'objet dans le cadre de GENCI d'une programmation sur 2 ans remise à jour annuellement. Cette programmation vise à mettre en place des moyens complémentaires dans les différents centres afin de répondre au mieux aux priorités scientifiques et à la variété des besoins, en dehors des grilles de calcul dont il sera question plus loin.

Aujourd'hui, quatre grandes classes de supercalculateurs susceptibles de répondre à des besoins de production se distinguent :

<sup>11</sup> CCRT – Centre de Calcul Recherche et Technologie : <http://www-ccrt.cea.fr>

<sup>12</sup> IDRIS - Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique : <http://www.idris.fr>

<sup>13</sup> CINES – Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur : <http://www.cines.fr>

- 
- Les machines massivement parallèles (MPP : massively parallel processor),
  - Les grappes de serveurs à base de nœuds de grande diffusion (SMP-TN : symmetric multiprocessor – thin nodes),
  - Les grappes de serveurs à base de nœuds à haute performance (SMP-FN : symmetric multiprocessor – fat nodes),
  - Les machines parallèles à base de processeurs vectoriels.

L'analyse faite en 2007 dans le cadre de la première programmation montrait, outre le retard important de la France par rapport aux autres pays Européens en terme de puissance globale de calcul, l'absence dans le parc existant de supercalculateurs de type MPP et de type SMP-TN. Un grand nombre d'applications importantes était susceptible d'utiliser efficacement de tels moyens.

Le plan mis en œuvre par GENCI sur la base de cette analyse conduit à la mise en place en 2008 de supercalculateurs de la classe SMP-TN (au CINES et au CCRT) et d'étendre le calculateur vectoriel du CCRT. S'y ajoutent les investissements du CNRS à l'IDRIS, consistant en un supercalculateur de classe MPP et le renouvellement d'une composante SMP-FN.

Ainsi l'année 2008 conduit à des réalisations majeures, qui seront mises au service de la communauté scientifique par GENCI ou avec sa coopération :

- Installation par GENCI au CCRT d'une machine de type SMP-TN couplée avec des accélérateurs graphiques (GPU) en extension du calculateur BULL existant. Cette machine hybride, qui sera installée en début 2009, bénéficiera des nouvelles générations de processeurs Intel pour une puissance de 103 Tflops et des nouvelles générations de processeurs graphiques Nvidia pour une puissance de 192 Tflops (simple précision). Le coût des serveurs Nvidia est d'environ 5% du montant total de l'achat d'où l'intérêt pour cette technologie dont le rapport performance/prix est exceptionnel pour des applications ciblées, pouvant s'accommoder des particularités (et des insuffisances) des processeurs GPU.
- Installation en juillet 2008 par GENCI au CINES d'une machine de type SMP-TN pour une puissance de 147 Tflops (SGI Altix ICE 8200).
- Installation par GENCI au CCRT de 3 nœuds NEC SX9 (5 Tflops, 16 processeurs, 1To de mémoire par nœud). Cette installation aura lieu fin mars 2009 et permettra ainsi à la communauté des climatologues de tenir les engagements pris par la France dans le cadre du 5<sup>ème</sup> programme du GIEC.
- Installation par le CNRS à l'IDRIS d'une machine de type MPP pour une puissance de 139 Tflops (IBM Blue Gene/P) et d'une machine de type SMP-FN pour une puissance de 68 Tflops (IBM Power 6)<sup>14</sup>.

Ces évolutions permettent ainsi de passer d'une capacité totale disponible de 20 Tflops en 2007 à plus de 476 Tflops en début 2009. Elles permettent également de donner accès à la communauté scientifique à des configurations MPP et GPU afin de la préparer à utiliser au mieux les évolutions technologiques.

---

<sup>14</sup> Dans son rapport intermédiaire de février, le CSCI s'est félicité de l'arrivée de ce calculateur, qui rappelons-le (ou déplorons le), a été financé par le CNRS sur des crédits qui auraient dû transiter par Genci.

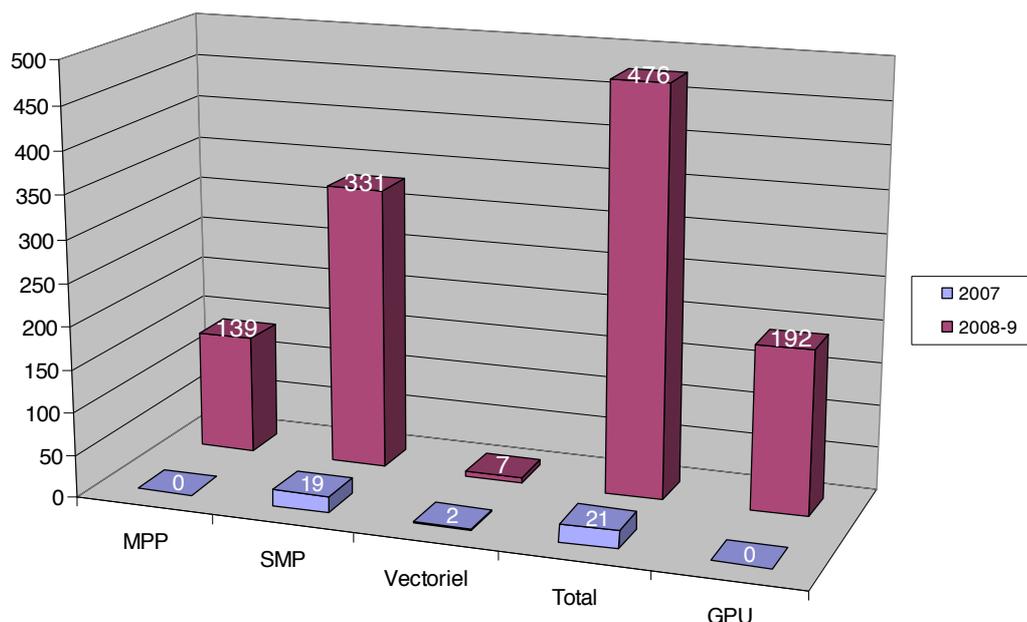


Figure 2: Évolution de la capacité de calcul disponible à l'ensemble de la communauté scientifique entre 2007 et fin 2008/début 2009

## 2.12 Le projet PRACE

En signant le 17 Avril 2007, le « Memorandum of Understanding » PRACE15, les représentants de 14 pays européens ont affirmé leur intérêt pour la mise en place d'une Infrastructure de Recherche dédiée au calcul intensif, du meilleur niveau mondial. GENCI est le représentant français dans ce partenariat, appelé « Initiative PRACE ».

Les partenaires ont ensuite déposé un projet européen de phase préparatoire auprès de la CE, dans le cadre du premier appel à propositions Infrastructures du 7ème PCRD. Ce projet, appelé « projet PRACE », est coordonné par le directeur du FZJ (Jülich). Il a débuté le 1er janvier 2008 pour une durée de 2 ans.

### L'initiative PRACE : objectifs, partenariat et échéances

En novembre 2006, ESFRI, le Forum stratégique européen sur les infrastructures de recherche, a présenté sa première feuille de route, après deux ans de travaux. Ce document recense « 35 projets d'infrastructure de recherche d'intérêt paneuropéen à différents stades de développement et 7 domaines de recherche principaux: sciences de l'environnement; énergie; sciences des matériaux; astrophysique, astronomie, physique nucléaire et des particules; sciences biomédicales et du vivant; sciences humaines et sociales; informatique et traitement des données. »

Parmi ces 35 projets, le besoin d'une infrastructure paneuropéenne de calcul intensif de classe pétaflopique a été reconnu comme indispensable et critique pour la compétitivité européenne. Différents états-membres ont décidé de se coordonner afin de créer une telle structure et ont lancé l'Initiative PRACE par la signature d'un « Memorandum of Understandings PRACE » le 17 avril 2007.

<sup>15</sup> <http://www.prace-project.eu/>

---

L'objectif principal de l'Initiative PRACE est de préparer une structure européenne pour financer et opérer une infrastructure de calcul intensif au meilleur niveau mondial dès 2010.

Le projet est structuré en 8 workpackages (WP1.WP8), étroitement interconnectés, allant de la gestion de l'initiative jusqu'au développement de systèmes prototypes.

S'agissant du budget, le projet PRACE est doté d'une subvention communautaire de 10M€ pour un budget total de 20M€ GENCI et ses associés bénéficient d'un financement communautaire de 833K€

### **Composition du Partenariat de l'Initiative PRACE**

Le « Memorandum of Understanding » PRACE comprend :

- partenaires principaux : Allemagne, France, Pays-Bas, Espagne et Royaume-Uni.
- 9 partenaires généraux : Autriche, Danemark, Finlande, Grèce, Irlande, Italie, Norvège, Pologne, Portugal, Suisse, Suède et Turquie.

Les partenaires principaux sont les pays candidats pour l'accueil des futures machines de classe pétaflopique et ont de ce fait un rôle décisionnaire majeur dans la gouvernance de l'Initiative PRACE.

### **Bilan des 9 premiers mois de fonctionnement du projet PRACE**

Il ressort notamment des travaux des workpackages les réalisations suivantes :

- Dans le cadre du WP3 : recensement des besoins de formation des utilisateurs européens, organisation d'une école d'été en août 2008 à Stockholm et d'un séminaire industriel en septembre à Amsterdam (co-organisé par la France, l'Allemagne et la Hollande) auquel une centaine de participants représentant 43 compagnies européennes ont participé.
- Dans le cadre du WP6 : il ressort que quatre codes français (NEMO, SATURNE, AVBP, TRIPOLI) ont été retenus parmi les 20 applications sélectionnées en tant que benchmark des futures infrastructures
- Dans le cadre du WP7 : un ensemble de 6 prototypes de systèmes de production « petascalables » a été mis en place. Pour la France un prototype a été proposé par GENCI basé autour d'une réponse commune CEA/FZJ avec un cluster de type SMP-TN BULL doté de processeurs nouvelle génération Intel Nehalem.
- Enfin dans le cadre du WP8 : Lancement d'une procédure de sélection de prototypes système présentant un intérêt technologique de façon à préparer les futurs systèmes de production au-delà de 2010. Au niveau français, deux projets ont été proposés par GENCI : un prototype CINES en partenariat tri-partite avec LZR et NCF (SGI UV/ICE2 + accélérateurs Clearspeed et Intel Larabee) et un prototype CEA (basé sur des accélérateurs NVIDIA TESLA).

### **Sélection des sites d'implantation des machines dans le cadre de WP7**

Un Workshop, regroupant tous les représentants des sites, a été organisé les 2 et 3 octobre en Suisse afin d'aboutir à une synthèse technique homogène. La France a été le seul partenaire principal à proposer un dossier de candidature unique coordonné par GENCI (dans le cadre du Centre Jacques-Louis Lions). Le Royaume-Uni a présenté deux sites et l'Allemagne en présentera certainement trois.

---

## 2.13 Le complexe de calcul du CEA

La volonté du CEA d'être un acteur majeur dans les domaines de la simulation numérique et du calcul haute performance se traduit par un ensemble d'actions, comprenant, outre le CCRT : le Très Grand Centre de Calcul (TGCC), l'Institut Jacques-Louis Lions, Ter@tec, le Laboratoire Architecture & Système, le Laboratoire de Conception des Systèmes Complexes, et la Maison de la Simulation,

Elles se résument de la manière suivante :

### **Disposer de la puissance de calcul nécessaire.**

Les investissements du CCRT sont réalisés en partenariat avec de grands industriels : EDF, SAFRAN, ASTRIUM (ensemble environ 40%) et la Défense (environ 12%). Il permet ainsi à l'ensemble du dispositif de profiter des retombées du projet TERA du CEA/DAM et de minimiser les coûts de fonctionnement. Par ailleurs depuis 2007, la Maîtrise d'ouvrage « CEA civil » du CCRT a été transférée à l'entité nationale GENCI.

Pour répondre à l'accroissement considérable des besoins civils, le CEA a lancé en 2007, dans le cadre du contrat de plan CEA/État/Région, la construction sur le site de Bruyères le Châtel, d'un « Très Grand Centre de Calcul » (TGCC) qui prend en compte dans ses spécifications les besoins potentiels d'un Centre de calcul européen Tier0 (projet PRACE).

Il est en effet nécessaire pour la candidature de la France, portée par GENCI, à recevoir l'une des toutes premières machines européenne de disposer d'une infrastructure de classe mondiale.

### **Maîtriser les technologies d'accès aux grandes puissances de calcul.**

Le CEA/DAM a créé en 2003 *Ter@tec* et signé des accords bilatéraux avec des industriels (BULL, Quadrics, INTEL, CAPS) et des laboratoires de recherche, notamment l'INRIA/Rennes et l'Université de Versailles St-Quentin. La nouvelle (et maîtresse) pièce de ces opérations va être le *Laboratoire Architecture et Système* créé en commun par le CEA/DAM et BULL et financé dans un premier temps par le contrat TERA100. Il prend une dimension européenne avec l'accord sur les technologies du HPC signé en février entre le CEA et le Centre de Calcul de Jülich. Les deux partenaires ont déclaré vouloir répondre ensemble et de manière cohérente au projet PRACE.

### **Promouvoir la simulation comme vecteur de la compétitivité**

Cet objectif est porté par *Ter@tec* qui, depuis sa création en 2003, réunit industriels fournisseurs et utilisateurs, grands laboratoires et universités, entités politiques intéressées au développement de la simulation numérique et du calcul haute performance au travers de coopérations Recherche-Industrie ou Recherche-Industrie-Défense. Le CEA a annoncé, dans ce cadre, la création du *Laboratoire de Conception des Systèmes Complexes*.

Autour de ce noyau, *Ter@tec* se dote de moyens pour accueillir, en 2010, dans les nouvelles installations de son campus des laboratoires de grandes entreprises fournisseurs de technologies comme BULL, INTEL, SUN ...

### **Aide aux chercheurs pour l'utilisation optimale des ressources**

L'effort à faire sur les logiciels, et notamment sur les grands logiciels de simulation numérique utilisés dans le monde de la Recherche est extrêmement important mais difficile à organiser. En effet, un des éléments clé est la bonne prise en compte de l'interdisciplinarité entre Physique, Modélisation, Mathématiques-Numérique et Informatique. La création du

---

laboratoire Jacques-Louis Lions et de la maison de la Simulation, dans le cadre de l'accord CEA-CNRS, ont ces recherches pour objectifs.

### **2.14 Les accords CEA-CNRS et les projets de l'INRIA**

Pour assurer la maîtrise d'œuvre de l'exploitation du futur centre européen, abrité dans le TGCC, et coordonner leurs investissements, le CEA et le CNRS ont annoncé la création d'une structure légère commune : le *Centre Jacques-Louis Lions*. Il sera responsable, entre autres, du réseau et des protocoles de communication entre les machines des deux signataires.

*La Maison de la simulation*, réalisée dans le cadre de l'opération nationale du Plateau de Saclay et installée à proximité des équipes de recherches du CEA et du CNRS, vise à permettre les échanges et le travail en commun de chercheurs européens impliqués dans des travaux liés à la simulation et ainsi de tirer le meilleur parti des moyens de calcul disponibles. Elle offrira, en outre, l'accès à des équipements complexes et coûteux comme les murs d'images ou autres outils de visualisation absolument nécessaires pour une interprétation des simulations numériques hautes performance. Enfin, elle participera aux actions de formation en matière de calcul intensif.

Par ailleurs l'INRIA, qui développe depuis de nombreuses années des compétences en modélisation, en algorithmique et en développement de middleware, souhaite renforcer de manière significative ses actions de recherche en calcul intensif en candidatant à GENCI (comme cela est prévu par le plan « France Numérique 2012), et en rentrant dans le projet de la Maison de la Simulation.

## **3 La simulation et son environnement**

### **3.1 Généralités**

La simulation est une forme d'expérimentation virtuelle sur ordinateur. De nombreuses expérimentations constituent elles-mêmes des simulations de la réalité : par exemple les essais en souffleries pourraient être qualifiés de simulations « analogiques » dans la mesure où ils ne rendent pas compte complètement de ce qui se passe dans le milieu naturel qui est presque de taille infinie.

Mais, comme dans beaucoup d'autres domaines, le numérique a progressivement remplacé l'analogique ; l'expérimentation numérique, plus souple, plus rapide, moins chère tend à supplanter, ou au moins à compléter, l'expérimentation. La substitution à l'expérience s'impose

- Dans le cas où les essais sont impossibles à réaliser,
- dans le cas où les essais sont possibles mais trop dangereux et
- dans le cas où elle est trop coûteuse ou trop longue à réaliser.
- Par ailleurs l'archivage de la connaissance, l'optimisation du design et l'automatisation des chaînes de fabrication se marient bien avec la simulation<sup>16</sup>.

---

<sup>16</sup> Rappelons à ce sujet que le plus utilisé des systèmes de CAO est français (Catia, conçu par Dassault System).

---

## La simulation numérique classique

### La modélisation physico-numérique

La simulation numérique s'est initialement développée pour permettre des calculs plus rapides ou pour résoudre des équations ou des systèmes d'équations non résolubles analytiquement. Elle est basée sur des « modèles » de comportement, mathématiques ou logiques, représentant les lois de la nature (Physique, Mécanique, ...) où encore, quand elles ne sont pas connues, sur des systèmes logiques ou crédibles, comme l'activité d'opérateurs humains.

La validité et la précision de ces modèles ont en général été préalablement vérifiées expérimentalement, et les algorithmes de résolution numérique associés (les solveurs) ont été optimisés.

### Simulation numérique et réalité physique

Alors que la réalité physique enchaîne et imbrique « naturellement » les phénomènes, la simulation numérique doit modéliser cette interaction. Dans de nombreuses simulations, on admet que le couplage n'a pas besoin d'être fort (aérothermique, aéroélasticité, par exemple) et on le réduit à un échange de données à intervalle régulier, sans que l'on perde trop en représentativité de la réalité.

Quand le découplage n'est plus réaliste mais que l'on sait coupler les équations aux dérivées partielles entre elles, la simulation reste viable au prix d'un accroissement des coûts de calcul. Mais dès que les échelles caractéristiques des phénomènes diffèrent (multi-échelles) au point que certaines grandeurs n'ont plus de sens à certaines échelles (comme la température dans un gaz raréfié...), la modélisation devient complexe (multi physique), et difficile à valider.

### Vérification et validation

La simulation traite rarement la totalité des phénomènes mais elle peut décrire le détail des événements pris en compte, ce qui en permet une analyse fine pour remonter à des causalités. Son résultat doit être validé et ceci reste un problème essentiel pour la simulation. Elle doit être faite à tous les niveaux, depuis la vérification des programmes informatiques jusqu'aux comparaisons expérimentales. Par ailleurs les données expérimentales sont entachées d'erreur ce qui, en toute rigueur, oblige la simulation à être stochastique.

### La simulation est en constante mutation

Par exemple :

- Dans son exploitation habituelle, la simulation numérique est caractérisée par la production de données à partir de modèles pré-établis. Les outils d'analyse des données ont permis d'améliorer considérablement le traitement des résultats ; il est donc devenu possible de construire numériquement des modèles à partir des données.

- Les techniques de réduction de modèles et certaines méthodes d'optimisation exploitent des données expérimentales ou obtenues numériquement à partir de modèles pré-établis (les « clichés » c'est-à-dire des points de fonctionnement) pour établir de nouveaux modèles, parfois non physiques, mais avec moins de degrés de liberté.
- Les techniques pour prendre en compte le caractère incertain de la plupart des données d'une simulation se développent rapidement. Connaissant des informations sur la distribution probabiliste des données, on peut maintenant obtenir les informations correspondantes sur la solution, par exemple à l'aide des développements stochastiques en polynômes de Wiener.

## Conséquences

De consommatrice de modèles pour produire des données, la simulation devient aussi consommatrice de données pour produire des modèles.

Sous de nombreux aspects, cette évolution a des conséquences :

- une certaine réorientation des besoins en analyse numérique vers les méthodes de traitement des données (analyse stochastique, méthodes d'identification...)
- corrélativement, la fonction gestion des données devient plus importante que la fonction calcul, ce qui a considérablement changé la technologie des machines de calcul intensif, et de là le savoir-faire nécessaire à la conception de telles machines,
- une implication plus forte du « thématicien », qui ne peut plus ignorer les aspects numériques,
- l'interface homme/machine devient essentielle

Cette évolution de la simulation n'est pas sans incidence sur la formation des chercheurs et des ingénieurs.

### 3.2 Les domaines d'application

Comme nous l'avons annoncé dans l'introduction, le CSCI ne s'est pas donné pour objectif en 2008 l'exploration de tous les domaines d'application du calcul. Toutefois nous donnons ici une liste brève et incomplète des principaux domaines.

#### Géophysique

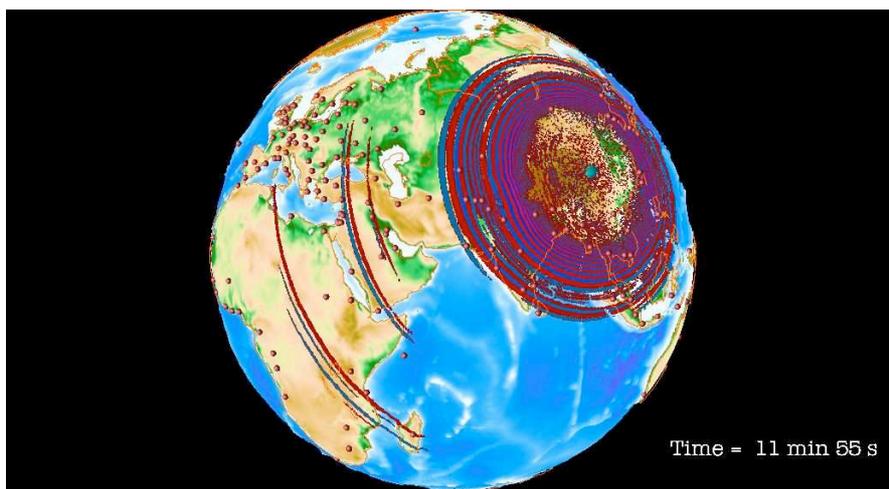
La géophysique a été l'un des premiers utilisateurs historiques du calcul intensif, avec la prospection sismique pour les compagnies pétrolières. Un des objectifs consiste à produire une image du sous-sol, à partir d'enregistrements produits par des sources explosives en différents points de la surface. Cette application est toujours une grande consommatrice de calculs, dans la mesure où la puissance nécessaire dépend directement de la résolution souhaitée sur l'image finale, et que le nombre de sources, et les fréquences utilisées continuent d'augmenter. La sismique tridimensionnelle est maintenant d'usage courant. Fort heureusement, les calculs sous-jacents recèlent un très grand degré de parallélisme.

Même si elle en représente encore l'immense majorité, l'exploration du sous-sol ne se limite pas à la sismique. Les méthodes électromagnétiques (basées sur la résolution des équations de

Maxwell) sont un complément utile. Par ailleurs, ils permettent aussi de détecter des objets métalliques enfouis (mines). Naturellement, l'utilisation simultanée de plusieurs de ces techniques est possible (sismique 4D pour suivre l'évolution d'un réservoir pétrolier).

L'autre champ d'application en géophysique est celui des écoulements de fluides souterrains. Deux grands domaines sont l'hydrogéologie et la simulation de réservoirs pétroliers. En hydrogéologie, on cherche à simuler l'écoulement de l'eau et le transfert de solutés dans le sous-sol. Les principales difficultés sont le caractère hétérogène du sous-sol, les différentes échelles tant spatiales que temporelles, et la variété de phénomènes physiques à prendre en compte. Les applications sont nombreuses, depuis l'évolution des nappes phréatiques, jusqu'à la sûreté des sites de stockage de déchets, en passant par le stockage géologique du gaz carbonique. La simulation de réservoirs pétroliers permet d'optimiser l'extraction de pétrole, et de planifier le rendement d'un gisement pétrolier pendant sa durée d'exploitation en vue notamment de maximiser le taux de récupération d'huile.

Il y a de nombreuses autres applications, qu'il n'est pas possible d'énumérer : par exemple, la prévision des tremblements de terre, l'histoire géologique d'un bassin, la tectonique des plaques, etc. Pour illustrer l'apport du calcul intensif, mentionnons les récentes simulations, à l'échelle de la planète, des ondes sismiques observées lors d'un grand tremblement de terre. La figure ci-contre, calculée avec le logiciel [SPECFEM3D](#) montre bien l'intérêt d'une telle simulation.



**Figure 3: Simulation à très haute résolution de la propagation des ondes sismiques suite au tremblement de Terre du Sichuan en Chine en mai 2008, modélisée au CINES avec le logiciel SPECFEM3D (D. Komatitsch, Université de Pau et des Pays de l'Adour, MIGP CNRS, INRIA Bordeaux Sud-Ouest)**

## Chimie ab-initio et dynamique moléculaire

La simulation de la matière aux niveaux atomique et moléculaire constitue une des plus importantes applications du calcul intensif. Les problèmes de ce domaine s'étendent sur une grande gamme d'échelle de temps et d'espace et nécessitent diverses approches théoriques. Pour les petits systèmes (quelques Angströms) et les échelles de temps courtes (quelques picoseconde), les techniques basées sur la mécanique quantique (MQ), telles que la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT<sup>17</sup>), sont, en principe, les plus précises. Pour les systèmes plus grands et les échelles de temps plus longues, les méthodes MQ sont trop coûteuses et

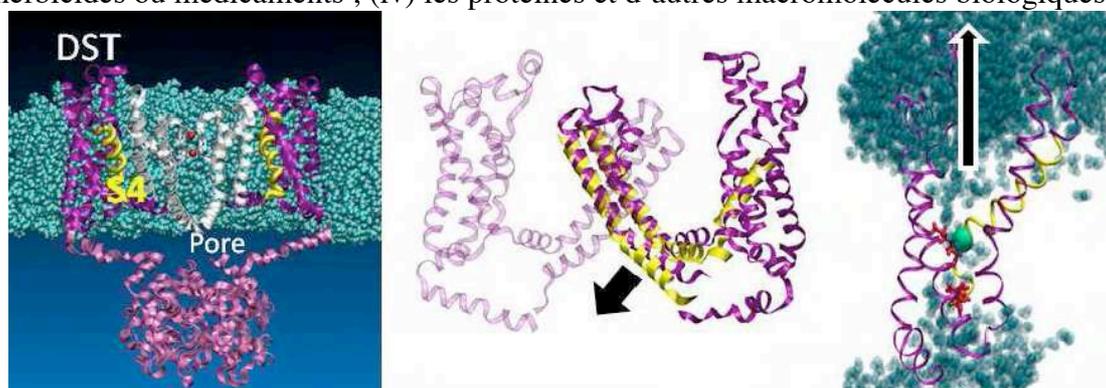
<sup>17</sup> A. R. Leach, “. « Molecular Modelling: Principles and Applications » » (second edition). Prentice- Hall, 2001.

donc des approches plus rapides et plus approximatives sont utilisées, telles que la mécanique moléculaire et la mécanique du continu.

Parmi les défis prioritaires pour le calcul intensif dans ce domaine on peut citer: (i) l'étude des plus gros systèmes avec les méthodes MQ; (ii) la simulation des processus moléculaires qui s'étendent sur la milliseconde ou plus; et (iii) le développement des approches intégrées pour simuler les processus multi-échelles.

## Chimie et biochimie

La simulation est un outil essentiel dans différents domaines industriels où soit la compréhension d'un système moléculaire existant soit la conception ou l'ingénierie d'un système novateur est nécessaire. Des exemples de tels systèmes comprennent: (i) les catalyseurs, organiques ou inorganiques, ou les enzymes qui accélèrent les réactions chimiques; (ii) les matériaux avec les propriétés spécifiques (électroniques, mécaniques ou thermiques); (iii) les molécules qui bloquent un processus biologique et pourraient agir en tant qu'herbicides ou médicaments; (iv) les protéines et d'autres macromolécules biologiques.



**Figure 4:** Simulations de dynamique moléculaire du canal ionique sensible à la tension Kv1.2. A droite, représentation du système total (~300 000 atomes) comprenant le canal (rose), la membrane lipidique (bleu), et la solution non représentée ici. Au centre, changements conformationnels observés après 800 nanosecondes de simulation. A gauche, les résultats correspondant à la conséquence de mutations. Les calculs montrent que ces mutations, incriminées dans des pathologies génétiques (Mounir Tarek, CNRS/université de Nancy).

## Mécanique, aérodynamique

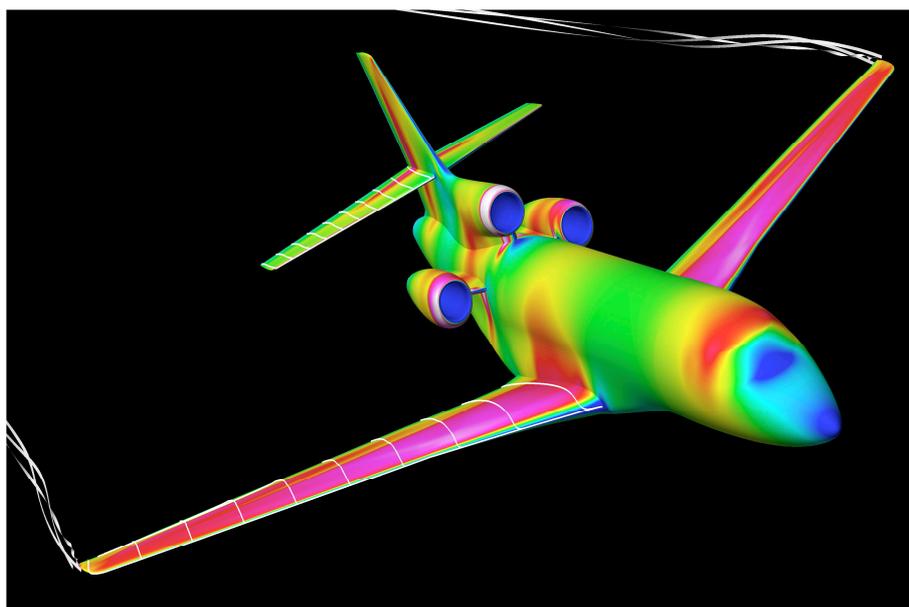
La mécanique des fluides couvre différents domaines comme l'hydrodynamique (avec des écoulements pouvant présenter des changements de phase), l'aérodynamique (avec l'hyperonique), la combustion,... Dans chacun de ces domaines, différents niveaux de modélisation physique existent suivant le degré d'approximation qu'il est pertinent de retenir. C'est le cas par exemple de la turbulence et des écoulements raréfiés. Les approches les plus fines nécessitent des ressources de calcul importantes (Direct Navier Stokes ou même Large Eddy Simulation, pour les écoulements turbulents). Les schémas numériques et les algorithmes de résolution ont été au cœur de nombreux travaux (maillage structuré/ non-structuré, approche multigrille, solveur, méthodes implicites,...) et constituent un domaine de recherche toujours actif. En particulier l'apparition de machines massivement parallèles soulève de nouvelles questions.

Le domaine de la mécanique a utilisé aussi depuis longtemps le calcul scientifique et de nombreux logiciels sont commercialisés pour le calcul de structure. La modélisation des

matériaux composites, l'analyse des procédés de fabrication, le comportement non linéaire et les endommagements constituent des axes de recherche.

Dans le domaine de l'électromagnétisme et des équations des ondes (acoustique) de nouvelles méthodes numériques ont vu le jour comme les méthodes multipôles rapides.

L'aéronautique utilise largement le calcul intensif depuis de nombreuses années. L'objectif est de pouvoir améliorer les performances des produits (par exemple baisse de la consommation en carburant des avions, réduction du bruit, ...) de réduire les durées et les coûts de développement. Certaines simulations sont arrivées à un bon niveau de maturité et sont mises en œuvre quotidiennement. En aérodynamique, le comportement d'un avion en régime de croisière est correctement prédit aujourd'hui par les codes de calculs. Airbus par exemple effectue en moyenne 250 calculs Navier Stokes par jour avec des maillages d'environ 30 millions de points (le plus gros calcul Navier Stokes sur une configuration industrielle ayant dix fois plus de maille). Pour un avion au décollage, par contre, des progrès sont encore nécessaires dans le domaine de la modélisation des écoulements turbulents présentant de fortes zones décollées avec des géométries complexe (voir par exemple<sup>18</sup>). Le calcul intensif permet aujourd'hui de traiter des couplages multidisciplinaires avec un niveau de modélisation plus fin, de faire des boucles de calcul pour rechercher la solution optimale et de construire des bases de données. L'aérodynamique continue à avoir des besoins en forte augmentation. Nous assistons aussi aujourd'hui dans le domaine de l'aéronautique à une montée en puissance d'autres disciplines qui utilisent depuis longtemps le calcul scientifique mais qui ont maintenant besoin de traiter des problèmes de grandes tailles comme le calcul de structure, les calculs de performances, l'acoustique, ...



**Figure 5: Calcul 3D Navier-Stokes du Falcon 7X**  
(Code elsA de l'ONERA Conditions: vol de croisière Couleurs = pressions)

Les industriels de l'aéronautique ont été parmi les premiers utilisateurs de supercalculateur et ceci dès la fin des années 1980. Le recours à la simulation comme moyen efficace de conception dans un contexte multidisciplinaire fort s'est généralisé lorsque les calculateurs parallèles ont pu offrir une puissance de calcul enfin compatible des besoins en précision et en temps de restitution. Fortement itératif, le dimensionnement d'un aéronef est le résultat d'un

<sup>18</sup> *Future simulation concept*, J. Klenner, K. Becker, M. Cross, N. Kroll, 1st CEAS European Air and Space Conference, 2007

---

compromis difficile entre plusieurs performances. Aujourd'hui d'utilisation courante, le recours aux calculateurs parallèles est devenu le standard du calcul industriel pour la simulation aérodynamique, électromagnétique et calcul de structure. L'adaptation des produits aéronautiques aux objectifs ambitieux de protection de l'environnement impose en particulier de concevoir des avions plus silencieux. Les modélisations aéroacoustiques constituent un défi pour le HPC aussi bien pour la modélisation des sources aéroacoustiques que pour la prédiction de la propagation.

Il est à noter que dans le cadre d'une utilisation intensive telle qu'elle est conduite industriellement, ce n'est pas seulement l'accélération des calculs qui est recherché (en effet, en utilisation intensive, faisant l'hypothèse d'une scalabilité parfaite, si on a besoin de  $N=p*q$  calculs, il est quasiment équivalent d'utiliser  $p$  ressources pour les  $N$  calculs parallélisés en séquence ou bien  $q$  séquences de  $p$  calculs menés en parallèle sur chacune des ressources) mais bien souvent en premier lieu l'accès à une taille mémoire suffisante que seul un supercalculateur parallèle peut offrir.

Les industriels menant une très grande partie de ces calculs en interne se doivent donc de maîtriser l'utilisation intensive des calculateurs à architecture parallèle du marché; assez généralement, les industriels ont opté pour une programmation par échange de message (message passing) offrant une portabilité très satisfaisante. Le paradigme de programmation à base de message passing est considéré pour l'instant stable. L'arrivée de nouvelles architectures (accélérateurs à base de processeurs IBM Cell, processeurs multi-cœurs) pose la question du modèle de programmation dans le futur. Les industriels ont la nécessité d'anticiper au mieux cette évolution et sont attentifs aux travaux plus académiques sur ce sujet.

Pour les industriels, un des principaux défis lié à l'accroissement des capacités offertes par les calculateurs futurs est lié au changement d'échelle des simulations qui oblige à repenser leur insertion dans le processus de conception. La capacité apportée notamment par les simulations instationnaires (aujourd'hui envisageables en calcul intensif) va impacter profondément les processus de conception, voire l'organisation des échanges entre disciplines. L'exploitation due à une masse d'information accrue est également à repenser. En utilisation industrielle intensive, l'architecture matérielle (calculateur et stockage des données) doit permettre d'exécuter simultanément des analyses de natures très différentes tant par le volume de données nécessaires que le temps de résidence en machine.

La stratégie d'optimisation multidisciplinaire la plus pertinente pour l'industrie se base sur une approche utilisant des modèles de comportement (surfaces de réponse ou autre) décrivant la réponse de chaque discipline dans le domaine paramétrique considéré. Cette approche n'est rendu possible que par la mobilisation d'une capacité HPC permettant de construire les modèles de comportement.

L'industrie est amenée à exprimer ses attentes vis-à-vis des équipes académiques dans le cadre de l'association Ter@tec en particulier: défricher les simulations aux frontières et identifier ce que de telles simulations peuvent apporter dans de futures méthodologies de conception.

## Combustion

La combustion est un domaine prioritaire pour les moteurs, les réacteurs, les centrales thermiques, les chaudières individuels, etc. L'amélioration des rendements et de la

composition des gaz brûlés est d'une importance capitale pour la compétitivité industrielle et pour l'environnement. Du point de vue de la simulation il s'agit de coupler les équations de la mécanique des fluides avec des équations de chimie mais les difficultés sont d'ordres diverses suivant que la cinétique chimique est lente ou rapide par rapport aux temps caractéristiques des écoulements. Les fronts de flamme sont particulièrement difficiles à simuler car ils sont en général instables et multiéchelles. Il faut donc un grand nombre de mailles de calcul. Par ailleurs les équations sont fortement non-linéaires et la qualité des schémas numériques ainsi que leurs robustesses sont déterminantes pour la qualité des résultats. L'École Centrale de Paris et le CERFACS à Toulouse font, en coopération avec des industriels comme SAFRAN, de très gros calculs en combustion LES avec le code AVBP comme le montre la figure ci-contre.



Figure 6 : simulation d'une turbine d'hélicoptère (M. Boileau and G. Staffelbach, Cerfacs et Turbomeca, groupe Safran)

## La physique corpusculaire

La physique corpusculaire regroupe les domaines scientifiques de la physique des particules, la physique nucléaire et la physique des astroparticules. Elle est pilotée au niveau français par le CNRS/IN2P3 et par le CEA/DSM/Irfu.

L'essentiel des ressources informatiques de la physique corpusculaire en France est localisé au CC-IN2P3<sup>19</sup> à Villeurbanne.

La physique corpusculaire expérimentale ne nécessite pas l'utilisation de machines parallèles et s'accommode bien de grappes de PC reliés par un réseau standard. Par contre, les masses de données engendrées par les expériences impliquent la mise en œuvre de solutions de stockage distribué particulièrement novatrices. L'exploitation des données issues des expériences installées sur l'accélérateur LHC du CERN repose sur une architecture de grille de calcul.

Concernant la physique corpusculaire théorique, la Chromodynamique Quantique sur réseau, nécessite l'utilisation de supercalculateurs de classe pétaflopique. Les théoriciens français travaillant dans ce domaine sont de renommée internationale et bénéficieront directement des futures grandes machines françaises et européennes.

<sup>19</sup> <http://cc.in2p3.fr>

---

## Nano-technologie pour les matériaux

La technologie des composants électroniques est parvenue à des échelles nanométriques où les portes élémentaires interagissent. Les simulations sont faites soit avec des lois empiriques soit avec les équations de Boltzmann. Les propriétés cristallines des matériaux peuvent aussi être analysées par la simulation à l'échelle atomique avec des retombées très intéressantes pour la rhéologie des contacts, des frontières libres ou des liquides non-newtoniens.

## Défense

La Défense a été une pionnière dans l'utilisation de la simulation numérique et du calcul intensif, que ce soit dans le domaine de la simulation numérique du fonctionnement des armes nucléaires, ou dans celui, également classifié, du cryptage/décryptage. Cela explique *l'intérêt stratégique* porté par les grandes puissances, notamment les États-Unis à ces technologies. Intérêt qui a conduit les États-Unis, non seulement à mettre en place une organisation visant clairement et ouvertement à leur assurer la suprématie mondiale dans ce domaine, mais aussi à des actions éventuellement coercitives comme l'introduction de ces technologies dans la liste des « objets sensibles » soumis à autorisation d'exportation, embargo politique sur les premiers ordinateurs 64 bits CDC en 1975, puis sur le CRAY 1 en 1981 vis-à-vis de la France.

Une des méthodes de cryptanalyse pour casser un code est de trouver les nombres premiers qui ont servi à l'encryptage. La méthode brutale est de les essayer tous, ce qui aboutit à un très grand nombre de calcul très parallèles. Ces problèmes dépassent le cadre de la Défense ; ainsi à tout instant les entreprises comme Gem+ qui commercialisent des systèmes sécurisés (cartes bancaires) doivent s'assurer que ces techniques ne sont pas possibles en un temps raisonnable.

Pour les armes nucléaires un tournant important a été pris en 1996, avec la signature du « Comprehensive Test Ban Treaty » (CTBT). A partir de cette date la garantie de la fiabilité et de la sûreté des armes nucléaires va dépendre, en l'absence de tout test global, de la Simulation : *l'élément central de la garantie est bien la simulation numérique qui seule permet d'accéder au résultat final.*

Le problème posé est à la fois multi-physique et multi-échelle. Il faut en premier lieu disposer de la meilleure modélisation physique de l'ensemble des phénomènes contribuant au fonctionnement : détonique, fission nucléaire, transfert d'énergie, fission, fusion, ensuite représenter l'objet d'une manière parfaite allant jusqu'aux imperfections de fabrication (les réactions intervenant dans le fonctionnement étant à seuils, de très faibles écarts peuvent entraîner d'importantes variations sur le résultat) Les échelles de temps vont de la nano seconde à plusieurs dizaines de microsecondes. Dès le problème posé, il est apparu que sa solution nécessitait des puissances de calcul allant très au-delà de ce que le marché pourrait raisonnablement fournir à échéance de 15 ans. Deux pays se sont ouvertement lancés dans un programme de garantie par la simulation : Les États-Unis avec le « Stockpile Stewardship Program » piloté par le DOE et réalisé dans les laboratoires de Lawrence Livermore, Los Alamos et Sandia et la France avec le programme « Simulation » piloté et réalisé par le CEA/DAM. Ces deux programmes comportent une part importante de recherche fondamentale sur les modèles, le développement des codes de simulation correspondants et le développement, la conception et la mise en service des moyens de calcul nécessaires.

---

Le Japon, qui dispose d'une industrie HPC au plus haut niveau s'est lancé en 1995 dans un programme HPC similaire, avec une justification environnementale, qui conduira au «Earth Simulator».

### **Le programme simulation numérique du CEA/DAM**

Pour répondre aux objectifs cités plus haut, le CEA/DAM a dû, dès 1996, trouver une solution à deux problèmes qui depuis quelques temps se posent de manière cruciale à l'ensemble du monde de la Recherche :

1. L'accès à la puissance de calcul nécessaire, impliquant des investissements importants non seulement en machines, mais aussi en environnement de ces machines (stockage, réseaux, moyens de visualisation,...) et en infrastructures.
2. La capacité d'utiliser cette puissance par les chercheurs et ingénieurs impliquant un changement total de culture de leur part : passage d'un système totalement vertical où chaque « physique » constituait un laboratoire indépendant avec ses propres numériciens et informaticiens à une culture horizontale complètement pluridisciplinaire.

Ce dernier point a été réglé en 2000 par la création du Département des Sciences de la Simulation et de l'Information, regroupant en une seule masse critique l'ensemble des ingénieurs et chercheurs travaillant dans ces domaines.

Le premier point fait l'objet du projet TERA.

### **Le Simulateur**

Compte tenu de la différence entre la durée de vie du simulateur (10 ans de développement pour une première version opérationnelle puis 20 à 30 ans d'exploitation) et de son coût (150 ingénieurs/an soit 1500 hommes\*ans pour la version initiale) et la durée de vie d'un super ordinateur (4/5 ans), de grandes options d'architecture logicielle ont été prises dès l'origine pour le développement du simulateur :

- Découplage total entre l'application et l'architecture de la machine par la définition d'une interface parfaitement spécifiée et seule connue des développeurs de l'application. Cela se traduit par le développement d'un « middleware » fournissant l'ensemble des services systèmes. Cette couche logicielle garantit un portage rapide de l'application à chaque changement d'ordinateur et sa « scalabilité ».
- Architecture logicielle de l'application à deux niveaux de parallélisme permettant une grande souplesse de développement. Ce principe, utilisé au départ pour faciliter la programmation d'un très grand nombre de tâches en parallèle, puis rendu inutile par l'arrivée de bibliothèques MPI performantes est de nouveau utilisée avec l'arrivée des multi-cœurs.

L'application de ces principes implique:

- La nécessité d'une équipe de masse critique pour le développement d'une application,
- La multidisciplinarité de celle-ci : physiciens, numériciens, architectes logiciels, développeurs d'application, développeurs d'environnement,
- La professionnalisation de l'ensemble
- La responsabilité de l'équipe confiée à l'architecte.

### **Le projet TERA**

Il a pour objet de garantir aux dates fixées par le programme Simulation les puissances informatiques nécessaires évaluées en puissance « soutenue » mesurée sur le simulateur lui-

---

même soit 1 Teraflop/s en 2001, 10 en 2005, plus de 200 en 2010, c'est-à-dire des machines de 5, 60 et plus de 1000 Tflops crête.

De telles machines, qui sont des machines « de production », devant fournir un service garanti et continu, sont nécessairement en limite des technologies disponibles. Il est donc absolument nécessaire de participer très en amont, en coopération avec le constructeur, aux choix technologiques, à la conception et aux développements nécessaires pour arriver au résultat. Pour cela le projet TERA a d'abord eu pour objectif de mettre en place une équipe d'une vingtaine d'experts, aujourd'hui reconnu au plus haut niveau mondial, capables d'influer sur les choix des constructeurs et de participer au développement de leurs futures machines.

C'est ainsi, qu'après avoir fourni la machine TERA-10, numéro 5 mondial et première machine de cette classe jamais réalisée en Europe, BULL a été retenu, pour réaliser, en collaboration avec l'équipe du CEA/DAM, la machine TERA-100 destinée à être la première machine pétaflopique européenne. La volonté du CEA est que ce choix conduise à la mise en place d'un laboratoire commun BULL/CEA véritable partenariat privé/public permettant d'assurer à long terme l'existence et la permanence de l'Europe dans le domaine stratégique des technologies du HPC.

## Énergie et nucléaire civil

Le monde en général et l'Europe avec une acuité particulière sont confrontés à des défis considérables et immédiats dans le domaine de l'énergie : sécurité d'approvisionnement, maîtrise des impacts climatique et environnemental, développement des énergies renouvelables. Dans ce domaine le calcul intensif offre une triple opportunité :

- au plan de la recherche scientifique, il constitue un outil indispensable pour l'étude des ruptures technologiques, qu'il s'agisse de recherche long terme comme ITER, ou d'enjeux plus immédiats comme de nouveaux matériaux pour le photo-voltaïque ou les batteries de véhicules électriques,
- au plan industriel il offre de nouveaux leviers de compétitivité en permettant l'optimisation de processus physiques complexes jusqu'à présent inaccessibles à une simulation réaliste : augmentation des performances des centrales nucléaires existantes, meilleure conception des centrales nucléaires futures, optimisation des forages pétroliers, etc.
- dans le domaine de l'environnement et de la gestion des risques il devient un élément clé pour éclairer les décideurs publics sur des questions aussi importantes que le stockage du CO<sub>2</sub> ou des déchets nucléaires, l'augmentation de la sûreté des installations ou la limitation de la diffusion des polluants dans la biosphère.

La simulation numérique et les codes de calcul accompagnent depuis longtemps le développement industriel des technologies et des processus énergétiques ; c'est le cas en particulier du nucléaire et du pétrole. L'arrivée du calcul intensif constitue dans ces domaines une véritable opportunité pour les opérateurs d'atteindre par la modélisation une représentation suffisamment fidèle de la complexité des installations et des processus qu'ils exploitent, et d'augmenter ainsi considérablement les capacités d'aide à la décision dans des applications à très forts enjeux économiques : Total et EDF ont par exemple investi récemment dans des machines dont la puissance unitaire dépasse les 100 Teraflops et qui permettent d'étendre les capacités de simulation existantes à des classes de problèmes jusqu'à présent hors de portée: traitement des données sismiques dans des configurations de sous-sol complexes à grande profondeur, simulations thermo-hydrauliques prenant en compte l'extrême complexité géométrique de l'intérieur des cuves nucléaires etc. Ces applications

utilisent d'ores et déjà plusieurs milliers à plusieurs dizaines de milliers de processeurs pour inverser les équations de propagation d'ondes acoustiques ou pour la simulation fine (LES) d'écoulements fluides turbulents instationnaires mono ou diphasiques etc. Les données produites s'expriment en Tera octets par simulation, et peuvent mobiliser des dizaines de millions d'heures processeurs, avec des maillages dont certains dépassent déjà le milliard d'unités. Ces avancées ont des retombées directes sur des décisions à très fort enjeu comme le forage de puits, l'exploitation de réservoirs, les stratégies d'exploitation et de maintenance des réacteurs. Le calcul intensif est également de plus en plus mobilisé par des organismes publics comme la Direction de l'Énergie nucléaire du CEA, l'Autorité de sûreté nucléaire, ou l'ANDRA pour des questions aussi cruciales que la recherche sur les nouveaux réacteurs, le contrôle de la sûreté des installations nucléaires ou la conception de sites de stockage de déchets. Ces problèmes conduisent à mieux rendre compte de situations extrêmes, caractérisées par une complexité que seul le calcul intensif peut espérer traiter, en relation étroite avec des validations indispensables sur des moyens expérimentaux. En amont, la simulation hautes performances va aussi probablement jouer un rôle croissant chez les grands équipementiers de l'énergie, où il offre une capacité appréciable d'optimisation du design et de sécurisation des performances dans un contexte d'accroissement de la concurrence sur des marchés mondiaux majeurs, par exemple dans le domaine du nucléaire, mais aussi dans celui en plein essor des énergies renouvelables (le photo-voltaïque et les énergies marines en particulier). On note aussi aux États-Unis la forte dynamique du DOE sur la simulation hautes performances, appuyée par les plus puissants moyens de calculs mondiaux, en particulier pour les prochaines générations de centrales nucléaires.

Malgré les avancées rapides des dernières années, qui placent le domaine de l'énergie parmi les premiers utilisateurs industriels du calcul intensif dans le monde, de très nombreux challenges restent à relever car les applications actuelles arrivent en limite des technologies, outils, méthodologies et compétences disponibles et d'importantes opportunités sont encore à peine abordées ; citons par exemple :

- le couplage multi-physique fort (interaction fluide structure permettant notamment de traiter les questions de fatigue thermique)
- le couplage multi-échelle (dégradation des aciers ou des polymères), ceci pouvant impliquer des simulations massives par exemple à l'échelle ab initio pour consolider la compréhension des phénomènes de base (formation et migration de défauts)
- le traitement des incertitudes (élément décisif pour une utilisation du calcul intensif dans les décisions opérationnelles) et l'optimisation de leur recalage par l'assimilation de données, tous facteurs qui conduisent à multiplier les calculs élémentaires (qui peuvent eux mêmes utiliser des milliers de processeurs) par des facteurs allant de cent à un million.
- la scalabilité des codes, clé de voute d'une meilleure fidélité des simulations (avec le dilemme optimisation/portabilité face à la variété croissante des types d'architectures informatiques),
- la génération et le traitement d'une masse considérable de données, qu'il s'agisse de données d'entrée (géométries et maillages à des échelles de plus en plus fines, pour lesquelles on ne dispose pas encore des outils adaptés) ou des résultats eux-mêmes (qui impliquent à la fois des technologies de fouille de données intelligentes et de visualisation collaborative à très haute résolution, encore peu développés)

Franchir ces étapes nouvelles étapes fortement créatrices de valeur ne peut se concevoir que dans une interaction étroite avec une communauté recherche plus mobilisée sur ces sujets selon des modalités qui seront probablement multiples mais qui impliquent toutes la

---

reconnaissance à sa juste mesure de l'ampleur des enjeux et des défis de la simulation et du calcul à très hautes performances dans le domaine de l'énergie.

## Astrophysique

À l'instar des supercalculateurs nationaux, les calculs sur grille, à cause de la lourdeur de leurs procédures de mise en œuvre, ne s'adressent qu'aux calculs « extrêmes », nécessitant des ressources hors de portée d'un mésocentre de calcul. Leur utilisation demande aussi une formation et une expérimentation qui rendent encore plus indispensable l'existence de la structure intermédiaire, plus souple, que représente le mésocentre de calcul. En astrophysique, un mésocentre local est en effet le meilleur moyen de former les chercheurs de manière efficace aux techniques de calcul parallèle (MPI ou OpenMP) et de leur permettre ainsi un portage efficace des codes sur les grands calculateurs nationaux ou les grilles européennes pour les projets les plus exigeants. C'est aussi le moyen de créer une animation autour du calcul qui permette des échanges et des interactions sur les codes. Le mésocentre permettra le développement en local de projets de recherche ambitieux sur la compréhension de l'Univers, depuis les grandes structures extra-galactiques, l'évolution des galaxies, jusqu'à l'environnement terrestre et la calibration astronomique des échelles de temps géologiques.

## Finance

Les banques ont toujours beaucoup utilisé l'informatique car elles ont à traiter un grand nombre de données, mais depuis les travaux de Black, Scholes et Merton sur la modélisation des produits dérivés et les transactions bancaires par internet, les banques, les assurances, certains départements des grandes industries (EDF en particulier) sont devenus de gros consommateurs de calcul intensif. Le « pricing » d'option sur un objet composite comme le CAC40 pose des difficultés numériques énormes. Les algorithmes sont principalement stochastiques (méthodes de Monte Carlo) et le parallélisme y est très explicite de sorte que la vitesse de calcul est plus importante que la vitesse des communications entre les nœuds de calcul. La tendance actuelle est donc de privilégier les très gros clusters, voir même les grilles.

## Environnement

Dans ce secteur, la modélisation numérique est un outil indispensable pour le développement des sciences du climat, de l'océan et de l'atmosphère. Elle contribue à l'étude des processus physiques, chimiques et biologiques fondamentaux. Elle offre le moyen d'intégrer et de discuter les hypothèses. Elle se retrouve systématiquement associée aux grands programmes expérimentaux, dont elle permet souvent de rationaliser la conduite, voire de réduire les coûts. Enfin, et c'est peut être là sa contribution majeure, c'est souvent le calcul intensif qui rend possible la prévision de l'évolution des systèmes naturels en réponse aux interrogations et aux enjeux de société.

Un trait majeur des recherches du secteur Environnement est leur intégration forte dans les grands programmes internationaux (GIEC), et nationaux du CNRS, de l'INSU, ou de l'ANR. Ces activités s'appuient sur un fort soutien et d'étroites collaborations avec les organismes comme Météo-France, le CEA, l'IRD, l'IFREMER, le SHOM, l'INRA, et le CNES.

---

La tendance vers une modélisation des systèmes naturels accentue les possibilités de rétroactions multidisciplinaires et multi-échelles. Elle se décline de façon un peu différenciée selon trois thèmes généraux:

- Axe premier, l'étude de la variabilité climatique naturelle d'échelles décennales à millénaires, ainsi que celle des scénarios d'impact de l'activité humaine impliquent d'entreprendre des simulations complexes comportant à la fois les compartiments glace-océan-atmosphère-végétation. De plus en plus, il s'agit aussi de représenter des espèces chimiques nombreuses et de s'attaquer à l'analyse des grands cycles (carbone, soufre, etc,...) et de leurs perturbations anthropiques. La recherche climatique a désormais pour objectif la modélisation couplée globale du "système Terre". Prévoir l'évolution future du climat et répondre aux questions posées à la société sur le réchauffement climatique suite à l'augmentation des gaz à effet de serre est entièrement dépendant de l'accès à des moyens de calcul intensif. Réduire les incertitudes, quantifier la probabilité d'événements extrêmes, quantifier les puits de carbone et leur possible évolution suite au changement du climat, étudier les impacts sur les écosystèmes et la société passe par l'augmentation de la puissance de calcul par un facteur 1 000 par rapport aux moyens actuels afin de pouvoir intégrer la complexité du système, augmenter la résolution des modèles, affiner la représentation de processus clés comme les nuages ou les aérosols. Modéliser le climat implique le recours à une machine Pétaflopique pour les expériences les plus poussées en résolution et en complexité.
- Seconde tendance lourde, la modélisation océanique nécessite une grande augmentation de la résolution des modèles. Comprendre comment fonctionnent la variabilité de l'océan, les interactions d'échelles, l'action des tourbillons dans le transport de chaleur et dans les cycles biologiques, nécessite une résolution de la dizaine de kilomètres et des simulations longues. Ce secteur vient de connaître des succès importants: le modèle OPA de l'IPSL est désormais une référence en France mais aussi dans plusieurs pays Européens (surtout sa version fortement parallélisée qui donne des performances élevées); le projet DRAKKAR a ouvert la voie vers la haute résolution; enfin, une excellente position internationale est tenue en assimilation de données avec des méthodes novatrices. Point fort, la modélisation en océanographie s'est organisée plaçant OPA à l'amont du programme MERCATOR afin d'accompagner le développement de l'océanographie opérationnelle.
- Enfin, ce même besoin de très haute résolution se retrouve dans des termes voisins pour les simulations atmosphériques à méso-échelle, où un modèle non-hydrostatique comme MESO-NH utilise plusieurs millions de points sur quelques dizaines de variables pour simuler des cas réels avec une résolution sub-kilométrique (AMMA, COPT...). Ces très hautes résolutions en météorologie conditionnent les progrès pour la prévision des phénomènes extrêmes (crues, vents forts). La modélisation atmosphérique de recherche à haute résolution a donc, elle aussi, ouvert la voie vers le projet AROME de Météo-France pour la prévision météorologique opérationnelle à résolution kilométrique sur la France, dont la mise en service est prévue vers 2009. Dans ce secteur, les progrès envisagés en chimie atmosphérique (GMES), ainsi qu'en modélisation des nuages et du sol, nécessitent une augmentation de la puissance de calcul du même facteur, avec possibilité de participer à de grands exercices de modélisation Européens.

Une caractéristique primordiale du calcul intensif dans ce secteur est le regroupement des chercheurs autour d'un petit nombre d'outils logiciels communautaires spécialisés, de taille quasi-industrielle, par exemple les modèles de circulation générale atmosphérique LMD-Z ou

ARPEGE, le modèle de circulation générale océanique OPA, et le modèle atmosphérique de méso-échelle Méso-NH. La Figure illustre une simulation d'un cycle de vie d'orage tropical réalisé avec le code Méso-NH qui intègre les équations de la mécanique des fluides à très haute résolution, sub-kilométrique. Ce calcul est réalisé sur les machines actuelles de 100 Tflops avec un maillage de quelques millions de points et une parallélisation jusqu'à 8000 processeurs. Sur cet exemple, la perspective d'une machine pétaflopique européenne permettra de coupler les équations de la mécanique des fluides avec des équations de chimie afin de considérer l'impact de la convection sur la chimie des oxydes d'azote atmosphériques.

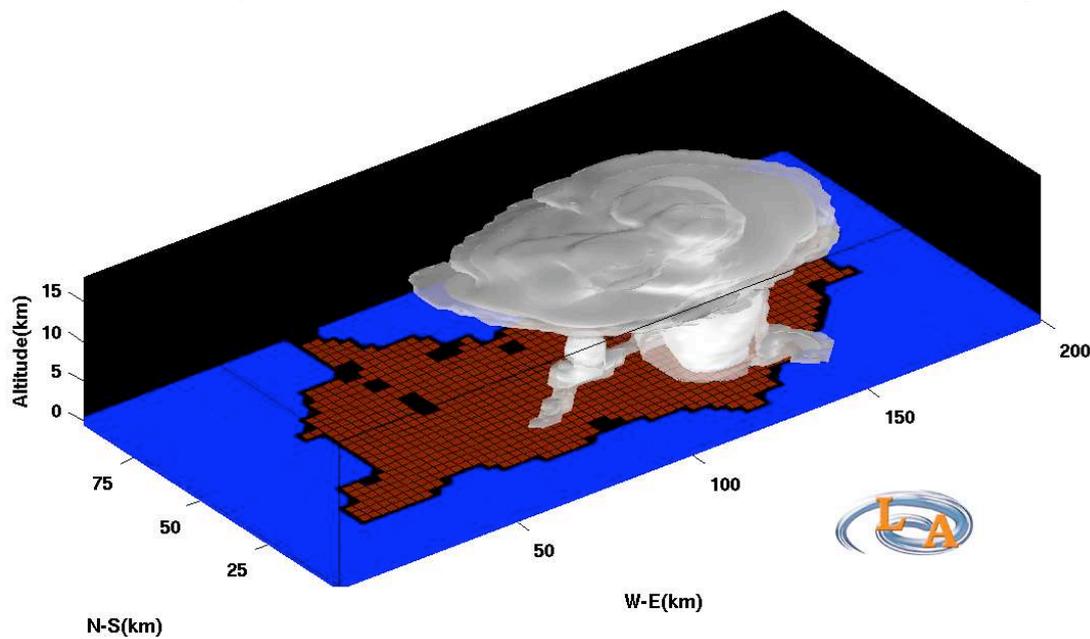


Figure 7: Simulation à haute résolution d'un orage tropical au dessus d'une île du Pacifique (calcul par J.-P. Chaboureau, LA/OMP, Toulouse, avec le code MESO-NH)

## Informatique et algorithmique pour le HPC

Il apparaît de manière claire aujourd'hui que la taille en termes de nombre de cœurs de calcul ainsi que l'hétérogénéité de la structure des machines pétaflopiques seront des obstacles majeurs à l'obtention de performances et que les modes de programmation classiquement utilisés aujourd'hui ne conviendront plus.

Il apparaît donc qu'une virtualisation forte de l'architecture globale est incontournable puisqu'il s'agira de comprendre et surtout d'utiliser des mécanismes (très) différents intervenant à différents niveaux (calcul pipeliné/vectoriel et superscalaire; multi threading et multi cœurs massifs; exploitation de caches multi niveaux et gestion hiérarchique optimisée de la mémoire ; synchronisation d'un grand nombre d'entités concurrentes ; asynchronisme, communications et recouvrement sur des réseaux rapides à faible latence).

L'idée d'avoir une modélisation hiérarchique (plus ou moins générique) de l'architecture correspondant aux divers niveaux de parallélisme exploitables et à partir de laquelle des supports d'exécution pourraient garantir de manière raisonnable une certaine portabilité des performances semble une bonne voie.

Cette virtualisation et un modèle d'exécution quasi-unifié pourraient ainsi conduire à des générations de code spécifiques en fonction du hardware, à une optimisation de code et à une exploitation plus massive du parallélisme à grain fin, et aussi à des politiques génériques

---

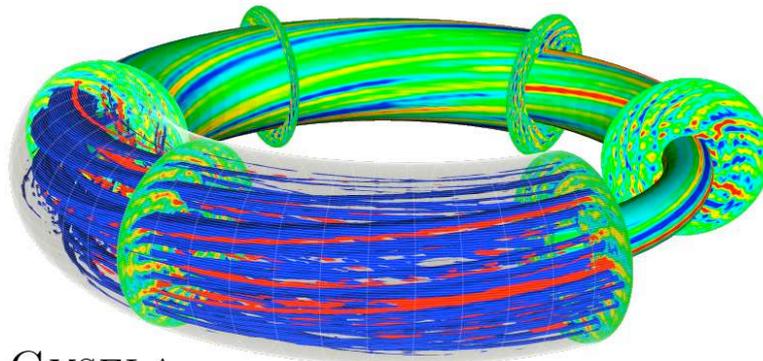
d'ordonnement d'un grand nombre de « threads » tout en favorisant la localité des accès mémoire. À noter qu'une instrumentation des codes bien intégrée au niveau des langages de programmation (avec une approche incrémentale d'optimisation des codes) est alors indispensable pour aider autant que faire ce peut les compilateurs et les supports d'exécution pour tirer de la performance.

Des modèles de programmation hiérarchiques, en cohérence avec la virtualisation de l'architecture et les supports d'exécution sous-jacents, pourraient conduire à une approche unifiée (probablement hybride) de programmation, cela pouvant déboucher même alors sur une conception plus unifiée et hiérarchique des algorithmes et des applications de grande taille ; il va s'en dire que cela serait une démarche pour les nouveaux codes devant utiliser ces nouvelles machines mais le problème est entier pour les (très) anciens codes que l'on souhaiterait porter à moindre coût de réécriture... Les langages de programmation devront donc permettre d'exprimer du parallélisme à grain moyen et un maximum de parallélisme à grain fin, l'usage systématique d'appels à des noyaux de calcul et à des bibliothèques (parallèles) spécifiques étant incontournable pour avoir des performances. Il s'agira donc de trouver le bon niveau intermédiaire entre une généricité importante qui conduirait à virtualiser au maximum la complexité du hardware de ces nouvelles machines et la capacité laissée à l'utilisateur d'exprimer les propriétés fines de ces algorithmes pour que le compilateur et le support d'exécution puissent mettre en œuvre des optimisations pertinentes.

## Fusion Nucléaire

### Par confinement électromagnétique : ITER

Dans la perspective du démarrage d'Iter, il est fondamental d'étudier la micro-turbulence ainsi que les sources d'instabilités macroscopiques des plasmas de tokamaks afin de comprendre, prédire et contrôler ces phénomènes délétères au confinement du plasma. L'enjeu consiste à résoudre de manière auto-consistante la dynamique des particules couplée aux champs électrique et magnétique. Les échelles temporelles et spatiales très différentes de ces deux processus nécessitent pour l'instant le recours à deux descriptions complémentaires du plasma, les champs étant quant à eux gouvernés par les équations de Maxwell: l'approche macroscopique se fondant sur les équations de la magnétohydrodynamique (MHD), et l'approche microscopique des équations cinétiques, décrivant la fonction de distribution des électrons et des ions dans un espace des phases a priori à six dimensions (6D) position-vitesse. Pour cette dernière, les caractéristiques des plasmas fortement magnétisés autorisent une réduction du problème à 5D, en opérant une moyenne sur la variable rapide. La résolution de cette nouvelle équation dite gyrocinétique, de type Boltzmann-Vlasov, reste cependant très gourmande en ressources numériques. Le code ab-initio GYSELA, qui résout un tel système pour la population ionique uniquement, est développé à l'IRFM en collaboration avec plusieurs universités françaises (Strasbourg, Nancy, Aix-Marseille, Nice) et d'autres organismes de recherche (INRIA, CNRS), au travers notamment du projet ANR "EGYPT". Une simulation aux paramètres typiques d'Iter mais sur des temps courts requerrait tout de même 1 jour si nous disposions de 100 Tflops de puissance HPC, et de l'ordre de 100 Go de mémoire de stockage. Rajouter la dynamique des électrons multiplierait ces besoins typiquement par 60 (racine carrée du rapport des masses) au cube, soit environ 500 ans et 100 To.



### GYSELA

Figure 8: Simulation gyrocinétique d'un plasma (Virgine Grandgirard (CEA) avec le code Gysela)

Si la micro-turbulence limite les performances de la décharge, certaines instabilités MHD font quant à elles peser des contraintes inacceptables sur les éléments de paroi, en termes de flux de chaleur et de tenue mécanique des matériaux. Citons en particulier les ELMs (Edge Localized Modes), qui constituent une des préoccupations majeures de l'équipe Iter. Ces modes se développent à des échelles temporelles allant du temps d'Alfvén ( $10E-7$  s) au temps de diffusion du courant, de l'ordre de la minute, et requièrent également de très grosses puissances de calcul. Le code JOEUK de MHD non-linéaire, unique en son genre, est développé à l'IRFM dans le cadre du projet ANR ASTER, en collaboration avec des unités mixtes de recherche de l'université de Bordeaux et du CNRS (LaBRI, IMB) et avec l'INRIA Bordeaux Sud-Ouest.

La perspective d'une machine dédiée à ces applications à Jülich en 2009 (d'une puissance de 100 Tflops) et d'une autre au Japon en 2012 dans le cadre de l'approche élargie entre le Japon et la Communauté européenne (projet IFERC, International Fusion Energy Research Center) est vitale pour toutes ces applications. Pour autant, une partie de la physique ne pourra être correctement traitée, laissant dans l'impasse les perspectives de prédiction et d'un possible contrôle, sans le développement de machines encore plus performantes, tant du point de vue de la puissance de calcul que de la mémoire disponible par processeur.

### Fusion par confinement inertiel

Le laser Mega Joule au CEA/CESTA ainsi que quelques autres installations dans le monde, permettent d'observer une fusion nucléaire produite par un mélange de deutérium et de tritium chauffé à plusieurs milliers de degrés par un faisceau de lasers intenses.

Contrairement à la fusion magnétique qui fonctionne en régime continu, la récupération de l'énergie d'une FCI fait appel à des processus impulsionsnels de durée de vie très courte : une sphère de deutérium de cent micron de rayon à la température cent mille million de degrés restera confinée pendant trente pico seconde. Si les conditions pour que se réalisent les réactions thermonucléaires étaient initialement réunies, au-delà de cette durée, on admet que le milieu est trop détendu pour que la combustion se poursuive ; il faut donc répéter le processus périodiquement. Obtenir une chambre capable de résister à de tels chocs thermiques et nucléaires et récupérer la chaleur sont autant de défis technologiques pour lesquels la simulation sera une aide précieuse.

Actuellement la simulation de la phase initiale de la réaction est possible, ce qui permet d'optimiser les éclairages lasers par exemple.

## Les domaines émergents

Il est bien sûr difficile de prévoir les nouvelles applications du calcul intensif, mais signalons au moins deux nouvelles applications :

- Les nouveaux protocoles de communications pour internet peuvent être testés en simulant la toile et ses requêtes sur un superordinateur.
- Une modélisation du fonctionnement du cerveau (le projet [blue brain](#)) est à l'étude à l'EPFL par exemple en simulant directement un réseau de neurones avec cent millions de synapses, chacun étant muni d'un modèle de transmission simplifié.

## 4 La pyramide des moyens de calcul

Les moyens de calcul pour la simulation vont de la station de travail jusqu'aux plus gros ordinateurs ou grilles de calcul. Si on range tous les ordinateurs en 5 classes en fonction, disons, de leur puissance, on obtient ce qui est communément appelé la « pyramide des moyens de calcul ». Pour la France et l'Europe, cela donne, de haut en bas de la pyramide :

- **Tier0** : Les machines européennes du projet PRACE
- **Tier1** : Les super ordinateurs nationaux financés par GENCI (CINES, CCRT, IDRIS) et les grilles
- **Tier2** : Les ordinateurs des méso-centres régionaux ou locaux
- **Tier3** : Les clusters des équipes
- **Tier4** : les ordinateurs personnels.



Le calcul intensif s'effectue principalement sur les machines du Tier0 et du Tier1, toutefois pour une utilisation optimale de ces moyens il faut que le Tier2 soit bien structuré afin que seuls les utilisateurs formés au parallélisme les utilisent et pour des tâches non réalisables sur les autres machines.

Ainsi avant de présenter les problèmes spécifiques aux super ordinateurs Tier0 et Tier1 disons quelques mots des autres moyens et des grilles de calcul.

### 4.1 Les machines des méso-centres

Les méso-centres sont des centres de calcul hébergeant un ou plusieurs calculateurs de puissance intermédiaire entre des ordinateurs de laboratoire et les machines nationales. Ils sont généralement situés dans des campus universitaires et servent la communauté scientifique locale. Ces machines sont souvent en grande partie financées par les régions (CPER par exemple).

Le rôle des mésocentres est primordial car ils permettent aux chercheurs de mettre au point leurs codes de calcul avant de les soumettre dans les grands centres. L'accès aux machines est par nature beaucoup plus souple et aisé que dans les centres nationaux. Les mésocentres étant souvent situés dans les universités, ils sont un lieu privilégié pour l'apprentissage et la formation des étudiants et des jeunes chercheurs qui seront amenés à utiliser plus tard les supercalculateurs. Enfin, ils fournissent une puissance de calcul d'appoint permettant de traiter ou d'affiner les résultats issus des grandes machines et peuvent de part leur environnement scientifique permettre d'attirer des PME vers le calcul intensif.

Bien que l'existence de mésocentres soit sans conteste un élément structurant de la recherche régionale, il serait important de mettre en place un mécanisme permettant de coordonner l'action des mésocentres au niveau national de façon à optimiser les ressources et surtout à les mettre en cohérence avec la politique de développement des supercalculateurs. Cette action va être menée par la CPU (Conférence des Présidents d'Universités) en relation avec GENCI.

Voir l'état des lieux des structures de type méso-centres en France réalisé par le Groupe Calcul (février 2008): <http://calcul.math.cnrs.fr/spip.php?article14>

## 4.2 Les grilles de calcul

Les grilles de calcul sont des structures de calcul et de stockage distribuées qui permettent de mettre en commun des ressources informatiques hétérogènes. En Europe, les grilles de calcul sont souvent liées au projet Européen multidisciplinaire EGEE20 (Enabling Grid for E-science). Les architectures de grilles, en plus des ressources informatiques, fournissent une couche de logiciels pour les accéder (intergiciels) ainsi qu'une structure opérationnelle plus ou moins développée, qui garantit la bonne coordination et le bon fonctionnement de l'ensemble. Les grilles de calcul ne sont en principe pas une alternative pour les supercalculateurs qui nécessitent des réseaux à très faibles latences. Par contre, elles offrent une solution efficace pour le stockage, la distribution et la mise à disposition des données issues des grandes simulations. Les moyens de calcul des nœuds de grille sont également bien adaptés pour assurer les post-traitements qui doivent être appliqués sur ces données.

La physique des hautes énergies qui, avec la mise en route prochaine du LHC, doit faire face à des masses de données considérables (15 Poctets/an) a déployé une grille de calcul mondiale (LHC Computing Grid ou LCG) basée en Europe sur l'intergiciel fournit par EGEE. Cette grille est maintenant opérationnelle.

Le projet européen EGEE arrive au terme de sa troisième phase en 2010, d'ici là une structure pérenne devrait se mettre en place au niveau européen (European Grid Initiative ou EGI) en s'appuyant sur des grilles nationales (National Grid Initiative ou NGI). La phase préparatoire d'EGI est actuellement financée par l'Europe (EGI Design Study).

Parallèlement à ces grilles dites de production, il existe des grilles de recherche destinées à mettre au point les logiciels et les architectures des grilles de production de demain. En France, le projet Grid5000 qui interconnecte près de 5000 processeurs répartis dans différents sites, fédère l'essentiel des recherches sur les grilles.

En 2008, le CNRS a créé l'Institut des Grilles du CNRS qui rassemble les communautés CNRS travaillant sur les grilles de production et les grilles de recherche. L'idée force, étant de rapprocher les équipes et d'établir des passerelles entre production et recherche. Le Ministère a confié à l'Institut des Grilles du CNRS la tâche de réaliser une prospective nationale sur les grilles de production, celle-ci devrait se concrétiser par la publication d'un livre blanc d'ici à

---

<sup>20</sup> <http://www.eu-egee.org/>

---

la fin de l'année 2008. Une prospective similaire est menée par la structure ALADDIN21 (successeur de Grid5000) pour les grilles de recherche.

Les communautés des supercalculateurs et des grilles de production sont assez disjointes. Vu la complémentarité des approches et en particulier le fait que les grilles de production pourraient offrir une solution viable au problème des masses de données produites par les grandes simulations, il est important de faire en sorte qu'un rapprochement s'opère.

**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.**

### 4.3 Les diverses architectures de machine

Les limitations physiques de la technologie des semi-conducteurs, échauffement des circuits, effets quantiques dans des circuits excessivement fins, font que l'accroissement de la vitesse des micro-processeurs par l'augmentation de leur fréquence ou la miniaturisation s'est fortement ralenti.

Le seul moyen d'augmenter à la fois la vitesse de calcul et la taille globale de la mémoire consiste à construire des architectures « parallèles », c'est-à-dire des machines dans lesquelles, les processeurs, les mémoires et, plus généralement les unités fonctionnelles, sont dupliquées, au sein d'un système capable de les faire fonctionner simultanément pour une même application. C'est ainsi que les micro-processeurs courants sont aujourd'hui « multi-cœurs » et que l'augmentation de la puissance se fait désormais par la multiplication des cœurs, la fréquence restant pratiquement constante.

Dans le principe, multiplier les unités arithmétiques ou les processeurs afin de pouvoir réaliser simultanément plusieurs calculs, paraît simple. Cependant, le vrai problème, au niveau matériel, consiste à alimenter les différentes unités avec les données nécessaires pour le calcul, données qui viennent de la mémoire du système. Pour des raisons évidentes cette mémoire ne peut pas être monolithique : pour qu'une mémoire unique puisse alimenter de manière satisfaisante un grand nombre de processeurs, il faudrait qu'elle fonctionne à une fréquence plus élevée que chacun d'eux. Qui plus est, plus une unité mémoire est grosse, plus le temps d'accès à une donnée quelconque est élevé. Grande taille et vitesse élevée sont des contraintes incompatibles.

*L'architecture de la mémoire est donc la caractéristique essentielle d'un système parallèle.*

Pour des nombres modérés de processeurs, une solution consiste à disposer de petites mémoires rapides, les « caches », qui servent de tampons de stockage près des processeurs. Des mécanismes matériels optimisés permettent de transférer les données de la mémoire centrale vers les différents caches par paquets. Pour que le système fonctionne bien, il faut que chacun des caches ne sollicite pas constamment la mémoire centrale. Ce qui signifie que le logiciel doit être conçu de manière à assurer une bonne localisation temporelle et spatiale des données : c'est-à-dire qu'il permette de faire travailler les différents processeurs sur des paquets de données suffisamment petits pour pouvoir résider dans leur cache, et qu'il réalise des opérations successives sur les mêmes données, de sorte que chaque processeur ne demande pas constamment de nouvelles données.

---

<sup>21</sup> <https://www.grid5000.fr/mediawiki/index.php/Grid5000:Home>

---

De tels systèmes sont qualifiés de machines à « *mémoire partagée* », puisqu'elles disposent d'une mémoire centrale à laquelle tous les processeurs peuvent accéder de manière égale, d'où l'appellation de « **SMP** » (Symmetric multi-processor).

L'inconvénient de cette approche est qu'elle n'est pas extensible : elle ne permet pas d'augmenter indéfiniment le nombre de processeurs, puisque l'accès à la mémoire centrale constitue un goulet d'étranglement du système.

Le concept de machine à « *mémoire distribuée* » permet de lever cette limite à l'extensibilité. Il consiste à relier des processeurs ou des groupes de processeurs, et en particulier des systèmes SMP, par un réseau d'interconnexion, en supprimant la mémoire globale commune. Ces architectures permettent de mettre en œuvre de très grands nombres de processeurs, jusqu'à plusieurs dizaines de milliers dans les plus gros systèmes, en utilisant qui plus est des technologies standard, au niveau des nœuds et, dans une moindre mesure, des réseaux, de sorte que le rapport entre leur coût et leur puissance reste compétitif.

Qui plus est, le concept permet de réaliser des systèmes départementaux puissants, en interconnectant des stations de travail à l'aide de réseaux bon marché de type Ethernet. Ces systèmes à base de « grappes » de machines standard sont appelés « *clusters* » en anglais.

On les classe généralement en deux catégories en fonction de leurs composants :

- Les clusters SMP à nœuds fins (ou thin nodes): ce sont des clusters basés sur des composants standards avec de 4 à 8 cœurs par nœud, de 8 à 32 Go de mémoire et interconnectés par des réseaux Gigabit Ethernet ou Infiniband. A titre d'exemple on peut citer en France la machine SGI ICE 8200 Jade du CINES installée en juin 2008 ou l'extension du système BULL qui sera installée au CCRT en 2009.
- Les clusters SMP à nœuds larges (ou fat nodes): ce sont des clusters basés sur des composants spécifiques au HPC avec de 4 à 64 cœurs par nœud de calcul, jusqu'à 512 Go de mémoire à haut débit et des réseaux à haut débit d'interconnexion (Infiniband ou propriétaires). A titre d'exemple on peut citer en France la solution BULL Itanium2 Platine installée au CCRT ou la machine IBM Power6 Vargas installée à l'IDRIS en octobre 2008.

Une troisième catégorie dite **MPP** (massively parallel processors) est une sous-catégorie des deux précédentes et se caractérise par des superordinateurs composés de plusieurs dizaines de milliers de processeurs interconnectés par 1 à plusieurs réseaux d'interconnexion, utilisant des systèmes d'exploitation optimisés ou spécifiques. Il existe deux systèmes MPP actuellement celui fourni par IBM (le Blue Gene/P qui équipe par exemple l'IDRIS) et le CRAY XT5 qui équipe ORNL la machine académique la plus puissante actuellement.

Mais les calculateurs à mémoire distribuée impliquent une conception totalement nouvelle du logiciel, en ne définissant pas seulement des structures de données et des méthodes de calcul opérant sur ces structures, mais en organisant l'application comme un ensemble de tâches qui communiquent entre elles mais qui ont chacune son code et ses données propres. Le type de programmation associé à ce modèle s'appelle « programmation par échanges de message ». Ce terme indique que les transferts de données entre les tâches doivent être explicitement programmés dans les codes de calcul, à l'aide de bibliothèques de fonctions d'échanges comme « **MPI** », (Message Passing Interface) ; c'est un modèle de programmation dit **MIMD** (multiple instruction multiple data).

Les clusters SMP hétérogènes utilisent depuis peu des nœuds de calcul composite formés de microprocesseurs standards couplés à un ou plusieurs accélérateurs comme les GPGPU

---

(general purpose graphic processor unit), des processeurs CELL, des FPGA ou des accélérateurs tels que ceux conçus par Clearspeed. Une tendance à l'horizon 2010 visera à intégrer au sein des processeurs ces accélérateurs comme le promet le projet Larrabee de Intel ou le projet Fusion d'AMD.

## 5 Les infrastructures

Tout chercheur appartenant à la communauté scientifique nationale peut, sous le couvert de son laboratoire, faire une demande de ressources sur les machines hébergées au CCRT, CINES et IDRIS, grâce à l'application en ligne « DARI » ([www.edari.fr](http://www.edari.fr)) où il expose l'intérêt scientifique de son projet et les moyens nécessaires pour le réaliser. Des Comités Thématiques d'experts nationaux examinent les demandes et proposent les attributions de ressources pour les projets sélectionnés, sur critère d'excellence scientifique. Ce mécanisme sous la responsabilité de GENCI est commun depuis 2008 aux centres nationaux.

Nous insistons dans ce rapport sur la partie la plus visible, c'est-à-dire l'infrastructure matérielle des centres. Mais il est important de rappeler que chacun des centres assure également un support, à la fois informatique, et parfois applicatif, pour ses utilisateurs. Il assure également une mission de formation aux techniques du calcul intensif, en organisant des séminaires et des formations thématiques. Ces missions impliquent l'existence d'équipes formées et compétentes. Ces équipes sont le plus souvent très appréciées des utilisateurs. Enfin, signalons l'existence, dans chaque centre, d'un comité des utilisateurs, qui représente ces derniers auprès des instances du centre.

### 5.1 Le CCRT

Le Centre de Calcul Recherche et Technologie (CCRT) est une des composantes du complexe de calcul scientifique du CEA localisé sur le site de Bruyères-le-Châtel (*Centre DAM-Ile de France*).

Il a été ouvert en production fin 2003 pour répondre aux besoins du CEA et de ses partenaires en matière de grandes simulations numériques et favoriser les échanges et les collaborations scientifiques, dans un contexte où l'accès à la simulation numérique haute performance est devenu un des enjeux stratégiques de la compétitivité des entreprises et des organismes de recherche.

De la recherche à l'industrie, les simulations numériques réalisées grâce au CCRT touchent ainsi des domaines très diversifiés : aéronautique, sûreté des réacteurs nucléaires, évolution du climat, naissance des galaxies, comportement des matériaux, génomique, traitement d'images médicales etc....

Le CCRT est l'un des rares centres de calcul européens ouverts à des partenariats entre la recherche et l'industrie. Ses partenaires sont aujourd'hui :

- Les pôles du CEA : Direction de l'Énergie Nucléaire, Direction des Sciences du Vivant, Direction des Sciences de la Matière, et la Direction des Applications Militaires
- GENCI : Grand Equipement National pour le Calcul Intensif
- des industriels : EDF, Snecma, Turbomeca, Techspace Aero, EADS/Astrium
- des centres de recherche : Onera, Cerfacs.

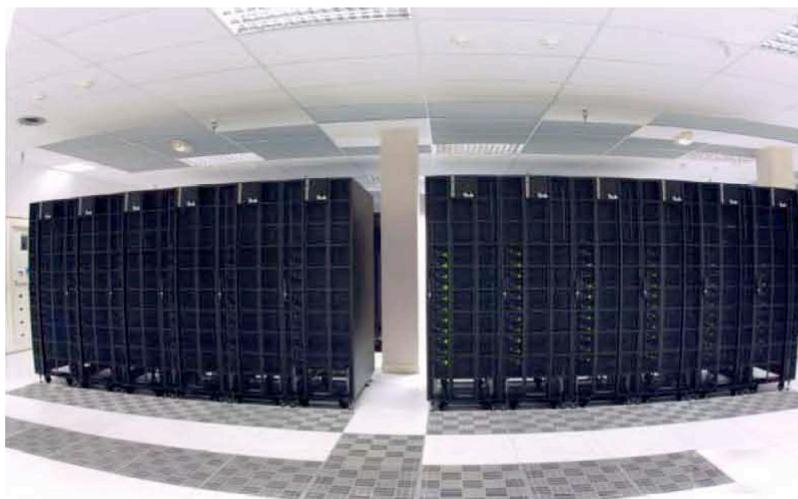


Figure 9: la machine Bull Novascale « Platine » du CCRT

## L'organisation

Le CCRT s'appuie sur deux instances de pilotage :

- le comité de pilotage qui prend les décisions budgétaires et stratégiques, valide l'arrivée de nouveaux partenaires et arbitre les évolutions techniques
- le comité utilisateur qui recense les besoins utilisateurs, propose les évolutions techniques, définit la politique d'exploitation

La maîtrise d'œuvre du CCRT a été confiée au département des Sciences de la simulation et de l'information (DSSI) du centre DAM-île de France.

Les services d'exploitation, d'administration, d'assistance aux utilisateurs et de support aux développements applicatifs sont assurés par des prestataires sous contrat, pilotés par des responsables CEA. L'expertise et la veille technologique dans le domaine du HPC sont réalisées par des équipes CEA du DSSI mutualisées avec le centre de calcul Défense.

## Une offre diversifiée de calculateurs

Le CCRT est équipé de différentes architectures de calculateurs, parallèles et vectoriels, afin de répondre aux besoins de ses 1500 utilisateurs.

Sa puissance de calcul crête est aujourd'hui de 50 Tflops, avec :

- Un calculateur massivement parallèle (Bull), à base de nœuds Novascale 3045 (processeur Intel/Itanium) interconnectés par un réseau Infiniband, d'une puissance de calcul crête de 48 Tflops ;
- Un calculateur vectoriel (NEC), constitué de 8 nœuds SX8-R, d'une puissance de calcul crête de 2 Tflops ;

Les résultats obtenus à partir de ces calculateurs peuvent être hébergés sur un système de stockage. Ce dernier, fourni par la société SGI, dispose d'un premier niveau de 1 pétaoctets<sup>22</sup> sur disques et d'un deuxième niveau sur cartouches (robotique SUN-STK) permettant l'archivage de 5 pétaoctets de données.

---

Fin 2008, un cluster de dépouillement viendra compléter ces moyens de calculs pour fournir aux utilisateurs un environnement de traitement graphique et de visualisation de leurs données.

### **Les évolutions 2009**

Grâce au financement de GENCI, le CCRT va pouvoir réaliser début 2009 une extension de ses moyens de calculs actuels et mettre à la disposition des utilisateurs du monde de la recherche, un des premiers systèmes parallèles hybrides installés en Europe.

Ce dernier disposera de 1068 nœuds de calculs généralistes à base de la nouvelle génération de processeurs Intel Xeon/Nehalem, dont certains seront équipés d'accélérateurs de type GPU (Graphics Processing Unit). Ces derniers processeurs disposent d'une architecture initialement développée pour le traitement graphique et sont fournis par la société Nvidia. Cette machine hybride d'une puissance agrégée de près de 300 Tfllops a été conçue par BULL et sera administrée comme une extension du calculateur BULL déjà en service depuis juin 2007.

Les objectifs recherchés avec ce nouveau concept de calculateur sont :

- Favoriser l'émergence de nouvelles applications bénéficiant du couple CPU-GPU
- Étendre le champ du calcul scientifique à de nouvelles applications, notamment dans le domaine du traitement des données
- Préparer l'avenir de l'utilisation de processeurs de plus en plus parallèles dont les GPU pourraient être les précurseurs

Trois nouveaux nœuds NEC-SX9 viendront début 2009 compléter le système vectoriel pour répondre aux besoins de la communauté de la climatologie dans le cadre du prochain programme du GIEC.

### **Formation, colloques scientifiques et technologiques**

Afin de maintenir une dynamique d'échanges entre ses partenaires, le CCRT organise des journées annuelles consacrées à des exposés utilisateurs présentant leurs résultats scientifiques et des workshops technologiques autour de thématiques actuelles (accélérateurs type GPU ou cell, optimisation de la consommation d'énergie, nouveaux algorithmes de programmation...).

Des formations sont périodiquement organisées pour permettre aux utilisateurs de tirer pleinement parti des architectures mises en œuvre sur le CCRT. Cela concerne la programmation parallèle (MPI, OpenMP...) mais aussi les technologies utilisées par les futures machines comme l'environnement Cuda, dans l'objectif de préparer l'évolution des codes utilisateurs en avance de phase par rapport aux installations des calculateurs.

### **Un avenir européen**

Dans les prochaines années, le CCRT évoluera au sein des infrastructures prévues pour accueillir un Très Grand centre de Calcul (TGCC) implanté à Bruyères-le-Châtel.

Avec le pôle de compétence en calcul haute performance Ter@tec et ses 50 partenaires issus du monde de la recherche, de l'industrie et de l'enseignement, l'ensemble constituera une technopole d'envergure européenne

## 5.2 Le CINES

Le CINES (Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur) est un Établissement Public à caractère Administratif national placé sous la tutelle du Ministère chargé de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche. Le CINES propose des moyens exceptionnels à l'ensemble de la communauté scientifique dans les domaines suivants :

- Le calcul numérique intensif,
- L'archivage pérenne de documents électroniques,

### Calcul intensif

Dans ce cadre le CINES héberge des équipements de pointe dont le supercalculateur acquis en 2008 par GENCI (Grand Équipement National pour le Calcul Intensif) qui figure à ce jour parmi les premières machines européennes (14<sup>ème</sup> mondiale et 2<sup>ème</sup> en Europe au dernier classement du top500 en novembre 2008)

#### Un supercalculateur de niveau mondial : 147 Tflops

Résultat d'une procédure de dialogue compétitif menée par GENCI, un supercalculateur parallèle **SGI ICE 8200 EX**, conçu par la société Silicon Graphics Inc. est hébergé au CINES depuis juillet 2008. D'une puissance crête de 147 Tflops ce système nommé Jade, à base de nœuds de calcul à mémoire partagée interconnectés par un réseau InfiniBand, est composé de **12 288** cœurs Intel Xeon™ à 3 GHz dotés chacun de 4 Go de mémoire. Une capacité de stockage local de 500 To permet d'effectuer des accès rapides (15 Go/s) aux données gérées par le système de fichier parallèle « Lustre ».



Figure 10: la machine SGI Altix « Jade » du CINES

Lors de l'inauguration de la machine Jade le 05 novembre 2008 (en présence de V. Pecresse Ministre de l'Enseignement supérieur et de la Recherche) un colloque a permis de présenter les travaux menés par les scientifiques dans le cadre de 9 grands défis applicatifs.

Ces défis issus de domaines scientifiques très variés (physique des plasmas, prédiction des tremblements de terre, climatologie, combustion, nouvelles énergies, ...) ont permis aux chercheurs de réaliser à l'aide de simulations sur plusieurs milliers de cœurs de réaliser des avancées scientifiques de premier ordre qui pour certaines sont des premières mondiales.

Une description plus complète des grands défis (et les résultats obtenus) est disponible sur le site web de GENCI<sup>23</sup> :

<sup>23</sup> <http://www.genci.fr/spip.php?article31&lang=en>

A côté de cet équipement de grande envergure le CINES propose différentes ressources de calcul complémentaires de moindre envergure mais qui permettent à travers des technologies différentes d'adresser une grande variété de problèmes. Les différentes plates-formes disponibles sont équipées des logiciels de base (compilateurs, bibliothèques mathématiques, outils de parallélisation, etc.) et de logiciels spécifiques aux différentes disciplines scientifiques en fonction des besoins exprimés dans les demandes des laboratoires. Tous ces outils sont choisis pour tirer les meilleures performances des calculateurs.

Dans le cadre d'une collaboration de R&D entre BULL et GENCI 6 nœuds hybrides BULL/nVIDIA ont été installés au CINES fin 2008, ils permettront aux scientifiques français en attendant l'installation du système hybride au CCRT de tester et porter leurs applications sur ce type de plateformes.

Des outils de programmation pour les GPU (plus simples d'utilisation que CUDA) comme ceux de la jeune pousse CAPS Entreprise seront prochainement installés par GENCI sur ce prototype. Ils permettront ainsi la promotion de cette société par des retours d'expérience des utilisateurs.

### *Archivage pérenne et hébergement*

L'archivage pérenne a pour but de permettre la **conservation à long terme de l'information numérique**, et en particulier de s'affranchir de l'obsolescence des supports physiques et de leurs défauts, ainsi que de l'évolution constante des formats et standards logiciels. C'est un élément essentiel de toute politique de dématérialisation et de numérisation des informations, qu'elles soient scientifiques, culturelles ou administratives.

En 2004, le MENESR a confié au CINES la mission d'assurer l'archivage pérenne des thèses électroniques<sup>24</sup>, ainsi que des revues numérisées en Sciences Humaines et Sociales du portail Persée<sup>25</sup>. Ces projets ont amené le CINES à concevoir puis à mettre en œuvre une solution générique d'archivage pour les documents numériques, appelée Plateforme d'Archivage au CINES (PAC), conçu sur le modèle proposé par la norme ISO 14721 (OAIS).

Le TGE Adonis qui travaille à une solution mutualisée d'accès et de conservation à long terme des documents en Sciences Humaines et Sociales, a sélectionné le CINES en collaboration avec le Centre de Calcul de l'IN2P3 pour l'archivage des données orales du CRDO (Centre de Recherche pour les Données Orales).

Enfin le CINES collabore avec le CCSD (Centre pour la Documentation Scientifique Directe) pour mettre en œuvre l'archivage pérenne des documents versés dans les archives ouvertes HAL et avec le CERIMES pour l'archivage des données vidéos du consortium de chaînes numériques CANAL\_U (<http://www.canal-u.fr>).

L'expérience du CINES dans l'exploitation des environnements informatiques et la mutualisation de ses infrastructures permettent d'accueillir dans les salles machines les serveurs stratégiques de partenaires. Ainsi le CINES héberge une partie du « cluster » de calcul de l'IN2P3, l'ensemble des serveurs de l'ABES et de PERSEE, les machines de l'ISSN, les serveurs de Canal-U, le nœud régional RENATER, etc..

---

<sup>24</sup> Arrêté du 7 août 2006 relatif aux modalités de dépôt, de signalement, de reproduction, de diffusion et de conservation des thèses ou des travaux présentés en soutenance en vue d'un doctorat

<sup>25</sup> Convention tripartite DGES/SDBIS, Université Lyon 2, CINES

### 5.3 L'IDRIS

L'IDRIS (Institut du développement et des ressources en informatique Scientifique), fondé en novembre 1993, est le centre majeur du CNRS pour le calcul numérique intensif de très haute performance. A la fois centre de ressources informatiques et pôle de compétences en calcul intensif de haute performance, l'IDRIS est une Unité Propre de Service du CNRS, à vocation pluridisciplinaire, placée sous la tutelle du Département ST2I. Les modalités de fonctionnement de l'IDRIS sont très proches de celles des très grands équipements scientifiques.

Pour le fonctionnement de l'unité, la direction de l'IDRIS est en relation avec :

- Une instance de gestion scientifique des ressources : le Conseil Scientifique, constitué essentiellement par les présidents des comités thématiques qui évaluent les demandes des ressources informatiques sur les centres nationaux. Le Conseil Scientifique de l'IDRIS est maintenant fusionné dans un Conseil Scientifique commun aux trois centres nationaux (IDRIS, CINES, CCRT).
- Une instance de contrôle de qualité des services : le Comité des Utilisateurs.

L'IDRIS gère chaque année environ 420 projets scientifiques émanant de plus de 200 laboratoires de recherches clients. Environ 1800 scientifiques sont des utilisateurs assidus de ses infrastructures de calcul de haute performance.

#### L'environnement de calcul de l'IDRIS

L'IDRIS met à la disposition de ses utilisateurs un environnement diversifié d'architectures de calcul numérique intensif, accompagné de tous les services nécessaires à la production de données : système de stockage, frontale, services de pré et de post-traitement numérique, frontale de post-traitement graphique. L'environnement de calcul de l'IDRIS est structuré autour d'un réseau à très haut débit qui connecte les différentes machines de calcul et les serveurs de gestion, post-traitement et visualisation des données :

Les plates-formes de calcul intensif sous-traitent aux serveurs spécialisées toutes les opérations de gestion, préparation et post-traitement des données qui précèdent et qui suivent les simulations elles mêmes.



Figure 11: La machine IBM Blue-Gene/P « Babel » de l'IDRIS

---

**Le calcul scalaire : le système couplé BlueGene/P – Power6**

La nature et le profil des programmes informatiques mis en œuvre par les grands défis scientifiques dépendent naturellement de la discipline et du problème ciblé. La nécessité de soutenir un très large spectre de projets de recherche d'avant-garde a conduit le CNRS à choisir une architecture scalaire polyvalente et hétérogène, résultant de l'intégration de deux architectures d'ordinateurs différentes mais complémentaires :

- Une architecture massivement parallèle appelée MPP, le système BlueGene/P, d'une puissance nominale de 139 Téraflops, adaptée aux applications pouvant bénéficier d'un niveau de parallélisme « extrême ». Elle est donc optimisée pour ce type d'application par exemple par la mise en œuvre d'un réseau d'interconnexion entre processeurs (utilisé pour échanger des informations entre les unités de calcul) pouvant soutenir sans faiblir des communications engageant des dizaines de milliers de processeurs simultanément. Le système BlueGene/P est destiné à entraîner la communauté scientifique nationale dans le développement, déploiement et exploitation des applications à fort parallélisme massif s'exécutant sur des milliers, voire des dizaines de milliers de processeurs. Cette évolution est incontournable pour accéder à des niveaux de performance au-delà du Pétaflop, nécessaires pour les grands défis scientifiques actuels.

- Une architecture plus généraliste appelée SMP, le système Power6, d'une puissance nominale de 68 Téraflops, pour les applications à parallélisme modéré, doté de processeurs très puissants, Cette plate-forme permet à des ensembles de 32 processeurs de calcul de partager une très grosse mémoire. Le système IBM Power6 est destiné au support des applications existantes aujourd'hui à l'IDRIS, dont la plus grande partie possède un niveau de parallélisme intermédiaire à gros grain (typiquement, s'exécutant sur des petites centaines de processeurs) ou bien utilise un modèle de programmation parallèle à mémoire partagée. Cette composante est au mois 10 fois plus performante que l'ancienne plate-forme Power4 qui vient d'être retirée du service.

*L'image unique du système.* L'intégration des deux plates-formes citées ci-dessus en une seule plate-forme de calcul à image unique pour les scientifiques qui lui confieront leurs simulations numériques se fait par un système de fichiers global GPFS (Global Parallel File System) qui permet le partage des fichiers entre les deux plates-formes.

**Le supercalculateur vectoriel NEC SX8**

Ce système est un cluster de dix nœuds de calcul, chaque nœud comportant huit processeurs vectoriels très performants – d'une puissance crête de 16 gigaflops par processeur – et 64 Gigaoctets de mémoire partagée par les processeurs du nœud. L'objectif de cette plate-forme est le support aux applications qui bénéficient du traitement vectoriel. Il y a chaque année environ 160 projets scientifiques qui utilisent cette plate-forme.

Des serveurs spécialisés complètent l'offre matérielle :

- un serveur de visualisation (supercalculateur graphique SGI à base de processeurs spécialisés, couplé à un ensemble logiciel de déport d'affichage),
- un système de stockage (Origin 2000 SGI de fichiers comportant une capacité de stockage sur disques de 30 Téraoctets servant d'intermédiaire à trois robots de stockage pouvant accueillir jusqu'à 1 Petaoctets sur cassettes).
- Une « frontale » (en cours de remplacement, pour la mettre à niveau des nouveaux calculateurs) permet aux utilisateurs de l'IDRIS d'effectuer des pré et post-traitements numériques sur leurs données et également de préparer l'exécution de codes de calculs sur les architectures vectorielles et scalaires de l'IDRIS.

---

## 5.4 *La situation internationale*

### 5.4.1 Les principaux centres aux États-Unis

Les grands centres de calcul pour la recherche aux États-Unis sont administrés principalement par le DoE (Dept of Energy) et la NSF (National Science Foundation).

#### **Los Alamos**

La plus grosse machine du DoE est à Los Alamos : c'est la Roadrunner dont nous avons parlé plus haut, le premier super ordinateur ayant dépassé le pétaflops en juin 2008.

Roadrunner connecte 6,562 dual-core AMD Opteron® chips ainsi que 12,240 Cell chips avec un total de 98 terabytes de mémoire. Il est encore difficile d'optimiser un programme sur une telle machine de sorte qu'il n'est prévu de porter qu'un nombre restreint d'applications. Les activités du laboratoire sont principalement pour des objectifs militaires, mais un grand nombre d'autres sujets sont aussi abordés tels que les écoulements dans les milieux poreux, la propagation des ondes etc. Certains des logiciels sont dans le domaine public.

#### **Lawrence Livermore National Lab**

La deuxième machine est aussi dans un laboratoire du DoE. Il s'agit d'une IBM blue-gene/P d'une puissance de 487 Tflops-Linpack. La machine a 106,496 nœuds de calcul.

Le laboratoire à des missions scientifiques voisines de celles de Los Alamos mais sa particularité est d'avoir une équipe qui développe des outils pour faciliter l'utilisation des machines ultra-parallèles ; citons en particulier une bibliothèque pour les solveurs multigrilles capable de passer à l'échelle jusqu'à 100.000 cœurs.

#### **Lawrence Berkeley National Lab**

Au NERSC, le troisième laboratoire du DoE possède une machine CRAY XT4 de 38,640 cœurs avec une puissance de pointe de 357 Tflops. La plupart des domaines du HPC sont couverts par le LBNL, qui, par ailleurs, s'est illustré par sa collaboration avec l'université de Californie de Berkeley et le langage de programmation UPC.

#### **OakRidge National Lab (ORNL)**

Les missions du centre de calcul sont de mettre à la disposition des chercheurs des machines expérimentales et de collaborer avec les universités et les industries pour une meilleure utilisation du calcul scientifique. Jusqu'à l'été 2008, ORNL disposait d'un CRAY XT4 à base de processeur AMD Opteron quadricoeurs à 2.1 GHz ayant tourné Linpack à 300 Tflops.

ORNL vient de mettre en service un CRAY XT5 (Jaguar) à base de processeurs AMD Barcelona quadricoeurs 2.3 Ghz maintenant classé en seconde position du top500 avec une performance de 1.05 PF sur un Linpack. Cette machine d'une capacité crête de 1.6 PF a déjà démontré des performances de plus d'1PF soutenues sur des codes d'applications réalistes, dont certains ayant récemment gagné le prix Gordon Bell (décerné chaque année lors de SuperComputing pour récompenser les codes utilisant le mieux le parallélisme) dans des domaines comme la géophysique, la simulation des plasmas, la physique des matériaux, la simulation du climat, la combustion ...

Jaguar est depuis novembre 2008 le superordinateur le plus performant pour la recherche académique.

---

### Argonne National Lab

Les missions d'ANL sont de conduire des recherches en physique, pour les sciences de l'environnement et de la santé, sur des programmes qui intéressent le DoE, en particulier tout ce qui touche à l'énergie. La machine la plus grosse est une IBM Blue-Gene/P de 450 Tflops Linpack. Le laboratoire est aussi très connu pour ses contributions aux logiciels libres pour le HPC, comme la bibliothèque PetSc.

### Texas Advanced Computing Center

Le TACC possède une machine SUN microsysteme a base de Sunblade utilisant des AMP Opteron comme Oakridge. C'est la plus grosse machine de la NSF avec 62,976 nœuds, 123 Tbytes de mémoire et capable de 570 Tflops Linpack.

### Pittsburg Supercomputing Center

Le PSC est un des grands centres du NSF, très impliqué dans la grille de calcul Teragrid. Parmi les thèmes de recherche le PSC est impliqué dans la recherche de nouveaux médicaments, la simulation des écoulements sanguins, les tremblements de terre et les événements climatiques extrêmes. Il est question d'équiper le PSC d'une machine pétaflopique dans un avenir proche.

### University of Illinois et NCSA

Le National Center for Supercomputing Applications est un des grands acteurs du calcul intensif aux États-Unis. Même s'il ne brille pas actuellement par la taille des machines sur le centre (Dell PowerEdge de 85 Tflops max, mais avec Windows server), il est prévu d'installer, en partenariat avec IBM, en 2011, une machine capable du Pflops soutenu (donc au moins dix fois plus en Linpack de pointe). La NSF, Microsoft (et l'INRIA) mise sur ce centre de recherche pour le développement d'outil nouveaux, logiciel et matériel.

## 5.4.2 Europe

### Allemagne

La position de l'Allemagne pour le calcul scientifique a été fortement renforcée par les opérations suivantes :

Les 3 centres nationaux en calcul intensif, Jülich, Garching et Stuttgart ont unis leurs forces pour donner naissance au Gauss Centre for Supercomputing (GCS).

Cette alliance entre le Forschung Zentrum Jülich (**FZJ**), le Leibniz Rechen Zentrum (**LRZ**) à Garching, et le Höchst Leistungs Rechen Zentrum Stuttgart (**HLRS**) a produit l'une des plus grandes infrastructures d'Europe pour le calcul intensif. Le GCS est une structure virtuelle basée sur un accord entre le ministère fédéral pour l'éducation et la recherche (BMBF) et les ministères de la recherche des états du Baden-Württemberg, de la Bavière et du Nordrhein-Westfalen depuis Juillet 2006.

Le GCS a aussi pour objectif de donner à l'Allemagne tous les atouts pour qu'elle puisse avoir un rôle de leader dans le futur écosystème européen pour le calcul intensif et particulièrement vis à vis du 7ème PCRD où la Commission Européenne a donné des directives pour la construction d'infrastructure pétaflopiques à l'échelle européenne en 2009/2010. Une coopération des centres nationaux est prévue avec pour objectif de réaliser

---

une action de grande envergure avec toutes les nations européennes intéressées par le calcul intensif. Le nouveau directeur du Forschungszentrum de Jülich, a été nommé pour représenter le GCS dans les instances européennes; il est aussi directeur du programme PRACE.

Le BMBF a annoncé qu'il participerait à hauteur de 30 M€ au réseau de communication à haute vitesse entre les différents centres Allemand.

Le GCS offre ainsi un des meilleurs services en calcul intensif et en réseaux avec, récemment,

- Une extension du SGI Altix 4700 à 62.3 TeraFlop/s au LRZ
- Un 2.6 TeraFlop/s NEC SX/8 au HLRS et ,
- Un IBM Blue Gene/P de 223 Tflops ainsi qu'un cluster 8.4 TeraFlop/s IBM p6 575 au FZJ,

soit un total de l'ordre de 300 Téraflopp/s.

L'architecture de chaque machine est différente mais complémentaire dans le sens que pour chaque domaine d'application une architecture est mieux adaptée:

- l'Altix a une énorme mémoire partagée,
- le SX8 est très efficace pour des codes vectorisés,
- le Blue Gene est adapté aux codes scalables sur un grand nombre de processeur et n'utilisant que très peu de mémoire par proc
- le cluster p6 575 apporte une grande mémoire pour une machine SMP.

LE FZJ vient de plus d'annoncer la commande à BULL d'un cluster de SMP généraliste de 200 Teraflopp/s pour le début 2009 (machine JUROPA). Cette machine, utilisant le dernier des processeurs INTEL (NEHALEM) intègre une partie des développements technologiques effectués en collaboration par BULL et CEA/DAM dans le cadre du pôle de compétitivité SYSTEMATIC (projets FAME2 et POPS).

Avec l'aide de l'industrie allemande, le BMBF a développé un réseau 10 Gbit/s dans le cadre du programme DEISA et il sera bientôt passé à 40 Gbit/s puis 100 Gbit/s.

Un tel réseau va permettre de développer des applications coopératives et une gamme de nouveaux services. L'accès aux ressources utilise la technologie des grilles de calcul ce qui va sans doute faciliter les calculs distribués et le stockage des données réparties. Les universités et les laboratoires de recherche sont reliés à ce réseau et sont en contact avec le GCS par l'intermédiaire du DFN, l'office qui gère le réseau national. Ainsi il y a tout lieu de penser que le GCS va jouer un rôle national et européen pour la simulation. Le GCS a aussi un rôle dans la formation et projette d'harmoniser les services de formation du HLRS, LRZ et NIC et de les adapter aux diverses communautés de la science des matériaux de la physique, climatologie, biologie computationnelle, ingénierie...

Enfin l'alliance JARA a été créée en 2007 pour rapprocher le FZJ et l'université RWTH-Aachen. Une des 4 sections de JARA, la JARA-SIM est dédiée à l'avancement des méthodes numériques pour le calcul intensif. Il s'agit d'un programme reliant une quarantaine d'institutions pour les sciences naturelles et l'ingénierie. Au centre de cet accord il y a la nouvelle école GRS pour la simulation qui délivre un diplôme de Mastère et possède un programme de doctorat pour les meilleurs étudiants ([www.grs-sim.de](http://www.grs-sim.de)) avec pour objectif de stimuler les interactions multidisciplinaires ayant une composante en calcul.

Mentionnons pour terminer que les centres en calcul intensif allemands travaillent actuellement à renforcer leurs liens avec les autres acteurs du calcul en Europe.

---

Un accord a été signé en février entre le FZJ et le CEA sur le HPC. Cet accord porte sur le développement de technologies européennes pour le HPC. Il s'est traduit cette année par :

- une réponse commune à PRACE pour un prototype BULL à installer début 2009 au CEA sur lequel les deux entités travailleront ensemble.
- Un projet de répondre en commun avec des machines complémentaires au futur appel d'offre européen pour les deux premières machines PRACE.

## Espagne

L'Espagne possède essentiellement un très grand système : un cluster IBM de type Blade Center (nommé Mare Nostrum), d'une puissance de 94 Tflops et classé 26<sup>ème</sup> dans le top500, après avoir été en 2005-2006 le plus puissant système en Europe. Cette machine est située au BSC-CNS (Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación). Ce centre a été créé par une coopération entre le Ministère de l'Éducation et de la Science espagnol, le gouvernement de Catalogne et l'Université Technique de Catalogne (UPC).

Les missions du BSC-CNS sont la recherche, le développement et la gestion des technologies de l'information dans le but de faciliter le progrès scientifique. Une attention particulière est portée au calcul intensif, aux sciences de la vie et aux sciences de la terre.

## Finlande

En Finlande le CSC (center for Super Computing), est responsable du réseau national – funet - et du centre de calcul national pour la recherche. Il dépasse de beaucoup ses missions d'origine car il maintient aussi une politique de veille exemplaire sur le calcul intensif et une coopération exemplaire avec les universités et les industries finlandaises. De fait la Finlande est un pays modèle pour l'enseignement de la simulation et du calcul. Il dispose d'un Cray XT5 d'une puissance de 86 Tflops et de plusieurs cluster de grandes tailles, ce qui, ramené au nombre d'habitants constitue un équipement impressionnant.

## Italie

Le calcul intensif en Italie est essentiellement l'affaire de Cineca, un Consortium Interuniversitaire sans but lucratif, regroupant 31 universités italiennes, le Centre national de la recherche italien (le CNR), et le Ministère de l'Université et de la Recherche (MUR). Constitué en 1969 en tant que Consortium Interuniversitaire pour le calcul automatique de l'Italie nord-orientale, aujourd'hui, CINECA est le plus grand centre de calcul d'Italie, un des plus importants au monde.

## Pays-Bas

Les Pays-Bas possèdent 3 machines dans les 100 premières (en juin 2008). Les deux premières sont à l'Université de Groningen, au Centre for High-Performance Computing and Visualisation, la troisième à Amsterdam, au SARA Computing and Networking Services. La plus puissante est un IBM Blue Gene, mais qui sera dédié à l'analyse du projet d'astrophysique LOFAR. La machine de SARA (un IBM pSeries, à base de Power 6) est une ressource nationale.

## Royaume Uni

L'EPSRC en Grande Bretagne a deux programmes, HPCx et HECToR (High End Computing Terascale Resource), avec une gestion centralisée sur l'université d'Edimbourg. HPCx donne accès à un IBM Power 4 de 1600 processeur et Hector à un Cray XT4 de 60 Tflops sur le campus de l'université. Par ailleurs la plupart des grandes universités ont toutes une machine quelques dizaines de Tflops et accès à deux grilles de calcul nationales (NGS et NW-GRID),

---

raisons pour lesquelles la Grande-Bretagne est seconde en Europe pour l'équipement en calcul intensif.

## Suisse

La recherche en Suisse est dominée par les deux écoles polytechniques de Lausanne et de Zurich. Il y a plusieurs décennies elles décidèrent de faire coopérer leurs centres de calcul et de renouveler le matériel alternativement tous les 3 ans. Pour des raisons politiques le centre de calcul de l'ETH a été délocalisé dans le Tessin et est devenu le CSCS. Actuellement l'EPFL possède un ibm Blue-Gene/L de 23 Tflops, le CSCS un Cray XT3 de 17 Tflops. Le SIB, institut de bio-informatique de l'ETH est un modèle d'excellence.

### 5.4.3 Japon

Après avoir occupé la tête du classement mondial entre 2002 et 2004 avec la machine Earth Simulator, le Japon marque le pas, en attendant la réalisation de plusieurs projets ambitieux. En juin 2008, il occupait le 5<sup>ème</sup> rang mondial, derrière la France. La machine la plus puissante, classée 16<sup>ème</sup> se trouve à l'Université de Tokyo. Elle est construite par Hitachi, puisque le Japon reste l'un des rares pays à posséder encore des constructeurs nationaux avec des machines dans le top500. Outre Hitachi, Fujitsu et NEC, on trouve également des constructeurs américains.

Le Japon poursuit actuellement 3 projets importants (outre la machine spécialisée Grape):

- T2K Open Supercomputer est une alliance de 3 universités (Tokyo, Kyoto, et Tsukuba), autour d'une architecture commune, mais décentralisée (la machine Hitachi citée plus haut est l'un de ces nœuds, un second nœud est classé 20ème), et ouverte, tant pour le matériel que le logiciel.
- Tsubame (classé 24<sup>ème</sup>) est basé sur un cluster Sun, et des accélérateurs Clearspeed, donc une architecture hybride innovante.
- Le projet de supercalculateur à 10 Pflops de RIKEN, qui s'accompagne d'un Grand Défi en sciences de la vie, et nanotechnologies. Ce projet, doté d'un budget de près de 800 millions d'euros a le potentiel de rééditer le coup de tonnerre du Earth Simulator, en prenant durablement la première place du classement. Il est important de souligner que les applications sont dès le départ partie intégrante du développement de l'architecture, avec un centre de calcul intensif construit à proximité de la machine.

Ces projets procèdent d'une stratégie nationale ambitieuse et à long terme. Basés sur des processeurs japonais, ils sont coordonnés de manière à constituer un écosystème global pour le calcul intensif au Japon. Les recherches sont communes, et intègrent aussi bien le matériel que le logiciel, en laissant une ouverture vers les coopérations internationales. La question sans réponse reste bien entendu le modèle de programmation : le modèle retenu est toujours MPI, et l'on peut s'interroger sur sa pérennité.

### 5.4.4 Autres pays

- La Chine possède 12 machines dans le Top500 dont une des plus puissantes pour la recherche (22 Tflops) est utilisée pour la prospection du pétrole. Le Centre de Calcul Technologique de Shanghai a fait aboutir fin 2008 un projet de calculateur d'une puissance de 230 Tflops qui est classé 10<sup>ème</sup> au dernier classement du top500.

- L'Inde a construit en 2007 une machine de 172 Tflops sur la base d'un design HP et de Xeons reliés par un réseau infiniband. Cette machine est utilisée pour la R&D de Tata Motors le principal constructeur automobile du pays.
- La Russie a plusieurs machines de fabrication locale dont les deux plus puissantes (60 Tflops) sont à l'université de Moscou, et au Centre de Calcul de l'Académie des Sciences. Ces deux centres seront probablement rééquipés en 2009 par des machines de 500 et 140 Tflops respectivement.

## 6 Les ressources humaines

La France possède une bonne école de mathématiques fondamentales et appliquées et une bonne tradition de coopération industrie-recherche dans cette branche. Pour un domaine où l'algorithmique et les méthodes numériques prédominent, c'est un atout considérable car dans l'ensemble le scientifique et l'ingénieur français connaît plus de mathématiques que son homologue américain ou anglais. En revanche les formations en calcul scientifique sont quasiment inexistantes dans les écoles d'ingénieur et externes aux départements dans la plupart des sciences dans les universités. Il est presque juste de dire que la plupart des scientifiques et des ingénieurs se sont formés « sur le tas » en informatique, à l'exception de certains masters dans des départements de mathématiques. A l'inverse les formations en informatiques font très peu de calcul scientifique.

Sur la manière d'enseigner le calcul scientifique et la simulation dans les sciences comme la géologie ou la biochimie, les avis divergent. Pour les étudiants les plus doués il n'y a pas de problème, car ils ont souvent une double formation avec des mathématiques appliquées ou de l'informatique. Le problème se pose pour la majorité. Comme l'indique le rapport PITAC<sup>26</sup> américain, il s'agit d'abord d'un problème de culture : le géologue, ou le biologiste, ne doit plus considérer la simulation comme un service externe mais bien comme une partie intégrante de son art. En attendant que cette nouvelle culture soit absorbée par tous, on s'attend à voir émerger quelques centres d'excellence et la logique serait de leur donner les moyens de grandir.

Ainsi toute opération faisant la promotion de la simulation est bienvenue et le CSCI encourage la création d'Institut du calcul dans les universités, de prix scientifique (prix Joseph Fourier Bull en collaboration avec GENCI récemment créé par exemple) et de la mention « calcul scientifique » sur les thèses concernées, mise en place par la CPU en coopération avec GENCI.

## 7 L'effort logiciel

Après dix de recherche dans les années 85-95, MPI émergea comme l'outil de base pour le calcul parallèle sur les ordinateurs à mémoires distribuées, openMP restant l'outil de référence pour les ordinateurs à mémoires partagées.

MPI s'est aussi révélé capable de passer à l'échelle jusqu'aux machines actuelles, soit plusieurs milliers de processeurs<sup>27</sup>. Les experts pensent qu'ils pourront encore travailler en

---

<sup>26</sup> [Computational Science: Ensuring America's Competitiveness](#), President's Information Technology Advisory Committee, National Coordination Office for Information Technology Research and Development

<sup>27</sup> Au LLNL un code de dynamique moléculaire tourne sur 200.000 processeurs d'une IBM Blue-Gene et un solveur d'EDP multigrille sur 130.000 processeurs. Au LBNL un code d'astrophysique tourne sur 40.000 processeurs.

---

MPI sur des machines avec des millions de processeurs à conditions qu'elles soient homogènes, c'est-à-dire que tous les processeurs sont du même type.

En dehors de MPI il existe actuellement deux types d'outils :

- Les compilateurs de nouveaux langages comme UPC (Unified Parallel C) et CUDA (de Nvidia pour les GPGPU)
- Les bibliothèques comme HYPRE et PETSC

Beaucoup de ces outils ont été développés dans les centres américains du DoE, équipés avant les autres en super ordinateurs : Lawrence Berkeley National Laboratory ([LBNL](#)), Lawrence Livermore National Laboratory ([LLNL](#)), Argonne National Laboratory ([ANL](#)), Oak Ridge National Lab ([ORNL](#)), Sandia National Laboratory ([SNL](#)) et Los Alamos National Laboratory ([LANL](#)), quoique ce dernier ait assez peu contribué en fait, probablement pour des raisons de confidentialité. Certains pensent aussi que les centres de la NSF n'ont pas joué le rôle qu'ils auraient dû à cause du manque de pérennité des centres de calcul, conséquence de la sélection par appel d'offre des centres d'excellence tous les 5 ans, et également de par la durée assez courte des appels à projets.

Si l'Europe, et la France en particulier, souhaite contribuer à ce type de recherche il lui faut aussi de telles équipes dont les caractéristiques sont

- d'être proche d'un super ordinateur et de participer à l'effort d'optimisation des codes applicatifs, et donc à l'interface de l'informatique, l'algorithmique et des domaines d'application.
- D'être formée de chercheurs dont la spécialité est le calcul intensif, et ceci pour plusieurs années car il semble que l'expérience sur une architecture vaille pour les suivantes.
- D'être assurée d'une relative stabilité de financement car ce type de travail n'est pas financé par le privé vu qu'il profite à tous.

Comme il n'apparaît pas clairement qu'aucune institution soit prête à accueillir ce type d'équipe en France peut-être faudrait-il s'orienter vers des accords de coopération internationaux, directement ou par l'intermédiaire de PRACE ? Dans le dernier cas, il serait peut être opportun d'envisager une équipe de recherche comparable à celle du LLNL dans le cadre de PRACE, c'est à dire proche de l'Institut Jacques-Louis Lions créé par le CEA et le CNRS.

Sur le plus long terme, plusieurs millions de processeurs et surtout des processeurs hétérogènes poseront sans doute des problèmes difficiles aux utilisateurs, nécessitant probablement des réseaux programmables et une relocalisation des tâches en temps réel. Les outils de programmation sont spécifiques aux processeurs ce qui rend les codes sur ces machines non portable<sup>28</sup>. Enfin les outils de mise au point (limité pour l'instant au logiciel commercial [totalview](#)) sont très insuffisants. Il faut donc de nouvelles idées fondamentales. D'un autre côté le parallélisme envahit tous les domaines de l'informatique, depuis les réseaux internet jusqu'aux téléphones portables, ce qui implique que de nombreux chercheurs se pencheront sur le problème. Faute de trouver des solutions il faudra s'orienter vers l'utilisation massive et le couplage de codes de base optimisés, par exemple un code de

---

<sup>28</sup> Un logiciel applicatif a une durée de vie beaucoup plus longue qu'une machine ce qui fait qu'il voit au moins 3 générations d'ordinateur; sa réécriture est souvent très coûteuse, voir impossible.

---

simulation pour les fluides et un code pour la neutronique que l'on pourrait coupler et/ou rajouter un module manquant.

Notons enfin que l'augmentation de la puissance de calcul invite les décideurs à demander aux simulateurs non seulement de meilleures performances mais aussi de plus en plus de résultats. Ainsi le programme ASC, prolongeant ASCI, se concentre sur la validation des codes et des résultats, jusqu'à la comparaison avec l'expérience ; il faut donc repenser les modèles et même les méthodes et ne plus calculer seulement une solution du problème mais aussi la distribution probable des erreurs et la stabilité du résultat obtenu, mettant ainsi dans la boucle de l'innovation jusqu'au probabiliste théoricien.

L'importance des données dans le calcul intensif va en croissant. Il faut des outils pour stocker les données et les analyser. Si les problèmes sont du même type que l'analyse des données en informatique et le « data mining », les caractéristiques numériques des données impliquent des développements spécifiques pour accélérer les calculs.

Enfin la gestion et l'équilibrage des tâches au niveau du système, les entrées sorties et de la tolérance aux pannes sont aussi des domaines importants et spécifiques pour le calcul intensif. A noter toutefois qu'une solution a été trouvée, au moins pour une application, au LLNL concernant la tolérance aux pannes, ce qui montre que le problème n'est peut-être pas aussi bloquant qu'il y paraissait au premier abord.

Avec l'augmentation du nombre de processeurs la loi d'Amdhal devient très pénalisante. Une formule simple montre en effet que si une petite partie seulement du code n'est pas parallélisée les performances s'écroulent. Il faut donc que tout soit parallèle et que tout passe à l'échelle (scalable en anglais). Pour les mêmes raisons les algorithmes dont le nombre d'opération est proportionnel aux nombres d'inconnues,  $n$ , s'imposeront car même un facteur en  $\log(n)$  devient pénalisant. Pour l'approximation des fonctions les méthodes compactes, comme les méthodes d'éléments de haut degré pourraient se révéler meilleures car elles ont l'avantage de diminuer les accès aux mémoires distantes et donc aussi les conflits d'accès. Mais malgré tout ces facteurs, les difficultés de la programmation militent pour des méthodes simples comme les grilles structurées ou les méthodes de Monte Carlo c'est-à-dire éventuellement un retour en arrière dans le choix des techniques d'approximation. En tout état de cause le problème, les techniques d'approximation et l'algorithmique devront de plus en plus être repensés en fonction des capacités de traitement des machines.

Concevoir en effet une algorithmique (de fait hiérarchique) exploitant différents types de parallélisme (sur des cœurs de calcul généraliste et sur des cœurs de calcul spécialisés) pour des problèmes irréguliers et sur machine pétaflopique (donc qui passe à l'échelle avec une scalabilité très importante) est un vrai challenge de recherche sur lequel la communauté scientifique des algorithmiciens du HPC doit se mobiliser. Il conviendra aussi de travailler sur la conception de bibliothèques numériques encore plus scalables et plus performantes car elles seront les briques de base incontournables pour les applications en vraie grandeur. Notons que le Royaume-Uni, par exemple, réfléchit actuellement dans cette direction, avec une série d'ateliers dédiés aux aspects algorithmiques du Calcul Intensif<sup>29</sup>. Enfin, l'ordonnancement des calculs et des communications sera de fait un problème à reconsidérer compte tenu du très grand nombre de threads à gérer et en prenant en compte de manière centrale les contraintes d'affinité mémoire.

---

<sup>29</sup> <http://www.oerc.ox.ac.uk/research/hpc-na>

Le problème de la tolérance aux pannes est considéré comme crucial pour une exploitation effective des calculateurs pétaflopiques. La première voie pour laquelle il commence à y avoir quelques solutions (spécifiques) est la mise en œuvre systématique d'un système de checkpoint/restart mais au prix d'I/O très performantes car les masses de données à sauvegarder/restaurer sont sans commune mesure avec les calculs parallèles traditionnels. La poursuite de travaux concernant un MPI tolérant aux pannes et adapté à ce nouveau contexte est aussi considéré comme une voie possible. Le diagnostic d'une défaillance du hardware (la probabilité de panne sera naturellement très forte sur une machine ayant des centaines de milliers voir des millions de cœurs) sera aussi un élément à intégrer dans cette problématique.

## Table des matières

Remerciements .....	3
Résumé et recommandations .....	4
1 Les activités du CSCI .....	5
1.1 Les missions du CSCI .....	5
1.2 Les activités du CSCI en 2008 .....	6
1.3 Projet pour 2009 .....	6
1.4 Le Rapport .....	6
2 Les faits marquants .....	7
2.1 Tendances .....	7
2.2 L'action de Genci et la place de la France .....	7
2.3 Les problèmes posés par le calcul intensif .....	9
2.4 Quels sont les utilisateurs du calcul intensif ? .....	9
2.5 L'importance des données .....	10
2.6 Les outils logiciels .....	10
2.7 La formation .....	11
2.8 Le calcul intensif dans l'industrie .....	12
2.9 Le colloque Penser le Petaflops .....	12
2.10 L'ANR .....	13
2.11 Les infrastructures françaises .....	13
2.12 Le projet PRACE .....	16
2.13 Le complexe de calcul du CEA .....	18
2.14 Les accords CEA-CNRS et les projets de l'INRIA .....	19
3 La simulation et son environnement .....	19
3.1 Généralités .....	19
3.2 Les domaines d'application .....	21
4 La pyramide des moyens de calcul .....	36
4.1 Les machines des mésocentres .....	36
4.2 Les grilles de calcul .....	37
4.3 Les diverses architectures de machine .....	38
5 Les infrastructures .....	40
5.1 Le CCRT .....	40
5.2 Le CINES .....	43
5.3 L'IDRIS .....	45
5.4 La situation internationale .....	47
6 Les ressources humaines .....	52
7 L'effort logiciel .....	52
Table des matières .....	56
Annexe 1: décret ministériel et liste des membres .....	57
Annexe 2: Avis intermédiaires du CSCI en 2008 .....	59

---

## Annexe 1: décret ministériel et liste des membres

J.O n° 160 du 12 juillet 2007 page 11810  
texte n° 22

**Décrets, arrêtés, circulaires**  
**Textes généraux**  
**Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche**

**Arrêté du 28 juin 2007 portant création du comité stratégique du calcul intensif**

NOR : *ESRR0757401A*

La ministre de l'enseignement supérieur et de la recherche,  
Vu le décret n° 2006-672 du 8 juin 2006 relatif à la création, à la composition et au fonctionnement de commissions administratives à caractère consultatif ;  
Vu le décret n° 2007-1001 du 31 mai 2007 relatif aux attributions du ministre de l'enseignement supérieur et de la recherche,

Arrête :

**Art. 1<sup>er</sup>.** – Il est créé auprès du ministre chargé de l'enseignement supérieur et de la recherche un comité stratégique du calcul intensif.

Ce comité est créé pour une durée de quatre ans.

**Art. 2.** – Le comité stratégique du calcul intensif est chargé de conduire des études et des réflexions ainsi que de formuler des propositions sur l'organisation et le renouvellement des équipements de calcul intensif. Il examine les mesures permettant l'utilisation optimale de ces équipements en tenant compte notamment des activités de recherche et des besoins de la communauté scientifique. Il étudie les questions relatives à la participation française aux programmes internationaux utilisant l'infrastructure de calcul intensif et la simulation numérique ou portant sur ces domaines.

Il est saisi des demandes d'avis émanant du ministre chargé de l'enseignement supérieur et de la recherche.

Il établit un rapport annuel à l'attention du ministre chargé de l'enseignement supérieur et de la recherche.

**Art. 3.** – Le comité stratégique du calcul intensif comprend des personnalités qualifiées choisies en raison de leur compétence dans les disciplines utilisatrices des moyens de calcul intensif, dont au moins deux personnalités étrangères, ainsi qu'un représentant du ministre chargé de l'enseignement supérieur et de la recherche.

Les personnalités qualifiées sont nommées pour une durée de deux ans renouvelable par le ministre chargé de l'enseignement supérieur et de la recherche. Le président du comité est nommé par le ministre chargé de l'enseignement supérieur et de la recherche parmi ces personnalités.

Le représentant du ministre chargé de l'enseignement supérieur et de la recherche assure les fonctions de secrétaire du comité.

**Art. 4.** – Pour la réalisation de ses missions, le comité stratégique du calcul intensif peut faire appel à la collaboration des services et établissements publics de l'État compétents dans le domaine du calcul intensif.

**Art. 5.** – Les membres du comité stratégique du calcul intensif exercent leurs fonctions à titre gratuit. Les frais de déplacement et de séjour supportés à l'occasion des travaux de ce comité peuvent être pris en charge dans les conditions fixées par la réglementation applicable aux fonctionnaires de l'État.

**Art. 6.** – Le présent arrêté sera publié au *Journal officiel* de la République française.

Fait à Paris, le 28 juin 2007.

VALÉRIE PÉCRESSE

**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 Glinasty, 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'École 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.

M. Olivier Pironneau est nommé président du comité.

---

## Annexe 2: Avis intermédiaires du CSCI en 2008

### Recommandations du CSCI concernant le CINES

La séance du 9 novembre 2007 du Comité Stratégique du Calcul Intensif a été consacrée à l'examen de la situation du CINES. Après audition de personnes susceptibles d'apporter une information sur ce sujet, le Comité émet les recommandations suivantes :

**Un retard énorme.** Les moyens de calculs français pour la recherche, et tout particulièrement le CINES, ont accumulé un retard très important, en particulier vis-à-vis des moyens existant dans l'industrie. L'impact sur les personnes, les équipes et la recherche est considérable et durable.

Il faut donc faire en sorte que des machines de puissance compétitive soient mises au plus vite à la disposition des équipes de la recherche publique.

Sans information concrète sur les projets du CNRS et en conservant à l'esprit que le CCRT n'a pas vocation à couvrir tous les besoins de la recherche fondamentale, il y a au CINES un terreau favorable avec une historique et une culture qui prendrait du temps à reconstruire ailleurs et la situation est tellement tendue que la solution la plus rapide est de **mettre de nouveaux et puissants moyens de calcul au CINES**, sans toutefois anticiper sur le long terme.

Le Comité Stratégique espère que cette machine sera la plus puissante possible, c'est à dire supérieure à l'appel d'offre de 50 TeraFlops; il serait même opportun d'étudier une possible rallonge budgétaire prise sur les crédits 2008 car cette première machine se doit d'être dans le peloton de tête des super ordinateurs installés en France. Les augmentations ultérieures pourraient se faire par remplacement partiel, ou par acquisition d'une nouvelle machine mais de toute façon il faudra rediscuter de l'avenir du CINES plus tard au moment de son rééquipement quand la situation ne sera plus aussi tendue.

#### Recommandations annexes

1. La cohérence des choix et la mutualisation des contributions universitaires à la politique nationale de calcul intensif, ne peuvent pas être assurées par la CPU, sans la création d'un GIP ; dans cette perspective, le soutien exprimé à GENCI est une bonne chose actuellement.
2. Le CINES devrait dialoguer plus avec les équipes en calcul intensif des universités ; il a sans doute un rôle national à jouer en coopération avec le futur GIP de la CPU.
3. Le comité des utilisateurs est excellent, les infrastructures sont aussi excellentes (10 M euros seraient perdus si on ne les utilisait pas), il y a des compétences locales (et c'est long à construire) et de bonnes ressources en personnel. La gestion jusqu'à 80% d'utilisation des machines montre aussi que les équipes sont capables d'exploiter très efficacement la capacité qui leur est confiée.
4. Il ne faudrait surtout pas que GENCI entre dans une logique de concurrence entre ses différents partenaires.

---

## Rapport au 13 Février 2008 du CSCI sur l'appel d'offre européen PRACE

Par ce rapport à mi-parcours le CSCI souhaite répondre à certaines questions urgentes qui lui ont été posées par Madame la Ministre dans sa lettre de mission d'Octobre 2007.

Le CSCI s'est réuni les 22 Octobre, 9 Novembre, 4 Décembre, 9 Janvier et 13 Février 2008 pour étudier

- Le rééquipement des 3 centres nationaux sous l'égide de GENCI ;
- L'allocation des ressources de calcul aux équipes de recherche ;
- La réponse à l'appel d'offre européen PRACE.

Bien que le CSCI n'ait pas été contacté pour s'exprimer sur le choix des nouvelles machines à l'Idris — ses questions à la direction du CNRS sont même restées sans réponse —, il se félicite de l'arrivée rapide d'une machine puissante pour la recherche. Avec la machine Bull du CCRT, cela porte à 200 teraflops la puissance de calcul accessible par les chercheurs. Ce chiffre est à comparer avec celui de nos voisins : 350 teraflops en Allemagne, 125 en Angleterre, 115 en Espagne, 142 en Suède (2000 aux États-Unis).

La recherche a besoin d'accéder aux machines les plus puissantes au niveau mondial, ce que PRACE se propose de faire. Mais elle a aussi besoin de disposer d'une infrastructure nationale comportant plusieurs centres d'une grande puissance. Le CSCI confirme donc la nécessité de concrétiser dès que possible les décisions annoncées par GENCI pour le CINES et le CCRT. Notre lettre de Décembre 2007 à Madame la Ministre, jointe en annexe, argumente plus en détails cette recommandation pour le CINES.

GENCI, en coopération avec les trois centres nationaux, va mettre en place un comité, et une méthode unifiée, d'attribution des heures de calcul sur les moyens nationaux. Des discussions sont en cours pour coordonner l'attribution des heures aux projets soumis à l'ANR.

L'importance du calcul intensif n'est plus à démontrer. Pour tirer tout l'avantage compétitif des ruptures technologiques que représente le calcul petaflopique, il faut aussi, au-delà de l'attribution de moyen de calcul, développer une politique globale intégrant le développement et la structuration des compétences sur:

- L'architecture des logiciels applicatifs (code de calcul), l'intergiciel (middleware, PSE, problem solving environnement),
- l'algorithmique (parallélisation), la gestion des grandes masses de données, la visualisation,
- La formation à l'informatique scientifique et au calcul à tous les niveaux.

La compétence des équipes scientifiques, le tissu culturel et industriel autour du calcul intensif restent les ressources les plus précieuses et doivent être planifiés sur le long terme.

L'initiative européenne PRACE permet de répondre à un objectif à moyen terme (2010-13) ; elle doit donc être replacée dans une politique à plus long terme, en particulier harmonisée avec la politique nationale d'équipement en calcul intensif, et avec les grands programmes applicatifs (ITER, GIEC, CECAM, ...).

Pour ces raisons le CSCI recommande très fortement

1. que la France confirme sa position de partenaire principal dans PRACE ;

2. qu'elle inscrive sa politique nationale dans ce contexte européen seul capable d'assurer la pérennité sur le sol européen d'une machine de classe mondiale ;
3. De créer les conditions de l'accueil sur le sol français de la première machine de classe mondiale en Europe car cela représente, pour le développement du tissu de compétence scientifique et industriel, un atout indéniable sur le long terme ;
4. Par ailleurs, il faudra s'assurer que les moyens mobilisés (fonctionnement et investissement) permettent de maintenir, en permanence, une machine en Europe dans les 5 premières machines mondiales ;
5. Il est essentiel d'accompagner cet effort par une politique volontariste de structuration de la recherche et de la formation au calcul scientifique dans l'enseignement supérieur ;
6. De plus le CSCI recommande de veiller à ce que l'accueil du centre soit accompagné de conditions favorisant les collaborations industrie – recherche afin d'accroître la compétitivité future des entreprises françaises.