

# Le calcul dans les laboratoires de recherche : pratiques et moyens

*Février 2009*

Étude réalisée par : Françoise Berthoud, Bernard Chetrit, Philippe Depouilly et Violaine Louvet, à partir d'entretiens individuels et d'une enquête auprès des personnels concernés.

1	Contexte .....	2
2	Objet .....	2
3	Périmètre .....	2
4	Moyens .....	2
5	Constats .....	2
5.1	Utilisation du calcul scientifique .....	2
5.2	Caractérisation des codes de calcul .....	3
5.3	Aspects financiers .....	3
5.4	Moyens matériels .....	5
5.5	Moyens humains .....	11
5.6	Quels moyens pour quelles pratiques ? .....	12
6	Perspectives et conclusions .....	13
7	Propositions .....	14

## **1 Contexte**

Le paysage du calcul dans les laboratoires de recherche français, extrêmement mouvant, est en général bien décrit sous l'angle des moyens matériels disponibles, mais beaucoup moins sous l'angle des moyens humains, des pratiques et des moyens financiers investis dans ce domaine. A la fin de l'année 2008, la question de la faisabilité d'achat d'heures de calcul auprès de fournisseurs privés a été posée par le secrétariat général du CNRS, cette option étant vue comme une possibilité d'optimiser globalement l'utilisation des moyens financiers/humains disponibles. La Direction des Achats du CNRS, en charge de l'étude du dossier, nous a sollicités pour une expertise. La présente étude a été réalisée pour apporter des réponses à cette demande.

## **2 Objet**

- Etablir un constat sur les pratiques et l'utilisation actuelle et future des ressources liées au calcul scientifique, en particulier par rapport aux options d'externalisation.
- Formuler des propositions pour répondre à la demande d'optimisation de l'utilisation des moyens financiers/humains.

## **3 Périmètre**

Les chercheurs et ingénieurs des laboratoires de recherche associés au CNRS.

## **4 Moyens**

Pour mener cette étude, nous avons :

- réalisé des entretiens auprès de chercheurs, de réseaux métiers (groupe calcul <http://calcul.math.cnrs.fr/>, RESINFO <http://www.resinfo.cnrs.fr/>) (une dizaine d'entretiens)
- proposé une enquête dont les questions sont présentées en annexe de ce document. Cette enquête a été menée sur 1 mois (19 décembre 2008 - 23 janvier 2009). (192 réponses) L'information concernant sa mise en ligne a été diffusée au sein du groupe calcul et dans plusieurs listes de diffusion d'administrateurs systèmes et réseaux pour rediffusion au sein des laboratoires.

## **5 Constats**

### **5.1 Utilisation du calcul scientifique**

Le calcul sert une démarche scientifique visant à l'élaboration d'une théorie, à la confrontation avec la réalité ou à la simulation de processus physiques. Le rôle du calcul scientifique est en augmentation dans toutes les disciplines scientifiques, y compris les disciplines comme la biologie, parce qu'il constitue, entre autres, une alternative aux expériences réelles et aux expériences irréalisables (trop loin, milieu hostile, trop petit ou trop grand ...).

Dans la pratique, les calculs effectués par les chercheurs sont donc généralement destinés à simuler un phénomène, physique, biologique, chimique, ... à modéliser un système complexe,

etc. en résumé à obtenir des résultats quantitatifs ou qualitatifs relatifs à un problème scientifique donné.

Ces calculs s'appuient sur des programmes informatiques (dits « codes »), mais aussi sur toute une chaîne de traitements qui constituent autant de services d'accompagnement du calcul.

Cet environnement informatique constitue le principal outil de travail des numériciens, des théoriciens et parfois des expérimentateurs pour valider leurs théories et des observateurs/expérimentateurs pour pré-traiter/post-traiter/interpréter leurs observations, au même titre que le microscope constitue un outil de travail incontournable pour le biologiste microscopiste.

## 5.2 Caractérisation des codes de calcul

Les calculs sont réalisés à partir de codes qui sont soit des codes développés dans la communauté Recherche (souvent en équipes nationales ou internationales de chercheurs et d'ingénieurs), soit des codes existants (libres ou commerciaux).

Plusieurs critères permettent de classer les codes de calcul :

- leur stabilité :
  - des codes peu ou pas évolutifs, utilisés comme boîtes noires,
  - des codes fortement évolutifs, très proches des développeurs (chercheurs / ingénieurs), qui sont souvent eux-mêmes objet de recherche, et donc généralement peu stables car en évolution permanente. Ces codes émergents ont vocation à être les codes de production de demain,
- les données qu'ils manipulent :
  - les codes qui manipulent de petits volumes de données ne nécessitant donc ni stockage important, ni archivage, ni débit important des réseaux,
  - les codes qui manipulent de très gros volumes de données,
- la confidentialité des modèles ou des données, pour laquelle les contraintes sont très différentes d'un code à l'autre, mais aussi d'une utilisation à l'autre pour un même code. Le problème de la confidentialité peut s'appliquer au code lui-même et/ou aux données.
- le modèle de programmation implémenté : les codes exploités dans les différentes communautés de la recherche scientifique sont extrêmement variables par rapport à ce modèle. Les architectures machines optimales pour ces différents codes varient donc d'un type de code à l'autre et ce, sans corrélation avec les caractéristiques précédentes.

**Toutes les combinaisons existent autour de ces quatre critères (stabilité / volume données / confidentialité / architecture).**

Ces critères imposent des contraintes plus ou moins fortes sur les moyens matériels et humains utilisés tant sur les aspects quantitatifs/qualitatifs que sur la façon dont ces moyens sont à la disposition du chercheur.

## 5.3 Aspects financiers

Les moyens financiers à disposition des chercheurs sont divers et disparates. La complexité administrative des laboratoires de recherche, en particulier des UMR multi-tutelles (du point

de vue des locaux et de leur gestion, mais aussi du point de vue des ressources financières), associée à la multitude de sources de financement potentielles et souvent de faible montant rendent les montages financiers pour l'achat de moyens de calcul extrêmement complexes (sauf lorsque le calculateur est considéré par nos tutelles comme un instrument de recherche ce qui est le cas par exemple pour la grille de production EGEE pour l'IN2P3 où les moyens financiers sont conséquents et regroupés mais ce qui est loin d'être le cas dans les autres disciplines).

Par ailleurs, les jeunes chercheurs ne disposent bien souvent d'aucun moyen financier sur projet lorsqu'ils débutent. Dans ce cas, l'accès à des plateformes mutualisées au sein du laboratoire ou inter-laboratoires, acquises sur les dotations des chercheurs déjà engagés dans des projets, leur permettra de disposer de ressources dans un contexte scientifique favorable.

### *Combien coûte une heure cpu ?*

Il est intéressant d'estimer le coût réel d'une heure cpu dans différents contextes, même si ce n'est pas suffisant pour juger la pertinence de l'un ou l'autre de ces contextes.

Le calcul ci-dessous ne tient pas compte de la puissance de calcul disponible (nous supposons que dans tous les cas, les processeurs sont de dernière génération et que l'architecture de la machine est adaptée aux besoins de la communauté qu'elle sert).

Dans le paysage français du calcul, nous pouvons distinguer trois niveaux hiérarchiques :

- les cluster/serveurs de calcul à l'échelle d'un laboratoire (typiquement moins de 200 cœurs),
- les mésocentres / plateformes mutualisées (serveurs de calcul à l'échelle d'une université ou d'un ensemble de laboratoires) (entre 200 et 2000 cœurs),
- les centres nationaux (IDRIS, CINES, CCRT) (plus de 2000 cœurs).

Le coût réel tient compte du coût humain réel, du coût énergétique, du coût d'achat / amortissement, des coûts de maintenance etc.

Exemple : pour un calculateur de laboratoire :

100 cœurs (budget achat et maintenance 50 000 €), 10 KVA par an (18000 € sur 3 ans), 1 ETP IE (200000 € sur 3 ans) soit un budget total sur 3 ans de 268000 €.

Soit environ 0,11 € / h cpu.

On peut estimer ainsi le coût d'une heure cpu pour chaque type de structure :

- **Laboratoire** : entre 0,10 € et 0,20 €
- **Mésocentre** : entre 0,15 € et 0,35€
- **Centre national** : de l'ordre de 0,20 €

Cependant, ce coût n'est pas significatif si on ne le met pas en regard des services offerts en accompagnement de la puissance de calcul et de leur impact sur la recherche elle-même.

Il est ainsi beaucoup plus difficile de mesurer les gains réalisés lorsque les expériences réelles sont remplacées par des simulations (économie de moyens financiers, humains et de temps).

## 5.4 Moyens matériels

Les grosses infrastructures (type IDRIS, ou Earth Simulator au Japon) permettent de faire de très grandes simulations dans le cadre de projets scientifiques ambitieux.

Par ailleurs, pour traiter les données, il faut des outils graphiques et des capacités de stockage de proximité suffisants. Les plateformes mutualisées permettent de faire des études complémentaires moins gourmandes en ressources mais très nombreuses. C'est un outil idéal pour stocker et traiter des gros fichiers. De plus les mésocentres ont tout à fait leur place pour les développements de codes, le travail d'optimisation ainsi que les calculs préliminaires ou préparatoires avant l'exécution sur les centres nationaux.

Aucune solution exclusive n'est idéale. Les numériciens sont amenés à simuler une variété de problèmes de tailles et de complexité très différentes, avec des contraintes de réactivité très différentes. Il est important de disposer d'une gamme de moyens de calculs, allant des serveurs de calcul multiprocesseurs, aujourd'hui très bon marché (quelques milliers d'euros), aux moyens les plus importants (IDRIS). Un très gros ou très long calcul ne pourra se faire que sur des moyens nationaux, et nécessitera une planification à l'avance (plusieurs mois). En revanche, au cours d'un projet, d'une thèse, d'un stage, il est souvent nécessaire de réaliser très rapidement un calcul de taille plus modeste mais non planifié à l'avance.

Ces différentes solutions sont complémentaires et répondent à des besoins distincts.

### *Données quantitatives*

Il nous a paru pertinent d'apporter quelques éléments quantitatifs afin d'illustrer les pratiques actuelles. Nous avons donc réalisé une enquête au cours de laquelle nous avons recueilli 192 réponses. Nous estimons que ce nombre représente moins de 1/10<sup>ème</sup> du nombre total d'utilisateurs dans le domaine du calcul dans le recherche en France. Notons que les réponses sont issues de la plupart des disciplines utilisatrices du calcul.

<b>Fonction des utilisateurs ayant répondu à l'enquête</b>	<b>Combien ?</b>
CR	31 %
DR	14 %
MC	16 %
PR	12 %
IE/IR Calcul scientifique / développement	24 %
Divers	5 %

### **Quels moyens sont utilisés aujourd'hui ?**

**Sur un échantillon de 169 utilisateurs, combien utilisent les moyens ci-dessous ?**

<b>Type de moyens</b>	<b>Combien ?</b>
GENCI	49 %
Plateformes mutualisées (PM)	44 %
Moyens de laboratoire (labo)	89 %
Grilles	18 %

On pourra relever ici le très fort taux d'utilisation des moyens de laboratoire (près de 90%) et les taux quasiment identiques d'utilisation de plateformes mutualisées et des centres nationaux (notons qu'une étude complémentaire devrait être faite d'ici une ou deux années, compte tenu de la très forte augmentation des moyens des centres nationaux, ce qui modifie considérablement le paysage des moyens de calcul en France).

### Comment ces moyens sont-ils utilisés ?

Moyens utilisés simultanément	Combien ?
GENCI + PM + labo + grille	2.4 %
GENCI + PM + labo	23.7 %
GENCI + PM	26 %
GENCI + labo	49.7 %
PM + labo	14.2 %
Labo + grille	4.1 %
Labo seul	34.3 %
PM seule	6.5 %
GENCI seul	0.5 %
Grille seule	2.4 %

- Près de 1 utilisateur sur 4 utilise tous les moyens mis à sa disposition (à l'exception de la grille).
- Quasiment 1 utilisateur sur deux utilise les moyens de son laboratoire en complément de GENCI.
- Plus de 1 utilisateur sur 4 utilise une plateforme mutualisée en complément de GENCI.
- Les utilisateurs grille ont un profil un peu particulier, ils utilisent rarement GENCI. Ceci est lié au fait de la spécificité des profils de codes qui peuvent vraiment tirer parti des grilles de production (EGEE en particulier).
- Plus de 1 utilisateur sur 3 n'utilise pas d'autres moyens que ceux de son laboratoire.

Ces éléments montrent bien la complémentarité des différents moyens de calcul.

### Réponses à la question de l'utilisation de futurs moyens (aspects quantitatifs)

A la question, « dans l'hypothèse où les moyens dont vous disposez actuellement ou à moyen terme seraient insuffisants pour vous. Quelles seraient les options que vous envisageriez ? (vous pouvez choisir plusieurs options) »

Projection sur l'utilisation des crédits	% de réponses positives
Utiliser vos crédits pour acheter des heures de calcul chez un prestataire privé ?	2.4 %
Utiliser vos crédits pour participer à la consolidation d'une plateforme mutualisée (type mésocentre)	61.5 %
Utiliser vos crédits pour acheter un calculateur SMP ou une grappe de PC pour votre laboratoire	70 %

**En conclusion, seul un nombre marginal d'utilisateurs (2.4%) envisage, dans un contexte particulier (besoins ponctuels, collaboration avec un partenaire industriel, utilisation d'un logiciel très spécifique), le recours à un prestataire.**

	<b>% des utilisateurs prêt à utiliser leurs crédits pour acheter :</b>			
<b>Ils utilisent actuellement :</b>	Heures privé	PM	Labo	PM + labo
<b>GENCI</b>	0 %	26.6 %	37.3 %	20.7 %
<b>Plateformes mutualisées</b>	1.2 %	36.7 %	30.2 %	23.7 %
<b>Moyens de laboratoire</b>	1.8 %	51.5 %	68 %	40.2 %
<b>Grilles</b>	0.6 %	14.2 %	10.5 %	7.7 %

Comment lire ce tableau ?

Par exemple, parmi les utilisateurs ayant répondu à l'enquête, 51.5 % déclarent être prêt à utiliser leur crédits pour participer à la consolidation d'une plateforme mutualisé alors qu'ils utilisent actuellement des moyens de laboratoire.

Ces résultats montrent clairement que les utilisateurs actuels de moyens de laboratoires sont attachés au maintien d'un certain niveau d'équipement au sein des unités de recherche, et ce pour des raisons qui ont été précisées par les utilisateurs et synthétisées plus loin. Cependant presque la moitié de ces utilisateurs est prête à consolider une plateforme mutualisée.

A noter que les utilisateurs actuels de mésocentres sont quasiment tous d'accords pour réinvestir dans une plate forme mutualisée, ce qui constitue un bon indice de qualité sur le service rendu par ce type de solution.

À noter également que les utilisateurs qui n'ont choisi, comme type d'investissement futur, que l'équipement laboratoire n'utilisent pas dans leur majorité une plateforme mutualisée.

Les idées reprises dans l'analyse ci-dessous sont issues des réponses à l'enquête, remises en forme pour respecter une certaine cohérence de la présentation.

### ***Centres Nationaux***

Les centres nationaux apportent aujourd'hui une puissance de calcul conséquente et un support de grande qualité aux utilisateurs. Ces moyens sont particulièrement adaptés aux grosses applications de production très optimisées, mais ils sont peu adaptés au développement et aux tests de scalabilité.

L'accès à ces moyens repose sur des procédures d'obtention des heures de calcul relativement longues (il faut prévoir entre 6 mois et un an à l'avance les calculs), ce qui rend cette solution peu adaptée aux projets très innovants à évolution très rapide. Enfin, certains utilisateurs regrettent un manque de transparence dans l'arbitrage scientifique entre les différentes disciplines, souvent en faveur des grosses demandes. (Il faut noter que les récentes évolutions des matériels nationaux modifient sans doute cette situation).

### ***Plateformes mutualisées (dont mésocentres)***

De manière générale, la puissance de calcul des plateformes mutualisées est intermédiaire entre celle proposée dans les centres nationaux et celle disponible dans les laboratoires. Les informaticiens qui administrent ces machines sont plus proches des utilisateurs et de leurs préoccupations car souvent issus de laboratoires de recherche.

La mutualisation facilite la mise en place de ressources humaines de haut niveau pour la gestion de ces plateformes et l'optimisation en terme de puissance et temps de calcul.

Ce support technique de proximité est essentiel pour une meilleure compréhension des besoins, pour le choix des matériels et logiciels adaptés et pour un service aux utilisateurs de qualité.

La mutualisation des coûts (humains et infrastructures) permet, pour un budget donné, d'optimiser l'exploitation de ces ressources importantes, compte tenu du nombre d'utilisateurs et de leurs besoins à des périodes de temps différentes.

Par ailleurs, ces plateformes permettent de mettre à disposition des utilisateurs des logiciels spécifiques commerciaux dont le coût serait prohibitif pour un laboratoire seul en regard du nombre d'utilisateurs par laboratoire.

Enfin, les mésocentres permettent la mise en place d'outils exploratoires, de nouvelles architectures machines et favorisent le partage des compétences (entre informaticiens et numériciens par exemple) pour le portage de codes sur ces architectures, même si, compte tenu du nombre, de la diversité et de la spécificité des problématiques et des projets, ils ne peuvent pas proposer tous les outils.

Notons également que ces structures constituent souvent les briques de base de grilles de calcul (grille de production EGEE, grille légère CIGRI, etc.)

Un des points essentiels qui distingue ces plateformes des moyens de laboratoire est l'existence d'une structure de pilotage scientifique qui constitue un interlocuteur scientifique pertinent par rapport aux tutelles, reconnu et proche des utilisateurs. Ce comité scientifique a en général un rôle d'animation technique et scientifique qui permet d'assurer la pérennité et le maintien du dynamisme de ces mésocentres.

La proximité géographique et la diversité des disciplines impliquées dans une plateforme mutualisée en fait un lieu favorable à l'émergence de projets transversaux, aux rencontres multi-disciplinaires, à la confrontation de méthodes numériques si le pilotage scientifique de la plateforme est pertinent.

Les plateformes mutualisées peuvent également constituer de bonnes réponses aux besoins de collaboration régionale entre le tissu de la recherche publique et celle de la recherche privé, via les financements régionaux.

Cependant, certains mésocentres, en dépit de leur proximité avec les utilisateurs, peuvent présenter un manque de souplesse aussi important que celui reproché aux centres nationaux (délais importants pour lancer une exécution, contraintes techniques, assistance pas toujours réactive, nombreuses contraintes en terme de disponibilité et de sécurité ...).

Par ailleurs, on peut constater, sans faire de généralités, une certaine opacité dans la gouvernance d'un nombre minoritaire de ces structures.

Enfin, la diversité des types de moyens de calcul (différents centres nationaux, différentes plateformes mutualisées, moyens de laboratoire) peut forcer à disperser les efforts de portage et d'adaptation et à multiplier les environnements de travail.

### ***Moyens de laboratoires***

L'utilisation de moyens de calcul au niveau du laboratoire répond à un besoin de gestion simple et souple des outils de calcul (gestion des priorités et des files d'attente, souplesse d'ouverture de comptes). Cette réactivité, facilitée par un accès direct aux personnes en charge de l'administration des machines, est par exemple utile pour permettre à des utilisateurs occasionnels d'avoir accès à une certaine puissance de calcul.

Ces moyens peuvent évoluer au fur et mesure des besoins liés à l'utilisation de configurations expérimentales (expériences de portabilité) ou à la mise à niveau rapide du matériel. De même certains équipements très spécifiques tels que les systèmes logiciels embarqués ou les systèmes effectuant de l'acquisition de données ne peuvent s'envisager qu'en local.

Cette proximité immédiate favorise aussi l'installation rapide de nouveaux outils et la modification des paramètres du système ou des applications pour répondre aux besoins de mise au point et de développement (à l'opposé d'une exploitation de production) pour lesquels ces moyens sont les plus adaptés.

Il est aussi nécessaire d'avoir accès à des moyens de calcul à temps CPU « perdu » (début d'étude, tests, calculs non planifiés ...). Les moyens de calculs au niveau des laboratoires permettent également l'utilisation d'une plus grande diversité de logiciels pour la préparation des fichiers, pour l'analyse des résultats, d'outils graphiques locaux et des capacités de stockage locales suffisantes. Ils sont très adaptés aux tâches d'analyse dans un mode interactif.

Par ailleurs, les temps de calcul pour mener à bien une étude sont parfois difficiles à estimer et un budget fixé quelques mois à l'avance quasiment impossible à respecter. Les moyens de laboratoires permettent une gestion libre des campagnes de calcul, la possibilité de bénéficier des ressources autant de fois que nécessaire sans voir à rendre de compte de leur utilisation.

La confidentialité des données pendant les phases de recherche est également plus aisément respectée sur des moyens locaux.

Enfin on ne peut oublier les aspects pédagogiques que représente le fait de disposer localement de moyens matériels et humains nécessaires à l'exploitation de calculateur, pour ce qui est du transfert et de l'acquisition de compétences, ainsi que de la pérennité du savoir faire local.

Cependant, il ne faut pas négliger les coûts d'investissement (machines et infrastructures), de maintenance et de ressources (coût humain de la gestion des machines) dans un contexte où la pérennité des moyens n'est pas assurée.

Ces coûts suggèrent la nécessité d'une certaine masse critique (laboratoire important ou regroupement de laboratoires plus petits) pour les justifier et limiter les risques de non-utilisation.

### ***Grilles de calcul***

Les grilles de calcul sont avant tout des moyens très spécifiques déployés pour des projets conséquents (grille de production EGEE) qui n'ont pas d'autres réponses actuellement que celle-ci. Ce n'est pas tant un avantage qu'un impératif de dimensionnement de l'outil

scientifique. Le projet Grid5000 (grille de recherche) de l'INRIA est également un grand équipement d'expérimentation et de recherche déployé à l'échelle nationale, les grilles étant aussi des outils permettant de répondre à des problématiques de recherche bien spécifiques telles que le calcul distribué.

Remarquons que plusieurs laboratoires débutent des projets de mutualisation à travers une mise en commun des moyens basée sur le principe de grille (interconnexion des sites et harmonisation des accès). D'autres types de grilles se développent ainsi aujourd'hui pour optimiser l'utilisation des plateformes mutualisées (voir par exemple CIGRI) en offrant les ressources non utilisées par la communauté locale à des utilisateurs externes à cette communauté.

Cependant, la complexité d'accès et la spécificité des infrastructures de grilles les rendent peu intéressantes pour les projets scientifiques non issus des communautés originelles des grilles.

### ***Moyens Privés***

Les moyens privés présentent les avantages d'une solution clé en main et peuvent être envisagés dans des cas très particuliers en lien avec des collaborations industrielles. Par exemple, si une réponse à une demande d'industriel nécessite un moyen de calcul important, l'utilisation de moyens privés permettra de facturer directement le coût à l'industriel. Cela simplifie l'identification et la facturation des coûts liés au calcul. Un prestataire privé peut proposer des prestations en termes de sécurité, de moyens (matériels et logiciels) et d'outils collaboratifs qui peuvent rassurer les partenaires privés du projet.

Cependant, les intérêts des laboratoires et des partenaires privés diffèrent, les uns ayant besoin de souplesse et d'adaptation à l'expérimentation, les autres ayant pour priorité la rentabilité de leurs plateformes.

On peut craindre que la standardisation d'un centre de calcul privé ne puisse pas se plier aux besoins de disponibilité et de réactivité de la recherche. La mise en œuvre d'un contrat limite l'accès aux ressources si celles-ci doivent évoluer au cours de l'expérimentation. De plus cela peut induire des incertitudes sur les prestations (nature et adéquation du matériel, quotas limitatifs incontrôlables). Le problème de la sécurité et de la confidentialité des données peut se poser, notamment pour les données non encore publiées, et pour la protection du patrimoine scientifique.

Le calcul scientifique se fait sur des plateformes d'expérimentation sans cesse en évolution afin d'être en adéquation avec le projet et les évolutions technologiques. Le personnel attaché à la plateforme doit avoir des compétences techniques et thématiques de pointe. Il doit être capable de répondre aux besoins du projet à travers une connaissance du domaine scientifique, c'est un pont entre la technologie computationnelle et le domaine propre de recherche de l'expérimentation. La proximité aussi bien géographique qu'en terme de culture professionnelle est indispensable.

Par ailleurs, la pérennité d'un partenaire extérieur n'est pas garantie et les difficultés administratives supplémentaires sont contraignantes : création et suivi des contrats, demandes de ressources, demandes de crédits, justificatifs, paiement. Le coût de ces démarches est loin d'être à négliger.

Enfin, une externalisation des heures de calcul risque de fragiliser les compétences de la communauté de la recherche en calcul scientifique, tant à l'échelle nationale qu'internationale.

## 5.5 Moyens humains

Le calcul intensif est une mécanique de haute précision dont l'exploitation nécessite un contact très étroit entre les différents protagonistes (utilisateurs, développeurs et administrateurs des machines).

L'informatique scientifique n'a ainsi aucun point commun avec l'informatique de gestion et il est essentiel que cette dimension humaine soit prise en compte dans le pilotage des ressources informatiques pour le calcul.

L'outil numérique est un élément primordial pour la communauté des scientifiques, et notamment des théoriciens : ces clusters et machines de calcul sont leurs instruments et leurs salles d'expérimentation.

Une machine de calcul est un outil très complexe qui doit répondre à une problématique. Ses caractéristiques ne se limitent pas à la fréquence des processeurs ou à sa puissance crête. Les problèmes d'accès mémoire, de réseau, de types de calculs (parallèles ou non et type de parallélisme ...) sont souvent spécifiques au projet scientifique. Le déploiement des codes nécessite régulièrement des ajustements de l'environnement logiciel de la machine, voire même du système lui-même. La proximité entre utilisateurs/développeurs et administrateurs système, dont les compétences sont particulièrement pointues et adaptées au contexte, est donc essentielle et indispensable.

Les personnels techniques en charge de l'administration système des machines de calcul et de leur exploitation font le lien entre les constructeurs et les chercheurs, pour répondre au mieux aux besoins. De plus la formation dans ces domaines des doctorants, mais aussi celle des chercheurs plus confirmés, se fait très souvent au contact de ces mêmes personnels.

La « computational science » a évolué vers une science à part entière. L'exploitation optimale des moyens de calcul, tant sur le plan des méthodes numériques, de l'algorithmique, de la programmation et de l'optimisation, est devenue un travail très technique, mais qui n'est pas assimilé à de la recherche, c'est-à-dire non publiable. Les personnels techniques en calcul scientifique sont les spécialistes de ce travail et sont donc nécessaires à l'exploitation des calculateurs.

Beaucoup de codes sont peu ou mal adaptés aux architectures actuelles (par exemple les codes vectoriels développés sur d'anciennes générations de matériels sont inadaptés aux architectures massivement parallèles qui émergent). Le travail de portage de ces codes est immense et repose essentiellement sur ces personnels.

Les ingénieurs ont d'ailleurs souvent, en plus de leur expérience inestimable en programmation, une thèse dans les champs de recherche du laboratoire pour lequel ils travaillent, ce qui en fait des acteurs incontournables de la recherche. Ce savoir-faire, les développements de code de simulation/modélisation et les données elles-mêmes constituent le patrimoine durable de la recherche. Il est important que la recherche en garde une maîtrise totale.

Il faut aussi noter que les méthodes et concepts désormais répandus dans les centres de calcul (systèmes d'exploitation, architectures, logiciels libres, méthodes de calcul ...) sont souvent issus du monde universitaire. Il est crucial que ce savoir-faire soit conservé, développé et diffusé.

Par ailleurs, la capitalisation de ce savoir est toujours associée dans notre contexte à sa transmission au travers de formations couvrant l'ensemble des étapes menant à l'exploitation

scientifique des résultats des calculs (algorithmes, programmation, optimisation, parallélisation, visualisation ...). Il faut être particulièrement vigilant à préserver un niveau suffisant de formation au calcul haute performance. Cet aspect souligne l'importance de la proximité avec à la fois les personnels techniques, mais aussi les machines elles-mêmes, pour l'apprentissage et la compréhension de leur fonctionnement.

Cet aspect (celui des savoirs) n'est pas quantifiable par une approche purement financière. Ces personnels techniques sont des collaborateurs, un maillon essentiel de la chaîne des calculs du CNRS.

## 5.6 Quels moyens pour quelles pratiques ?

Les besoins de la recherche sont très diversifiés et les réponses génériques mal adaptées. La recherche a besoin de flexibilité. Tout ne sera donc pas forcément mutualisable. Ainsi, les besoins spécifiques de calcul et des moyens associés (stockage, visualisation, ...) d'un projet donné freinent son intégration dans un moule commun trop général. Par ailleurs, les besoins en calcul sont assez différents d'une discipline à l'autre pour ne pas être considérés comme nécessairement un même problème et donc recevoir une et une seule réponse.

Un autre point important est de respecter cette diversité des besoins en s'assurant de mettre à la disposition de la communauté scientifique les différents types d'architectures de machines afin que chacun puisse accéder à l'environnement de calcul en adéquation avec ses codes. En effet, certains algorithmes sont très performants sur certaines architectures et pas du tout sur d'autres.

Les points suivants tentent de caractériser cette diversité dans les pratiques.

### □ *Cas des petits calculs (séquentiels en général)*

- Contraintes : faibles, les PC standards actuels suffisent.
- Les moyens de laboratoire sont très adaptés à ce cas.

### *Cas des calculs longs (non ou peu parallélisables)*

- Contraintes : le temps d'utilisation devient important et donc les besoins en nombre de machines disponibles, en bibliothèques et compilateurs optimisés, en reprise à chaud (checkpoint, etc.) augmentent. Ces calculs sont souvent liés à des besoins en stockages plus importants.
- Les moyens de laboratoire peuvent suffire à satisfaire ces besoins, mais les moyens mutualisés permettent souvent des exécutions sur des temps très longs et proposent des solutions de stockage plus importantes.

### *Cas des calculs moyennement parallélisables*

- Contraintes : besoins en réseaux informatiques dédiés, architectures homogènes, logiciels adaptés (compilateurs, bibliothèques MPI, etc.), avec des besoins en stockage plus ou moins importants.

- Les moyens de laboratoire ne suffisent plus pour ce type de calcul. Les moyens mutualisés ont l'avantage de proposer par leur proximité un support disponible et des possibilités d'adaptation et de paramétrages adaptés aux besoins.

### *Cas des calculs massivement parallèles*

- Contraintes : matériels dédiés, réseaux dédiés, logiciels dédiés (compilateurs, bibliothèques, optimiseurs, outils d'analyse, etc.).
- Ce type de calcul est adapté aux très gros calculateurs. Les moyens mutualisés, permettant les mises au point finales de ces codes, servent souvent dans ce cadre de tremplin vers les centres nationaux qui permettent d'effectuer l'ensemble des traitements de production.

## **6 Perspectives et conclusions**

La croissance des besoins en calcul numérique ne cesse de progresser, cet outil d'expérimentation et de prospection devient présent dans un très grand nombre de domaines scientifiques. Le calcul intensif ne concerne plus seulement les applications traditionnelles (climat, astrophysique, mécanique des fluides, ...) mais voit la montée en puissance de nouvelles disciplines (modélisation du vivant, nanotechnologies ...).

Le développement et l'émergence de ces nouveaux besoins s'accompagnent d'une multiplication des demandes de moyens de calculs au sein des laboratoires ou de plateformes mutualisées.

Du point de vue des moyens humains, l'expérimentation numérique est du même niveau de besoin que l'expérimentation classique, la proportion respective des sciences numériques par rapport aux sciences expérimentales a beaucoup évolué ces dernières années.

Cet essor nécessite donc de renforcer les moyens humains d'accompagnement de la recherche, en particulier les ingénieurs calcul scientifique qui ont un rôle clé dans ce domaine.

Par ailleurs, il faut noter que l'évolution des architectures matérielles de ces dernières années, basées sur l'augmentation de la puissance des processeurs touche ses limites. La fréquence de fonctionnement ne peut ainsi grimper de façon continue. Cet état de fait permet donc de penser que l'obsolescence des machines sera sans doute moins rapide dans les années à venir qu'elle ne le fut par le passé.

Vu l'explosion des besoins de calcul et des demandes associées, il est naturel de se poser la question des solutions à y apporter : externaliser une partie des heures de calcul ou renforcer les moyens existants.

Dans l'état actuel des choses, l'enquête et les entretiens menés ne permettent pas d'identifier de disciplines ou de communautés spécifiques susceptibles d'utiliser leur crédit calcul pour acheter des heures de calcul auprès de prestataires extérieurs à la fois pour des raisons de coûts, de pérennité et de confidentialité de cette solution, mais aussi et surtout car cela va à l'encontre de pratiques de recherche s'appuyant fortement sur le potentiel humain d'accompagnement de la recherche et le développement des compétences et des expertises en calcul scientifique.

Par contre un certain nombre d'améliorations seraient à apporter au fonctionnement actuel, si on souhaite maintenir une qualité et un dynamisme de recherche suffisants lorsque la simulation numérique est nécessaire (ce qui est de plus en plus fréquent).

Nous formulons ci-dessous un ensemble de propositions destinées à améliorer l'existant.

## **7 Propositions**

Les organismes de recherche doivent assurer l'existence de moyens de calcul suffisants et accessibles au niveau scientifique attendu dans un contexte de recherche internationale compétitive. Cet outil de travail doit impérativement s'accompagner d'un environnement humain de très haut niveau.

*Tout scientifique qui a besoin de l'outil numérique, au même titre qu'un chimiste dispose d'une paillasse et de produits nécessaires à sa recherche, doit avoir le droit à une quantité minimale d'heures CPU sans devoir la justifier avec un projet.*

Les moyens matériels et logiciels devraient en partie être consolidés (mutualisés) afin d'en assurer la pérennité d'une part et afin d'optimiser leur utilisation/maintenance d'autre part.

Le nombre d'ingénieurs en charge de l'accompagnement de la recherche, en calcul scientifique, doit être renforcé ; le réseau métier existant (groupe calcul) permet de transmettre, partager les compétences, renforcer les expertises.

Le rattachement des ingénieurs systèmes et réseaux à des plateformes mutualisées permettrait d'optimiser l'ensemble du système.

La mise en place d'une telle organisation devrait être accompagnée par nos tutelles, tant sur le plan des moyens matériels que sur celui des moyens humains.

### ***Au niveau des moyens informatiques***

La multiplication des financements sur projets crée une situation nouvelle où de tout petits groupes reçoivent des moyens informatiques relativement importants sans avoir prévu le personnel nécessaire à la maintenance de ces moyens.

Ces situations peuvent être améliorées en agissant à plusieurs niveaux :

- En amont du dépôt des projets, il faut établir un dialogue entre les demandeurs et les experts pour conseiller efficacement les responsables de projet en analysant techniquement leur besoins.
- Il est nécessaire d'encourager le développement des centres mutualisés publics :
  - en agissant d'une part au niveau de l'évaluation des projets, en prenant en compte dans les demandes d'équipement cet aspect de mutualisation
  - en facilitant la structuration de ces centres par un accompagnement technique et administratif spécifique et en réfléchissant à la pérennisation de ces structures.

Ces propositions visent à favoriser l'investissement de ressources financières individuelles dans des structures de calcul mutualisées (gros laboratoire ou regroupement de laboratoires, mésocentres).

Il serait également intéressant de proposer des plateformes de modélisation plutôt thématiques que géographiques, répondant à des besoins techniques et scientifiques plus ciblés, sans pour autant négliger l'importance des moyens de laboratoires, indispensables en terme de développement, de pré et post traitements, et d'études ponctuelles ou de petites tailles.

Lorsque le nombre de serveurs de calcul est suffisant, il peut être pertinent de faire appel à des partenaires privés (sociétés spécialisées, ou bien le constructeur ou le fournisseur du cluster) pour des prestations de support logiciel dédié au calcul scientifique (en plus du support matériel couramment utilisé). Sans être à proprement parler de l'externalisation, ce modèle permet alors de consolider les compétences locales ou bien de palier à leur manque. Nous constatons que lors des acquisitions de ce type de matériel, les fournisseurs proposent régulièrement ces prestations, qui peuvent alors être discutées et adaptées aux besoins locaux.

Cette politique des ressources de calcul doit prendre en compte les côtés négatifs du fonctionnement actuel, et notamment

- le sentiment d'opacité des diverses instances ayant en charge le développement des moyens de calcul, que ce soit à l'échelle locale, régionale ou nationale
- la lourdeur administrative et l'obligation de devoir prévoir plusieurs mois à l'avance l'utilisation des moyens nationaux (besoins exprimés de pouvoir utiliser ponctuellement et temporairement de très grosses machines pour tester les applications sur un très grand nombre de processeurs)
- les contraintes sur les usages (contraintes liées aux configurations des logiciels gestionnaires de ressources en particulier).

### ***Au niveau des moyens humains***

Mutualisation des moyens humains : La mutualisation d'un pôle de compétences techniques au sein d'un gros département ou entre plusieurs laboratoires peut permettre d'améliorer le support scientifique, informatique et technique des utilisateurs de moyens de calcul tout comme celui des moyens matériels.

Communication : Il est aussi nécessaire, pour promouvoir ces centres mutualisés, de les faire connaître à l'ensemble des laboratoires et de former les agents des laboratoires à y recourir et à les utiliser lorsque c'est possible.

Formation : Il faut que les chercheurs/ingénieurs disposent des compétences techniques en matière informatique comme ils en ont sur les autres aspects techniques de leur discipline. Cela leur permettrait d'améliorer la qualité de leurs applications en termes de performances et d'adéquation avec l'architecture matérielle (Les gains en performance dus aux progrès des algorithmes dépassent de plusieurs ordres de grandeurs les gains en performance venant des progrès dans l'accroissement des performances matérielles).

Valorisation : Il serait important de valoriser le temps passé par les chercheurs et les ingénieurs pour mettre au point leurs applications. Beaucoup de temps est nécessaire, dont les retombées scientifiques (publications) n'apparaîtront que plus tard..

