



Rapport n°3 du Comité Stratégique du Calcul Intensif

24 Juin 2011

Dédié à Marie-Madeleine Rohmer, décédée le 5 Juin 2010

Sommaire

Partie I. Résumé et recommandations du rapport n°3	3
1. Pourquoi le CSCI ?	3
2. Recommandations	3
2. Les faits marquants depuis Mars 2010.	5
2.1. Tendance pour les architectures et les logiciels	6
2.2. La place de la France et de l'Europe	7
2.3. La recherche française dispose en 2011 de 1 Pflops	8
2.4. Politique scientifique et accès aux ressources du calcul	8
Partie II: Le rapport	11
3. Membres du CSCI	12
4. Suivi des recommandations de 2010	13
5. Les missions du CSCI	15
6. Les activités du CSCI en 2010-2011	15
6.1. Le Rapport	16
7. Le Programme PRACE	17
7.1. PRACE-ASLB	17
7.2. Les machines du tier0 dans PRACE	18
7.3. Les machines tiers1 dans PRACE	19
7.1. CURIE : nouvel outil stratégique pour le Calcul intensif	20
7.2. Réponses aux appels d'offre PRACE	20
8. Allocations des Ressources du tier1	22
8.1. La recherche française disposera fin 2011 de 1 Pflops dans le tier1	22
8.2. Campagne d'attribution des ressources de calcul 2010	22
8.3. Distribution des heures attribuées par domaine scientifique	24
8.4. Distribution des heures attribuées par région	24
8.5. Analyse du profil de consommation des projets ayant obtenu des ressources sur centres nationaux	25
9. Impact du Calcul Intensif sur la science	26
10. Préparation à l'exascale	28
10.1. L'exascale à l'international	28
10.2. La roadmap de Bull	30
10.3. La roadmap d'IBM	31
10.4. La roadmap d'HP	32
10.5. la roadmap de Cray-Research	33
10.6. La roadmap NEC	34
10.7. La roadmap Silicon-Graphics	35
10.8. La road map Fujitsu	35
11. Promotion du Calcul Scientifique	36
11.1. L'ANR	36
11.2. La formation	37
11.3. EQUIP@MESO : consolider l'écosystème du calcul intensif	38
11.4. La Maison de la Simulation du Plateau de Saclay	39
11.5. Le calcul intensif dans l'industrie	40
11.6. Les grilles en tant que moyen de calcul intensif	40
12. Les grilles de calcul et les « clouds »	40

12.1.	Les grilles de production	41
12.2.	Les grilles de recherche	41
12.3.	Activités récentes et perspectives sur les grilles	41
12.4.	Évolution des grilles vers les clouds	42
12.5.	Relations entre les grilles de production et les supercalculateurs	42
12.6.	Le centre de calcul de l'IN2P3	43
13.	Actions et stratégie de quelques grands organismes	44
13.1.	Actions et stratégie du CEA	44
13.2.	Activités à l'INRIA pour le calcul haute performance	48
13.3.	Actions Calcul à l'IDRIS	49
13.4.	Actions calcul au CINES	51
14.	Quelques grands thèmes scientifiques	55
14.1.	Chimie et Nanotechnologies	55
14.2.	La simulation des biomacromolécules et la Génomique	60
14.3.	Astrophysique	61

Partie I. Résumé et recommandations du rapport n°3

1. Pourquoi le CSCI ?

La simulation numérique est un outil majeur pour la recherche, sur le même plan que la théorie et l'expérience. La finesse des résultats numériques dépend de la qualité des modèles mathématiques, du talent de l'équipe de recherche pour l'implémentation et dans de nombreux domaines elle dépend aussi de l'accès aux meilleures ressources informatiques. La mission du CSCI est de veiller à ce que l'accès des chercheurs français à ces ressources soit au meilleur niveau international et à ce qu'elles soient utilisées le mieux possible.

L'enjeu est de taille puisque les caractéristiques techniques des superordinateurs les plus puissants doublent au moins tous les 18 mois.

Par ailleurs l'optimisation des ressources implique que chaque tâche s'effectue sur une machine adaptée : les calculs extrêmes se font sur des machines dites du tier0, la mise au point et les exploitations plus routinières sur les machines du tier1, mais la plus grosse partie des calculs est faite en laboratoire sur des machines d'accès libre dite du tier2.

2. Recommandations

1. Les ordinateurs de puissance progressent à une vitesse fulgurante ; les moyens les plus lourds, ceux du tier0, sont très importants pour les projets numériques extrêmes ; de ce point de vue les machines PRACE remplissent leur rôle au delà des espérances de 2009; donc à ce stade du développement, le CSCI recommande qu'une attention particulière soit portée à l'équilibre de la pyramide tier0-tier1-tier2. Pour le tier1, [le CSCI pense que la France se doit de développer ses trois centres de calcul intensifs nationaux au même rythme que le tier0](#). Ils ont en effet chacun leurs spécificités, tant géographiques de par les communautés qu'ils servent que par leurs complémentarités au niveau des architectures de machines. Ceci suppose aussi que le réseau RENATER continue à se développer en harmonie avec les volumes de données échangés.
2. Le nombre d'utilisateurs du calcul intensif doit continuer à progresser. [Il faudra donc encore en 2012 développer de nouvelles formations et encourager les chercheurs à passer du tier2 au tier1 et du tier1 au tier0, leur faciliter l'accès aux machines, récompenser leurs efforts et les inciter à former des équipes](#). Le MESR devrait demander à l'université française, représentée par la CPU, d'établir un socle commun de connaissances de la modélisation et de la simulation numérique et d'en déduire un programme de formation dans les cursus L, M et D, permanente et continue. Les alliances, en particulier Allistène, devraient être associées à ces réflexions. Elles devraient les prolonger pour créer les conditions de l'essor d'équipes de recherche spécialisées dans le HPC en favorisant des interactions pluridisciplinaires autour de grands projets (méthodes numériques massivement parallèles et problèmes scientifiques aux enjeux stratégiques dans les domaines de

l'énergie, de l'environnement, de l'information et la communication, de la santé, des transports, etc.).

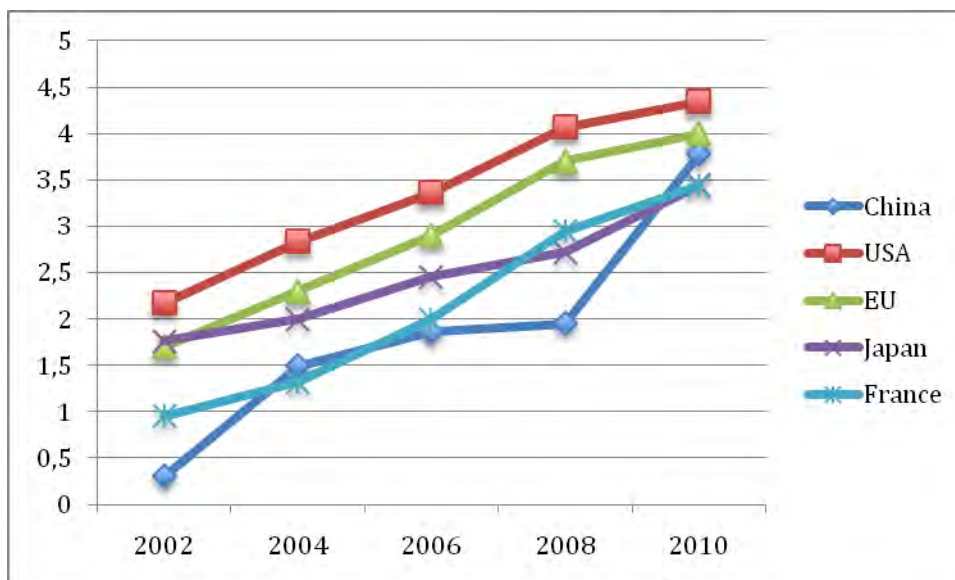
3. Dans la continuité des recommandations de 2010 pour d'autres thématiques comme la climatologie, on peut s'attendre à des avancées spectaculaires en astrophysique par le calcul intensif d'autant plus que les algorithmes passent bien à l'échelle. *En chimie computationnelle et pour les nanotechnologies, le potentiel de développement de la simulation de systèmes de plus en plus complexes est un enjeu sociétal très important. Il y a de nombreux utilisateurs mais peu d'équipes à même de contribuer aux progrès des algorithmes. Ces équipes doivent être soutenues afin de préparer l'arrivée des calculateurs exaflopiques et de développer le parallélisme massif qu'ils supposent.*
4. *L'ANR est un moyen puissant pour les orientations de recherches, mais sauf pour le programme « Méthodes Numériques » le calcul intensif est dilué dans les actions générales et n'a que peu de visibilité au sein de l'ANR. Comme en 2010 le CSCI recommande que l'ANR prépare l'Exascale-2018 et la mi-parcours 100 Pflops 2015 avec plus de visibilité.*
5. A part le secteur pétrolier et le secteur bancaire il y a eu peu de nouveaux utilisateurs du calcul de pointe dans l'industrie en 2009-2010. Pour les PME des programmes¹ phares ont été créés en 2010. *De nouveaux programmes d'incitation pourraient être créés pour faciliter l'utilisation du calcul parallèle dans l'industrie au niveau du tier1. Une cohésion des industriels utilisateurs du tier1 autour de programme nationaux, impliquant éventuellement les chercheurs, permettrait aussi d'éviter ou de remédier à un enfermement potentiellement nuisible aux transferts des savoir-faire.*
6. *Le financement de la R&D pour les nouvelles architectures est un problème identifié en 2009, en particulier pour la compagnie Bull, et non réglé jusqu'à ce jour. Il semble se profiler un programme de l'Union dans cette direction, mais contrairement au passé, le Ministère de l'Industrie et de l'Emploi ne finance plus cette R&D, alors que l'importance du « co-design²» pour les nouvelles architectures d'ordinateurs apparaît encore plus clairement en 2011. Toutefois la France n'a que peu d'équipes capables de jouer un tel rôle. Il faut donc donner aux meilleurs les moyens de développer des équipes aux doubles compétences informatiques et applicatives dans tous les domaines de pointe du HPC et aux industries du calcul haute performance les moyens de coopérer avec eux.*
7. Pour les grilles calcul il conviendrait de faire émerger une infrastructure de nuage (cloud) *dédié à la recherche*, multidisciplinaire en collaboration étroite avec la communauté des informaticiens, puis d'assurer un financement viable pour les nœuds de la grille française (production et recherche). *Il faudrait donc renforcer les liens entre les centres de calcul sur grilles et la communauté française du calcul intensif afin de mettre en place des modèles de gestion des données performants et pouvant aisément passer à l'échelle.*

¹ Dont le programme GENCI-INRIA-OSEO d'initiation au calcul intensif pour les PME.

² Co-conception d'ordinateur par coopération entre les concepteurs et les utilisateurs

2. Les faits marquants depuis Mars 2010.

La puissance installée dans le monde continue d'augmenter au rythme de la loi de Moore, principalement grâce à l'utilisation du parallélisme massif.



Croissance (en échelle log) de la puissance installée dans quelques pays.

Entre Juin 2010 et Juin 2011 quatre événements majeurs ont eu lieu :

- ✧ **Le lancement de la machine Curie sur le TGCC de Bruyère-le-Châtel.** Inaugurée le 25 Octobre 2010 par Madame la ministre, la machine sera capable d'une performance crête supérieure à 1.6 Pflops. C'est la plus puissante machine européenne dédiée à la recherche. La machine est propriété de GENCI mais maintenue par le CCRT et 80% des ressources sont allouées au programme européen PRACE.
- ✧ **Les premières allocations de ressources de calcul dans le cadre de PRACE.** Depuis Juillet 2010, PRACE distribue des heures de calcul aux chercheurs européens par l'intermédiaire d'un comité qui se réunit 2 fois par an. Actuellement 2 centres de calcul avec des machines petaflopiques sont concernés: Jülich en Allemagne et le TGCC de Bruyères-le-Châtel. En 2012 une troisième machine pétaflopique –installée à Stuttgart – sera ajoutée à PRACE.
- ✧ **L'annonce des performances de la machine chinoise Tian-He.** La Chine avait prédit qu'elle prendrait la tête du Top500 en 2010 et elle a tenue parole avec une machine hybride à base de composants Intel/Nvidia sur un réseau de conception chinoise. Aux USA et en Europe quatre constructeurs au moins se sont engagés dans un programme qui devrait déboucher sur des machines exaflopiques vers 2018 mais on peut s'attendre à une concurrence asiatique farouche.

- ⤴ **Au top500 de Juin 2011, Riken** est maintenant n°1 mondial avec son Fujitsu K qui bat tous les records: Il affiche une puissance de crête de 8.77 Pflop/s et une puissance Linpack de 8.16 Pflop/s. Il consomme près de 10 MW. Le n°2 reste l'ex n°1 chinois Tian-He, toujours avec 2.6 Pflop/s Linpack, L'écart est donc vraiment très important (x3.1). On s'attend à une réaction américaine en novembre avec Cray, et surtout IBM, mais il n'est pas certain qu'ils puissent dépasser Fujitsu. Les chinois, les japonais et les américains se sont lancés de façon très agressive dans la course aux supercalculateurs de puissance et ils y consacrent beaucoup de moyens. On peut ajouter qu'ils le font en s'appuyant sur une industrie totalement locale pour le Japon, et bientôt également pour la Chine. Notons que les japonais ont délégué la maîtrise d'ouvrage de leur projet à un centre de recherche (et pas un centre de calcul à proprement parler), Riken, et que cela implique qu'ils développent le parallélisme des applications prévues pour ces nouvelles machines, avec tout les moyens budgétaires que cela implique. C'est ce type soutien précisément que l'on pourrait avoir de l'ANR ou du ministère de l'Industrie.

2.1. *Tendance pour les architectures et les logiciels*

En 2010 peu de progrès ont été réalisés pour faciliter la programmation des machines massivement parallèles et encore moins hybrides; l'effet sur les algorithmes est visible car ces architectures privilégient les méthodes avec peu de communication entre les tâches comme les méthodes explicites. La complexité de programmation des méthodes implicites est un frein aux développements algorithmiques.

Pourtant les architectures hybrides sont de plus en plus acceptées comme un moyen viable pour augmenter la puissance sans pénaliser la consommation électrique. Les trois fondateurs Intel, Nvidia et AMD font maintenant des microprocesseurs intégrant le GPU³ mais ceux-ci ne sont pas encore adaptés au calcul intensif.

L'abandon de l'architecture x86 n'est pas non plus d'actualité mais il ne serait pas étonnant que 2014 change ce point de vue car les architectures MIPS et ARM progressent. La taille de gravure des circuits continue de diminuer, Intel a aussi commencé les gravures tridimensionnelles depuis peu afin de miniaturiser la connectique et donc les consommations électriques.

Pour l'exascale les constructeurs misent sur des communications optiques à l'intérieur des puces mais cette technologie est encore expérimentale.

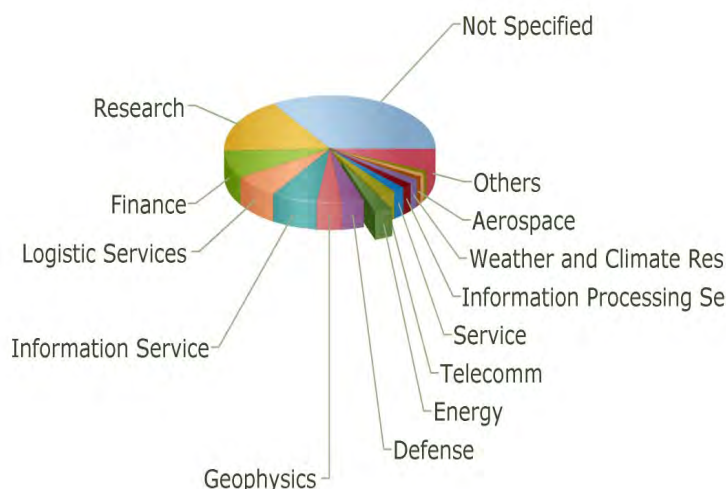
A mi-parcours vers 2015 les machines devraient être capables de 100 Pflops ce qui permettra de préciser la faisabilité de l'exaflops. Ces machines devraient avoir une consommation électrique comparable aux machines actuelles car de visibles progrès ont été accomplis sur le refroidissement.

Que ferons nous de plus avec ces machines en 2015 ? De fait beaucoup de chose car les utilisateurs attendent avec impatience ces nouvelles ressources. On peut citer :

- en recherche fondamentale : la compréhension de la formation de l'univers et le rôle de l'énergie noire, la vérification des équations fondamentales de la physique (L-QCD), la compréhension du cerveau, etc.

³ GPU : accélérateurs de calcul destinés au départ aux affichages graphiques seulement.

- En recherche appliquées : la simulation et l'optimisation d'écoulements complexes multiphasiques (pétrole, métallurgie, combustion...), le traitement de maladie, peut-être l'Alzheimer et le Parkinson, la climatologie, la sécurité, etc.



Utilisation des ordinateurs du top500 en 2010

2.2. La place de la France et de l'Europe

Le site www.top500.org liste les 500 machines les plus puissantes en fonction de plusieurs critères dont le pays d'installation. Les premiers sont

Pays	Nb de machines dans le top500	Puissance totale (PFlops)
USA	274	3537
Chine	41	622
Allemagne	27	500
France	26	417
Japon	26	416
Grande-Bretagne	25	206

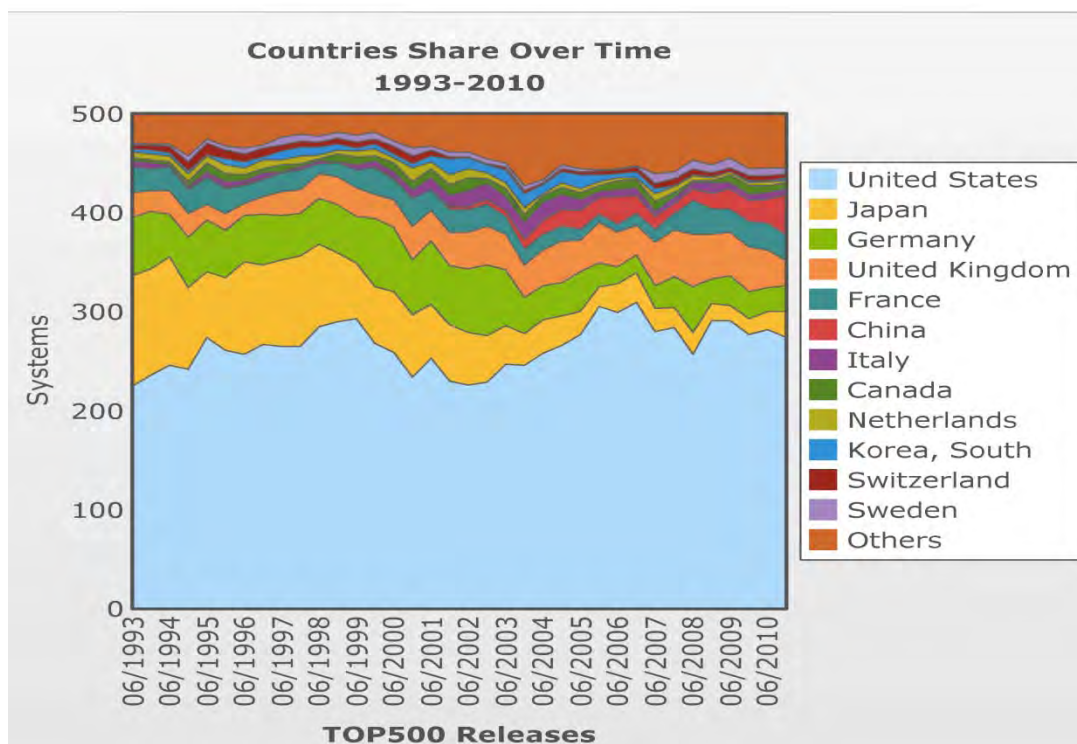
De ce point de vue, la France est donc quatrième, derrière l'Allemagne et devant le Japon et la Grande-Bretagne.

Il faut noter au passage que l'écrasante domination des USA persiste avec plus de la moitié des machines du top 500 sur leur territoire.

Toutefois il faut tempérer ce classement par plusieurs facteurs :

1. Les machines ne sont pas nécessairement dédiées à la recherche ou même au calcul intensif.
2. Certaines machines sont européennes comme celle du centre européen de météorologie de Reading et les machines PRACE.

Enfin le Top500 n'est pas une mesure fiable de l'activité HPC-recherche. Même le Top100 présente quelques défauts, d'autant que le critère de classement Linpack n'est pas représentatif de tous les logiciels de la recherche.



Répartition des ordinateurs du Top500 par pays au cours des 17 dernières années.

2.3. La recherche française disposera fin 2011 de 1 Pflops

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

Entre Juin 2010 et Juin 2011, le plan d'investissement a permis de doubler la puissance disponible pour la recherche publique française par rapport à 2009, principalement en augmentant la puissance de la machine *jade* au CINES en 2008 et en finançant la machine *Curie* au CCRT en 2010.

Par ailleurs le programme Européen PRACE met à la disposition du petit nombre de chercheurs sélectionnés par « l'Access committee » d'importants moyens de calcul.

Enfin dans le cadre du Grand Emprunt, GENCI a obtenu un *equipex* pour aider au développement des meso-centres en France, c'est le projet [equip@meso](#) pour 10 centres répartis sur tout le territoire.

2.4. Politique scientifique et accès aux ressources du calcul

Fort heureusement depuis 2007 et jusqu'à aujourd'hui l'offre correspondait à peu près à la demande sauf dans quelques domaines comme la physique théorique ; il faut dire aussi que les utilisateurs connaissent les ressources et se limitent à des demandes raisonnables. Cependant nous avons constaté en juin 2011 une forte augmentation du nombre d'excellents dossiers scientifiques sur le tier1. Plusieurs demandes classées A n'ont pas pu être satisfaites et plusieurs machines du tier1 sont totalement saturées.

Pour les heures PRACE la situation est plus complexe : en 2010 plusieurs dossiers français valables n'ont pas été sélectionnés pour des raisons de forme. Heureusement la situation

s'est inversée en 2011.

Un an d'expérience PRACE confirme que ces machines européennes dites du tier0 ne remplaceront jamais les machines nationales du tier1. En effet les premières servent un petit nombre d'utilisateurs très intensifs alors que les dernières servent tous les chercheurs français qui sont en butée de ressource dans leurs machines locales du tier2. On voit ici l'importance de l'équilibre de la pyramide des tiers 0,1,2 à la fois pour optimiser les coûts et pour servir toutes les recherches selon leurs besoins.

PARTIE II Le rapport

Remerciements

Le Comité remercie Marc Baaden (CNRS IBPC), Jean Christophe Gabriel (CEA DSM), Thierry Deutsch (CEA DSM), Catherine Rivière et Stéphane Réquena (GENCI), Michel Ricoux et Henri Calandra (Total), M. Ravachol et Q.V. Dinh (Dassault Aviation), Jean Pierre Panziera (Bull), Bruno Lecointe (NEC), Agnès Aufray et Luigi Brochard (IBM), Marc Simon et Patrice Gommy (SGI), Jean-Luc Assor, Patrick Demichel et Philippe Devins (HP), Vincent Pel (CRAY), Bertrand Braunschweig (ANR), Françoise Genova (CDS-Strasbourg), Antoine Strugarek, Alain Sacha Brun (CEA DSM), Philippe Haye, Masaaki Sato et Vijay Saravan, (Fujitsu Systems Europe), Noaya Tamura (Fujitsu Japon), qui ont bien voulu répondre à ses questions, et ont fourni des éléments d'information utiles à ce rapport. Il remercie la Direction Générale pour la Recherche et l'Innovation pour son support logistique, et particulièrement Laurent Desbat, chargé de mission, pour leur assistance.

3. Membres du CSCI

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

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

Au titre des personnalités qualifiées

- **Jean-Claude André**, CERFACS (Centre Eur. de Rech. et Formation Avancée en Calcul Scientifique)
- **Daniel Benoualid**, directeur du centre de recherche corporate du groupe Hutchinson;
- **Jacques Blum**, professeur à l'université de Nice (algorithmique) ;
- **Dominique Boutigny**, dir. Centre calcul de l'Inst. nat. physique nucléaire et physique des particules ;
- **Françoise Combes**, astronome à l'Observatoire de Paris, et membre de l'Académie des Sciences;
- **François Coron**, chef de l'unité « ingénierie thermique et mécanique », à EADS ;
- **Laurent Crouzet**, assistant dir. des sciences de la matière, chargé du CS et de l'informatique au CEA
- **Martin Field**, chef du lab. de dynamique moléculaire, Inst. de biologie structurale Jean-Pierre Ebel ;
- **Jean Gonnord**, chef de projet, dir du programme « simulation numérique et informatique » CEA/DAM ;
- **Jean-François Hamelin**, directeur des systèmes d'information à EDF Recherche et développement ;
- **Charles Hirsch**, prof. Émérite, Université Libre de Bruxelles, président Numeca Int. (académie Royale)
- **Argiris Kamoulakos**, directeur scientifique, ESI Group ;
- **Richard Lavery**, directeur de recherche, et dir. du dépt. de Biostructures Moléculaires IBCP-CNRS.
- **Boris Leblanc**, resp. adjoint, équipe de recherche et dev. « Equities & Derivatives » de BNP Paribas
- **Patrick J. Mascart**, dir. École doctorale des sciences de l'univers, de l'espace et de l'environnement;
- **Heiner Müller Krumbhaar**, Académie des Sciences de l'Allemagne, "Leopoldina" ;
- **Olivier Pironneau**, prof. à l'université Paris-VI - Pierre et Marie Curie, Académie des sciences ;
- **Alain Ratier**, directeur général adjoint à Météo-France (+centre de calcul);
- **Marie-Madeleine Rohmer⁴**, directeur de recherche et dir adjoint de l'Institut de Chimie de Strasbourg ;
- **Jean Roman**, DR à l'Institut national de recherche en informatique et en automatique ;
- **Stéphanie Schaer⁵** chef bureau «Logiciel» min. économie, industrie et emploi ;
- **Laurent Desbat**, professeur à l'Université Joseph Fourier, imagerie médicale. En qualité de représentant de la ministre de l'Enseignement supérieur et de la Recherche

Olivier Pironneau est nommé président du comité.

⁴ Décédée le 5 Juin 2010

⁵ Remplacée par Franck Tarrier

4. Suivi des recommandations de 2010

Suivi de la recommandation 1 : *Le doublement de puissance tous les 18 mois des ordinateurs de pointe implique de continuer l'effort d'investissement pour renouveler le matériel faute de quoi nous serions à nouveau assez vite distancés.* Le CSCI ne peut que se féliciter de l'énergie avec laquelle le Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche, GENCI est ses actionnaires, ont travaillé pour doubler en 2010 les ressources de calcul à la disposition des chercheurs ; toutefois il semble que des incertitudes budgétaires existent et qu'elles pourraient poser problème en 2012. Le CSCI recommande aussi de veiller à l'équilibre *tier0/tier1* et donc veiller à ce que les machines du tier1 ne soient pas moins puissantes d'un facteur 10 de la première machine du Top500.

Suivi de la recommandation 2 : *Il est essentiel d'aider les chercheurs du calcul haute performance, d'abord en leur donnant la reconnaissance qu'ils méritent et surtout les moyens de faire grandir leurs équipes et de diffuser leur savoir-faire.* L'importance des signes extérieurs de reconnaissance de l'excellence sur la motivation des chercheurs ne sauraient être sous-estimée. Il n'y a pas eu en 2010 d'action spécifique dans cette direction ; toutefois l'ensemble de la communauté scientifique prend de plus en plus conscience de l'importance du calcul.

Suivi de la recommandation 3 : *L'ANR a diminué son appui aux programmes ciblés calcul intensif ce qui est regrettable dans une conjoncture où le nombre de chercheurs publics et privés dans le domaine est sous-critique. Une recommandation ministérielle à l'ANR pourrait améliorer cette situation.* Le CSCI fait à nouveau cette année une recommandation dans ce sens.

Suivi de la recommandation 4 : *Le projet PRACE va sûrement jouer un rôle majeur dans la recherche. Sa mise en place nécessite plus de publicité auprès des communautés utilisatrices. Il faudrait soutenir les chercheurs français prêts à relever les défis.* Cette recommandation a été suivie, le CSCI félicite GENCI et tout ceux qui ont relevé les défis.

Suivi de la recommandation 5 : *Une puissance multi pétaflopique sera nécessaire à ITER à l'horizon 2015 pour lever certains verrous technologiques. Pour s'y préparer il faudrait renforcer les équipes sur la simulation. Une machine européenne BullX a été installée à Rokkasho au Japon. Un des contrats du programme G8 (à l'initiative de l'ANR) ira à ITER. Le CNRS a créé 2 postes mais il s'est avéré difficile de trouver assez de candidats ; un spécialiste en CS a été recruté au CEA pour ITER. Le code Gysela a été adapté pour tourner sur 65000 cœurs. Bref il est incontestable que les acteurs du calcul pour ITER sont conscients des enjeux, il faut continuer à les soutenir.*

Suivi de la recommandation 6 : *En climatologie il apparait que les codes actuels n'utiliseront qu'une faible partie de la puissance théorique des super ordinateurs ; Il conviendrait donc de soutenir vigoureusement l'effort de parallélisation déjà entamé par les équipes françaises et favoriser le dialogue entre la communauté des climatologues et celles des numériciens de l'algorithmique parallèle.* Comme pour ITER une meilleure coordination s'est mise en place en particulier dans le cadre de l'appel d'offre Calcul Intensif du G8. Avec la disparition effective des calculateurs vectoriels en 2012, la communauté scientifique est consciente du problème mais souffre du manque de spécialistes ayant une double compétence climat-calcul. Pour l'instant aucune équipe n'a les moyens de récrire

les codes en partant de zéro, ce qu'il faudrait pourtant faire pour exploiter pleinement le parallélisme.

Suivi de la recommandation 7 : *Le CSCI recommande aux ministères de la recherche et de l'industrie d'étudier les financements des programmes de R&D dans le domaine des superordinateurs, en accord avec les règles européennes, pour ne pas défavoriser les entreprises françaises face à la concurrence internationale.* Aucun effort n'est visible du côté du ministère de l'industrie mais l'Union Européenne étudie la faisabilité d'un tel programme. Le CSCI fait à nouveau cette année une recommandation dans ce sens.

Suivi de la recommandation 8 : *Le CSCI recommande qu'un effort soit fait pour le rapprochement des communautés qui calculent sur grilles de celles qui calculent sur super ordinateurs.* Aucun progrès visible n'est à rapporter en 2010.

Suivi de la recommandation 9 : *Certaines communautés scientifiques comme celle de la L-QCD en physique théorique et une partie de la dynamique moléculaire en chimie profiteraient probablement de machines dédiées avec une architecture et/ou une unité de calcul adaptées.* Les concepteurs de la machine Anton (USA) ne sont pas intéressés par une collaboration européenne. Les chimistes se tournent vers le Japon qui a un projet similaire. Pour la L-QCD, la réflexion sur la technologie de la plateforme informatique à mettre en œuvre n'a pas encore abouti.

Suivi de la recommandation 10 : *Les méso centres sont insuffisamment développés en France.* En répondant avec succès à l'appel d'offre *equipex* avec le projet equip@meso, GENCI à clairement fait un effort d'accompagnement pour le développement des méso-centre. Le CSCI félicite tous ceux ci ont relevé le défi de cette action.

Suivi de la recommandation 11 : *La création d'un programme d'incitation industrie-recherche pour le calcul intensif est nécessaire.* Pour les PME un programme GENCI/INRIA/OSEO est en place et devrait donner des résultats visibles fin 2011. Pour les grandes industries le programme est toujours à l'étude.

5. 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 2010 d'un budget de 30 M€. GENCI est doté d'un conseil d'administration pour les décisions à court et moyen terme ; en parallèle et pour la stratégie à long terme le ministère a créé le CSCI en octobre 2007.

La lettre de mission du Ministre de la recherche précise que :

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

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

- Donner un avis sur les centres de calcul nationaux, et leur évolution par rapport à l'initiative européenne PRACE, les grilles de calcul et les équipements « mi-lourds » des communautés thématiques.
- S'assurer de la bonne utilisation des ressources en coopération avec GENCI et l'ANR.
- Réfléchir à la manière d'améliorer l'impact industriel de la simulation numérique et du calcul intensif.
- 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, etc.), les domaines disciplinaires « en émergence », les besoins de formation initiale ou continue et les perspectives de coopération internationale.

Les membres du CSCI sont, en proportion égale, chercheurs dans des laboratoires universitaires et dans des grands organismes ou dans des industries de pointes. Le CSCI ayant été renouvelé une première fois par tiers par décret en Novembre 2009, il le sera à nouveau au troisième trimestre 2011.

6. Les activités du CSCI en 2010-2011

Depuis le rapport 2009/2010, préparé en Avril 2010, le CSCI s'est réuni les 19 Mai, 15 Juin, 8 Juillet, 13 Octobre et 10 Novembre 2010 et en 2011 jusqu'à la date d'écriture de ce rapport, il s'est réuni les 12 Janvier, 2 Février et 16 Mars. Les comptes rendus de séance sont disponibles sur demande;

Les sujets abordés au cours de ces réunions incluent :

- Le Calcul Intensif en biologie et sciences de la vie.
- Le Calcul Intensif et les nanotechnologies.
- Le Calcul Intensif pour l'astrophysique
- Les perspectives pour l'Exascale vues pas les constructeurs
- L'ANR et les investissements français pour le calcul

Par ailleurs le CSCI s'est exprimé auprès de Mme la ministre V. Pécresse sur la performance chinoise présentée à la *Supercomputing Conference* de Novembre 2010.

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

6.1. Le Rapport

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

Le deuxième rapport (Avril 2010) traite des points suivants:

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

Ce troisième rapport (Juin 2011) traite de :

- L'évolution des moyens de calcul en France : Centres nationaux GENCI (tier1) , mésocentres (tier2) et grands centres européens de PRACE (tier0).
- L'objectif Exascale 2018, le point de vue des constructeurs, le problème du co-design, le rôle de l'ANR et de l'Europe.
- L'impact du calcul intensif sur l'astrophysique, la biochimie et les nanotechnologies.

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

7. Le Programme PRACE

PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) est un programme européen pour l'excellence en calcul intensif dans la recherche public et privée et pour les applications industrielles.

PRACE-ASLB est une association à but non lucratif basée à Bruxelles. Chaque membre est représenté dans le « board of council » dont le président actuel est Achim Bachem. Ce « council » nomme un conseil scientifique de 20 membres, le « scientific steering committee » ou SSC dont le président est Richard Kenway. Enfin le SSC nomme un « access committee » pour chaque session d'allocation de ressource sur les ordinateurs PRACE deux fois par an.

PRACE gère des heures de calcul sur des machines tier0 et tier1.

7.1. PRACE-ASLB

Au printemps 2010, l'entité légale qui porte l'infrastructure européenne distribuée de ressources en calcul intensif a été créée sous la forme d'une association internationale à but non lucratif de droit belge (AISBL). Son objectif est de mettre à disposition de la communauté scientifique européenne de 4 à 5 systèmes pétaflopiques (dits Tier-0), c'est-à-dire visant la compétitivité mondiale au-delà de la capacité offerte par les installations nationales (dites Tier-1).

La PRACE AISBL - dont le siège est à Bruxelles - comprend aujourd'hui vingt membres qui représentent les pays suivants : l'Allemagne, l'Autriche, la Bulgarie, Chypre, l'Espagne, la Finlande, la France, la Grèce, Irlande, Italie, Norvège, les Pays-Bas, la Pologne, le Portugal, la Serbie, la République Tchèque, le Royaume-Uni, la Suède, la Suisse et la Turquie. La France y est naturellement représentée par GENCI. Au sein de ce partenariat, 4 pays ont le statut particulier de membre hôte d'un Tier0 - Allemagne, Espagne, France et Italie - et se sont engagés à mettre à disposition de la PRACE AISBL des ressources en temps de calcul Tier0, pour un équivalent de 100M euros pour la période de 2010-2015.

Un comité scientifique de 20 membres, le " Scientific Steering Committee " SSC, dont le président actuel est Richard Kenway, est chargé de donner son avis sur les procédures d'attribution mis en place par PRACE, d'évaluer l'impact scientifique des travaux menés grâce aux ressources Tier0 et de proposer au Conseil PRACE toute orientation scientifique qu'il juge stratégique. 4 scientifiques français sont membres du SSC PRACE.

En 2010, l'Allemagne et la France ont concrétisé leur engagement, en mettant à disposition les deux premières machines Tier-0 de PRACE : JUGENE à Jülich en Allemagne et CURIE à Bruyères-le-Châtel en France (avec une puissance de plus de 1,6PFlops fin 2011)..

Pour en bénéficier, les chercheurs doivent présenter un projet de recherche effectué en collaboration avec un laboratoire hôte et nécessitant des ressources en calcul. Les projets sont évalués sur critères scientifiques et techniques par un panel unique d'experts européens. Un " Access Committee ", composé de 7 membres (dont 1 français) et nommé en Janvier 2011 par le Conseil PRACE (sur proposition du SSC), est chargé du suivi de

l'évaluation des projets et de la proposition d'allocation sur ressources Tier0.

Le SSC ne prévoit pas d'appliquer un système de quota par pays. Le " juste retour " ne se fera donc que par la qualité des demandes pour que celles-ci soient sélectionnées pour leur qualité scientifique. Il faut donc qu'un nombre suffisant de chercheurs français calculent sur les machines GENCI (tier1) pour qu'une partie d'entre eux - ceux qui sont en butte de ressources - prennent la peine de faire des demandes PRACE. En effet, alors que GENCI peut et doit honorer toutes les demandes de qualité, PRACE ne peut pas actuellement en faire autant. En effet actuellement le taux de réussite des demandes PRACE oscille entre 10% et 50% selon les sessions. Le nombre de projet retenus par PRACE est de l'ordre de quelques dizaines au niveau européen. La stratégie légitime sur le tier0 est de ne retenir que les projets excellents scientifiquement et extrêmement intensifs en calcul.

7.2. Les machines du tier0 dans PRACE

Le principe est d'avoir à tout instant au moins un centre européen équipé d'une machine dans les premières places du top500. En 2010 l'IBM Blue/gene de Jülich a été mis partiellement à la disposition de PRACE (photo ci dessous),



en 2011 ce fut la machine Curie (Bull) du TGCC de Bruyère le Chatel (photo ci-dessous)



et fin 2011 la machine Hermit (Cray research) du HLRS de Stuttgart (photo ci-dessous)



Ces 3 super ordinateurs sont actuellement capables de 1Pflops au moins chacun.

L'appel d'offre sur le tier0 de Juin 2011 proposait les ressources suivantes :

Pays	Organisme	Total heure CPU
Allemagne	LRZ (Jülich)	360.000.000
France	GENCI(TGCC)	156.000.000
Allemagne	HLRS (Stuttgart)	160.000.000

7.3. Les machines tiers1 dans PRACE

L'appel d'offre sur le tier1 de PRACE de Juin 2011 proposait les machines suivantes

Pays	Organisme	Total heure CPU
Espagne	EPCC	7.800.000
Suede	KTH	12.750.000
Finlande	CSC	2.290.000
France	IDRIS,CINES	10.000.000
Bulgarie	NCSA	2900.000
Pays-Bas	SARA	880.000
Italy	CINECA	1.400.000
Allemagne	HLRS,FZJ,LRZ,RZG	9.200.000
Espagne	BSC	1.900.000
Pologne	PSNC	4.300.000
Irlande	ICHEC	3.400.000

L'allocation des heures sur les machines du tier1 de PRACE est géré par un comité séparé, hérité du programme DEISA.

7.1. CURIE : nouvel outil stratégique pour le Calcul intensif

Acquis par GENCI et conçu par Bull, CURIE est le deuxième supercalculateur petaflopique installé en Europe. Il atteindra, fin 2011, une puissance totale de 1,6 pétaflop/s. Ce supercalculateur permet à la France de confirmer son engagement dans PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe).

Pour bénéficier des dernières opportunités technologiques qui seront disponibles en 2011, CURIE est mis en service en deux phases. *La première phase s'est déroulée avec succès fin 2010 et a permis au supercalculateur de délivrer les 105 teraflop/s attendus.*

Fin 2011, la seconde phase permettra à CURIE d'atteindre une puissance de 1,6 pétaflop/s.

La première «tranche» de CURIE a été intégrée au deuxième Regular Call de PRACE, lancé le 1^{er} novembre 2010 pour une allocation d'une année d'heures de calcul à compter du 1^{er} mai 2011. CURIE est accessible aux chercheurs de toute l'Europe sur la base de l'intérêt scientifique de leurs travaux, depuis le 1^{er} janvier 2011.

Les performances de CURIE permettront à la communauté scientifique française et européenne de disposer d'un outil de pointe pour mener ses travaux à beaucoup plus grande échelle, avec une précision beaucoup plus grande et dans tous les domaines scientifiques : physique des plasmas et des hautes énergies, chimie et nanotechnologies, énergie et développement durable, climatologie et évaluation des risques naturels, médecine et biologie... Il sera également possible de traiter de problèmes qui, du fait de leur envergure et de leur complexité, ne pouvaient être résolus auparavant.

7.2. Réponses aux appels d'offre PRACE

En 2010, la PRACE-AISBL a lancé trois appels à projets :

le « Early Access Call » (machine disponible : JUGENE, 360 Mh) : 68 projets soumis et Le tableau suivant présente les caractéristiques des résultats de cet appel :

Nombre total projets	68
Temps total demandé (en millions d'heures)	1870
Nombre de projets acceptés	10
Temps total alloué (en millions d'heures)	321.4
Nationalités des Porteurs de projets	D(5), NL(1), PT(1), IT(1), UK(1)

Pour le « First call » (machine disponible : JUGENE, 360 Mh) : 59 projets soumis, 9 projets sélectionnés pour une allocation de 1 an à compter du 1^{er} novembre 2010. Le tableau suivant présente les caractéristiques des résultats de cet appel :

Nombre total projets	59
Temps total demandé (en millions d'heures)	2900
Nombre de projets acceptés	9
Temps total alloué (en millions d'heures)	362
Nationalités des Porteurs de projets	F(1), D(2), H(1), NL(1), PT(1), SP(2), UK(1)

Le « Second call » (machines disponibles : JUGENE, 360 Mh et CURIE, 40 Mh sur nœuds larges) : 47 projets soumis et 17 projets sélectionnés pour une allocation de 1 an à compter du 1^{er} mai 2011. Le tableau suivant présente les caractéristiques des résultats de cet appel :

Nombre total projets	47
Temps total demandé (en millions d'heures)	1251
Nombre de projets acceptés	17
Temps total alloué (en millions d'heures)	400
Nationalités des Porteurs de projets	F(6), D(2), CH(2), DK(1), IE(1), SE(1), SP(2), UK(3)

Le « Third regular call » a été lancé le 2 mai 2011 et se clôturera le 22 juin 2011. Trois machines Tier0 sont accessibles pour cet appel : JUGENE/GCS-Juelich (360 Mh), CURIE/GENCI-CEA (31 Mh sur nœuds larges / 125 Mh sur nœuds fins) et HERMIT/GCS-HLRS (160 Mh).

En parallèle, un appel continu « Preparatory Access » a été ouvert en Novembre 2010. Ces projets, soumis uniquement à une évaluation technique, permettent de faire des tests de scalabilité ou des travaux d'optimisation de codes, en vue de préparer un projet soumis dans le cadre des appels réguliers de PRACE.

D'autre part, pour soutenir le développement des activités opérationnelles de l'infrastructure de recherche PRACE, le projet PRACE 1-IP (PRACE - First Implementation Phase) a officiellement été lancé, le 1er juillet 2010. Il fait suite au projet PRACE-PP (PRACE Preparatory Phase) qui avait notamment permis, entre 2008 et 2010, de définir les contours de la future PRACE AISBL.

D'une durée de deux ans (2010-2012), PRACE-1IP bénéficie d'un financement de la Commission européenne d'un montant de 20 M€, dans le cadre du programme « Infrastructures » du 7^{ème} PCRD. PRACE- 1IP sera suivi par le projet PRACE 2-IP (PRACE « Second Implementation Phase ») qui a été présenté à la Commission européenne début 2011. PRACE 2-IP a pour objectifs à la fois de renforcer le soutien opérationnel à la PRACE AISBL, notamment sur les aspects applicatifs et de prototypage (prospective technologique), et d'intégrer, sous l'égide de PRACE, les activités d'échanges Tier1 (projet DEISA).

En 2010 les utilisateurs avaient du mal à comprendre la structure de PRACE et de ses appels d'offre. Maintenant certains s'effrayent lorsqu'on leurs dit qu'un projet ne sera pas financé deux fois. Ce dernier point semble réglé mais il pourrait amener une dérive où seulement quelques utilisateurs, excellents au demeurant, rempliraient à eux seuls les machines PRACE.

Il faut noter de toute façon que PRACE ne sert qu'un petit nombre d'utilisateurs très gourmands. Le HPC se fait donc essentiellement sur le tier1 mais les calculs extrêmes sur tier0 sont générateurs de publications scientifiques intéressantes en général.

8. Allocations des Ressources du tier1

8.1. La recherche française dispose en 2011 de 1 Pflops dans le tier1

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

En 2010, le plan d'investissement a permis de doubler la puissance disponible pour la recherche publique française par rapport à 2009, principalement en augmentant la puissance de la machine *jade* au CINES et en finançant la machine *Curie* au CCRT.

8.2. Campagne d'attribution des ressources de calcul 2010

Deux appels à projets sont organisés chaque année pour tout utilisateur (académique ou industriel) souhaitant accéder aux moyens de calcul nationaux pour des travaux relevant d'une mission de service public de recherche ou d'enseignement supérieur. Le dépôt des demandes se fait sur le site www.edari.fr. Leur sélection est réalisée sur la base de l'excellence scientifique du projet de recherche, avec obligation d'en publier les résultats, au travers de 10 Comités Thématiques, couvrant l'ensemble des disciplines.

Voici les supercalculateurs ouverts aux utilisateurs via les appels à projets en 2010 et 2011 :

Maîtrise d'œuvre	Supercalculateurs	Nombre de cœurs
CINES	IBM SP – ERA Anakin	80
	SGI ICE - Jade	23040
IDRIS	IBM SP – Vargas	3 584
	IBM BG/P - Babel	40 960
	NEC SX8 - Brodie	80
CCRT	NEC SX9 – Mercure	48
	Bull Xéon – Titane	7 760
	Bull Xéon – Titane	48 serveurs Tesla/192 unités hybrides
	Partition CPU/GPU	

Au terme de la campagne 2010, il apparaît que l'intégralité des ressources disponibles a été attribuée. L'ouverture de l'extension de Jade a permis, en partie, de répondre à la forte demande observée lors de la 2^{ème} session 2010.

Il est également intéressant de noter que la partie hybride GPU de la machine Titane a rencontré un succès certain, ce qui est un point positif compte-tenu de la nouveauté de cette architecture.

Afin de traiter au mieux les demandes de la 2nd session, des décisions d'arbitrage ont été mises en œuvre, en concertation avec les 3 maîtrises d'œuvre:

- **Application stricte des modalités d'ajustement** à hauteur de 40% de reprise d'heures pour les projets ayant sous-consommé les 5 premiers mois sans justification. Ces ajustements s'appliquent uniquement pour les machines fortement sollicitées (Anakin, Jade, Titane et Babel) mais se généralisent en 2011 à cause de l'augmentation de la pression des demandes d'excellente qualité scientifique.
- **Migration d'heures de calcul entre machines:** sur l'ensemble des deux sessions de la campagne 2010, des transferts entre machines ont été décidés afin d'optimiser les charges. Les transferts ont porté au total sur environ 12 M d'heures.

L'application de ces décisions d'arbitrage a permis de revenir à une situation satisfaisante pour les machines et d'optimiser l'utilisation de l'ensemble des ressources disponibles pour l'année 2010. Le même exercice a été beaucoup plus difficile à faire en Juin 2011.

Recommandation :

La croissance des demandes en juin 2011 montre qu'il est nécessaire de continuer la dynamique d'investissements engagée pour répondre aux besoins futurs des communautés scientifiques.

D'autre part, l'arrêt de la production des supercalculateurs vectoriels prévu pour la fin 2012 va amener mécaniquement une nouvelle communauté, forte consommatrice de moyens de calcul, sur les supercalculateurs scalaires.

Par ailleurs, les travaux d'évolution engagés sur le DARI en termes d'outils et de procédures et décidés conjointement avec les représentants des maîtrises d'œuvre et les Présidents de Comités Thématiques ont été menés à bien en 2010 et ont été fortement appréciés par l'ensemble des utilisateurs.

D'autre part, 225 000 heures ont été attribuées sur la machine NEC SX9 du CCRT, pour répondre aux besoins spécifiques du GIEC.

La répartition 2010 des projets par comité thématique est décrite ci dessous :

Comité thématique	Nombre total de projets en 2010	Nombre de projets renouvelés en 2010	Nombre total de projets en 2010
CT1 Environnement	58	48	10
CT2 Mécanique des fluides	151	108	43
CT3 Biomédicale et santé	8	5	3
CT4 Astro et Géophysique	52	35	17
CT5 Physique théorique et plasmas	43	35	8
CT6 Informatique, algorithmique	22	15	7
CT7 Syst. Moléculaires et Biologie	75	38	37
CT8 Chimie quantique	117	88	29
CT9 Physique Chimie et matériaux	102	64	38
CT10 Nouvelles applications	6	3	3
Total	634	439	195

Au total, 619 dossiers ont obtenu des heures et 15 dossiers (soit 2,4%) ont été rejetés.

Pour information, 576 dossiers avaient été déposés lors de la campagne 2009, avec un taux de nouveaux dossiers de 35,4% : le nombre de projets déposés est en hausse de 11,4%. Le taux de nouveaux projets est de 30,8%.

La répartition des dossiers par Comité Thématique montre que les moyens de calcul nationaux profitent à l'ensemble des communautés scientifiques et qu'en conséquence leur utilisation est pluridisciplinaire.

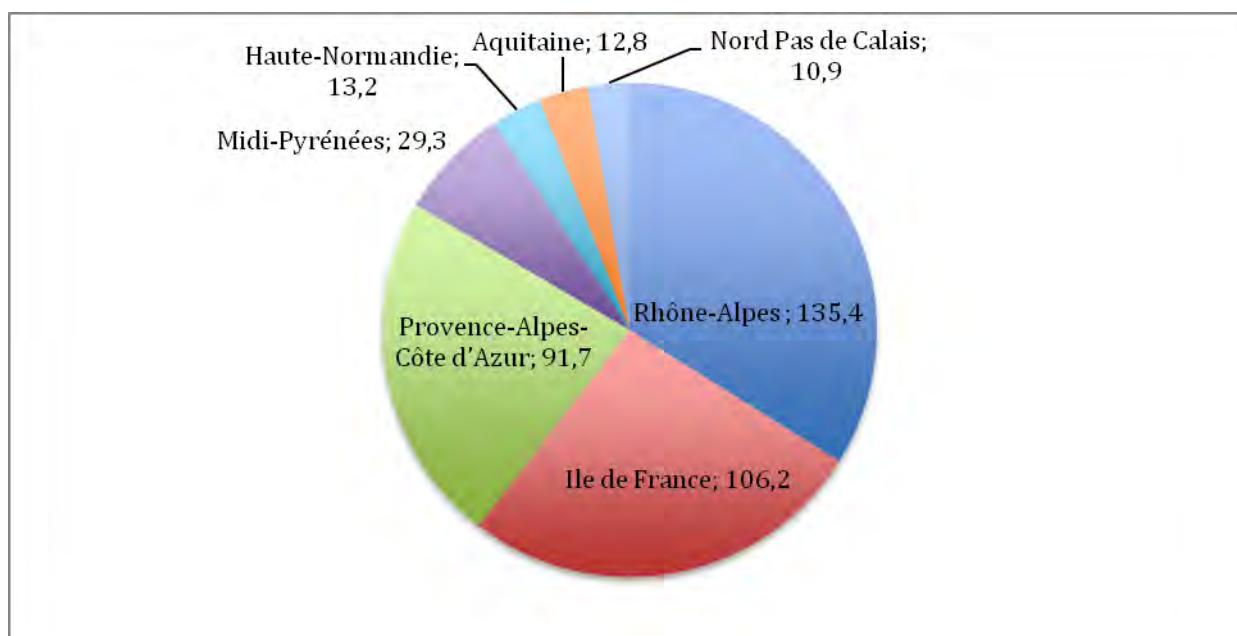
8.3. Distribution des heures attribuées par domaine scientifique

La répartition par grande thématique scientifique est proche de celle observée lors de la campagne 2009. On peut cependant observer une ouverture à de nouveaux domaines scientifiques sur Babel.

8.4. Distribution des heures attribuées par région

Cette analyse porte sur une distribution des heures de calcul attribuées (tout type de machine confondu) par appartenance régionale du porteur du projet, et ne tient donc pas compte du caractère potentiellement distribué des projets sélectionnés.

Cette analyse, indique clairement une forte utilisation des ressources dans 7 régions principales



Par contre les régions Limousin, Basse Normandie, Picardie et Corse sont très en retrait, voire ne sollicitent pas du tout les moyens centraux de calcul (comme la Corse ou la Picardie).

Certaines actions de communication permettraient sûrement de mieux sensibiliser les équipes de recherche concernées aux moyens disponibles.

8.5. Analyse du profil de consommation des projets ayant obtenu des ressources sur centres nationaux

Les taux de consommation (heures consommées vs heures allouées) sont les suivants :

Ces taux de consommation sont satisfaisants et leur analyse permet de déterminer les taux de sur-allocations raisonnables à appliquer lors de l'attribution initiale des heures de calcul.

Le taux de consommation sur Titane GPU a été de 18% sur 2010 mais il sera en augmentation en 2012.

Le taux de consommation au regard des heures disponibles DARI sur les machines Jade et Vargas est de l'ordre de 100%, toutes les heures allouées ont donc été consommées. Concernant la machine Jade un surbooking de l'ordre de 10% est constaté, il n'a pas pu être consommé de part la non utilisation de ces heures par les utilisateurs.

Sur la machine Titane toutes les heures allouées ont été consommées, la disponibilité de ce supercalculateur a été très bonne sur l'année.

Le taux de disponibilité des machines est très satisfaisant, démontrant une très bonne stabilité de fonctionnement, et leur charge globale est importante (sauf pour Titane GPU), en particulier pour Jade.

9. Impact du Calcul Intensif sur la science

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

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

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

Il ne faut pas sous-estimer l'effort de programmation qu'imposent les superordinateurs. D'une certaine manière on peut déjà dire que les chercheurs qui font l'effort de s'adapter à ces architectures de calcul en attendent des résultats scientifiques. Les domaines les plus concernés par la révolution du calcul sont

- L'astrophysique
- La chimie et la biochimie
- L'ingénierie.

A ces domaines on peut penser que s'ajouteront bientôt la médecine et la physique des particules.

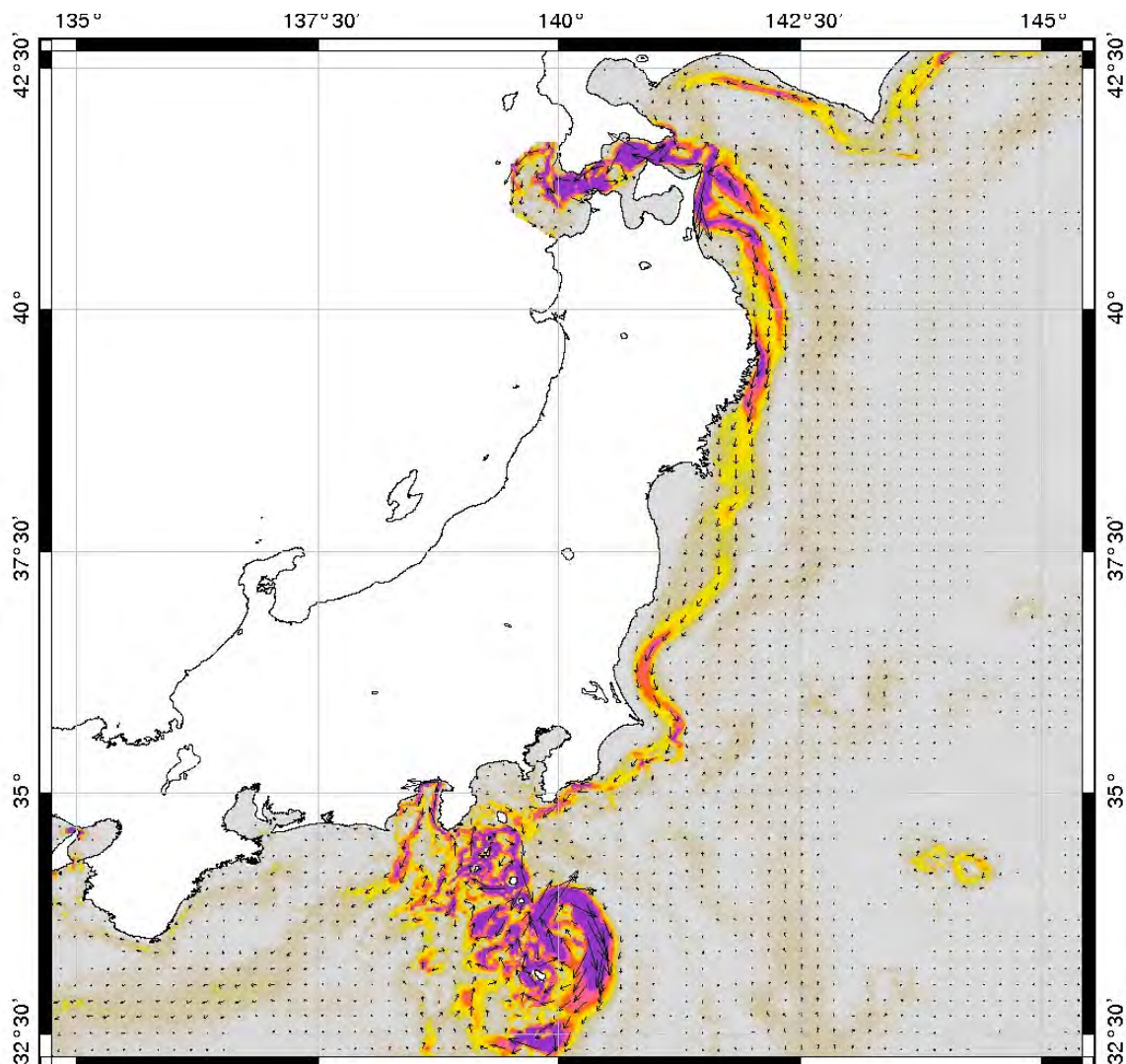
Dans les trois premiers domaines la synergie théorie-simulation-expérience semble se faire assez bien. Nous analysons plus en détail dans ce rapport le cas de l'astrophysique et de la chimie/biochimie.

L'ingénierie avait été étudiée dans le rapport n° 1 et nous avons déjà indiqué que le CS permettait d'étudier des scénarios d'accident a priori et a posteriori. Ce fut le cas pour la disparition de l'Airbus AF447 Rio-Paris le 1er Juin 2009 où météo-France a été mis à contribution pour calculer en mode inverse d'où les courants marins qui portaient les débris pouvaient venir ; les boites noires de l'avion ont été retrouvées comme cela.

C'est encore le cas cette année avec la catastrophe nucléaire de Fukushima pour laquelle ont été effectués des calculs inverses de cuve⁶, des calculs de courants marins et de

⁶ William J. Broad : The New York Times, édition du 2 Avril 2011, section Sciences.

dispersion de radionucléides dans l'atmosphère.



Calcul des courants moyens intégrant les marées sur la cote est du japon (courtoisie du groupe SIROCCO@aero.obs-mip.fr)

10. Préparation à l'exascale

L'exascale c'est 10^{18} opérations par secondes, soit 1000 Pflops. Rappelons que le Pflops a été obtenu en 2008 et que la puissance double tous les 16-18 mois. Ceci nous amène à 10Pflops en 2012, 100Pflops en 2016, 1000Pflops en 2020, mais les constructeurs sont plus optimistes et pensent atteindre cette performance peut être même en 2018 grâce à des ruptures technologiques.

La performance maximale n'est pas la seule préoccupation du programme Exascale, la performance soutenue et la capacité d'utiliser les machines aux maximum de leurs performances, l'accès rapide aux bases de données, la robustesse par rapport aux pannes. Enfin pour arriver à l'exascale l'ensemble de l'écosystème calcul sera concerné, jusqu'aux théories mathématiques pour de nouveaux algorithmes.

10.1. L'exascale à l'international

Dès 2008 les Etats-Unis ont ressenti le besoin de lancer une initiative structurante afin de faire face aux défis relatifs au calcul sur les futurs ordinateurs de la génération « Exascale », pour lesquels, tant le nombre de cœurs de calcul (de plusieurs centaines de milliers à peut-être quelques millions) que la structure même de ces nœuds (structure hybride), vont requérir une profonde évolution des logiciels, tant au niveau des logiciels d'exploitation, des bibliothèques, etc. que des codes applicatifs eux-mêmes. Sous l'initiative de deux chercheurs⁷, et avec le soutien du DoE et de la NSF⁸ une série de séminaires a été lancée (1 en 2008, 3 en 2009, 2 en 2010, 1 en 2011, et 2 encore à venir en 2011 et 2012), série au cours de laquelle a progressivement été construite une « roadmap » (feuille de route) pour le développement des outils permettant une utilisation efficace des architectures exaflopiques. Les promoteurs de cette initiative, dite IESP pour International Exascale Software Initiative, ont voulu dès le début la placer dans un cadre international, en invitant des participants européens et japonais à prendre part à la réflexion. L'ambition était et reste clairement d'organiser la mise en priorité de problèmes, voire la mise en place coordonnée de programmes permettant de les aborder, en concertation internationale.

Cette feuille de route⁹, conçue de façon très volontariste dans le cadre de logiciels libres, est désormais très proche de sa forme finale, bien qu'elle ait vocation à être mise à jour de façon régulière. Elle peut être consultée sur le site IESP¹⁰ et comporte, entre autres, des chapitres sur les logiciels système (systèmes d'exploitation, systèmes d'entrées-sorties, systèmes de gestion, ..), sur les environnements de développement (modèles de programmation, compilateurs, bibliothèques numériques, outils de déverminage, ...) et les logiciels dits applicatifs (algorithmes, analyse de données et visualisation, gestion de données). Elle comporte aussi des chapitres sur des problématiques se rapprochant des

⁷ Jack DONGARRA, Université du Tennessee et Oak Ridge National Laboratory, et Pete BECKMANN, Argonne National Laboratory/University of Chicago

⁸ Department of Energy et National Science Foundation.

⁹ Rapport du comité <http://www.exascale.org>

¹⁰ www.exascale.org

aspects liés aux matériels, comme la tolérance aux pannes, la gestion énergétique, l'optimisation des performances et la programmabilité.

Il n'est pas sans intérêt de rappeler ici que c'est dans le cadre de l'initiative IESP qu'a été conçu l'appel à projets du G8 «Interdisciplinary Program on Application Software towards Exascale Computing for Global Scale Issues », dont la partie française est portée par l'ANR.

Aujourd'hui IESP a donné naissance aux Etats-Unis à 2 programmes extrêmement novateurs en cours de mise en place :

- un « Exascale Software Center », avec 5 composantes réparties au sein de divers groupes de recherche américains : Systèmes d'exploitation, Modèles de programmation, Outils logiciels, Bibliothèques mathématiques, Analyse de données et stockage.
- une série de centres dits de « co-design » (co-conception) où les chercheurs d'un domaine applicatif particulier, les développeurs de logiciels et les constructeurs informatiques se retrouvent pour mener en commun les recherches nécessaires afin de concevoir les architectures les mieux adaptées. Les centres déjà en place sont relatifs aux moteurs et réacteurs, à la fusion, à la physique des hautes énergies, à la combustion. D'autres se mettent en place actuellement (climat, ..). Ce modèle de centres de co-conception semble très efficace pour réduire au maximum le temps d'accès à une utilisation efficace des architectures exaflopiques.

Quelle a été la place des chercheurs français dans IESP ? Si au début seuls quelques représentants d'EDF, du CERFACS et de l'INRIA ont été invités, le cercle des français contributeurs à la réflexion IESP s'est progressivement élargi. La feuille de route IESP est donc potentiellement d'intérêt pour la structuration de la recherche nationale et européenne. Ce cadre IESP a d'ailleurs été le révélateur du besoin de mettre en place, cette fois-ci au niveau européen, une initiative de réflexion commune. C'est ainsi que, sous l'impulsion de J.Y. BERTHOU (EDF) a été lancée une action de la Commission Européenne (Support action) dite EESI¹¹, dont l'objectif est de fournir fin 2011 à la Commission Européenne une feuille de route pour structurer les activités de recherche dans le domaine du calcul intensif au sein du 8^{ème} programme cadre (FP'8).

EESI a aussi été conçu avec deux objectifs complémentaires :

- 1 fédérer la contribution européenne à IESP
- 2 et mieux réfléchir qu'IESP ne l'a fait elle-même à la problématique du calcul exaflopique pour les applications, tant celles issues de la recherche académique que celles provenant du monde industriel.

EESI est structuré autour de 8 groupes de travail, dont 4 sont relatifs aux technologies logicielles et matérielles (Feuille de route matériel et relations avec les constructeurs ; Ecosystème logiciel ; Bibliothèques numériques, solveurs et algorithmes ; Génie logiciel scientifique) et 4 autres aux grands domaines applicatifs (Industrie et ingénierie ; Météorologie, climat et sciences de la terre ; Sciences fondamentales, physique et chimie ; Sciences de la vie et santé).

¹¹ European Exascale Software Initiative, www.eesi-project.eu.

Recommandation :

Si, comme cela a été indiqué plus haut, la réflexion préparatoire à l'utilisation efficace des architectures exaflopiques est bien lancée au niveau international, et si, heureusement, un certain nombre de chercheurs français ont pu y contribuer efficacement, il n'en reste pas moins que la déclinaison de ces actions au niveau national reste à mettre en place dans la perspective de l'exascale. Ceci devrait sans nul doute faire l'objet d'un programme spécifique de l'ANR.

Remarque: il semble que la création d'un programme ANR, transverse aux STIC et avec plusieurs domaines applicatifs forts consommateurs de ressources de calcul pourrait aller dans ce sens. Il faut aussi que ce programme soit coordonné aux programmes nationaux des autres pays Européens et de la commission Européenne.

10.2. La roadmap de Bull

Tera100 est maintenant une réalité : 17000 socket de processeurs 170.00 cœurs). Pourquoi aller sur l'exascale ? Pour adresser des problèmes plus complexes comme par exemple en géophysique, des problèmes 3D avec des modèles viscoélastiques). Le moteur c'est le processeur. Intel prévoit de descendre jusqu'à une gravure de 8nm en 2017 contre 22nm aujourd'hui. La puissance de calcul ne suit pas forcément cette évolution à cause des débits mémoire. Par ailleurs le nombre de processeurs augmente. Aujourd'hui sont possibles:

- Un GPU et un CPU sur une même carte
- La fusion entre GPU et CPU (fusion). La cohérence est maintenue par le programmeur, la mémoire qu'on peut mettre par cœur est grande.
- Des processeurs SIMD et graphiques dans un chip (Larabee). La cohérence de ce « many core » est automatique.
- Un processeur d'un type différent (ARM) sur un chip GPU pour lequel, actuellement, la mémoire par cœur est petite.

Intel pense pouvoir mettre 20.000 cœurs sur un chip en 2020 !

Les défis sont au niveau du processeur et au niveau de la hiérarchie mémoire. L'ossature est le réseau : la réduction des latences est difficile. Par ailleurs les pannes vont être bloquantes (un MTBF de 10 ans par pièce se ramène à 10h sur 10.000 pièces !). On s'oriente donc vers des systèmes redondants (un cœur libre au sein de chaque chip). On peut essayer de détecter les pannes avant qu'elles ne se produisent. Pour la consommation électrique on pense pouvoir descendre à un facteur d'efficacité de 1.1 (actuellement 1.4). Les systèmes informatiques devront gérer la complexité. La virtualisation ouvre des horizons pour le management du système. Sur les modèles de programmations, les constantes de temps sont de dix ans mais on prévoit du parallélisme massif, de l'hétérogénéité et des mémoires hiérarchiques. Bull regarde FORTRAN8, openMP, MPI, PGAS (upc), Cuda, OpenCL. Des progrès se font jour pour les programmeurs qui sauraient exprimer leur parallélisme et la localité de leurs données. Il faut éliminer la nécessité de synchronisation. Les données générées vont être massives et leur analyse, visualisation, intégration avec la simulation, sauvegardes seront aussi des défis.

10.3. La roadmap d'IBM

IBM a développé deux architectures qui donneront lieu à des systèmes Petaflopiques qui seront disponibles à partir de fin 2011.

Le premier est un système conçu autour du processeur Power7 et du projet HPCS¹². La *Blue Waters* est l'aboutissement de cette démarche, l'objectif étant non seulement de créer des systèmes plus puissants mais d'améliorer également la productivité des ingénieurs et chercheurs. *Blue Waters* est un système de 10 PFlops qui sera livré à NCSA. *Blue Waters* utilisera le processeur haut de gamme de la famille Power 7 qui fonctionnera à 3.80MHz avec 2 contrôleurs mémoire (au lieu de 1 contrôleur pour les autres processeurs Power 7) et 8 cœurs et 8 Flops Double Précision / cycle (comme tous les processeurs Power7). Le système aura environ 300.000 cœurs; IBM a développé un réseau spécifique qui ne nécessite pas de routeur externe car il est intégré au nœud de calcul. Un nœud de calcul est composé de 4 processeurs intégrés sur un QCM (Quad Chip Module) avec 32 cœurs et 128 threads par nœud (chaque cœur peut exécuter 4 threads) avec une mémoire partagée de 512 Go; Un tiroir de 2U contient 8 nœuds, 4 tiroirs sont connectés pour faire un « supernode » qui contient donc 1024 cœurs. Le système aura au maximum 512 supernodes (16 PFlops). Le système est refroidi par eau. Disponible fin-2011, le système aura une consommation de l'ordre de 500 MFlops/Watt, ce qui est supérieur au *Blue Gene/P* actuel.

Le second est un système conçu autour de processeurs à faible consommation et qui donnera lieu au *Blue Gene/Q*. L'objectif est d'étendre le spectre des applications qui fonctionnent sur *Blue Gene/P* tout en améliorant la consommation électrique d'un facteur 5 la consommation. L'accroissement du spectre applicatif est le résultat de trois améliorations: le nœud de calcul est un processeur à 16 cœurs (au lieu de 4 cœurs pour BG/P), une amélioration du réseau d'interconnexion intégré au système (Tore 5D pour BG/Q au lieu d'un Tore 3D pour BG/P) et l'intégration des nœuds d'entrée-sortie dans le système. Chaque nœud est composé d'un SOC (System On a Chip) à basse consommation (moins de 40 Watt) qui comporte 17 cœurs à 1.6GHz (16 pour le calcul, 1 pour le système) ainsi que le routeur réseau intégré. Chaque nœud possède 16 Go de mémoire. Le BG/Q vise une consommation qui dépassera 2GFlops/Watt. Le premier système sera livré au laboratoire national de Lawrence Livermore et aura une puissance de l'ordre de 20 Pflops.

Ces deux systèmes supporteront le même environnement logiciel ce qui permettra de construire des systèmes hybrides à base de Power7 et de BG/Q.

L'exascale nécessite des performances, performance/prix, performance/watt et une fiabilité qui doivent être améliorées par des facteurs entre 20 et 50 par rapport au BG/Q : facteur 50 pour la performance/prix ; facteur 20 pour la performance/watt, facteur 50 pour la fiabilité. Les prévisions sur les coûts montrent que les fibres optiques vont dominer. La mémoire et le mouvement des données vont être des éléments qui vont dominer la consommation électrique. De par l'accroissement du nombre de processeurs, le problème des pannes est crucial. IBM intégrera au niveau matériel des fonctionnalités pour améliorer la tolérance aux pannes. Roadmap : 300PFlops en 2016 et l'Exa en 2019 pour une consommation électrique de 20 MWatt et un MTBF semblable à ceux des systèmes Power et *Blue Gene* d'aujourd'hui.

12

HPCS : High Productivity Computing Systems

Comment obtenir de meilleures performances des composants ?

- Rapprocher la mémoire du processeur
- Utiliser de nouveaux types de mémoire/stockage
- Utiliser des nouveaux types de communication optique
- Créer des packaging haute densité
- Intégrer la tolérance aux pannes au niveau matériel
- Descendre la gravure jusqu'à 11 nano

Ces systèmes ne nécessiteront pas de rupture des modèles de programmation qui fonctionnent aujourd'hui sur Power et Blue Gene. Il faudra "simplement" que les applicatifs puissent s'exécuter sur un plus grand nombre de tâches MPI et sur un plus grand nombre de threads. Cela veut dire que la programmation 'hybride MPI + openMP ou MPI+ threads sera une nécessité pour obtenir des bonnes performances. Pour permettre cette transition IBM organise des séminaires avec les communautés scientifiques sur les évolutions de la programmation et des applications et travaille sur la création de centres de "co-design".

10.4. La roadmap d'HP

La stratégie d'HP vise à ce que tous les segments de l'informatique bénéficient de la recherche sur l'EXASCALE : le web 2.0, le commercial et le HPC. La stratégie d'HP « Convergence Infrastructure » vise à développer les serveurs, le stockage et le réseau de façon cohérente et autour de principes clé comme la souplesse d'administration et la gestion de la consommation énergétique. Cette stratégie est alimentée par les travaux des 7 unités de recherches HP labs soit 600 personnes.

Le programme EXASCALE vise à identifier les technologies en rupture permettant de réaliser un EXAFLOP/S dans de bonnes conditions économiques (Coût Total de Possession). L'enjeu est de gagner grâce à ces technologies en rupture d'un facteur 10 sur un grand nombre de paramètres. L'objectif d'HP : un EXAFLOP/S en 2018 = 100 000 sockets de 10 TFlop/s chacun pour une consommation énergétique globale de 20 MW. La difficulté principale est la consommation électrique. Ceci rend inéluctable le passage au tout optique pour le « chipset » des nœuds de calcul et l'interconnexion des nœuds de calcul ; la logique de traitement devrait rester en technologie CMOS. Objectif 100Pflops en 2015 avec déjà des technologies qui seront utilisées en 2018 pour l'exaflops (les réseaux rapides à base de technologie optique ou les memristors pour la mémoire). Pour la conversion des signaux entre le monde optique et le monde électrique, HP mise sur une technologie, le « ring resonator ».

Le projet Corona a permis d'étudier la faisabilité d'un socket pour l'EXASCALE. Pour le socket, HP anticipe un processeur de 256 cœurs avec des communications de 20To/s en optique permettant de s'affranchir de la co-localisation de la mémoire et des cœurs de calcul. Les coûts de la mémoire baissant moins vite, il y en aura moins par cœur (sans doute de l'ordre 500Po de mémoire dans la machine exaflops). Le projet HYPERX quant à lui a étudié les meilleures options de réseaux rapides : Le xbar optique semble être la meilleure stratégie pour les performances et la consommation énergétique. Ainsi, on projette d'avoir 200Watts par socket avec une grande diminution du nombre de câbles.

Pour le logiciel HP va travailler sur le système, le management, le monitoring, le checkpoint restart (le MTBF ne sera que de 30min) en utilisant le memresistor, sachant que cette technologie se généralisera dans le mode du stockage (clés USB, disques,) dans les 3 ans.

Questions/Réponses :

Q En 2018 la technologie sera-t-elle peu onéreuse ? R : Oui car tout ceci sera fait avec des composants destinés à une grande diffusion et généralisables dans tous les segments de l'informatique.

Q : Les technologies de réseaux optiques envisagées par HP sont propriétaires ; ne vont-elles pas nécessiter une refonte de toute la pile logicielle (MPI, ...) ? R : Dans le cadre de « Converge Infrastructure » HP influe de façon cohérente sur la standardisation du réseau, des serveurs et du stockage et favorisera l'adoption de la technologie HYPERX dans les standards informatiques.

10.5. *la roadmap de Cray-Research*

En 2010 Cray a la seule machine qui soutient le Pflops sur plusieurs applications de calcul scientifique. On rappelle que Cray a été le premier pour le Gflops (8 proc avec le CRAY II) et le premier en Tflops (1024 procs avec le T3E). Les problèmes à résoudre sont

- La puissance électrique : Cray espère consommer moins 20MW en 2018, soit un facteur 100 à gagner. Faire un « load-op-store » est extrêmement coûteux en termes de déplacement des données et il faut offrir des hiérarchies de mémoire permettant de limiter au maximum les déplacements des données. Cray étudie également des systèmes de refroidissement (dont certains par air) visant à abaisser le PUE sous 1.05. Les processeurs pour l'exaflops devront être hybrides : quelques entités scalaires comparables aux cœurs scalaires complexes actuels, et de très nombreux cœurs beaucoup moins complexes.
- Le parallélisme sur des millions de processeurs : le GPU tel qu'on le connaît n'est pas la solution pour l'exascale. Toutefois, les problèmes qu'il soulève en ce qui concerne la programmation, devront être résolus pour utiliser efficacement les processeurs à l'horizon 2018. Cray espère aussi pouvoir générer automatiquement les codes exécutables efficacement sur GPU et futures architectures hybrides.
- La difficulté de programmation : Cray a la maîtrise totale de ses compilateurs. Cray milite par ailleurs pour l'intégration à OpenMP de directives spécifiques aux accélérateurs.
- De meilleurs réseaux : efficace sur le plan énergétique, diminuant la latence de communication et intégrant le support hardware de nouveaux modèles de programmation. Conçus pour des performances élevées en charge.
- La tolérance aux pannes : CRAY utilisera les processeurs existants ; il faudra trouver des solutions sachant que seul le HPC sera confronté aux problèmes des pannes car il sera le seul à utiliser des centaines de milliers de cœurs pour une application ; d'autant qu'il ne faudra pas compter sur l'aide des autres acteurs IT.
- Système Linux optimisé : chaque nœud de calcul utilise un noyau linux ultra-léger. Possibilité de spécialisation des cœurs. Pour le système de fichier, Lustre reste la solution du présent et de l'avenir, pérennisée par la constitution et le support du consortium OpenSFS .

Chez Cray la technologie d'aujourd'hui est le XE6 : opteron avec un réseau d'interconnexion Cray en topologie Torique 3D.

- Cray XK6 (annoncé en mai 2011) : introduction de GPU dans le XE6 : on ajoute aux CPU des GPU reliés en PCI express. On pourrait ainsi obtenir 50Pflops. Ces nouveautés matérielles sont associées à de nombreux développements logiciels.

- Projet Cascade (horizon 2012/2013): Diminution des latences de communication en améliorant le réseau d'interconnexions ; nouvelle technologie de refroidissement. Adoption de processeurs Intel, et/ou AMD et nouveau GPUs et/ou architectures fusionnées CPU/GPU.
- Une architecture pre-Exaflopique vers 2014-2015 : En particulier un nouveau réseau et de nouveaux processeurs.
- Une architecture exaflopique soutenue vers 2018

Cray a aussi des machines massivement multithreads (des mémoires To partagées, chaque thread n'a la main que rarement) ; Cette technologie n'est pas destinée à mener vers l'Exaflop, mais constitue une voie d'exploration pour des problèmes particuliers et non typés HPC ;

Cray collabore avec NVIDIA et d'autres partenaires, pour la conception de processeurs du futur.

10.6. La roadmap NEC

NEC-HPC Europe existe depuis 1991. Le siège est à Düsseldorf ; il y a 4 centres en Europe dont un à Paris (avec une extension à Toulouse) de 45 personnes ingénieurs techniques et technico-commerciaux, dont 12 en France. NEC est bien implanté chez les constructeurs automobiles et dans les centres de météo. L'abandon du projet japonais HPC par NEC est dû à une perte financière importante en 2009 du groupe pendant la crise USD / Yen au Japon. Le ralentissement du développement des systèmes vectoriel est donc temporaire puisque NEC a renoué avec les bénéfices en 2010. En vectoriel plusieurs clients de marque dont METEO France, CEA, IDRIS, Onera, NLR, DWD (météo allemande), HLRS (centre de calcul de Stuttgart). Deux commandes récentes d'importance: le Tokyo Institute of Technology et l'Institut du Cerveau et de la Moelle épinière à Paris.

Plutôt que sur la performance de pointe, NEC communique sur l'efficacité calcul. NEC travaille actuellement sur l'harmonisation entre les machines scalaires et vectorielles, afin de valider deux prototypes de machine hybrides actuellement en test chez deux clients : DWD et HLRS.

Deux gammes de produits LX « x86 » et SX « vectoriel ». Les systèmes LX les plus rapides utilisent l'Infiniband, un refroidissement par air dirigé, des extensions GPU (Soleil a acheté une machine avec 4 GPU par carte mère). Typiquement NEC s'intéresse beaucoup aux machines de ce type de machines avec une centaine de cartes mères, quelques milliers de cœur. NEC a sa propre version du système de fichier Lustre (LXFS).

La gamme vectorielle : SX9 en 2010, le Next Generation Vector (NGV) est annoncé pour 2014.

Le NGV sera construit à partir d'un seul LSI multi-cœur, avec un gain en consommation considérable par rapport au SX9. Le NGV aura un cache HPC, la bande passante mémoire sera la même et il y aura 256GFlops par chips, une concentration X5 par rapport à aujourd'hui. Le frontal de la machine sera une machine scalaire comme actuellement.

10.7. *La roadmap SGI*

La vision de SGI est influencée par l'historique du passage du teraflops au petaflops et par ses dernières innovations (la plus grosse machine SGI est à la NASA). Ainsi l'augmentation du nombre de cœurs a été relativement importante vers 2005. On s'attend à une augmentation de l'efficacité des cœurs mais aussi à un rapport 1000 sur le nombre de cœurs (5 Millions de cœurs) pour l'exaflops. Les hybrides auraient tendance à être plus efficace en énergie à puissance identique.

Les défis:

- énergie, 20MW au mieux (soit 2M\$/mois)
- data management, nouvelle technologie de mémoire, nouvelle technologie d'I/O, 10Po de stockage.
- tolérance aux pannes : au niveau du manycore on peut espérer remplacer un cœur défaillant par un autre ; identification des mémoires défaillantes.
- OS et middleware : on gardera l'open source, des noyaux plus légers, avec de la virtualisation,
- et surtout le challenge économique !!!

La gamme Altix UV (scale-up computer). L'Altix UV fonctionne en 2 modes d'accès mémoire : une seule instance du système accédant à 16 To ou bien plusieurs mais 8Po distribués. L'UV2 est prévue en 2012 avec des Sandybridge. Interconnexions NumaLink 6. UV3 et 4 entre 2014 et 2017 fonctionneront sous NumaLink 7 et 8 (le CHP est développé en interne). La gamme UV supporte UPC.

La gamme Altix ICE (scale-out computer) avec des puissances installées supérieures à 5Pflops. Elle est fondée sur Infiniband, supporte indifféremment de l'AMD et de l'Intel. L'interconnexion est reconfigurable : communications « all to all » ou « hypercube. La prochaine génération Carlsbad3, annoncée à ISC 2011 a une gestion beaucoup plus souple des GPU.

La gamme Prism XL est accélérée en hybride avec des performances supérieures à 1 Pflops/cabinet. Le but est de fournir des accélérateurs sur PCI Xpress. SGI travaille sur une solution de power management (arrêter des cœurs).

Le modular data center ICE. Dans l'optique ou le container serait l'unité standard. En 2018 on pourrait atteindre l'exaflops avec 21 containers. 28MW. SGI étudie les refroidissements à air et à eau.

SGI est dans le DARPA UHPC Program avec Intel depuis 1 an et pour 8 à 10 ans.

10.8. *La road map Fujitsu*

Fujitsu offre une gamme x86 de PC de bureau jusqu'aux superordinateurs. Né au début des années 1980, les premiers superordinateurs FUJITSU sont vectoriels et de conception japonaise. Fujitsu dit que le HPC est désormais essentiel pour l'industrie. Fujitsu est en contact étroit avec les utilisateurs. Pour Fujitsu la coopération avec les applications et les industriels est essentielle.

Un exemple récent de développement est le « HPC Wales project », 190 TFlops de performance totale, basée sur 1400 nœuds de calcul, répartis sur 15 sites académiques.

Le prochain projet sur la route de l'exaflops est le K Computer (le caractère japonais 'K' signifie 10 à la puissance 16, et cela signifie également "grande porte"). Il s'agit d'un projet pour une machine 10Pflops Linpack en 2012 à Kobe city.

L'objectif est une excellente efficacité énergétique, mais avec des processeurs généralistes (pas de GP/GPU). Le modèle de programmation hybride MPI/openMP est efficace mais délicat. L'objectif de Fujitsu est de proposer une parallélisation automatique sur les différents cœurs d'un processeur et de laisser uniquement la programmation MPI au programmeur allégeant ainsi la programmation hybride. Cette parallélisation automatique est réalisée par le compilateur avec le support hardware.

Le hardware du K computer est basé sur une extension du processeur SPARC64 (8 cœurs 2 GHz, 128Gflops) et un réseau d'interconnexion Tofu 3D jusqu'à 100 000 nœuds. 8 racks sont déjà installés depuis le 1er octobre 2010 et des racks supplémentaires sont progressivement installés. La configuration finale sera de 800 racks.

Principaux enjeux pour l'Exascale:

En 2001, Fujitsu a arrêté le HPC en Europe. Aujourd'hui, Fujitsu redémarre ses activités HPC parce que ce n'est plus un marché de niche. Les technologies du HPC envahissent toutes les architectures du marché informatique (ou inversement).

Le « Power efficiency » est une cible essentielle. L'efficacité des compilateurs et des architectures aussi. Quelques technologies clés: la technologie 3D memory stacking ; Nanocarbon to semiconductor ; Open Petascale bibliothèques ; Exascale class computer.

Fujitsu insiste sur la nécessité de maîtriser la technologie du processeur pour atteindre l'exascale et implanter les prochaines technologies comme les liens optiques sur puces. Le nuage est stratégique pour Fujitsu. Aujourd'hui, le cloud permet de faire de la simulation de type Monte Carlo. Mais demain cela changera. Fujitsu est revenu sur le marché HPC après une dizaine d'années car l'entreprise pense que le HPC n'est plus une niche aujourd'hui. On y retrouve les mêmes technologies ou très proches de celles du marché de masse, simplement plus tôt et plus en pointe.

11. Promotion du Calcul Scientifique

11.1. L'ANR

Dans un rapport de 2010 l'ANR met en évidence l'omniprésence du calcul et de son financement à l'intérieur de nombreux programmes.

L'ANR a une programmation trisannuelle. Dans le département STIC les programmes MN et INFRA sont principalement pour le calcul scientifique (mais pas forcément pour le calcul extrême, c'est à dire ceux qui préparent à l'exascale); les programmes PNANO-P3N-P2N ont aussi des volets calculs importants. Enfin il y a les programmes blancs et une chaire d'excellence en calcul.

Dans les autres départements la partie calcul est souvent importante (ex : combustion pour les moteurs, climats, biologie systémique...). De fait, le calcul intensif diffuse dans toutes

les sciences et n'est donc pas simple à tracer.

En 6 ans l'ANR a financé 150 projets liés au CS, soit près de 25M€ d'aide par an sur un coût total de 60M€/an.

Des liens avec GENCI ont été tissés pour identifier l'adéquation des projets aux machines et inversement pour que les lauréats ANR puissent travailler dans les conditions de leurs contrats.

En 2010, l'initiative G8 Exascale est en partie sur proposition de l'ANR : le G8 a décidé de faire un appel d'offre commun (appel pilote, avec la Russie, Canada, USA, Japon, All., GB, Fr., It.). Il y a eu 84 propositions et 24 ont été retenus mais ensuite 6 au final dont 5 avec participation française ; le tout pour un coût de 1M€.

En 2010 le budget d'intervention de l'ANR a été de 740M€, l'aide moyenne pour les projets académiques de 430K€ et de 870K€ pour les projets en partenariat.

La demande a été croissante avec 6500 projets et seulement 1353 financés. Environ 400 entreprises sont concernées. Le grand emprunt n'a pas diminué les demandes pour le moment.

Le Budget 2011 est en baisse de 10% par rapport à l'année précédente. Le taux de sélections est tombé à 21.6% contre 23% en 2009. Le CSCI pense que c'est trop peu !

Le choix des thèmes : la programmation 2008-2010 avait été placée sous le signe « fin de la loi de Moore ». Pour 2011-13 le thème « société numérique » a été choisi pour le programme INFRA (internet du futur, diffusion numérique, développement durable) concrétisé par 4 programmes : infrastructures pour la société numérique, ingénierie numérique et sécurité, contenus numériques et interactions, modèles numériques (MN). MN, qui est la suite du programme 2008-2010 COSINUS a pour thèmes : Modélisation des systèmes complexes, conception, optimisation, masses de données, visualisations, utilisations.

Ainsi le financement du CS est peut être en hausse mais celui du calcul intensif est en baisse. Il y a par ailleurs une dérive du financement du calcul sur les outils réseaux, visualisation, base de données ce qui serait bien si ce n'était au détriment des algorithmes et logiciels de calcul. Par ailleurs l'attention portée au taux de sélection ne favorise pas les projets en partenariat plus difficiles à monter et donc nécessairement moins nombreux. Il est pourtant important de rappeler que les logiciels de calculs extrêmes, outils mis ultérieurement à disposition du monde académique gratuitement, sont le produit d'une équipe. Au départ ils peuvent être le produit d'un chercheur génial mais ensuite il faut une équipe aux compétences multiples pour développer l'ensemble du module logiciel qui sera rendu public et qui sera maintenu!

Recommandation :

L'ANR est un moyen puissant pour les orientations de recherches, en particulier pour le calcul massivement parallèle ; mais sauf pour le programme « Méthodes Numériques » le calcul intensif est perdu dans les actions générales et à peu de visibilité au sein de l'ANR. Comme en 2010 le CSCI recommande que l'ANR prépare l'Exascale 2018 et le mi parcours 100 Pflops 2015 avec plus de visibilité.

11.2. La formation

La formation en calcul intensif est assurée par les centres nationaux sous forme de cours thématiques technique de courte durée et par les universités dans les programmes de

Master et au niveau doctoral (le site <http://calcul.cnrs.fr/> onglet formations en recense un certain nombre).

En 2010 l'université de Versailles St Quentin, le CEA et le laboratoire mixte Intel ont lancé une formation modèle sous la direction de William Jalby. Il serait souhaitable qu'il y ait d'autre formation de ce type en France.

Dans le rapport n°2 nous avons insisté sur le manque de formation mixte au sein où à coté des masters applicatifs et aussi sur le manque de projets de doctorats conjoints avec une composante calcul. Ceci reste d'actualité.

Le nombre d'utilisateurs du calcul intensif doit continuer à progresser. **Il faudra donc encore en 2012 développer de nouvelles formations et encourager les chercheurs à passer du tier2 au tier1 et du tier1 au tier0, leur faciliter l'accès aux machines, récompenser leurs efforts et les inciter à former des équipes.** Le MESR devrait demander à l'université française, représentée par la CPU, d'établir un socle commun de connaissances de la modélisation et de la simulation numérique et d'en déduire un programme de formation dans les cursus L, M et D, permanente et continue. Les alliances, en particulier Allistène, devraient être associées à ces réflexions. Elles devraient les prolonger pour créer les conditions de l'essor d'équipes de recherche spécialisées dans le HPC en favorisant des interactions pluridisciplinaires autour de grands projets (méthodes numériques massivement parallèles et problèmes scientifiques aux enjeux stratégiques dans les domaines de l'énergie, de l'environnement, de l'information et la communication, de la santé, des transports, etc.).

11.3. EQUIP@MESO : consolider l'écosystème du calcul intensif

Equip@meso (Equipement d'excellence de calcul intensif de mésocentres coordonnés - tremplin vers le calcul pétaflopique et l'Exascale) figure parmi les 52 projets retenus dans le cadre de l'appel à Projets « Equipements d'excellence » dont les résultats ont été présentés début 2011 ; il fait partie des 12 qui ont obtenu plus de 10 M€, sa dotation s'élève à 10,5 M€.

Il associe des acteurs nationaux et régionaux pour faire, partout en France et chaque fois que possible, du calcul intensif et de la simulation numérique un vecteur de développement scientifique et économique.

Coordonné par GENCI, ce projet rassemble les dix partenaires universitaires et académiques suivants :

1. le Centre de ressources informatiques de Haute-Normandie (CRIHAN),
2. le PRES Université de Toulouse,
3. l'Université d'Aix-Marseille I,
4. l'Université Claude Bernard Lyon I,
5. l'Université Joseph-Fourier Grenoble I,
6. l'Université de Strasbourg,
7. l'Université de Reims Champagne-Ardenne,
8. le PRES Paris Sciences et Lettres (représenté par l'Observatoire de Paris et l'Ecole Normale Supérieure),
9. l'Université Pierre et Marie Curie ainsi que
10. la Maison de la simulation du Plateau de Saclay (avec le concours du Cerfacs et du GDR Calcul du CNRS, du Centre Blaise Pascal (ENS Lyon) et de la Maison de la Modélisation et de la Simulation, Nanoscience et Environnement [MaiMoSiNE] à

Grenoble).

Equip@meso poursuit quatre objectifs :

- développer au niveau régional la stratégie nationale portée par GENCI en matière de calcul intensif, avec des centres de calcul universitaires ;
- renforcer les compétences et les capacités de calcul de ces centres ;
- offrir un service d'excellence et de proximité, qu'il s'agisse de formation, d'éducation ou de calcul, complémentaire des moyens nationaux ;
- enfin, démultiplier localement l'initiative lancée par GENCI avec l'INRIA et OSEO pour doper l'innovation et la compétitivité des PME.

11.4. La Maison de la Simulation

La Maison de la Simulation est un projet regroupant cinq partenaires (CEA, CNRS, INRIA, universités d'Orsay et de Versailles – St Quentin) au sein d'une Unité de Service et de Recherche qui a pour objectif d'accompagner, de soutenir et de stimuler les communautés scientifiques afin de tirer le meilleur parti des super calculateurs, en particulier ceux déployés dans le cadre de GENCI et du projet Européen PRACE. Au-delà des partenaires directement impliqués dans l'USR, la Maison de la Simulation a vocation à établir des liens privilégiés avec d'autres entités, dont notamment GENCI et les centres de calculs nationaux et européens. La Maison de la Simulation favorisera l'émergence en France d'une communauté du calcul intensif. Pour cela elle développe, entres chercheurs et ingénieurs de différentes disciplines, les synergies fortes nécessaires pour concrétiser les avancées scientifiques importantes attendues du calcul haute performance. Ses initiatives sont tournées à la fois vers les communautés déjà utilisatrices des grands moyens de calcul mais également vers la recherche de nouveaux champs d'applications du calcul haute performance.

Pour mener à bien ses missions, la Maison de la Simulation se développe selon trois axes :

- Un centre de recherche pluridisciplinaire autour de la simulation numérique
- Une structure de soutien et d'expertise ouverte sur les communautés
- Un pôle d'enseignement et d'animation scientifique en calcul intensif

En 2010, la Maison de la Simulation a démarré ses activités. Elle participe à deux projets d'équipement d'excellence : Equip@meso et Digiscope. Equip@meso, coordonné par GENCI, vise à équiper une dizaine de méso-centres en France. La Maison de la Simulation est en particulier responsable de l'animation scientifique et de la formation au sein de ce projet, en collaboration avec le CERFACS et le GDR Calcul du CNRS. Le projet [Digiscope](#) met en place une infrastructure haute performance pour la visualisation interactive et collaborative sur le plateau de Saclay. La Maison de la Simulation disposera ainsi d'un mur d'image stéréoscopique et de moyens de calcul associés avec comme objectif principal la visualisation scientifique et l'exploration, éventuellement déportés, des grands volumes de données issus des centres nationaux.

Par ailleurs, la Maison de la Simulation a déjà organisé deux formations en collaboration avec l'IDRIS et le CCRT : une formation au calcul hybride en octobre 2010 et une école d'été en calcul haute performance de trois semaines en juin et juillet 2011. Les activités de recherche prendront leur essor en 2011 avec le démarrage de plusieurs

thèses, post-doctorats et projets scientifiques. Les thématiques concernées vont de problèmes applicatifs comme la fusion ou la physique des matériaux à des aspects plus transverses comme l'algèbre linéaire ou l'utilisation des GPU.

Pour plus d'information sur les actions de la Maison de la Simulation voir www.maisondelasimulation.fr

11.5. Le calcul intensif dans l'industrie

Le problème du calcul intensif dans l'industrie a été traité dans le rapport n°1. Il avait été dit que le coût de conversion des logiciels était élevé et que les industriels ne feraient pas l'investissement sans l'aide de l'état si les gains à court terme n'étaient pas évident. Nous refaisons dans ce rapport le recommandation

d'accompagner les efforts de conversions au parallélisme des industriels par un programme d'accès aux machines GENCI sur le modèle du programme INCITE américain.

Dans le cas particulier de l'automobile, les équipes qui développent « l'engineering design », ceci inclut les sous-traitants (PME) utilisent de plus en plus la simulation pour adapter le design au marché. Ces simulations sont aussi de plus en plus détaillées et font parties des cahiers des charges. La tenue des délais demande aussi une bonne orchestration des simulations et un traitement élaboré des couplages, comme en aéronautique ; les objectifs sont sur la tenue aux efforts, le crash, l'écrasement, les soudures mais aussi le bruit, les vibrations, la solidité. Les phénomènes sont multi-échelles et demandent des études micro et macro sur les matériaux (alliages, tissus, thermo-plastiques, composites), bref tout le potentiel du calcul intensif est le bienvenu et a un avenir certain sur ce terrain ; une PME sous-traitante pour Renault fera d'ailleurs partie du programme test INRIA-GENCI-Oseo pour les PME.

11.6. Les grilles en tant que moyen de calcul intensif

Les grilles de calcul sont des structures de calcul et de stockage distribués qui permettent de mettre en commun des ressources informatiques hétérogènes. Pour tout calcul où les communications entre tâches sont faibles les grilles sont adaptées ; elles constituent aussi un point d'entrée facile au calcul intensif. Comme le sujet est complexe nous lui consacrons un chapitre séparé.

12. Les grilles de calcul et les « clouds »

Il existe deux types de grilles, les unes orientées vers la production et les autres vers la recherche dans le domaine des technologies de l'information. Afin de pouvoir fonctionner de manière cohérente, les ressources attachées aux grilles reposent essentiellement sur un système d'information et un intergiciel. Idéalement, une grille peut être vue comme un ordinateur unique sur lequel l'utilisateur soumet des tâches sans avoir à se soucier de la localisation des ressources (virtualisation).

Les grilles dépendent de manière cruciale du réseau sous-jacent. En France l'infrastructure réseau offerte par RENATER et les interconnexions vers le réseau européen GÉANT sont d'excellentes qualités et permettent aux projets scientifiques de tirer tout le parti possible des architectures de grilles. Il faudra bien sûr veiller à conserver cette excellence et ne pas oublier de dimensionner le réseau face aux augmentations des flots de données

conséquentes à l'augmentation des moyens de calcul.

Sous l'impulsion de grandes compagnies privées telles Amazon, Google, IBM, Microsoft, etc. les infrastructures de calcul distribué ont évolué vers le modèle dit des « clouds » qui permet de s'affranchir des contraintes des plateformes matérielles et logicielles grâce aux techniques de virtualisation ainsi que de dimensionner automatiquement et dynamiquement les ressources en fonction des besoins, grâce au concept d'élasticité.

12.1. Les grilles de production

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

EGI s'appuie sur des infrastructures nationales nommées NGI (National Grid Initiative). En France la communauté des grilles s'est structurée autour du Groupement d'Intérêt Scientifique *France-Grilles*.

D'autres grilles plus légères du point de vue de la mise en œuvre et de l'opération existent également, elles permettent de servir des thématiques dédiées, comme le projet DECRYPTHON initié par l'Association Française contre les Myopathies, IBM et le CNRS, ou encore de fournir des moyens de calcul supplémentaire à destination de communautés scientifiques (projet CiGri par exemple). Ces deux grilles ont par ailleurs bénéficié d'apports de la part de la communauté de recherche, en particulier avec le déploiement de l'intergiciel DIET sur DECRYPTHON et de l'ordonnanceur OAR sur CiGri.

12.2. Les grilles de recherche

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

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

12.3. Activités récentes et perspectives sur les grilles

La mise en service de l'accélérateur LHC au CERN près de Genève et ses excellentes performances s'est accompagné d'un déferlement de données sur l'infrastructure de grille mondiale W-LCG, qui valide les choix technologiques opérés au cours des dix dernières années.

En France la communauté des grilles de production s'est structurée autour du GIS France-Grilles qui regroupe le MESR, le CNRS (via l'Institut des Grilles), le CEA, l'INRIA, l'INSERM, l'INRA, la CPU et RENATER. Actuellement une vingtaine de nœuds de tailles

différentes forment la grille française. Le développement de France-Grilles a permis d'étendre le calcul distribué à de nouvelles communautés.

Au cours de l'année écoulée, nous avons assisté à un rapprochement important entre la communauté des grilles de production et celle des grilles de recherche. Un appel d'offre commun CNRS / Institut des Grilles – INRIA lancé en 2009 avait fourni un financement d'amorçage à 7 projets à l'interface production / recherche, tous se sont concrétisés par des ANR en 2011.

12.4. Évolution des grilles vers les clouds

Les technologies de « cloud computing » ont considérablement évolué ces dernières années sous l'impulsion de plusieurs compagnies informatiques. De même, la communauté de recherche en informatique, notamment ALADDIN-G5k a beaucoup investi dans le domaine du cloud. Comme recommandé par l'International Advisory Committee de France-Grilles, Il apparaît maintenant nécessaire de faire évoluer les grilles de calcul vers un modèle de cloud académique qui pourra répondre de manière beaucoup plus souple aux besoins des utilisateurs.

12.5. Relations entre les grilles de production et les supercalculateurs

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

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

La mise en production des premières machines de l'infrastructure pétaflopique PRACE rend la problématique du traitement des données issues des grandes simulations encore plus prégnante. Le rapprochement des deux communautés qui n'a pas eu lieu jusqu'à maintenant devient donc de plus en plus important et devra être encouragé par des initiatives fortes.

Difficultés :

En 2011 les grilles de recherches et de production doivent faire face à des problèmes de financement très importants ; les budgets TGIR de l'Institut des Grilles et du projet LCG-France ont subi des coupures très importantes. Les EQUIPEX France-Grilles et GRID'5000 n'ayant pas été retenus, il y a actuellement un très fort risque de voir les infrastructures correspondantes périlcliter, ce qui aurait un impact très négatif, autant au niveau national qu'international.

Recommandations :

Comme en 2010 nous recommandons de renforcer les liens entre les communautés des grilles / clouds de production et du HPC afin d'exploiter au mieux les complémentarités. Ce rapprochement pourrait contribuer à modifier favorablement le découplage entre moyens de grilles et communautés utilisatrices afin de proposer des outils très largement ouverts (via un portail d'accès comme le DARI du HPC) à toutes les communautés scientifiques.

Nous recommandons aussi de continuer de favoriser les liens entre les grilles de production et les grilles de recherche et

de faire émerger une infrastructure de nuage pour la recherche, multidisciplinaire, en collaboration étroite avec la communauté de recherche en informatique, mais surtout d'assurer un financement viable pour les nœuds de la grille française (production et recherche)

12.6. Le centre de calcul de l'IN2P3

Le centre de calcul de l'IN2P3 (CC-IN2P3) est une Unité de Service et de Recherche du CNRS située sur le campus de l'Université Claude Bernard Lyon 1. La mission première du CC-IN2P3 est de fournir les moyens de calcul et de traitement des données pour la recherche en physique corpusculaire. Le CC-IN2P3 joue notamment un rôle majeur à un niveau international pour le traitement des données issues des expériences installées sur l'accélérateur LHC du CERN. Une soixantaine d'expériences et de groupes de recherche utilisent les moyens de calcul du CC-IN2P3. Au cœur de la grille de production française, le CC-IN2P3 a acquis un savoir faire très important dans le domaine du calcul distribué qu'il met maintenant à la disposition de plusieurs communautés scientifiques hors physique des hautes énergies : biologie (génétique, embryogénèse...), applications biomédicales, sciences humaines via le Très Grand Équipement ADONIS. Une ouverture récente vers le monde industriel Rhône-Alpin commence également à porter ses fruits, notamment au travers du pôle de compétitivité Imaginove. Le CC-IN2P3 est partenaire de l'IRT Infectiologie porté par Biomérieux et à ce titre contribuera à la mise en place et à l'exploitation de l'infrastructure de traitement des données.

Le CC-IN2P3 vient d'achever la construction d'une extension de ses locaux informatiques. Motivée au départ par les besoins croissant des expériences LHC, la réalisation actuelle offre des perspectives uniques en Europe pour le traitement des données scientifiques. Des négociations très avancées permettent d'envisager à l'horizon 2018 la mise en place au CC-IN2P3, de la chaîne de traitement « sol » des données de la mission spatiale EUCLID ainsi qu'un investissement majeur dans le traitement des données du télescope LSST (Large Synoptic Survey Telescope) au Chili qui produira un flot de données dépassant largement tout ce qui a été fait au niveau scientifique jusqu'à maintenant.

Le CC-IN2P3, de part ses compétences dans le domaine du traitement des données et sa position stratégique au niveau du calcul distribué (grilles et cloud) devrait jouer un rôle important dans le paysage informatique français en complément de la structure T0/T1/T2 du HPC.

Recommandations :

Renforcer les liens les Centres de Calcul sur grilles et la communauté française du calcul intensif afin de mettre en place des modèles de gestion des données performants et pouvant aisément passer à l'échelle.

13. Actions et stratégie de quelques grands organismes

13.1. Actions et stratégie du CEA

L'année 2010-2011 a été marquée pour le CEA par la concrétisation d'une politique menée sans discontinuer depuis l'annonce en février 2000 que les « *grands moyens expérimentaux du CEA/DAM : Laser et grands ordinateurs seraient ouverts à la communauté scientifique* ». Avec la mise en service opérationnelle de TERA100, première machine pétaflopique conçue et réalisée en Europe, la livraison du Très Grand Centre de calcul du CEA qui abritera la première machine pétaflopique pour la recherche française et européenne (programme PRACE financé par GENCI) et le lancement du Campus Ter@tec qui abritera début 2012 plusieurs centaines d'ingénieurs et chercheurs d'organismes public et d'industriels, le CEA dispose aujourd'hui à Bruyères le Châtel du plus complexe de calcul scientifique d'Europe.

▪ Mise en service opérationnel de TERA100

La machine TERA100 est le résultat d'un effort sans précédent de R&D menée conjointement par les équipes de BULL et du CEA/DAM depuis 2008 qui a mobilisé de part et d'autre plusieurs centaines d'ingénieurs dans le cadre d'un laboratoire commun « Extreme Computing Lab ». Fin 2009 l'architecture développée dans le cadre de ce laboratoire recevait aux USA le prix de « meilleure architecture de l'année » et en décembre 2010, avec 1,05 Pétaflop/s LINPACK, TERA100 obtenait la 6^{ème} place mondiale et la première place européenne qu'elle occupe de nouveau en juin 2011. Les retombées économiques de cette R&D ont été extrêmement importantes. L'architecture développée pour TERA est celle la machine CURIE commandée par GENCI pour le programme européen PRACE, de la machine « Fusion » commandée par F4E pour une installation au Japon. Elle a permis à l'industriel français de vendre des machines de grande puissance au Royaume Uni, en Allemagne et au Brésil.



TERA 100

CEA/DAM Bruyères le Châtel

▪ Inauguration du Très Grand Centre de calcul du CEA,

Conformément au planning prévu, le Très Grand Centre de Calcul du CEA a été livré en décembre et inauguré par Madame le Ministre de la Recherche. Cette infrastructure de 70M€ financée par le CEA avec l'aide du Conseil Général de l'Essonne est avec le

Centre de Calcul Défense TERA et le LRZ de Munich capable d'accueillir les machines multi-pétaflopiques des prochaines décennies. Le TGCC a été conçu pour pouvoir abriter dans les meilleures conditions opérationnelles des ordinateurs de très grande puissance et tout leur environnement. Elle peut disposer d'une puissance électrique maximum de 50MW. L'énergie dissipée par les machines est recyclée dans le chauffage du TGCC et du Campus et l'infrastructure a été optimisée pour minimiser son empreinte carbone.

En plus de ses 2600m² de salles machines et des servitudes associées (distribution de puissance et distribution de froid), le TGCC dispose d'un amphithéâtre de 206 place et de salles de réunion équipée pour la visioconférence lui permettant d'accueillir des séminaires jusqu'à 200 personnes.



Très Grand Centre de calcul du CEA Bruyères le Châtel

▪ **Mise en service, de la première tranche de la Machine Curie**

Après un appel d'offre mené en commun par GENCI et le CEA et l'attribution du marché à BULL, la première phase de la machine CURIE a été installée fin 2009 et ouverte aux utilisateurs dès fin janvier 2011. La phase 2 qui sera installée avant la fin de l'année est une machine hybride de comportant 100 teraflops/s de nœuds « large » à mémoire importante, 1,6 petaflops de nœuds « fin » et 200 teraflop de GPGPU. Son architecture est celle développée par le CEA et BULL dans le cadre du projet TERA100.

Le Centre de Calcul Recherche et Technologie

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 (CEA/DIF). Ce complexe comprend également le TGCC (Très Grand Centre de calcul du CEA) qui héberge le supercalculateur « Curie ».

La mission du CCRT est double. En tant que Tier1 français, il contribue à la mise en œuvre des moyens de calculs nationaux pour la recherche. En tant que centre de calcul ouvert à des partenariats industriels, il favorise les échanges et les collaborations entre le monde de la recherche académique et celui de l'industrie dans le domaine de la simulation numérique haute performance. En 2010, l'Ineris, Institut National de l'Environnement industriel et des risques, et Areva, numéro un mondial du nucléaire, ont rejoint EDF, Snecma, Turbomeca, TechspaceAero, EADS/Astrium en tant que partenaires industriels du CCRT.

Depuis avril 2011, les partenaires industriels ont renouvelé leur confiance au CCRT, en s'engageant pour une nouvelle période de partenariat allant jusqu'à fin 2014.

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

Le Campus Ter@tec

La première pierre du Campus a été posée le 5 mai 2011 pour une livraison au premier semestre 2012. Cette opération entièrement financé par des fonds privés accueillera des 2012 entre 500 et 600 ingénieurs et chercheurs sur le thème des technologies pour le calcul intensif. Environ un tiers du Campus sera occupé par des grandes entreprise du domaine, un autre tiers par un hôtel d'entreprise géré par la chambre de commerce et d'industrie de l'Essonne abritant des PME et une pépinière, enfin le dernier tiers sera occupé par les laboratoires public/privé issus de la politique d'ouverture du CEA/DAM

Développement de grands codes de simulation

En complément à ces réalisations, l'effort de *développement des codes de simulation* indispensables à la réalisation des programmes de recherche du CEA, et pouvant s'exécuter sur les calculateurs parallèles pétaflopiques s'est poursuivi et amplifié.

Outre les différents domaines de recherche concernés par ces développements et déjà cités dans ce rapport et les précédents (Fusion, Climat, Nanosciences, Génomique, nanotechnologies), on peut également citer les domaines liés à la physique (physique nucléaire, physique des particules et astrophysique), ainsi que ceux liés à l'énergie nucléaire (neutronique, thermo hydraulique, et matériaux).

Le CEA a lancé en mars 2009 son *programme Nanosimulation*, avec comme objectifs entre autres de renforcer la dynamique des équipes CEA vers une utilisation efficace des moyens de calcul intensif (tier0, tier1).

Au cours des 2 premières années, une impulsion dynamique au lancement du programme a été assurée en finançant 15 doctorants sur des projets transverses, entre équipes CEA, et parfois en interface avec des partenaires académiques. Ces projets correspondent à des défis scientifiques associés à la simulation pour la nanoélectronique, l'énergie (photovoltaïque, batteries...) ou les nanomatériaux, avec souvent une très forte composante de développement de la compétence sur les codes, en particulier vers le calcul intensif.

Ci-dessous, nous citons quelques exemples d'avancées récentes.

Code ab initio Big DFT: Ce code utilise les fonctions ondelettes pour représenter ses fonctions d'onde. L'avantage des ondelettes est de n'utiliser que des opérations localisées dans l'espace. Ainsi, en ne mettant en jeu que des opérations ainsi localisées, les données peuvent être également localisées en mémoire, permettant une meilleure efficacité de l'utilisation des processeurs. De plus, différentes conditions de bord peuvent être considérées pour simuler efficacement des systèmes isolés comme des molécules ou des systèmes périodiques comme les matériaux et les surfaces. Cette démarche est également

importante pour obtenir une excellente efficacité en calcul parallèle. Le code BigDFT est ainsi utilisé de manière quotidienne sur plusieurs centaines de processeurs avec des accélérations comparables au nombre de processeurs mis en jeu.

Utilisation des cartes graphiques : Les deux opérations de base sont l'algèbre linéaire (multiplication de matrices) et les convolutions à courte portée. Ces dernières sont aussi beaucoup utilisées en infographie. Il est donc logique d'essayer d'utiliser la puissance des cartes graphiques pour réduire sur un nœud de calcul le temps d'exécution du code BigDFT.

Dès 2008, le laboratoire L_Sim a débuté, en collaboration avec le laboratoire d'Informatique de Grenoble, le développement d'une version du code BigDFT capable d'exploiter des architectures graphiques composées de processeurs classiques et de cartes graphiques. Au départ le langage retenu a été CUDA, puis OpenCL a été préféré car il peut être exécuté sur différentes architectures. Actuellement (juin 2011), le code est capable de s'exécuter sur les cartes graphiques NVIDIA et ATI avec des performances similaires. Les accélérations obtenues peuvent atteindre un facteur 10.

Simulation du transport électronique : La simulation précise des propriétés électroniques de nano-objets comme les nanofils, les nanotubes de carbone ou le graphène, est associée à des très forts enjeux fondamentaux et appliqués. Aussi, le laboratoire L_Sim en collaboration avec le Leti (CEA) et l'ITEMN (Lille) a développé un code, TB_SIM, utilisant une méthode simplifiant les interactions entre électrons (méthode des liaisons fortes) pour calculer les propriétés de transport, et les propriétés optiques, notamment des nanofils. Les phénomènes de piézo-électricité (production d'un champ électrique à cause de contraintes mécaniques), d'émissions de lumière peuvent également être traités, en prenant en compte la nature et la morphologie des nanofils. Tout comme dans le cas de BigDFT, un travail important d'algorithmique a permis de diminuer considérablement les temps de calcul sur un processeur, puis sur des machines massivement parallèles. Actuellement, le code TB_Sim est porté sur carte graphique, avec un soutien apporté par un projet du programme nanosimulation.

Pour les modèles multi-échelles, le CEA/LITEN a développé un code (Memephys), multi-physique, multi-échelle, rassemblant des briques numériques allant de données issues de l'*ab initio* à la description des phénomènes de diffusion de la matière et de dégradation des matériaux. Le développement de tels codes requiert un effort soutenu sur plusieurs années par une équipe de taille suffisante (plusieurs hommes.ans / an).

En structurant son effort dans le domaine des nanosciences, le CEA souhaite préparer ses équipes aux challenges du calcul intensif, dans une perspective de maintien de leur compétitivité au tout meilleur niveau international, et développer les outils numériques requis par la conduite de ses programmes en nanosciences et nanotechnologies.

Au stade actuel, la nécessité de coupler cet effort au réseau des maisons de la simulation, et aux autres acteurs nationaux, est identifié, et fait l'objet d'actions spécifiques et croissantes, en lien par exemple avec la Maison de la Simulation (Saclay), la Maison de la Modélisation (MaiMoSine, Grenoble), ou des équipes partenaires (CNRS, INRIA, Universités).

13.2. Activités à l'INRIA pour le calcul haute performance

Le calcul intensif est l'un des axes de recherche majeurs de l'INRIA, puisqu'il concerne explicitement au moins deux des sept priorités du plan stratégique 2008-2012 : « Modélisation, simulation et optimisation de systèmes complexes » et « Ingénierie numérique ». Les autres priorités « Programmer, Communiquer et Interagir » ont également un rôle à jouer vis-à-vis du calcul intensif par la mise au point de nouveaux modèles de programmation, l'étude des réseaux de communications performants, et la visualisation de grands volumes de données. On retrouve en fait le calcul intensif dans l'ensemble des thèmes de recherche, l'INRIA étant ainsi un des lieux où informaticiens, algorithmiciens et mathématiciens appliqués se côtoient, ce qui a permis de développer des actions à l'interface de ces domaines. Ainsi, les équipes de l'INRIA peuvent attaquer les problèmes du calcul intensif dans leur globalité, depuis la conception et l'analyse de nouveaux schémas numériques, en passant par les algorithmes de résolution algébriques, en allant jusqu'à l'étude des architectures sur lesquelles les codes ainsi construits seront mis en œuvre, sans oublier les outils de pré- et post-traitement. Un exemple particulièrement important pour les futures architectures et applications de type Exascale concerne la tolérance aux pannes. Plusieurs équipes travaillent sur cette question à différents niveaux.

Pour coordonner l'ensemble de ses activités méthodologiques et applicatives concernant la simulation numérique et leur donner une meilleure visibilité, l'INRIA lance une Action d'Envergure Nationale intitulée « *Very high performance computing for computational sciences* » qui devrait débuter courant 2011 et qui regroupera l'ensemble des équipes concernées par ce sujet. Si une douzaine d'équipes consacrent l'essentiel de leur activité à divers aspects du calcul haute performance, et formeront le cœur de l'AEN, une équipe de l'Institut sur 5 est effectivement concernée. Cette Action permettra à l'Institut de mieux mobiliser l'ensemble des compétences pluridisciplinaires nécessaires pour attaquer et résoudre les problèmes de passage à l'échelle qui vont se poser à l'approche de l'Exascale. Elle sera structurée autour de quelques grands « défis applicatifs » s'appuyant sur des partenariats scientifiques avec des acteurs industriels tels que l'ANDRA, le BRGM, le CEA Cadarache, DASSAULT et EDF et qui mobiliseront des équipes aux compétences variées. L'INRIA a poursuivi les autres actions qui marquent son engagement dans le calcul à grande échelle et qui ont déjà été évoquées dans le rapport précédent : les Actions d'Envergure Nationale *Fusion* (modélisation numérique et logiciels de simulation pour la fusion, en lien avec ITER) et *Hemera*, qui vise à étendre les expériences autour de la plateforme Grid'5000.

Parmi les événements marquants de 2010, le premier prix du Prix Bull Joseph Fourier 2010 a été décerné à Dimitri Komatitsch (équipe *Magique3D*, associée à l'INRIA) pour ses travaux dans la parallélisation de codes qui permettent de mieux prédire les effets des tremblements de terre et de leurs répliques. Il est également notable que des équipes de l'INRIA participent à 2 des 6 projets retenus dans le cadre de l'appel « Exascale » du G8 concernant la simulation du climat et la simulation des séismes.

L'année 2010 a vu la création d'un *laboratoire commun* avec le CERFACS, centré sur les algorithmes parallèles hautement scalables pour les simulations numériques frontalières. Les premiers sujets concernent l'algèbre linéaire creuse axée sur les solveurs hybrides où les 2 partenaires ont de grandes compétences et des applications tout d'abord en physique des matériaux puis en CFD et en climatologie. Le laboratoire commun avec le NCSA a atteint

sa vitesse de croisière, avec l'organisation de 2 workshops, et la participation de ses membres à plusieurs événements importants. Les thèmes de recherche portent sur l'optimisation de bibliothèques numériques, sur la tolérance aux pannes, et sur les nouveaux modèles de programmation. L'INRIA participe également aux forums sur l'Exascale (*International Exascale Software Roadmap* et *European Exascale Software Initiative*).

L'INRIA a poursuivi ses partenariats stratégiques avec des acteurs industriels importants du secteur : Bull pour la conception d'architecture, EDF et TOTAL pour les défis applicatifs. En ce qui concerne les PME, l'INRIA, GENCI et OSEO ont lancé l'initiative « *HPC-PME* », dans le cadre du plan France Numérique 2012. Le but de cette initiative (menée en collaboration avec 4 pôles de compétitivité) est de développer l'accès des PME au calcul intensif au travers de projets d'innovation générateurs de compétitivité. L'enjeu est d'amener des PME à aborder la question du calcul intensif, à mobiliser les acteurs du calcul intensif à même de les aider, puis à construire leur projet de R&D à proprement parler dans une dernière phase. Enfin, le programme leur donnera accès à des moyens de calcul pendant la durée du projet.

Comme les années précédentes, des équipes de l'INRIA figurent dans la moitié des dossiers retenus pour l'édition 2010 du programme Cosinus de l'ANR.

Enfin, l'INRIA est l'un des partenaires de la Maison de la Simulation.

13.3. Actions Calcul à l'IDRIS

L'IDRIS est actuellement équipé de trois supercalculateurs :

- Une machine massivement parallèle IBM Blue-Gene/P de 40960 cœurs (10240 noeuds de 4 cœurs) installée au début de 2008
- Une machine parallèle à noeuds larges IBM Power 6 de 3584 processeurs (112 noeuds de 32 processeurs) installée à la mi-2008
- Une machine vectorielle NEC SX-8 de 80 processeurs (10 noeuds de 8 processeurs) installée en 2006

Les ressources de l'IDRIS sont fortement sollicitées. Lors de la première campagne d'allocation de ressources ont été allouées après arbitrages :

- 31 millions d'heures sur le Power 6 pour une disponibilité de 22,5 millions. Pour limiter la sur allocations, quelques projets ont été partiellement transférés au CINES.
- 188 millions d'heures sur la machine Blue-Gene pour une disponibilité de 248 millions d'heures (sur quota national et hors heures réservées aux projets européens DECI), certains projets ayant été contingentés pour permettre d'allouer lors de la seconde session d'été des ressources à de nouveaux projets et des ressources complémentaires à d'autres projets
- 0,48 million d'heures pour une disponibilité de 0,51 million sur la machine NEC.

En fonction des allocations effectuées lors de la première session, aucune allocation nouvelle ne sera attribuée lors de la seconde session sur les machines NEC et Power6. Sur la machine Blue Gene, 60 millions d'heures étaient donc disponibles pour la seconde session. 120 millions ont été demandées et les arbitrages seront rendus dans le courant du mois de juin.

Environ 370 projets scientifiques, toutes disciplines confondues, utilisent les ressources de l'IDRIS pour un total d'environ 1000 utilisateurs différents. Les heures de calcul disponibles sont donc intégralement allouées.

L'utilisation réelle dépend bien sûr des utilisateurs et du rythme d'avancement de leurs projets. Même si un mécanisme d'incitation à une consommation régulière des heures attribuées à été mis en place, une consommation uniforme n'est bien sûr pas constatée. Sur les quatre premiers mois de l'année, les taux d'utilisation sont les suivants : 65,3 % sur la machine NEC, 73,1 % sur la machine Power 6, 75 % sur la machine Blue-Gené.

Support aux utilisateurs et formation à l'IDRIS

Un support avancé, pouvant aller de quelques jours à quelques mois, est proposé aux porteurs de projets qui ont une demande conséquente d'assistance, notamment pour l'optimisation et l'augmentation de l'extensibilité de leurs applications. Cela concerne l'ensemble de nos calculateurs et tous les aspects envisageables.

Des actions particulières sont toutefois menées sur les nouveaux projets soumis sur la Blue-Gené, pour augmenter leurs performances et notamment leur extensibilité en nombre de cœurs, raison d'être de cette architecture de machine, et pour favoriser leur utilisation en mode dit « de production » qui permet aux applications de disposer de ressources de calcul conséquentes après avoir démontré leur efficacité.

Outre les cours proposés depuis de nombreuses années (Fortran 95 et C, MPI et OpenMP), de nouvelles formations sont proposées depuis 2010 :

- un nouveau cours sur la programmation hybride (MPI + OpenMP), qui est et sera l'une des clés pour utiliser efficacement les machines massivement parallèles "many-cores"
- un nouveau cours consacré aux apports de la norme Fortran 2003
- quatre modules, chacun de deux jours, autour de l'utilisation du C++ dans le développement de codes scientifiques

Implication dans les projets

Depuis 10 ans, l'IDRIS est fortement impliqué dans les projets européens du domaine du HPC (EuroGrid, DEISA, HPC-Europa, DEISA2, PRACE, PRACE-1IP). Après avoir été responsable du projet DEISA (2004-2008), l'IDRIS a été l'un des partenaires majeurs du projet DEISA2 (2008-2011) qui vient de se terminer fin avril

Après sa participation au projet PRACE ("Preparatory Phase") de 2008 à 2010, l'IDRIS est actuellement l'un des partenaires français du projet PRACE-1IP, impliqué d'une part dans les activités de définition et de déploiement des services sur l'infrastructure répartie et d'autre part dans les activités de développement applicatif (notamment sur les aspects extensibilité et "hyper-scaling" des applications) et d'expérimentations de nouvelles technologies (nouveaux langages de programmation, utilisation d'accélérateurs, optimisation d'entrées-sorties).

A partir du mois de septembre, l'IDRIS sera fortement impliqué dans le nouveau projet PRACE-2IP (avec environ 65 PMs sur les deux années du projet), visant à l'intégration

dans l'infrastructure répartie des sites européens dits Tier-1, à nouveau dans les aspects définition et déploiement de services, support des applications et expérimentations et veille technologique.

Perspectives

Depuis la mi-2010 en particulier, et jusqu'à l'été prochain, le grand chantier mené par l'IDRIS, sous le contrôle des services centraux du CNRS et de la délégation régionale dont nous dépendons, concerne le plus que doublement de ses capacités d'infrastructure, passant de 1 à 2,5 MW électriques pour ses futurs usages informatiques (hors climatisation). Ces travaux d'infrastructure permettront à l'IDRIS d'héberger à l'avenir des machines de classe pétaflopique, en fonction des projets de renouvellement de ses calculateurs, prévus l'an prochain.

Il est prévu une forte synergie entre l'IDRIS et la Maison de la simulation (MdS) en cours de constitution, dont l'un des sites de sa bi-localisation sera l'IDRIS. Outre l'hébergement prévu de la machine de développement que la MdS va acquérir dans le cadre d'un projet Equipex, la contribution de l'IDRIS consistera en la gestion de cette machine et surtout dans sa contribution aux actions de formation de la MdS (cette année, deux des trois semaines de l'école d'été organisée par la MdS seront assurées par l'IDRIS) et au support applicatif sur projets qui sera effectué à la MdS.

13.4. Actions calcul au CINES

Du point de vue du calcul à haute performance le CINES dispose à ce jour de deux environnements accessibles via le DARI :

- La machine parallèle Jade (SGI Altix ICE 8200 EX) de 267 Teraflops crête, constituée de 2880 nœuds interconnectés par un réseau Infiniband.
- Une machine ANAKIN (IBM) composée de 5 nœuds P575 intégrant chacun 16 processeurs Power5+ (à 1.9 GHz) disposant chacun de 32 GigaOctets de mémoire et interconnectés par un réseau Infiniband.

Nouvelles infrastructures. Le début de l'année 2010 a été marqué par la fin des travaux de réalisation du nouveau pôle énergétique qui peut supporter à ce jour des équipements électriques et de climatisation produisant jusqu'à 6 MWatts. Cette infrastructure a autorisé le passage en janvier 2010 de la ligne électrique ERDF de 1,2 à 2,6 MWatts, sécurisée en partie par un groupe électrogène, et a ainsi permis l'installation et la mise en production de l'extension du supercalculateur Jade.

Grands challenges et extension de Jade. La configuration du supercalculateur SGI installée en 2008 a été complétée par 21 nouvelles armoires à base de processeurs Nehalem quadri-cœurs (soit 10752 cœurs) représentant une augmentation de puissance de 120 Tflops. Cette extension livrée mi février 2010 et en exploitation dès le 10 mars, a été dédiée pendant 3 mois, au passage de grands challenges scientifiques. Les résultats ont donné lieu à une journée scientifique le 1^{er} octobre 2010 et ont fait l'objet d'une publication dans un numéro spécial de la Gazette du CINES.

Pour la première fois les grands challenges ont été ouverts à des partenaires européens : Italiens (CINECA), Allemands (LRZ), Irlandais (ICHEC) et à des projets de recherche

privée. Ainsi Véolia a pu déposer un brevet suite aux simulations réalisées dans ce cadre sur la « Modélisation LES d'une cuve agitée ». Cette ouverture a été poursuivie puisque des heures (en nombre limité) ont été accordées à la société Arcelor Mittal, sur demande de GENCI et après accord de la tutelle.

Doublement de la puissance de calcul. Les ressources disponibles sur Jade ont été très rapidement accaparées par les chercheurs et le taux de charge moyen mensuel de l'ensemble a dépassé les 90% en fin d'année, tendance confirmée en 2011 qui se traduit par de fortes contentions entre les travaux et des temps d'attente de plus en plus longs. Au-delà de 80% les effets de surcharge sont sensibles pour les utilisateurs.

Environ 150 millions d'heures ont été consommées sur Jade en 2010 par un peu plus de 300 projets DARI et les grands challenges. La machine IBM a produit 350 000 heures.

Evolutions des environnements du calcul. Parallèlement les environnements du calcul ont évolué en cohérence avec l'augmentation de puissance et la volonté d'offrir les meilleurs services. Ainsi le cœur du réseau est passé à 10 Gigabits/s, l'espace disponible sur le serveur de fichiers a été porté à 500 To, et les plates-formes de pré et post traitement ont fait l'objet d'une attention particulière. Une collaboration a été initiée avec la société BULL pour mettre en place un service de visualisation à distance des résultats de simulations, elle a conduit à l'installation dans une première phase de deux serveurs BullX S6030 quadri sockets Nehalem octo-cœurs équipés de cartes Nvidia.

Dans le cadre d'une collaboration avec IBM sur les systèmes de fichiers parallèles et l'utilisation de techniques d'économie énergétique disponibles sur les nouveaux processeurs Power 7, 4 nœuds P755 quadri-processeurs octo-cœurs ont été installés.

Le DARI. Rappelons que le CINES développe et héberge l'application nationale en ligne DARI, de revue des projets calcul. Les fonctionnalités évoluent tous les ans pour prendre en compte les demandes des présidents des Comités Thématiques et les remarques de des différents autres intervenants (Centres de calcul, GENCI, utilisateurs).

Le CINES dans les projets HPC Européens. Au niveau européen le Centre est impliqué dans plusieurs initiatives. En tant que Tier1 partenaire de GENCI il participe activement dans les différentes étapes de PRACE. Il est notamment le correspondant (BCO) au niveau du consortium pour les codes AVBP et SPECfM3D et il héberge des plates-formes prototypes dans le cadre de la veille technologique de PRACE. Il est également le partenaire opérationnel de GENCI dans HPC Europa2 (4,5 millions d'heures distribuées en 2010) : accueil au sein de laboratoires hôtes de chercheurs en provenance d'autres pays partenaires pour des projets mettant en œuvre des techniques de calcul intensif avec attribution d'heures de calcul sur le centre national du pays d'accueil.

Enfin le CINES développe et héberge pour le compte de l'entité juridique PRACE AISBL l'application en ligne qui gère le processus de revue de projets européens : « Prace Peer Review ».

Un service d'archivage pérenne agréé. A côté du calcul, l'archivage pérenne de données électroniques, qu'il faut distinguer de la sauvegarde, constitue la deuxième mission du CINES. Cette mission qui vise à conserver pour le long terme l'information en garantissant son accessibilité et son intelligibilité, adresse tous les types d'archives publiques numériques : patrimoniales, scientifiques et administratives, et s'appuie sur une équipe de spécialistes, comprenant un archiviste.

Le CINES dispose depuis 2008 d'une plate-forme d'archivage (PAC) et des services

associés ainsi que des procédures d'assurance qualité dans ce domaine.

De nouvelles archives opérationnelles. Déjà centre officiel d'archivage des thèses électroniques et des revues en sciences humaines et sociales numérisées du portail Persée (www.persee.fr), l'année 2010 a vu la mise en production de l'archivage sur le centre des données du CRDO (Centre de ressources pour la description de l'oral) membre du TGE Adonis et des archives ouvertes de HAL. Des projets avec l'Ecole Française d'Extrême Orient, l'Université Pierre et Marie Curie, les bibliothèques Cujas et Sainte Geneviève, etc. ont été programmés pour l'archivage de leurs corpus.

Archivage de données scientifiques. Du côté des données scientifiques le CINES propose une solution d'archivage intermédiaire en complément de l'archivage définitif. Il travaille notamment sur le projet (DOPACO) d'archivage de données de combustion et est partenaire de GEOSUD, labellisé équipement d'excellence, piloté par le Cemagref, pour ce qui concerne les données spatiales.

Le CINES organise des séminaires, des formations et offre son expertise pour sensibiliser les chercheurs à la problématique de la conservation à long terme des données scientifiques.

Une enquête a été lancée fin 2010 auprès des utilisateurs pour mesurer leur degré de satisfaction vis-à-vis des services rendus et déterminer les axes d'amélioration possibles.

Implication dans les projets européens

Participation à « DEISA/PRACE » Dans le cadre de la seconde phase d'implémentation de PRACE (PRACE-2IP) qui débute en septembre 2011 pour laquelle le CINES contribue à hauteur de 60 PMs, DEISA sera absorbé dans PRACE et le CINES devient partenaire de DEISA, la machine Jade fait partie des ressources disponibles. Ceci nécessite le déploiement d'un ensemble de services de grille et l'intégration du centre dans le réseau à 10 Gigabits/s de DEISA.

Prototype PRACE-1IP : IO pour l'échelle multipétaflopique Dans le cadre de PRACE-1IP le CEA et le CINES ont soumis un projet commun « Exascale-IO » qui vise la mise en place d'un prototype permettant d'étudier la gestion efficace des entrées/sorties à la mesure des capacités des futures machines multi-pétaflopiques et exaflopiques.

Eudat Le CINES est partenaire du projet européen Eudat, (Data infrastructure for e Science to provide data services to the European research community) dont le démarrage devrait coïncider avec le début d'année 2012. Ce projet, regroupant des centres de calcul et les principales communautés scientifiques structurées, vise à fournir un service paneuropéen de partage et de préservation de données scientifiques pour répondre au raz de marée de données prévu dans les prochaines années.

Prace Peer Review L'application intégrera dans les années qui viennent les statistiques d'utilisation des ressources et la gestion fine des projets.

Des connexions Renater à 10 Gigabits/s

Afin de répondre aux exigences de débit de DEISA et du projet Eudat, ainsi qu'à la nécessité de bande passante entre le CINES et le TGCC liée à la mise en œuvre du prototype « Exascale-IO » le CINES a demandé à Renater de disposer en 2011 de connexions à 10 Gigabits/s.

Quelques perspectives

Nouvelle salle machine. Le CINES a programmé la construction d'une nouvelle salle machine d'environ 500 m², disponible en 2013, permettant de disposer des espaces et des puissances énergétiques nécessaires pour accueillir les futurs équipements de calcul intensif du GENCI et de stockage massif. Ce projet s'accompagne de la mise en service fin 2012 d'une ligne ERDF dédiée de 10 MWatts et de l'installation de nouveaux équipements énergétiques et de climatisation dont la puissance sera ajustée en fonction de la configuration visée et des évolutions technologiques.

Nouvelle architecture des espaces de stockage. Afin de répondre au déferlement attendu des données produites par les différents moyens d'observation et de simulation le CINES prévoit de restructurer ses espaces de données pour aboutir à une architecture adaptée aux nouvelles exigences en 2013. Ceci devrait se traduire par la mise en place de PetaOctets de disques et l'accroissement des capacités de la robotique : passage à 2 PetaOctets en 2011, puis 4 PetaOctets.

Déploiement des services vers les Tier0. Un des objectif du CINES est d'amener les codes tournant aujourd'hui sur un nombre limité de cœurs à franchir une nouvelle étape pour être éligible à l'échelle pétaflopique, notamment pour permettre aux chercheurs français d'être de bons candidats à l'utilisation des machines Tier0 européennes, en particulier CURIE. Cela passe par la mise en œuvre de services de coopération entre le CINES et les Tier0 concernés.

Recommandation :

Ainsi le CINES joue un rôle majeur national pour les utilisateurs du HPC. Il a aussi le soutien de l'université de Montpellier et de la région. Par ailleurs les ordinateurs du CINES sont des machines généralistes. Enfin tous les utilisateurs semblent satisfaits des services du CINES.

A l'instar de l'Allemagne qui a 3 centres de calcul et en opposition au modèle britannique (une seule grosse machine), la France se doit aussi de garder ses trois centres de calcul car ils ont chacun leurs spécificités administratives, géographiques et scientifiques.

14. Quelques grands thèmes scientifiques

Fin 2010 et début 2011 le CSCI a auditionné quelques acteurs de plusieurs thèmes scientifiques. Les résumés, conclusions et recommandations sont présentés dans ce chapitre.

14.1. Chimie et Nanotechnologies

La Chimie moléculaire

Les équations fondamentales de la chimie sont les équations de Schroedinger ; toutefois leur dimension étant égale au nombre de particules chargées du système, elles ne sont résolues que très rarement ; moyennant quelques hypothèses de symétrie les équations de Hartree-Fock sont obtenues ou encore une équation pour la densité électronique avec l'approximation DFT ou même la Dynamique Moléculaire si on ne s'intéresse qu'à la stabilité des molécules.

L'apport du CS est fondamental pour comprendre les réactions et ultérieurement les contrôler ou pour abaisser les seuils électroniques des réactions. On peut aussi étudier les événements rares (taux des réactions lorsque les seuils électroniques sont trop élevés par exemple). En passant aux équations dynamiques on pourra étudier les temps de réaction. On diminue aussi les coûts et le temps des études d'un produit ce qui permet d'en tester un plus grand nombre.

Les applications les plus importantes actuellement sont

- Pour les moteurs : l'étude des processus catalytiques, l'électrolyse et les piles à combustible
- Pour les énergies renouvelables : les réactions dans la biomasse pour obtenir les composants désirés, L'absorption des photons par les cellules photovoltaïques, L'absorption de l'hydrogène pour le stockage, par exemple par les agglomérats de platine
- Pour les nouveaux matériaux : Les matériaux auto-réparateurs, colles, interfaces..., Les structures cristallines (fissures, métallurgie, endommagement...), La tenue au bombardement neutronique (ITER)
- Pour les médicaments : stabilité des nouvelles molécules, étude in situ de certains radicaux. Processus de fabrication.

L'augmentation de la puissance de calcul n'est pas le seul ingrédient nécessaire aux progrès de la chimie moléculaire. Il faut aussi améliorer les modèles, développer des modèles hybrides, comme par exemple des systèmes Hartree-Fock/DFT. Il faut aussi immerger les systèmes dans leur environnement réel et donc coupler avec les équations de la mécanique des fluides par exemple ; enfin comme dans les autres domaines du CS il faut optimiser le parallélisme.

Nanotechnologies

Dans un certain nombre de thématiques en nanotechnologies, il apparaît que seules les méthodes de simulation atomistique sont à même d'apporter les réponses quantitatives souhaitées sur les propriétés physiques ou chimiques des nano-objets et nanomatériaux à la base des dispositifs innovants (nanoélectronique et nanoélectronique du futur (« beyond CMOS », « more than Moore ») : transistors ultimes, nano-capteurs, photo-commutateurs, mémoires moléculaires etc, et pour les nouvelles technologies de l'énergie : cellules photovoltaïques, nano-actionneurs, convertisseurs d'énergie, piles à combustible, batteries, etc. ; enfin des techniques de nanocaractérisation telles les spectroscopies électroniques, etc. Encore peu présente, l'interface avec la biologie est un axe à explorer rapidement.

Pour ce qui concerne les défis scientifiques on peut citer la simulation des systèmes ouverts jusqu'à quelques centaines de milliers d'atomes, une description réaliste de la matière et du transport électronique dans les nano dispositifs, des simulations réalistes des états excités des électrons ainsi que des interactions avec les phonons et des corrélations électroniques, simulation des procédés.

Pour les domaines d'applications : électronique, électronique organique, photovoltaïque, thermoélectricité et catalyse pour les PEFMC bénéficieront des avancées en nano simulation.

Au cœur du dispositif on retrouve la nano-simulation et une problématique multi-échelle. De nombreux dispositifs, ou de nombreux problèmes physiques, trouvent leur source sur des phénomènes à l'échelle nanométrique, mais trouvent leur traduction pratique ou expérimentale à une échelle bien supérieure. Les piles à combustible, ou les batteries, constituent d'excellents exemples : pour décrire ces dispositifs, il faut prendre en compte une physico-chimie à l'échelle nanométrique (réaction chimique, évolution des particules de catalyseur), et des phénomènes comme le transport ionique, le transport de l'eau... à des échelles micro- ou millimétriques.

On arrive maintenant à avoir un enchaînement de simulations : Quantum Mécanique puis simulation atomistique puis grain grossier moléculaire jusqu'au continu.

A noter, une importante initiative de la NSF : Le Nano hub de Purdue University qui met à la disposition de 130 utilisateurs les outils de nano-simulation. A noter aussi que ce centre se retrouve à collecter toutes les données du monde entier, ce qui lui donne une position stratégique enviable.

Il y aura en nano-simulation une révolution similaire à la révolution CAO des années quatre-vingt et il faudra là aussi réussir l'intégration des codes. On prévoit par exemple de manipuler les molécules comme des pièces de montage automobile.

L'Europe est en tête sur le « more and Moore's » c'est-à-dire les MEMS.

La communauté est formée de physiciens, chimistes et informaticiens ; elle est fédérée autour du réseau PSICA. Beaucoup sont seulement utilisateurs des logiciels et ne participent pas à leurs développements. Les plus connus sont pour la chimie ab-initio, Gaussian (commercial), ABINIT, PWSCF. La plus part sont en fortran+python.

Quelques outils spécifiques sont malheureusement typiques de la situation générale, caractérisée par un manque de personnel spécialisé. Ainsi un code multiphysique (200K lignes, transport+Poisson) développé par une seule personne et dont l'équipe dépend, oblige cet excellent scientifique à des tâches de maintenance usantes.

BigDFT (voir le paragraphe au sujet du programme « nanosimulation » du CEA), est un outil développé au CEA qui a reçu le prix Joseph Fourier et que le CEA utilise notamment pour les piles à combustible. La parallélisation repose sur le parallélisme par orbitales mais l'équipe s'est aperçu que MPI devait être adapté au delà de 3000 processeurs. Un superbe effort de développement dont un report de certains calculs sur GPU a permis de tourner sur plusieurs milliers de processeurs avec une efficacité de 90%.

Pour faire la dynamique et la croissance il faut faire des milliers de calcul. On alors besoin de bases de données (et de fouille de données) et de poursuivre l'effort de scalabilité du code pour les générations futures de machines. Mais pour ce faire il manque de scientifiques ayant une formation pluri disciplinaires.

Conclusion et recommandations

Les capacités de calcul ont décuplé mais la France reste en deçà des ressources disponibles aux USA. Ceux-ci peuvent être plus exhaustifs. Les applications sont motrices il faut donc que les chercheurs s'y intéressent ce qui oblige à une activité quasi-commerciale. Mais inévitablement il y a des compagnies middleware qui récupèrent les codes académiques (ex Sciencenomics, material-design, accelrys) et les enrobent. A noter que les subventions pour le développement sont très aléatoires ce qui rend assez difficile une action à long terme. Les développements de méthodes et leurs implémentations ont jusque là été financés par le programme COSINUS de l'ANR. On s'attend à une concurrence de la Chine.

En chimie pour les nano technologies, les équipes semblent aussi manquer de moyens. Le CECAM pourrait peut être centraliser les bases de données.

On constate donc que les équipes qui développent des logiciels de chimie computationnelle ont des difficultés de financement alors que les ordinateurs exaflopiques de demain exigeront des adaptations difficiles pour la parallélisation des codes. Une pluie d'applications est prévue, il faut que les équipes et les codes soient prêts !

14.2. La simulation des biomacromolécules

Apports de la Simulation Moléculaire dans les Sciences de la Vie

L'objectif de la simulation moléculaire est de comprendre, puis de prédire, comment les biomacromolécules (protéines, ADN, ARN, polysaccharides, etc.) fonctionnent et interagissent, entre elles ou avec leur milieu (solvant, petites biomolécules, médicaments, toxines, ...). Typiquement les simulations par dynamique newtonienne impliquent une centaine de milliers d'atomes et suivent l'évolution du système pour des centaines de nanosecondes (avec un pas d'intégration de l'ordre de la femto seconde). Les enjeux techniques majeurs dans ce domaine sont d'augmenter la taille des systèmes (vers les millions d'atomes), le temps des simulations (vers les millisecondes), la précision des calculs (vers les kcal/mol) et, pour plusieurs applications, d'améliorer l'efficacité de l'échantillonnage conformationnel (sur des surfaces d'énergie libre accidentées dans des espaces de milliers, voir de centaines de milliers de dimensions).

La plupart des simulations se limitent à la mécanique classique qui, à l'aide des "champs de force" bien paramétrés, est capable de décrire correctement les changements de conformation et les interactions moléculaires. Quand la chimie intervient (formation ou cassure de liaisons chimiques, transferts d'électron ou de proton, ...) il est possible d'exploiter des méthodes hybrides classique-quantique, en limitant le traitement quantique

à la partie critique du système, ou de simuler la dynamique de façon purement quantique (comme dans la méthode Car-Parrinello) avec un surcoût computationnel significatif.

Développements méthodologiques

Le raffinement des méthodes de simulation moléculaire continue sur plusieurs fronts. Pour atteindre plus de précision, on ajoute de nouveaux termes aux champs de force, par exemple pour tenir compte des effets de polarisation, ou pour améliorer la représentation de la distribution électronique. En parallèle avec le travail sur les champs de force dits "classiques", constitués d'un ensemble de termes ayant un sens physique (électrostatique, van der Waals, répulsion d'échange, etc.), on voit l'apparition de plus en plus de champs de force dits "statistiques" ou "*knowledge-based*". Ces approches exploitent l'information contenue dans les structures macromoléculaires expérimentales et traduisent des probabilités d'occurrence (par exemple des distances entre acides aminés au sein des protéines) en des énergies par la procédure d'inversion de Boltzmann. De tels champs de force sont souvent associés aux représentations gros-grains qui remplacent des groupes d'atomes avec des pseudoatomes pour réduire le nombre de particules et le nombre de degrés de liberté à traiter. Ces approches sont prometteuses pour simuler le repliement des protéines, l'agrégation des peptides et l'assemblage des "machines" macromoléculaires.

La précision des calculs est particulièrement importante dans la modélisation des interactions, qu'il s'agisse de l'interaction des médicaments avec leur cible macromoléculaire ou l'interaction des macromolécules entre elles. Dans tous ces cas, il est nécessaire de pouvoir calculer des énergies libres d'interaction à la kcal/mol près pour pouvoir ensuite prédire des constantes d'association fiables. Ce problème implique non seulement des champs de force de bonne qualité, mais aussi des moyens d'échantillonnage efficaces. Les méthodes impliquant des ensembles généralisés comme la REMD ("*replica exchange molecular dynamics*") et la métadynamique sont particulièrement utiles pour sonder des espaces conformationnels complexes.

Exploitation des moyens de calcul

Les simulations liées aux sciences de la vie utilisent une proportion significative des ressources fournies par les machines de tier-1 dans le monde. Sur ces machines, les efforts pour améliorer les algorithmes de la dynamique moléculaires permettent de paralléliser les simulations sur des centaines de cœurs pour des systèmes de taille moyenne, et sur un millier de cœurs pour les plus grands systèmes. Les logiciels mis au point par les groupes de Klaus Schulten¹³ aux États-Unis et d'Erik Lindahl¹⁴ en Suède sont en tête dans ce domaine. Les méthodes dites d'ensemble généralisé (comme la REMD ou la métadynamique), qui nécessitent de multiples simulations couplées, sont, quant à elles, bien adaptées aux machines de tier-0.

Les machines hybrides CPU/GPU sont aussi intéressantes pour des simulations de la dynamique ou des calculs d'énergie libre, particulièrement quand ils sont associés à des modèles de solvant continu de type Poisson-Boltzmann. Il existe déjà plusieurs logiciels et bibliothèques spécialisées (comme OpenMM du groupe de Vijay Pande¹⁵ aux États-Unis,) adaptés à ce type de système.

Dans le cas des problèmes nécessitant un très grand nombre de simulations indépendantes, comme le criblage de médicaments, certaines approches pour replier les protéines, ou la prédiction des interactions protéine-protéine, il est possible d'exploiter très

¹³ NAMD, <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>

¹⁴ GROMACS, <http://www.gromacs.org/>

¹⁵ <https://simtk.org/home/openmm>

efficacement les grilles d'ordinateurs. Les projets HCMD2¹⁶ et folding@home¹⁷ sont de bons exemples.

Finalement, le développement de la machine Anton (D.E. Shaw Research, USA) représente un pas très important pour la simulation des biomacromolécules. Anton exploite 512 processeurs ASIC créés spécifiquement pour effectuer des simulations de dynamique moléculaire. Associée au logiciel DESMOND, créé également par le groupe de David Shaw, elle permet de réduire le temps de calcul pour la dynamique moléculaire par deux ordres de grandeur. Ainsi, il a été possible de simuler le repliement de petites protéines et d'effectuer la première simulation de la dynamique d'une protéine pendant une milliseconde. Une machine Anton I a été mise à la disposition du centre NRBSC Pittsburgh¹⁸, et, depuis avril 2011, elle est exploitée par un nombre limité de chercheurs américains (dans certains cas avec des collaborateurs européens, mais sans leur fournir un accès direct à la machine). Le groupe de David Shaw dispose, quant à elle, de plusieurs machines Anton I et va bientôt terminer la machine Anton II. David Shaw ne semble pas être intéressé par la vente de ces ordinateurs. Est-ce que la simulation des systèmes biologiques en Europe peut rester compétitive face à de tels moyens de calcul ? Une solution possible viendra du Japon où les chercheurs de Riken développent une nouvelle version de la machine MD Grape, également à base de processeurs ASIC, qui sera potentiellement aussi performante qu'Anton.

En ce qui concerne l'ère Exaflop, il faut dire que, pour le moment, l'architecture envisagée par les constructeurs semble très peu adaptée au domaine de la simulation des biosystèmes. Étant donné l'importance sociétale de ce domaine, il est important que ses besoins en calcul, très significatifs, soient pris en compte dès maintenant.

Applications et enjeux sociétaux

Les applications des simulations moléculaires sont multiples et de plus en plus indispensables, aux chercheurs comme aux industriels.

D'abord, la simulation joue un rôle indispensable dans l'obtention de l'ensemble des structures macromoléculaires. Dans le cas des méthodes expérimentales à haute résolution, comme la diffraction des rayons X ou la spectroscopie RMN, la simulation est une partie intégrale de la traduction des données brutes en structures. Avec des méthodes de basse résolution, comme la tomographie électronique, les simulations sont la seule façon de pouvoir construire des modèles. Elles permettent d'exploiter un faisceau d'informations expérimentales très diverses pour assembler des complexes qui peuvent contenir des centaines de macromolécules. Le travail effectué sur les récepteurs nucléaires¹⁹ est un bon exemple des possibilités actuelles.

La simulation fournit aussi des outils pour prédire la structure des macromolécules (notamment des protéines) à partir des structures d'homologues et pour manipuler leurs propriétés, par exemple, pour modifier leurs interactions ou leur stabilité²⁰. Un enjeu majeur dans ce domaine sera le traitement des protéines intrinsèquement non structurées qui peuvent néanmoins avoir des interactions très spécifiques et qui sont très répandues au sein des organismes évolués (dont les êtres humains).

Dans le domaine pharmacologique, les simulations moléculaires jouent un rôle important dans la conception de nouveaux médicaments et l'étude de leurs interactions avec des cibles macromoléculaires. L'emploi des logiciels de "docking" (d'amarrage),

¹⁶ <http://www.worldcommunitygrid.org/research/hcmd2/overview.do>

¹⁷ <http://folding.stanford.edu/>

¹⁸ <http://www.nrbsc.org/resources/>

¹⁹ <http://www.cmb.usc.edu/people/alber/Research.html>

²⁰ <http://rosettadesign.med.unc.edu/>

constitue une des premières étapes de la recherche de nouvelles molécules. Les simulations jouent également un rôle dans l'identification de nouvelles cibles potentielles et dans la compréhension des mécanismes moléculaires qui sous-tendent des pathologies majeures qui confrontent notre société aujourd'hui (infections virales, cancer, maladies neurodégénératives, ...).

Un nouveau domaine d'application est la prédiction des effets toxiques. Les règlements dans ce secteur deviennent de plus en plus stricts, non seulement pour de nouveaux médicaments, mais aussi pour l'ensemble des nouvelles molécules chimiques susceptibles d'entrer en contact avec les humains ou les animaux. En même temps, les tests sur les animaux sont de plus en plus contrôlés, et seront bientôt interdits dans le domaine des cosmétiques²¹. Ainsi, il devient important de pouvoir prédire les interactions potentielles de petites molécules au sein des cellules de divers organes en tenant compte de la variété d'espèces macromoléculaires présentes et de l'hétérogénéité des milieux intracellulaire et extracellulaire. Les premières simulations du cytoplasme bactérien, comportant un millier de protéines, sont particulièrement importantes dans ce contexte.

Génomique

La direction des sciences du vivant du CEA soutient actuellement un projet de prédiction de telles structures (avec identification de leur fonction associée). Une première étape a consisté à employer massivement les moyens de calculs mis à disposition par GENCI au CEA afin de prédire les structures de protéines associées à des séquences dont la fonction est inconnue (ce qui est le cas pour 2/3 des génomes des organismes vivants actuellement connus), à l'aide d'algorithmes courants. Ce travail, qui a fait l'objet d'un Grand Challenge GENCI sur le calculateur TITANE, a permis d'identifier des séquences qui codent des protéines présentant des structures (motifs) géométriques similaires, et qui correspondent donc à des fonctions potentiellement proches. Ce travail novateur va maintenant être poursuivi en y intégrant des algorithmes de prédiction et de raffinement de structures plus performants (en particulier basés sur des simulations microscopiques du type dynamique moléculaire), algorithmes qui seront couplés à des outils d'analyse structure/fonction basés sur des comparaisons de motifs avec des structures de protéines connues (et répertoriées dans la base PDB). L'objectif technique est ici de pouvoir disposer d'un outil apte à tirer parti de la puissance de calculateurs de classe pétaflopique.

Conclusion et recommandations

Les outils de modélisation et de simulation sont indispensables dans le domaine des sciences de la vie. Ils jouent un rôle important dans la biochimie, la biologie structurale, la biotechnologie et la médecine. Il y a notamment une demande croissante de la part des industries chimiques et pharmacologiques qui ont besoin de remplacer des tests sur les animaux avec des simulations sur ordinateur (de toxicité ou d'efficacité pharmacologique).

En France, cette recherche souffre d'un nombre trop limité de chercheurs, et notamment du petit nombre de groupes de taille suffisante, pour rester compétitive dans la conception de nouvelles méthodologies. Comme dans tous les domaines interdisciplinaires, le recrutement de jeunes chercheurs est difficile. Il connaît également des lacunes en matière de formation. L'absence d'accès aux machines aussi performantes qu'Anton pose un nouveau, et grave, problème pour l'ensemble des chercheurs dans ce domaine en Europe.

²¹ http://ec.europa.eu/enterprise/epaa/index_en.htm

14.3. Astrophysique

La recherche en astrophysique aujourd'hui vit une évolution très rapide, suite à la révolution des technologies des télescopes et des détecteurs, de la puissance de calcul, et des méga-infrastructures. La taille et la complexité des données astronomiques devenant disponibles rendent nécessaire des simulations numériques toujours plus performantes. L'observation elle-même requiert des supers ordinateurs (comme par exemple le radiotélescope européen LOFAR, dont une station est à Nancay, en Sologne) et les instruments considérés actuellement produiront chacun de l'ordre du Téraoctet de données par seconde. Les astronomes ont compris depuis longtemps l'importance des bases de données d'observation. Mais celles-ci avaient jusqu'à maintenant la particularité d'être relativement compactes, à l'inverse de ces nouveaux instruments et des résultats de calcul qui eux prennent une place énorme et pour lesquels l'organisation de l'archivage reste à faire.

Nous renvoyons le lecteur au 2^{ème} rapport du CSCI (2009/2010) pour plus de détails et nous rappelons simplement ici que les problèmes abordés par la simulation comprennent :

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

La grande augmentation des moyens de simulation, et la complexité des problèmes traités modifient considérablement le travail théorique. Lorsqu'un domaine gagne en maturité, les codes utilisés ont tendance à devenir beaucoup plus complexes. Par exemple, il y a 30 ans un étudiant pouvait écrire un code compétitif de problème à N-corps en deux ou trois mois. Maintenant la situation actuelle est dominée par les codes qui ont été raffinés sur des années et utilisent une gamme des technologies développées sur plus de trois décennies. Par conséquent, un jeune chercheur (étudiant ou post doc) qui veut travailler sur la dynamique galactique téléchargera habituellement un code parmi une poignée de codes standard. La même situation s'applique dans l'hydrodynamique, ou la cosmologie (le nombre de grands codes publics est de l'ordre de la douzaine). Tandis que tout effort devrait être fait pour maintenir l'innovation vivante en favorisant le développement de codes entièrement nouveaux, nous devons réaliser que beaucoup de travail va être effectué avec un nombre restreint de codes employés couramment, qui sont les analogues théoriques des instruments d'observation importants. La vitalité du champ, et la santé des plus petits établissements, seront maintenues seulement si une infrastructure existe qui facilite et encourage l'accès ouvert aux codes standard, et encourage leur évolution continue. Les ordinateurs massivement parallèles, simulant les systèmes complexes dans 3D ou 6D, produisent de grands volumes de sorties, qui peuvent être seulement très partiellement caractérisées dans une publication. Par exemple, les simulations des grandes structures de matière noire couvrant une petite fraction d'univers, donnent lieu à une vaste base de données des halos noirs, que les collègues autour du monde peuvent analyser de différentes manières.

En référence à ces considérations, à l'énorme besoin en simulations, ressources de calcul, et moyens humains de développement, le panel d'Astronet a recommandé la création d'un ASL "Astrophysical Software Laboratory", pour encourager les équipes à développer de nouveaux logiciels ou d'implémenter les existants, et de distribuer largement les expertises, à la fois pour leur création et leur utilisation par la communauté.

Ce laboratoire sans mur pourrait financer les développements de logiciels, employer des doctorants, des post-docs, diffuser largement leur connaissance et leur utilisation par des réseaux de formation et ces codes seraient du modèle open-source. Voir les sites web : <http://astro-sim.org/> -- <http://ascl.net/> (Astrophysics Source Code Library), pour plus de détails.

Les auditions conduites par le CSCI en Mars 2011 nous ont convaincu du dynamisme scientifique de l'astrophysique et de l'importance de la simulation comme moyen d'investigation scientifique. Nous avons aussi auditionné les développements des observatoires virtuels.

Ceux-ci correspondent à la nouvelle ère qui s'ouvre pour l'astronomie d'observation: une ère dominée par les grands surveys ou les recherches profondes, avec la combinaison d'un grand nombre de longueurs d'onde ; les débits d'arrivée des données explosent. Les catalogues de milliards d'objets deviennent courants, les cartes du ciel de Planck, l'astrométrie de GAIA vont demander des puissances de calcul de plusieurs dizaines de Teraflops en continu, plus tard les grands instruments optiques comme le LSST (Large Synoptic Survey Telescope) ou radio (SKA, Square Kilometer Array), auxquels la France participe, demandera des puissances de calcul de centaines de Teraflops en continu, uniquement pour le traitement des données. Les nouveaux produits d'observation changent la manière de travailler de la communauté: beaucoup de travail est maintenant effectué par des collaborations d'un grand nombre d'instituts, le service d'observation devient standard, et les collègues autrefois isolés ont maintenant accès aux données de tout premier plan dans les archives. L'Observatoire virtuel (ou Virtual Observatory, VO) est un effort global, lancé en 2000, qui est conduit par ces développements. Il vise à donner à n'importe quel astronome l'accès à toutes les données d'astronomie dans le monde comme si elles étaient installées sur son ordinateur local. Une fois que cette vision a été réalisée, le nombre de personnes qui peuvent travailler à la frontière de l'astronomie en a été énormément augmenté, et des études multi-longueur d'onde sont beaucoup plus faciles. De plus, le VO ouvre l'accès aux données simulées, à la théorie (TVO, ou Theoretical VO).

La participation française à l'effort d'observatoire virtuel est coordonnée par l'Action Spécifique Observatoires Virtuel France (AS-OV)), qui a été créée en 2004 par l'INSU. Comme l'OV est placé sous crédits d'incitation de l'INSU/CNRS et du CNES, cet effort est réparti sur plusieurs laboratoires et observatoires. L'OV a des groupes de travail dans les secteurs de la spectroscopie, de la théorie, des déroulements des opérations, de la grille, de la géodésie et de l'astronomie fondamentale, images, planétologie. La communauté française d'astronomie est plutôt avancée en VO, avec environ 80 projets différents identifiés dans le recensement Français en 2010. En outre, la communauté française participe très activement à la définition des normes VO établies par IVOA (International Virtual Observatory Alliance) et aux projets européens de VO. Un certain nombre de services importants de référence de VO sont fournis par la France telle que le CDS (Centre de données de Strasbourg), SkyBot, et plusieurs autres sont rendus disponibles. Les perspectives d'avenir dépendent principalement de l'appui continu des laboratoires, mais le

futur développement sera de coordonner des activités sous une forme semblable à l'alliance du centre de calculs d'EURO-VO, et pour cela plus d'actions vers la communauté scientifique sera développé.

Les simulations numériques font en parallèle des progrès impressionnants. En France, elles sont produites dans les centres de calcul nationaux, sur les grilles ou mésocentres. Elles produisent des volumes de données importants, par exemple le projet Grand Challenge DEUS d'étude de l'énergie noire dans l'Univers, et son influence sur les grandes structures, a demandé en 2010 des millions d'heures mono-CPU (BluGene), et 40 To de données ont été produites à l'IDRIS. Le temps de rapatriement depuis les centres de calcul, avec une liaison à ~ 100 Mb/s (1 To par jour) demande alors 40 jours de transfert. Souvent le post-traitement et l'analyse doit pouvoir être fait en local. Il y a donc des besoins locaux en mésocentres reliés aux centres de calcul en connexion rapide. Le rapatriement des données requiert aussi des solutions de stockage et d'archivage des données importantes, de même que des logiciels de traitement et visualisation des données.

La diffusion des simulations numériques est de plus en plus d'actualité. Le coût consolidé des simulations est important, et l'intérêt est d'en faire profiter au plus grand nombre. Les simulations sont complexes et l'équipe qui les produit ne les exploite pas à fond. Les observateurs voudraient pouvoir comparer leurs données aux prédictions des modèles. Il existe donc des développements de standards dans le cadre de l'Observatoire Virtuel pour diffuser ces résultats à la communauté, et permettre à d'autres équipes de trouver ces simulations et de les exploiter par de nouvelles analyses.

Il est aussi souhaitable d'offrir des outils théoriques au-dessus de ces bases de données pour préparer et interpréter les observations des grands instruments (prédiction des données). Dans le cadre du TVO (OV théorique), des services sont ainsi créés, qui permettent d'analyser les résultats de simulations (post processing).

Recommandation :

Dans un avenir bref, on peut s'attendre à des avancées spectaculaires en astrophysique par le calcul intensif. Il est donc très important de donner à la section française et européenne de cette communauté les moyens de calcul dont elle a besoin.