



Avis sur la situation de la France en matière de calcul scientifique intensif

20 décembre 2007

I. Le calcul scientifique intensif constitue aujourd'hui une composante essentielle de la recherche moderne

Depuis les années 80, **la modélisation et la simulation numériques ont pris une place rapidement croissante autant en recherche scientifique, où elles s'inscrivent naturellement entre théorie et expérience, que dans l'industrie et les services.**

L'évolution constante de ces différents domaines requiert des puissances de calcul qui ne sont accessibles qu'avec des ordinateurs spécialement conçus et réalisés en vue de cet objectif, et dont l'utilisation a donné naissance à la notion de "*Calcul Scientifique Intensif* " (CSI).

Depuis plus de deux décennies la puissance totale installée de ces ordinateurs "haute performance" a pratiquement doublé d'une année sur l'autre. D'un teraflop (Tflop : mille milliards d'opérations par seconde) en 1994, elle a atteint un petaflop (Pflop : un million de milliards) en 2005 ; fin 2007, elle est de sept Pflops dont un demi Pflop pour la machine actuellement la plus puissante. Cette course à la puissance, s'est accompagnée du développement de codes numériques élaborés de façon à utiliser de façon optimale cette puissance de calcul.

Les diverses modalités de calcul intensif et leurs usages

Les infrastructures de calcul intensif peuvent être soit distribuées sur différents sites et interconnectées (organisation en "grille"), soit, au contraire, très intimement intégrées (supercalculateurs). Nous nous concentrons ici sur les supercalculateurs qui offrent les plus grandes puissances de calcul ; aucune "grille " ne rentre dans le classement TOP 500 qui, tous les six mois, établit un classement des calculateurs les plus puissants¹

Une distinction s'opère également selon que les calculs sont effectués sur des nombres (approche scalaire) ou sur des vecteurs. Dans chacun des cas la puissance de calcul est obtenue grâce à l'utilisation, en parallèle, d'un certain nombre de processeurs. Ce nombre est relativement restreint pour les calculateurs vectoriels (jusqu'à quelques milliers) et beaucoup plus important pour les calculateurs à base de processeurs scalaires (au-delà de deux cent mille). Une troisième voie fait usage de processeurs spécialisés et/ou programmables, issus du marché grand public ou originaux.

Le calcul massivement parallèle scalaire s'impose progressivement par rapport aux deux autres voies. Cependant les architectures massivement parallèles vectorielles restent les mieux, voire les seules, adaptées à certains programmes tant que l'adaptation longue et coûteuse des codes concernés n'aura pas été réalisée.

Le calcul scientifique intensif, nouveau paradigme dans la connaissance des systèmes complexes non ou peu manipulables par l'expérience

¹ Ce mode de calcul distribué est néanmoins très bien adapté à certains problèmes, en particulier dans le domaine du traitement et de la gestion des données, et adopté par un certain nombre de communautés dont celle des physiciens des particules.

Dans les années 1950, le calcul scientifique a essentiellement été utilisé par les organismes gouvernementaux, principalement dans le domaine militaire. Mais rapidement il s'est imposé dans la recherche publique et privée, pour la réalisation de simulations de plus en plus complexes ou pour traiter des données volumineuses, ainsi que dans des secteurs opérationnels comme la météorologie par exemple. Dès les années 1960, la physique nucléaire, et notamment la physique des particules élémentaires ont été dépendantes des moyens de calcul scientifique, au côté du nucléaire civil, des activités aérospatiales, de la recherche pétrolière... Une nouvelle discipline a même vu le jour, la physique théorique « computationnelle ». La progression exponentielle de la puissance de calcul a ensuite ouvert, et ouvre en permanence, **de nouveaux champs de développement au CSI** devenu indispensable pour appréhender la complexité du réel.

Ainsi peut-être abordé le traitement des phénomènes et systèmes complexes (aérodynamique, climatologie, biologie, chimie, chimie quantique...) et envisagé le raccordement d'échelles multiples qui autorise la modélisation "*ab initio*" fondée sur les principes de base. Cette seconde approche permet de modéliser des situations où il est impossible d'expérimenter (astrophysique, matériaux soumis à des conditions extrêmes, développement des armes, ...). De nombreux phénomènes dans lesquels la compréhension du comportement statistique est essentielle (turbulence, nanoélectronique, ..) relèvent également du CSI avec des applications aussi bien scientifiques qu'industrielles. Enfin les applications touchant à l'exploitation et l'assimilation de données massives sont de plus en plus nombreuses (physique des hautes énergies, biologie post-génomique, sciences de la terre et du climat, sciences humaines et sociales...).

Les enjeux industriels du CSI dépassent de beaucoup la mise à disposition des chercheurs d'outils particulièrement performants. La capacité de calcul d'un état est devenue un élément essentiel de sa crédibilité aussi bien dans le domaine de la défense que dans celui de la préservation de l'environnement. En outre, le niveau de compréhension et de caractérisation des systèmes complexes autorisé par la simulation numérique permet de réduire les risques, partant les coûts de développement, des grands programmes et d'optimiser les investissements industriels, dans les secteurs de pointe (microélectronique, nanotechnologies, sécurité des installations). **La puissance de calcul dont dispose un pays est ainsi devenue un facteur essentiel de sa crédibilité sur la scène internationale et du succès de sa politique de recherche, un levier important de sa compétitivité industrielle, et un élément de la souveraineté nationale.**

II. Une récente prise de conscience de la nécessité de combler le retard français dans ce domaine

Un retard au niveau des équipements

La France est en retard, voire très en retard, sur le plan de l'équipement en supercalculateurs. Dans son enquête sur les frontières de la simulation numérique, parue en 2005, l'Académie des Technologies a évalué ce retard en s'appuyant sur le classement TOP 500 paru en novembre 2004. Ce classement, dont il faut garder à l'esprit le caractère indicatif, était dominé par le continent Nord-Américain (Etats-Unis essentiellement), suivi de l'Asie (Japon en premier lieu), la part de l'Europe restant, comme au cours des dix années précédentes, comprise entre 15 et 20%. Les équipements français comptaient alors pour 1,9 % du parc mondial, loin derrière le Royaume-Uni (7,3 %) et l'Allemagne (4,5 %) et tout juste derrière l'Espagne (2%).

Trois ans plus tard, en novembre 2007, la puissance installée a été multipliée par sept (de un à sept PFlop) ; la position de la France s'est améliorée atteignant 3,2% grâce à la récente acquisition par le CEA de deux calculateurs Bull, l'un à des fins militaires, l'autre pour le centre civil (en 2006 et 2007). La France reste cependant loin des deux premiers pays européens, avec une capacité voisine de 40% seulement par rapport à l'Allemagne (7,6%) et au Royaume-Uni (7,2%). Elle est talonnée par des pays tels que la Suède (2,7 %) et l'Inde (2,9%). L'Europe prise dans son ensemble (28%) a notablement progressé depuis 2004 devant désormais très nettement l'Asie dont la capacité relative est descendue à 7,5% (dont 4,2% pour le Japon en nette régression mais qui vise à reprendre le leadership avec à l'horizon 2012 la mise en route d'un calculateur massivement parallèle de 12 PFlop). Les Etats-Unis sont loin devant avec près de 60% de la puissance mondiale installée (les puissances de calcul dont disposent les militaires n'étant pas connues avec précision, la domination américaine pourrait être supérieure).

Un retard au niveau de l'implication de certaines disciplines dans l'utilisation du CSI

Ce retard chronique de la France au niveau des équipements a indéniablement contribué au fait que certaines communautés scientifiques ne se sont pas investies dans le CSI tant les moyens requis leur étaient inaccessibles, alors que sur le plan international, ces mêmes communautés en ont fait un des

axes majeurs de leur développement. **Cette autocensure est notable en biologie et chimie**, où le CSI n'a en France qu'une place marginale ce qui risque rapidement de la pénaliser dans la compétition internationale.

Un second aspect concerne le type de machine, le calcul massivement parallèle scalaire qui bénéficie de l'effort de développement des constructeurs, n'étant pas adapté de façon optimale vis à vis de certains types de problèmes. Ainsi, les physiciens nucléaires se sont délibérément orientés vers le calcul distribué (utilisation de grilles) tandis que les codes actuellement développés pour la modélisation de l'évolution du climat, et plus généralement celles du Système Terre", requièrent, pour être efficaces aujourd'hui, des machines vectorielles.

Des tentatives récentes de renverser la tendance

Les moyens dont dispose la recherche publique dans le domaine du CSI se trouvent essentiellement au CNRS (IDRIS), au CEA (CCRT) et au CINES pour le compte des universités ; s'y ajoutent des organismes (tels Météo France ou l'ONERA) ou de grands groupes industriels (Total, EADS...) dont les centres de calcul sont orientés vers leurs propres besoins.

Jusqu'à vers le début des années 2000, le CEA, le CNRS et les universités ont fourni à la recherche publique française des moyens raisonnablement compétitifs. Notre pays a alors pris un net retard, attribuable à la fois aux organismes qui, devant faire face à des coupes budgétaires, n'ont pas su - ou voulu - préserver les nécessaires investissements liés au CSI (ces équipements devenant rapidement obsolètes) et aux communautés scientifiques qui, par nature morcelées, ne se sont pas suffisamment organisées et mobilisées pour que cette priorité CSI s'impose.

Le retard a été rapidement repéré et jugé inacceptable car de nature à mettre en péril le développement scientifique et l'innovation industrielle dans notre pays, et à affecter la souveraineté nationale dans les domaines de la défense, de l'économie et des risques naturels. Trois rapports successifs ont été pilotés par le Ministère de la Recherche dont le plus récent (Héon et Sartorius, 2005) affiche pour la France l'objectif d'atteindre une puissance d'un PFlop en 2011. Certaines de ses recommandations - mise en place d'un Conseil stratégique, regroupement des acteurs au sein d'une société civile, reprise des investissements - se sont d'ores et déjà concrétisées. Même si l'on peut regretter les difficultés auxquelles la mise en route de ces actions s'est heurtée, en raison de relations extrêmement difficiles entre des acteurs aux objectifs divergents, ce rapport a contribué à mettre la France sur la voie du redressement. Notons également, le caractère incitatif et mobilisateur qu'a joué l'Agence nationale de la recherche (ANR) vis à vis des communautés d'utilisateurs grâce à l'action "Calcul intensif et simulation".

La création du Comité stratégique du calcul scientifique intensif

Contrairement à de nombreux autres pays, la France ne s'est jamais dotée des moyens de définir une véritable politique nationale du calcul scientifique. C'est le rôle désormais dévolu au Comité stratégique du calcul intensif (CSCI) créé par un arrêté du ministre de l'enseignement supérieur et de la recherche en date du 28 juin 2007. Une des missions de ce Comité, mis en place en octobre 2007, est de "conduire des études et des réflexions ainsi que de formuler des propositions sur l'organisation et le renouvellement des équipements de calcul intensif". Dans le cadre de cette mission, le CSCI doit notamment tenir compte des activités de recherche et des besoins de la communauté scientifique.

La création du grand équipement national de calcul intensif (GENCI)

La création d'un Grand Equipement National de Calcul Intensif (GENCI) a été également formalisée en 2007, sous forme de société civile à quatre partenaires, l'état pour 50%, le CEA et le CNRS chacun pour 20% et les universités pour 10%. GENCI a une mission de maîtrise d'ouvrage nationale et de représentant de la France dans les infrastructures de recherche internationales. L'idée d'attribuer à GENCI la maîtrise d'ouvrage unique est que ce groupement puisse conduire un plan d'ensemble à moyen et à long terme, mieux que ne le ferait séparément chacun des partenaires "maîtres d'œuvre", CEA, CNRS et universités. GENCI est également en charge de promouvoir la stratégie européenne de la France.

En principe GENCI dispose pour les quatre prochaines années d'un budget annuel de 25 M€, suffisant pour remettre la France au niveau des premiers pays européens, Allemagne et Royaume-Uni. Ce budget, abondé par chacun des partenaires de GENCI proportionnellement à sa participation, devrait ensuite augmenter substantiellement de façon à permettre à la France d'être candidate à l'accueil du premier équipement petaflopique européen.

Une des difficultés auxquelles doit faire face GENCI tient à la différence des stratégies suivies par le CEA et le CNRS dans le domaine des investissements. Le premier dont l'objectif est de

garder une cohérence entre ses centres civil et militaire pour des raisons d'indépendance et de soutien à une politique industrielle, s'est tourné vers le constructeur national Bull dont il vient d'équiper ses deux centres en machines massivement parallèles scalaires (42 Tflop pour le CCRT et 52 pour le CEA militaire). Le second qui ne partage pas ces objectifs a pris la décision de s'équiper, sur son budget propre, d'une machine IBM, également "massivement parallèle scalaire" de 120 Tflop qui devrait être opérationnelle en 2008.

Ces investissements n'ont permis ni au CEA, ni au CNRS de contribuer au budget GENCI pour 2007 et il en sera de même en 2008 pour le CNRS qui a simplement proposé de contribuer au groupement à travers la mise à disposition d'heures de calcul.

La première opération faite sous l'égide du GENCI a été la commande pour le compte du CINES d'une machine de 50 Tflop (massivement parallèle), commande qui n'a pu bénéficier que du seul soutien de la contribution des universités et de celle versée par l'Etat.

III. Deux ambitions, une stratégie

A. Deux ambitions

Remettre la France dans le peloton de tête européen est une priorité à laquelle doit être associé le souci que les besoins des différentes communautés soient satisfaits de façon optimale². Ceci requiert que les communautés utilisatrices soient parties prenantes dans les choix d'investissement et la définition des stratégies à venir dans le domaine du CSI.

Retrouver une indépendance réelle au niveau de l'Europe constitue le deuxième objectif. La maîtrise des moyens (développement de supercalculateurs) apparaît effectivement clé, et pas seulement pour les programmes liés à la défense de notre pays. A échéance de quelques années, cette nécessaire indépendance ne peut probablement pas se construire dans le seul cadre national, trop étroit, alors que l'Europe a la dimension appropriée.

Les programmes européens en cours DEISA et PACE, dédiés aux infrastructures et dans lesquels la France est impliquée devraient y contribuer et aboutir dans les années 2010 à l'installation d'équipements "Petaflop". Cet objectif devrait s'accompagner d'une ambition à participer à la réalisation de ces futurs équipements, ce qui n'est pas le cas aujourd'hui, et s'inscrire en complémentarité par rapport aux équipements nationaux dont la croissance est également indispensable.

² Soulignons que le choix d'investir uniquement dans des machines massivement parallèles scalaires pose un problème sérieux à la communauté des climatologues. L'adaptation des codes, qui requiert de renforcer les équipes scientifiques, ne pourra en tout état de cause être opérationnelle qu'à échéance de 3 à 4 ans. Les simulations prévues, à partir de 2008, pour le 5^{ème} rapport du GIEC, ne peuvent être réalisées que sur des machines vectorielles. Le CNRS s'est engagé à ce que ces simulations, qui constituent une des clés d'une implication forte des équipes françaises dans ce prochain rapport, soient réalisées. Ceci implique soit un investissement complémentaire massivement parallèle vectoriel (2^{ème} tranche de la machine NEC-SX8), soit que l'ensemble des ressources vectorielles actuellement disponibles puissent être, sur une certaine période, dédiées à ces simulations.

B. Une stratégie en six points

1. Construire un plan stratégique glissant

Le Haut-conseil recommande que l'Etat, en l'occurrence les ministères chargés de la recherche, de la politique industrielle et de la défense, élaborent, en s'appuyant sur le tout nouveau Conseil d'orientation stratégique pour le calcul scientifique intensif, une véritable stratégie en la matière. Celle-ci doit être à l'écoute des communautés utilisatrices, affirmer clairement les objectifs visés dans la durée, préciser les moyens nécessaires et définir l'organisation chargée de mettre en œuvre ces moyens.

2. Confier au Ministère de la Recherche le rôle de Maître d'ouvrage au nom de l'Etat français.

3. Considérer le CSI comme une grande infrastructure de recherche et l'individualiser dans la Lolf.

Cette recommandation du Haut-conseil implique que soient appliqués au calcul scientifique intensif les processus de décision et les modalités de fonctionnement que le Haut-conseil recommande dans son avis conjoint sur les très grandes infrastructures de recherche. L'individualisation dans la Lolf est la condition nécessaire pour assurer un suivi et un contrôle tant de l'exécution de la stratégie annoncée que de la gestion de cette grande infrastructure, d'autant qu'elle intéresse plusieurs ministères, même si le Ministre de la Recherche en est le pilote effectif.

4. Redéfinir la gouvernance de GENCI

GENCI peut assurer cette délégation mais cela suppose que l'Etat en soit le seul actionnaire au travers des ministères concernés, à savoir, le ministère chargé de la recherche, le ministère de l'industrie et le ministère de la défense. Cela suppose également une autre approche de sa gouvernance autorisant un dialogue confiant avec les organismes de recherche et avec tous ses autres partenaires. Il s'agit là d'un facteur clé de succès tout à fait essentiel.

5. Construire un plan de formation supérieure dans le domaine de la simulation numérique et de son application aux diverses disciplines.

Le retard pris par plusieurs communautés scientifiques françaises dans l'utilisation du calcul intensif et de la simulation numérique doit être rapidement corrigé. Au-delà des actions incitatives qui doivent être poursuivies et développées, la création d'enseignements à la rencontre des disciplines qui les requièrent et des techniques nécessaires à l'utilisation du calcul scientifique intensif doit être vivement recommandée dans plusieurs établissements d'enseignement supérieur. Ces enseignements, devraient être labellisés et couvrir les différents cycles d'enseignement supérieur, notamment le doctorat. Dans tous les cas, ils devraient s'intégrer aux enseignements existants, et notamment aux écoles doctorales sans créer de nouvelles spécialisations.

6. Proposer un projet de supercalculateur dans le cadre d'une stratégie européenne

La future présidence française de l'Union européenne fournit l'occasion de proposer à nos partenaires européens un projet de supercalculateur européen, qui s'inscrit dans une politique industrielle volontariste assurant une certaine indépendance de l'Europe en cette matière. Cela impliquerait une préparation approfondie de ce projet dans ses multiples aspects, scientifiques, techniques et industriels. Il conviendrait notamment de choisir entre un outil dédié à une communauté particulière et un équipement d'accès aussi général que possible. A cet égard, les recommandations de l'Académie des technologies devraient être prises en compte. De plus, la question d'une volonté européenne de favoriser l'émergence d'un ou plusieurs constructeurs européens capables de concevoir et d'assembler de tels supercalculateurs devrait être posée.

Enfin, le Haut-conseil recommande que la France soit candidate pour accueillir sur son territoire le premier élément petaflopique de cette infrastructure européenne, d'assurer la maîtrise d'œuvre de ses divers périphériques et d'en gérer efficacement l'évolution et le fonctionnement. Ceci requiert un soutien annuel, supplémentaire par rapport à l'effort national, de 20 à 25 M€.