

# 1994 - 2004



Cet ouvrage a été réalisé à l'occasion du 16<sup>ème</sup> Forum et du dixième anniversaire d'une collaboration lancée en 1994 par le CEA, le CNRS et l'INRIA pour promouvoir le calcul de haute performance en France.

**Avril 2004**

**Avertissement** : Les idées avancées et positions tenues dans cet ouvrage n'engagent en aucun cas l'organisme d'appartenance des auteurs respectifs, ceux-ci ne s'exprimant qu'en leur nom propre.

# Sommaire

	<b>Page</b>
<b>INTRODUCTION</b>	<b>5</b>
<b>1 - LE CALCUL DE HAUTE PERFORMANCE EN FRANCE</b>	<b>9</b>
<b>2 - LA CONFRONTATION ENTRE AMBITIONS ET MOYENS</b>	<b>23</b>
<b>3 - QUELLES FORMATIONS POUR LE CALCUL DE HAUTE PERFORMANCE ?</b>	<b>31</b>
<b>4 - LE CONTEXTE MONDIAL</b>	<b>39</b>
<b>5 - LE CONTEXTE EUROPEEN</b>	<b>55</b>
<b>6 - LES PROGRAMMES INCITATIFS EN FRANCE</b>	<b>69</b>
<b>7 - DIX ANNEES D'EVOLUTION TECHNOLOGIQUE</b>	<b>79</b>
<b>8 - QUELQUES EXEMPLES D'UTILISATIONS</b>	<b>87</b>
<b>9 - CONCLUSIONS</b>	<b>117</b>
<b>GLOSSAIRE</b>	<b>121</b>

**Contributions - Remerciements**



## INTRODUCTION

En 1992, le CADAS avait conduit une enquête sur la pénétration de la simulation numérique dans la recherche et l'ingénierie française. L'état des lieux était satisfaisant, même si on notait déjà certaines faiblesses en formation et dans l'industrie du logiciel. Le rapport<sup>1</sup> confirmait que, dans tous les grands secteurs scientifiques, la méthode classique basée sur la théorie et l'expérience avait cédé la place à une méthode alliant théorie, simulation et expérience, avec des avancées inégales dues notamment à l'hétérogénéité des moyens. L'apparition de la technologie « massivement parallèle » laissait prévoir le prolongement d'une courbe d'expansion qui durait déjà depuis 30 ans. Le rapport préconisait un effort collectif de grande envergure pour éviter le piège d'équipes autonomes mais isolées et potentiellement mal équipées.

En 1994, devant le foisonnement des initiatives et des équipements en calcul parallèle, ORAP est créé par le CEA, le CNRS et l'INRIA pour coordonner tous ces efforts. Jacques-Louis Lions, premier président d'ORAP<sup>2</sup>, suggère une structure souple de coordination dont les efforts porteront sur la formation, la mise en réseau des moyens et surtout l'ouverture et l'information entre les différents secteurs scientifiques tant académiques qu'industriels. Il reprend à cette occasion les remarques formulées dans le rapport Rubbia<sup>3</sup> sur la faiblesse de l'offre des fournisseurs européens malgré une position de pointe de la recherche dans le domaine des systèmes parallèles avancés. Il désigne alors les programmes cadres européens (PCRD) à venir comme outils potentiellement majeurs pour ce développement européen tant attendu.

Les années qui suivent montrent un effort de concentration en termes d'équipements nationaux de type vectoriel puis parallèle, en même temps qu'une

---

<sup>1</sup> Le calcul scientifique, Rapport du Comité des Applications de l'Académie des Sciences, La vie des Sciences, Comptes-rendus, série générale, tome 9, 1992, n°1, p.63-83, sous la direction de Robert Dautray.

<sup>2</sup> Calcul parallèle, ORAP, J-L Lions, 1994

<sup>3</sup> C.Rubbia et al. "Report of the High Performance Computing and Networking Advisory Committee" Vol. 1 (CEC: October 1992)

diffusion de plus en plus large de la culture du parallélisme à la base. Les centres nationaux figurent encore en position honorable dans le TOP500 en 1994. Une étape importante de développement de centres « méso-informatiques » de proximité débute dans les années 1997, à l'initiative du CNRS<sup>4</sup> ; cette politique d'équipements de centres thématiques ou généralistes mais régionaux sera appuyée par des budgets soutenus pendant 4 ans et relayée par un appel d'offre du Ministère de la recherche. Le but de cette stratégie d'équipements est de permettre aux utilisateurs une utilisation optimisée des moyens concentrés tout en évoluant dans le changement de paradigme de la simulation : l'utilisation d'une réalité virtuelle en lieu et place de l'expérimentation.

Un effort important sur le réseau vient appuyer également cette mutation. Comme le note Paul Caseau<sup>5</sup>, la devise « *the network is the computer* » s'est répandue du haut en bas de la pyramide des centres de simulation. Répartir et coupler entre eux les traitements, « concevoir parallèle » plutôt que centralisé est en train de devenir un réflexe. On peut donc penser que, pour peu que les difficultés d'organisation et de financement de quelques grands projets axés sur la prévision du futur – là où le Téra-flop est obligatoire – soient dominées, le paradigme de la simulation en réalité virtuelle sera validé, et les outils qui lui sont nécessaires le seront également. Et qu'ils se répandront alors naturellement, car la culture du parallélisme les aura précédés. Suivant ce constat optimiste, les centres nationaux continuent à s'équiper « pour faire mieux à moyens constants » et l'organisation, nécessaire par exemple pour le traitement de la complexité, n'apparaît guère que pour les questions liées à la climatologie.

Vers la fin des années 90, l'aboutissement des projets américains (ASCI) et japonais (Earth simulator), soutenu par une politique volontariste des gouvernements souhaitant porter leur industrie nationale, place le monde scientifique français devant un constat de sous-équipement flagrant. Ce constat est le point de départ de beaucoup des réflexions contenues dans l'ouvrage que l'on va lire.

Il ne faut cependant pas prendre l'effet pour la cause: le but de la recherche ou de l'industrie française n'est certainement pas d'avoir les meilleures place du TOP500. Mais la puissance des architectures utilisées, et donc le rang occupé dans ce classement, *sont des révélateurs* d'une évolution qu'il convient d'expliquer.

On trouve les fondements de cette explication en confrontant deux chiffres : le facteur de croissance des puissances dans le TOP500 est voisin de 500 en 10 ans, il n'est que de 50 (environ) pour les sites français. Ces deux chiffres correspondent à deux attitudes vis-à-vis de la simulation. On peut, en effet, considérer celle-ci *soit comme un centre de coût, soit comme une opportunité stratégique*.

Bien entendu, tout le monde, entreprises ou décideurs publics, sait que la simulation est un centre de coût, et donc que le rapport coût/performance doit être optimisé. La différence porte donc sur « d'abord un centre de coût » ou « d'abord une opportunité stratégique ». Les décideurs du premier groupe, dont la France fait partie, considèrent les besoins, peu ou prou, comme des données. De sorte que les budgets restent à

---

<sup>4</sup> Réflexions sur une politique d'équipement mésoinformatique au CNRS, COMI, Mai 1997

<sup>5</sup> Paul Caseau, Crise ou mutation de la simulation numérique, 1996, révision 2002

peu près constants, et que le facteur de croissance ne peut guère dépasser 50 en 10 ans.

Tout autre est l'attitude des décideurs du second groupe, qui considèrent que les besoins résulteront, très largement, des opportunités créées par la simulation elle-même, et par la croissance des capacités. Le facteur 500 est donc le résultat d'une attitude volontariste (souvent confortée par des raisons de Défense) et d'un pari sur l'avenir.

Les conséquences de ces deux attitudes sont décrites dans les différents chapitres qui composent ce livre.

Le chapitre 1 présente la situation française en 2003, et la compare à ce qu'elle était dix ans plus tôt. Le chapitre 2 montre alors comment les différents acteurs se sont adaptés à l'évolution, et comment ils ont été amenés à s'autocensurer, à renoncer à une partie de leurs ambitions. Il s'appuie, pour cela, sur le travail mené par un groupe de l'Académie des Technologies, et sur un questionnaire que ce groupe a fait circuler. Il faut bien voir, en effet, qu'une enquête comme le TOP500 n'est qu'un indicateur partiel. C'est lorsqu'on fait le point, non pas seulement sur la puissance, mais sur le nombre d'heures accessibles aux chercheurs ou ingénieurs que l'on comprend que la limitation des ambitions était inévitable. Le chapitre 8 décrit quelques exemples d'utilisation et de projets dans les entreprises.

Durant ces dix années, la France a lancé un certain nombre de programmes incitatifs, destinés en particulier à accompagner les efforts des constructeurs de codes de simulation. Le chapitre 6 fait le point sur ce sujet.

La situation est différente hors de France, comme le montrent les chapitres 4 et 5. Le premier traite de l'évolution mondiale. Le second décrit, de façon détaillée, la situation européenne. On constate que l'implication des acteurs publics a été forte dans tous les cas. Les industriels ont, dans de nombreux pays, parié sur la simulation, et c'est ce qui explique qu'ils ne soient pas absents du TOP500. Mais *l'impulsion essentielle est venue des agences et des institutions gouvernementales*. On peut dire qu'aujourd'hui la course à la puissance est relancée : le « passage de la barre » du Teraflop s'est fait dans les délais qui avaient été annoncés il y a dix ans, et c'est maintenant le passage de la barre suivante (les architectures au niveau Pétaflop) qui occupe les chercheurs, les constructeurs, et les décideurs publics. Il est clair que le succès du Earth Simulator japonais, ainsi que du programme ASCI américain, ont joué un grand rôle dans ce mouvement.

Les chapitres 3 et 7 reprennent le panorama de façon transversale (indépendante des pays) en traitant les problèmes communs à tous ceux qui sont impliqués dans la simulation et le Calcul à Hautes Performances. Les verrous qu'il faut « faire sauter » sont nombreux. La formation est l'un des plus importants: elle est traitée par le chapitre 3. Les problèmes posés par l'évolution des processeurs et des architectures sont évoqués au chapitre 7.

Le chapitre 9 est une conclusion générale.

La création d'ORAP, en 1994, se situait en pleine période de transition du « calcul vectoriel » vers le « calcul parallèle ». Dix ans après, le calcul de haute performance vit une nouvelle évolution de fond, le parallélisme n'étant qu'une des formes d'une « distribution » des traitements et des données.

ORAP a acquis au cours de cette décennie une visibilité à travers ses 15 forums et 39 bulletins Bi-ORAP notamment. Ce dixième anniversaire est l'occasion, tout en conservant le sigle ORAP qui a atteint une certaine notoriété, d'abandonner la référence au « parallélisme » et de redéfinir la mission de cette collaboration : « **ORAP, promouvoir le calcul haute performance** ».

# 1

## LE CALCUL DE HAUTE PERFORMANCE EN FRANCE

L'objectif de ce chapitre est de dresser un état des lieux du calcul de « haute performance » en France en 2004. Cette analyse s'inscrit dans la suite du rapport réalisé en 1994, sous la direction de Jacques-Louis Lions et notamment par Claudine Schmidt-Lainé et qui a conduit à la création d'ORAP.

Le calcul scientifique au sens large occupe une place de plus en plus importante dans l'activité de recherche, que ce soit comme domaine de recherche en tant que tel, ou comme outil de simulation de processus complexes ou encore comme outil d'analyse de résultats expérimentaux (pour faire des prévisions, de l'optimisation, de la conception). L'augmentation des capacités des ordinateurs rend en effet possible la résolution de problèmes de plus en plus complexes (la loi de Moore qui prévoit un doublement du nombre de transistors par unité de surface sur les circuits intégrés, tous les 18 mois, se vérifie depuis près de 40 ans ...). Il est donc de plus en plus difficile de donner une image complète et précise du calcul de haute performance.

### La méthodologie - Les choix

Le conseil scientifique d'ORAP a souhaité, à l'automne 2003, la réalisation de cette étude et il a semblé indispensable de réaliser une telle enquête en utilisant l'outil Internet qui est sans doute l'un des facteurs essentiels de l'évolution du calcul dans la dernière décennie.

Une réflexion a été menée qui a conduit, en collaboration entre ORAP et le groupe calcul<sup>1</sup>, de proposer une classification des équipements existants suivant trois types de

---

<sup>1</sup> Le groupe calcul, animé par Violaine Louvet et Thierry Dumont est une émanation du GdS Mathrice, dirigé par J. Marchand. Son objectif est d'offrir à tous les utilisateurs du calcul, qu'ils soient ingénieurs de recherche, enseignants-chercheurs,

critères principaux : les domaines d'applications, la localisation géographique et le type d'équipements. Il existe bien sûr de très nombreuses façons d'utiliser l'outil informatique pour « faire du calcul » et il est très difficile d'essayer d'en dresser un tableau exhaustif. L'intérêt de rassembler les résultats dans une Base de Données accessible via Internet est qu'il devient possible de faire une recherche par domaines d'applications ou par localisation géographique, critères que nous pourrions enrichir pour suivre les évolutions qui ne manqueront pas de bouleverser le paysage du calcul scientifique en France.

Pour le type d'équipements, nous avons décidé de distinguer cinq « niveaux d'équipements » correspondant à des besoins/usages/applications différents :

- les grands centres de calcul nationaux : il en existe deux en France, le CINES (à Montpellier) et l'IDRIS (à Orsay)<sup>2</sup>,
- les centres régionaux ou thématiques (parfois appelés "méso-centres"),
- les ressources propres des organismes de recherches (notamment EPST et EPIC),
- les ressources des entreprises,
- les ressources des laboratoires (qui peuvent aller jusqu'à des grappes de PC).

Pour les types d'applications, nous avons choisi de nous baser sur la répartition en « comités de programme » qui sont communs au CINES et à l'IDRIS, sans que cela soit explicite. Pour la localisation géographique, nous avons opté pour le découpage actuel en 19 délégations régionales du CNRS, qui nous semblait mieux respecter l'équilibre entre les différentes zones en ce qui concerne le calcul, que, par exemple les régions administratives pour lesquelles la région "Ile de France" serait sur-représentée.

Du point de vue technique, le site web est basé sur le logiciel libre SPIP.

La présentation va commencer par essayer de décrire la situation actuelle pour ces types d'équipements et les problèmes spécifiques qui y sont associés. On présente ensuite certains aspects du calcul GRID et de la pérennisation des logiciels. Le but de ce chapitre est de présenter une analyse synthétique des informations recensées au 15 mars 2004. Il ne s'agit donc pas de dresser une liste complète des données et nous renvoyons les personnes intéressées à consulter le site web et à faire part des éventuelles mises à jour et ajouts : <http://www.math.cnrs.fr/calcul/>

## **Centres nationaux pour le calcul de haute performance**

Il existe actuellement deux grands centres pour le calcul scientifique qui ont à la fois une vocation nationale et qui couvrent largement les différents domaines

---

chercheurs, doctorants, un espace de discussion, d'échange et d'information en utilisant notamment une liste de discussion et un site web, dont une partie est commune à ORAP.

<sup>2</sup> Nous devons citer également deux centres d'envergure « nationale » sur lesquels nous reviendrons : le centre de l'IN2P3 et le CCRT.

d'applications : le CINES et l'IDRIS. Le financement de ces deux centres est assuré, pour l'essentiel, par le ministère chargé de la recherche (à travers le CNRS pour ce qui concerne l'IDRIS).

L'IDRIS (Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique), fondé en novembre 1993, a pris la suite du CIRCE ; il est le centre majeur du CNRS pour le calcul numérique intensif de très haute performance et est situé à Orsay. Il emploie 55 personnes et a un budget d'investissement moyen (entre 1993 et 2000) de 10 M€ par an. Le CINES (Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur) est un établissement public créé en 1999 sous la tutelle du Ministère de la Recherche. Il fait suite au CNUSC (Centre National Universitaire Sud de Calcul) et est situé à Montpellier. Il y a 44 personnes au CINES et le budget d'investissement de 4 M€ an. Les rapports scientifiques du CINES et de l'IDRIS, disponibles sur leurs sites respectifs, présentent de façon détaillée l'utilisation qui est faite de leurs moyens et les résultats obtenus.

On doit mentionner ici, vu leur taille et leur importance à l'échelle nationale, le CCIN2P3 et le CCRT (Centre de Calcul Recherche et Technologie). Le centre de calcul de l'IN2P3 est un équipement de type « ferme de PC » (environ 600 PC). Le CCRT est la « partie ouverte » des moyens de calcul du CEA, en commun avec des industriels (EDF, ONERA, SNECMA, TURBOMECA) et des collaborations académiques. Créé en octobre 2003, le CCRT dispose de systèmes d'une puissance de 2 Téraflopps en « parallèle » et 350 Gigaflopps en « vectoriel » et il connaîtra une évolution très prochainement.

La situation des ces grands centres français les place assez loin dans les classements mondiaux. Par exemple, le TOP500<sup>3</sup> dresse la liste des machines les plus puissantes depuis 1993. La part de la France a été relativement modeste, même à l'échelle européenne<sup>4</sup>. En novembre 2003 (dernière publication de ce recensement), le premier système français est en 15<sup>ème</sup> position (CEA-DAM), le suivant est 55<sup>ème</sup> (Total-Fina) puis 61<sup>ème</sup> (Société Générale), l'IN2P3 est en 167<sup>ème</sup> position, l'IDRIS en 264<sup>ème</sup> position, Météo-France en position 280 et le CINES en 349.

La part réservée à la recherche en France fin 2003, si on cumule les puissances crêtes des centres informatiques destinés à la recherche qui figurent au TOP500 (CEA-CCRT, IN2P3, CINES, IDRIS, IMAG-INRIA), est de 6,4 Téraflopps à comparer à 18 Téraflopps en Angleterre et 16 Téraflopps en Allemagne. Cette situation s'explique notamment par l'absence de constructeurs Français. La part européenne est faible par rapport aux Etats-Unis et au Japon<sup>5</sup>.

Les centres actuels fonctionnent assez bien : le taux d'utilisation des machines est satisfaisant et leurs utilisateurs sont satisfaits des services offerts. Il est souvent noté qu'un rapprochement ou une harmonisation entre les différents centres serait souhaitable tant pour les utilisateurs que pour la visibilité de ces centres.

---

<sup>3</sup> <http://www.top500.org/>

<sup>4</sup> Voir le chapitre 5 : le contexte européen

<sup>5</sup> Voir le chapitre 4 : le contexte mondial

Le nombre d'utilisateurs est également un indicateur intéressant. On considère qu'il y a environ 2000 utilisateurs à l'IDRIS. Dans le rapport scientifique 2003, il est rappelé que le nombre de projets supportés par l'IDRIS en 2001 et 2002 était de 450 pour environ 1800 personnes. Nous renvoyons aux rapports d'activités du CINES et de l'IDRIS, que l'on peut trouver sur leurs sites respectifs, pour une présentation plus détaillée des utilisations et des résultats obtenus.

## Centre régionaux ou thématiques de calcul

A une échelle intermédiaire, un certain nombre de centres de calcul régionaux ou thématiques ont été mis en place. Il s'agit en général de grappes de PC ou de super-calculateurs de taille intermédiaire. Ces méso-centres ont notamment été développés grâce au plan « méso-informatique » du CNRS (1997 - 1998 -1999), ensuite relayé par des appels d'offres du ministère de la recherche. Dans l'immédiat, ils ont une visibilité assez faible. Il n'existe pas, à notre connaissance, de liste publique, à part sur le site du groupe calcul-ORAP. Les informations ci-dessous sont issues du site au 20 mars 2004 et nous vous invitons (à nouveau) à consulter le site pour une analyse plus récente.

Bien que cette classification soit quelque peu arbitraire, nous pouvons essayer de distinguer les centres plutôt généralistes mais d'influence régionale et les centres plutôt thématiques qui peuvent avoir une dimension nationale (voire internationale).

### CENTRES REGIONAUX

- CRIHAN - St Etienne de Rouvray (IBM Power4)
- CICT - Centre Interuniversitaire de Calcul de Toulouse (SGI)
- CIMENT - Grenoble (grappes de PC)
- C3I - Guadeloupe (HP, grappe)
- CCH Centre Charles Hermite - Nancy (SGI)
- CCR Jussieu - Paris (IBM Power4. - RS6000)
- Le CRI de l'Université Paris Sud (IBM Power4)
- PCIO Pôle de Calcul Intensif de l'Ouest - Rennes (SUN)
- Pôle IDFS - Cachan (SGI)
- Pôle M3PEC - Bordeaux (IBM Power4)
- PSMN de l'ENS Lyon (SUN)
- Université de Nantes (HP)
- Université de Reims Champagne-Ardenne (SUN)
- Université de Valenciennes (Cray)
- Université Louis Pasteur de Strasbourg (HP)
- USTL - Lille (IBM Power4)

### CENTRES THEMATIQUES

- Centre de Calcul IN2P3 - Lyon (grappe)
- EPEE (combustion) - Orléans (grappe)
- Infobiogen - Evry (SUN)
- IPG - Institut de Physique du Globe de Paris (grappe)

- Il existe également quelques centres de calcul destinés aux sciences de la vie.

On pourra constater que certains de ces centres n'existaient pas en 1994. On note une nette augmentation du nombre de ces centres et une répartition géographique relativement équitable. Cette multiplication peut s'expliquer par la possibilité de trouver des fonds notamment auprès des régions, dont les moyens ont été sensiblement accrus de par la politique de décentralisation, pour l'acquisition du matériel. En revanche, il est souvent plus difficile d'assurer la maintenance et le personnel susceptible de « faire tourner » ce type d'équipement.

Ce type d'équipement est certainement utile (et permet de tester certaines simulations et de mettre au point les codes avant de les soumettre aux centres nationaux). Une enquête auprès des laboratoires associés au département SPM du CNRS a été menée en 2000 par Olivier Pene, à laquelle 84 laboratoires ont répondu : en plus des moyens de calcul locaux, 36 laboratoires utilisent les centres nationaux (IDRIS et CINES) et 37 des centres intermédiaires, tels que des centres universitaires, des centres spécifiques ou des centres « méso-informatiques » regroupant plusieurs laboratoires. Souvent les utilisateurs des centres nationaux utilisent aussi des « centres locaux », ce qui confirme que les méso-centres sont, non pas concurrents, mais plutôt complémentaires des grands centres (préparation de jobs, etc). De même, les laboratoires utilisateurs de centres intermédiaires possèdent souvent des moyens locaux, réservant ces moyens de calcul plus modestes aux calculs légers ainsi qu'à la préparation des calculs lourds. Au total 56 labos utilisent des moyens qui leur sont extérieurs, ce qui est beaucoup et démontre une importante activité de calcul scientifique qui souvent dépasse les moyens des laboratoires : on cherche ailleurs une grosse puissance de calcul ou des logiciels rares et/ou coûteux.

Il serait bon d'avoir un retour d'expérience plus précis sur l'utilisation de ces centres et préciser leurs missions ; leur diversité est intéressante car cela permet de couvrir des besoins eux aussi très variés. Il serait souhaitable de pouvoir transférer plus facilement les demandes vers le centre le plus adapté pour l'application visée ... et pour cela il faudrait au moins disposer d'une vision globale de ces centres.

## Organismes publics

En complément de ces « méso-centres », il existe un certain nombre d'équipements qui appartiennent à des organismes publics (souvent des EPST ou des EPIC). On consultera le site pour une liste complète et pour des détails sur chacun de ces centres.

- ANDRA - Châtenay-Malabry
- BRGM - Orléans
- CEA - Bruyères le Châtel
- CEMAGREF - Aubière(63)
- Centre National de Génotypage - Evry
- CERFACS - Toulouse
- EDF - Clamart
- Gaz de France

- Genoscope - Evry
- IFREMER - Brest
- Institut français du pétrole - Rueil
- Météo France - Toulouse
- Ministère de la défense
- ONERA - Chatillon
- SHOM - Brest

## Entreprises

Il est plus difficile encore de recenser les équipements présents dans les entreprises, car il s'agit d'un domaine stratégique pour lequel on se heurte assez facilement au secret industriel. Notons par ailleurs que nombre de ces entreprises participent à certains équipements cités plus haut ; par exemple EDF, SNECMA et ONERA participent au CCRT du CEA.

- Alcatel
- Bouygues Telecom
- Cegetel
- Compagnie Générale de Géophysique
- France Télécom
- PSA
- Renault
- Saint Gobain
- SNECMA - Villaroche
- SNPE - St Médard en Jalles
- Société Générale
- Total
- Turbomeca

## Laboratoires

Les machines qui équipent les bureaux ont des capacités de calcul bien plus importantes que les premiers supercalculateurs. Il est donc tout à fait possible de réaliser des codes d'essais ou de tester des méthodes numériques sur une machine de bureau standard. Les laboratoires s'équipent également de grappes de PC qui sont d'un coût très abordable et permettent, comme pour les méso-centres, de tester une application avant de faire une demande de moyens de calcul intensif auprès d'un centre national.

Il n'est pas possible de dresser une liste exhaustive des ressources de laboratoires, d'autant que celle-ci est très changeante et nous renvoyons au site web pour une information que nous espérons la plus à jour possible. La liste actuelle des ressources de laboratoires sur le site est la suivante :

- Centre de Mathématiques Appliquées - Palaiseau
- Centre de Mise en Forme des Matériaux - Sophia Antipolis
- Cluster du laboratoire MAPLY
- Laboratoire de Physique de l'Etat Condensé - Le Mans

- Laboratoire de Physique et Chimie de l'Environnement - Orléans
- Laboratoire des Ponts et Chaussées - Paris
- LaBRI - Bordeaux
- MAB - Bordeaux
- MASTER - Bordeaux
- P2CHPD - Lyon
- Physique des Interactions Ondes-Matière - Bordeaux

Rappelons pour mémoire que sur l'enquête auprès de 84 laboratoires du département SPM, menée en 2000, 56 indiquaient utiliser des moyens informatiques. Le nombre de laboratoires utilisateurs de moyens de calcul est donc très important. Nous avons décidé de fixer la barre à 25 Gflops pour fixer les idées. Cette limite sera réévaluée périodiquement.

Afin d'illustrer la diversité des situations et des utilisations de l'informatique à ce niveau, on présente, à titre d'exemple, quelques situations : Orléans, Lyon et Bordeaux.

#### ORLEANS

Il y a sur le campus d'Orléans (CNRS-Université) quatre équipements de calcul haute performance :

- au CBM (centre de Biophysique moléculaire) : une ferme de 24 PC est utilisée principalement par l'équipe de G. Kneller pour l'étude de macromolécules ;
- au laboratoire d'Informatique fondamentale d'Orléans (LIFO) : une grappe de 16 PC ;
- au laboratoire de Chimie des substances naturelles (ICOA) : 6 stations de travail pour des applications à visées pharmaceutiques ;
- la fédération EPEE (énergie, propulsion, environnement et espace) dispose d'une grappe de 60 PC pour faire des simulations d'écoulements turbulents ou de combustion.

Le point commun entre ces quatre équipements est qu'aucun d'eux ne dispose de personnel spécifique pour le maintenir et qu'ils sont utilisés à plein régime par des chercheurs et enseignants-chercheurs. Il y a par ailleurs un cluster de PC pour l'analyse des données (projet Pulsar) à l'observatoire de Nançay et également des moyens de calcul au BRGM. Comme on le voit, il y a de nombreux utilisateurs qui n'interagissent entre eux que très exceptionnellement.

#### LYON

Depuis 1999, les principaux acteurs du calcul haute performance des différents établissements du site Lyonnais (ENS (Ecole Normale Supérieure), ECL (Ecole Centrale Lyon) et UCBL) ont décidé de se rassembler au sein d'une structure fédérative souple, la Fédération Lyonnaise de Calcul Hautes Performances (FLCHP). Cette fédération est constituée du *Pôle Scientifique de Modélisation Numérique* PSMN à l'ENS-Lyon, du *Pôle de Compétence en Calcul Haute Performance Dédié* P2CHPD à

l'UCB Lyon en association avec l'ECL et l'INSA, du *Pôle de Calcul et Modélisation en Sciences de l'ingénieur et de l'information* PCMS2I à l'ECL, des équipes *GRAAL* (anciennement *ReMaP*) et *RESO* du Laboratoire d'informatique pour le parallélisme (LIP à l'ENS-Lyon). L'un des objectifs de cette fédération est de promouvoir le calcul scientifique hautes performances sur le site lyonnais, dans des domaines extrêmement variés (qui vont de l'astrophysique et des sciences de la terre aux sciences pour l'ingénieur), avec une implication de plus de 150 chercheurs permanents et avec une forte interaction avec les formations de 3<sup>ème</sup> cycle (masters et doctorats).

Dans le cadre de la FLCHP, le Pôle de Compétence en Calcul Haute Performance Dédié (P2CHPD) regroupe des équipes de recherche des établissements d'enseignement supérieur de Lyon (UCB Lyon I, ECL, INSA Lyon, CNRS), qui utilisent la simulation numérique intensive. Le *Pôle Scientifique de Modélisation Numérique* PSMN, initié par des physiciens, n'est pas une structure de services mais permet plutôt de structurer l'activité scientifique. Il y a également beaucoup d'utilisateurs en mécanique des fluides à Lyon et bien sûr à l'IN2P3 (déjà évoqué auparavant).

## BORDEAUX

A Bordeaux, il y a plusieurs équipements :

- en informatique (enseignement et recherche), autour du LABRI et de l'ENSEIRB, 32 proc. (7 quadri-pro Power4 et 1 quadri-pro Power5)
- en mathématique (Institut de math. de Bordeaux), 41 processeurs (Cluster de bi-pro Xeon et 5 serveurs EV+1ES40+1ES45) pour des applications à la turbulence, écoulements multifluides multiphase et interaction laser-matière
- des machines pour l'enseignement (un GS80 et un ES45 soit 12 proc.) : calcul parallèle, mécanique des fluides
- en physique (écoulements, dynamique moléculaire) 20 proc. (machines ORIGIN 2000 et 3000) à l'ENSCP.

Notons également des interactions fortes dans le projet INRIA Scalapplix et une dynamique autour du calcul haute performance à travers des journées scientifiques du pôle M3PEC.

Comme on le voit sur ces quelques exemples (pour lesquels nous ne prétendons pas à l'exhaustivité), les situations locales des laboratoires sont complexes et variées. Il est difficile d'en présenter une image claire même si de nombreuses initiatives de structuration sont menées.

Au niveau des laboratoires, le problème du personnel est encore plus important qu'au niveau des méso-centres car il est assez rare qu'un laboratoire dispose d'un personnel qualifié. Il ressort du rapport méso-informatique du CNRS (1997) et de l'enquête d'Olivier Pene que, sans conteste, le point le plus sensible est celui des ressources humaines. La diversité des moyens dont disposent les laboratoires est frappante, pour des raisons historiques ou géographiques, les institutions hôtes étant plus ou moins bien dotées en ingénieurs et techniciens informaticiens. Mais la misère est la condition la plus fréquente. 55 laboratoires ont un seul ingénieur ou technicien (ou même moins d'un en comptant les ingénieurs et techniciens prêtés par les centres de

calcul au prorata). 24 laboratoires n'ont absolument personne. Très souvent ce sont donc des chercheurs/enseignants, souvent des jeunes maîtres de conférences qui assument la fonction d'ingénieur réseau et système pour le laboratoire. Parfois, c'est un même doctorant qui assure la gestion d'une machine de calcul, et, une fois sa thèse soutenue, il est embauché par d'autres organismes et le matériel n'est alors plus géré de façon satisfaisante.

A propos de l'administration système et réseau, une initiative issue des laboratoires de mathématiques est à souligner. Il s'agit de la constitution d'un GdS appelé Mathrice (qui existe de façon informelle depuis 1999 et s'est structuré comme groupement de service, constituant le premier GdS du CNRS, en janvier 2004). Ce GdS, dont le groupe calcul est issu, permet aux ingénieurs de ces laboratoires d'échanger des informations, de mutualiser leurs expériences, de se rencontrer. Cela contribue à sortir les ingénieurs de leur isolement, à structurer une communauté qui souffre souvent de manque de reconnaissance et à mettre en place des outils au niveau national (comme par exemple un annuaire de la communauté mathématique qui est une première étape permettant d'identifier les mathématiciens et rend possible la mise en place de services tel que l'utilisation de logiciels onéreux que tous les laboratoires ne peuvent s'offrir). Ainsi cette initiative a d'abord un intérêt important pour l'ensemble des ingénieurs qui y participent, mais elle présente également un intérêt potentiel pour les utilisateurs que sont les mathématiciens.

## Le calcul distribué sur la toile - GRID

Cette classification en niveaux est bien entendue réductrice et certains équipements sont difficiles à classer. En réalité, la situation est encore beaucoup plus complexe car la possibilité de faire du calcul « à travers le réseau » complique encore l'analyse de la situation. En effet, si les capacités de calcul d'un processeur augmentent, celles du réseau augmentent encore beaucoup plus vite et cela conduit à rendre attractives des solutions distribuées : comme le web est une façon de distribuer les informations sur la toile, on pourrait délocaliser les capacités de traitement de cette information ; c'est, de façon caricaturale, le principe des projets de type GRID ou de méta-computing. Ces solutions posent bien entendu beaucoup de problèmes techniques, de sécurité .... et font l'objet de travaux très importants soutenus notamment au niveau européen, dans le cadre du 6<sup>ème</sup> PCRD, et au niveau national par l'ACI GRID.

Il n'y a pas encore de solution clef en mains - même si des initiatives telles que le projet GLOBUS<sup>6</sup> vont dans ce sens - et cela reste encore du domaine de la prospective. On citera par exemple le projet EGEE qui est un projet européen avec un budget de 32 M€ dans 21 pays.

Notons que des expériences ont montré la faisabilité de cette approche, comme par exemple le projet seti@home, lancé par l'université de Berkeley en 1998 et qui distribue l'analyse de paquets de données sur des millions de PC dans le monde entier,

---

<sup>6</sup> <http://www.globus.org>

réalisant à distance et pour un investissement notablement plus faible que la machine japonaise Earth Simulator, un nombre d'opérations par seconde supérieur (avec une puissance établie de 70 Téraflops et plus de  $4.10^{21}$  opérations en virgule flottante effectuée depuis le début du projet !).

Bien entendu, tous les problèmes scientifiques, loin de là, ne se prêtent pas facilement à ce découpage en (tout) petits problèmes indépendants : il s'en faut même de beaucoup. Citons trois autres initiatives : pour l'étude du repliement des protéines, le projet [folding@home](#) annonce avoir utilisé plus de 500.000 CPU<sup>7</sup>. Pour des problèmes de cryptographies, il a été possible de « casser » un code RSA (défi RC5-64 et désormais RC5-72) grâce à des ordinateurs en réseau, depuis 1997 (actuellement équivalent à plus de 160.000 PentiumII 266 MHz<sup>8</sup>). Ou encore, dans le cadre du Téléthon, il a été lancé une opération « décrypton » demandant aux particuliers de contribuer à la recherche génétique en donnant du temps de calcul. Après le succès de l'édition 2002 (75.000 internautes participants), l'AFM, IBM et le CNRS ont décidé de s'associer, en 2003, pour développer une plate-forme technologique permettant, pour une durée de trois ans, de réaliser des opérations de calculs partagés. Cependant, l'analyse du génome a également recours aux super-calculateurs les plus puissants, comme celui du CEA (dans le cadre d'une collaboration avec Infobiogen, en mai 2003), ce qui prouve, si besoin était, que de nombreuses voies sont envisagées et complémentaires.

On pourrait citer également ici le projet européen DEISA, porté par le directeur de l'IDRIS, Victor Alessandrini, dont le but est de mettre en réseau cinq grands centres européens afin de partager les données au niveau européen mais pas de distribuer de très grosses simulations sur plusieurs sites. Peut-être est-ce une première étape, et après les solutions de partage de données (dont Napster est un exemple connu par les particuliers), viendra-t-il des solutions de partage de capacité de calcul.

L'évolution des processeurs et notamment le lancement de processeurs grand public (donc à bas prix) « 64 bits » permet, en schématisant, de doubler d'un coup les performances d'un ordinateur i.e. de gagner 18 mois par rapport à l'évolution normale prédite par la loi de Moore (AMD a lancé le Céléron, Intel l'Itanium, IBM le POWER4 qui équipe la dernière génération des ordinateurs Apple qui ont fait une entrée remarquée à la 3<sup>ème</sup> place du TOP500) et parallèlement l'amélioration de la bande passante du réseau (RENATER pour la communauté « recherche académique ») et déploiement du haut débit chez les particuliers (512 Kb/sec. en attendant le très haut débit ... qui sera sans doute considéré comme du très bas débit dans 10 ans) laissent penser que ces solutions n'ont pas dit leur dernier mot.

On pourra remarquer que l'utilisation de ces solutions (distribution de codes de calcul sur le réseau) n'est pas encore d'actualité dans nos laboratoires. Mais il y a fort à parier que ces solutions de type peer-to-peer ou « computing on demand » feront parler d'elles dans la prochaine décennie.

---

<sup>7</sup> voir le site <http://www.stanford.edu/group/pandegroup/folding/>

<sup>8</sup> voir le site <http://www.distributed.net>

## La pérennisation des codes

Le COMI (Comité d'Orientation des Moyens Informatiques) du CNRS, dirigé depuis juillet 2003 par Eric Horlait, cherche à apporter une réponse au problème de la pérennité des codes faits dans les laboratoires. Il n'est en effet pas rare qu'un code fait dans le cadre d'une thèse finisse dans un tiroir et qu'il ne soit pas réutilisé par les suivants. Il n'est pas rare non plus qu'une équipe développe une solution logicielle ad hoc pour résoudre un problème alors qu'une solution logicielle existante aurait pu leur apporter la solution directement... si elle avait été connue.

Plusieurs initiatives ont été conduites depuis longtemps pour tenter d'apporter des solutions à ce type de problème. On peut citer l'ANL (Atelier national du logiciel, puis Agence nationale du logiciel) créé en 1980 et qui disparaîtra au début des années 90, et, plus récemment, la création en 1999, par le CNRS, d'une unité propre de service : CODICIEL<sup>9</sup>.

En d'autres termes, on redécouvre la roue en permanence. Ceci a plusieurs explications : le fait que le travail de documentation d'un code soit fastidieux et peu valorisable ; l'évolution rapide des techniques qui fait qu'une application ne va pas forcément « tourner » sur la prochaine génération de machines ; et surtout un problème de suivi des projets.

On peut en effet distinguer plusieurs phases dans un tel projet de code/logiciel :

- le développement (qui est fait par un laboratoire, dans le cadre d'une (ou plusieurs) thèses, par exemple)
- l'industrialisation (qui correspond à la phase permettant à d'autres de s'approprier le code, d'en faire une documentation, d'améliorer l'interface utilisateur)
- la valorisation (qui va de la diffusion à un plus large public à la commercialisation lorsqu'elle se justifie)

La première phase est relativement bien traitée dans les laboratoires et de nombreux codes de calcul sont mis au point; la troisième phase est plutôt du ressort des services de valorisation interne ou externe. La phase intermédiaire, que l'on appellera d'industrialisation, nécessite des actions spécifiques et cela pourrait passer par la mise en place d'une structure chargée d'aider certains projets scientifiquement intéressants à conserver les réalisations, les documenter, améliorer l'interface utilisateur ou la procédure d'installation, permettre leur utilisation par d'autres.

Cette problématique n'est pas simple vu la rapidité d'obsolescence de certains langages ou de supports de stockage qui seront sans doute difficile pour les historiens des sciences à étudier (par exemple, certaines cartes perforées contiennent sans doute des idées très profondes mais qui sont malheureusement perdues). On pourra remarquer également que si les implémentations sont périssables, il n'en est pas de même des méthodes de discrétisation ou des algorithmes, qu'il serait important de pouvoir conserver mais cela suppose de savoir comment les classer, les retrouver.

---

<sup>9</sup> <http://www.codiciel.fr/>

L'INRIA a une expérience intéressante dans ce domaine et a réussi à faire émerger de nombreux codes de ses laboratoires (voir leur site web, rubrique logiciels, rubrique qui n'existe pas au CNRS).

Cela doit également intégrer le phénomène (durable ?) des logiciels libres pour lesquels le suivi de projet était, souvent, l'objet de doutes de la part des décideurs. Le succès de projets tels que Linux (pour les systèmes d'exploitation) ou d'Apache (pour les serveurs web) par exemple, a fini par convaincre les plus sceptiques, qu'il y avait une alternative à l'approche commerciale pour des projets durables et réussis.

Des outils pour le suivi de projets ont ainsi été mis en place dans le cadre du logiciel libre, comme par exemple le projet Sourceforge qui héberge les sources de très nombreux projets et permet leur gestion mutualisée par des équipes pouvant être très importantes et géographiquement éparpillées. On notera que certains organismes publics ont déjà pris la mesure de l'aspect logiciel libre et du développement mutualisé pour la mise en oeuvre de très grands codes comme par exemple, le projet RNTL Salomé<sup>10</sup> associant 22 partenaires.

## Conclusions

Pour résumer les différents points abordés dans ce chapitre,

- Les centres de calcul haute performance, (IDRIS et CINES) qui se sont développés dans la dernière décennie doivent être renforcés et être incités à collaborer au niveau national et européen ;
- Les centres régionaux ou thématiques qui ont un rôle complémentaire se sont multipliés et sans doute faut-il les inciter à se constituer en réseaux pour que leur diversité serve aux utilisateurs qui ont des besoins variés ;
- Compte tenu de la pénurie de moyens humains notamment au niveau des laboratoires, il faut encourager et soutenir les initiatives de mutualisation, de réseaux visant à structurer une communauté pour le logiciel scientifique (GdS Mathrice, CEMRACS) ;
- Il faut être attentif à l'apparition de nouvelles technologies (GRID, P2P) et mettre en place des outils pour améliorer la « réutilisabilité » des logiciels (libres) réalisés dans les labos;

Comme on a essayé de le montrer dans ce texte, les implantations du calcul haute performance sont très variées et elles évoluent si rapidement qu'il n'est pas facile de capitaliser l'existant; il est donc encore plus difficile de dire quelle sera la (ou plus certainement les) stratégies porteuses pour l'avenir.

Au delà des machines, le calcul est fait par des hommes, dont les compétences sont multiples (modélisation, analyse mathématique et numérique, algorithmique et programmation, connaissance des réseaux, des bases de données...). L'amélioration des méthodes apporte souvent un gain qualitatif au moins égal au gain lié à

---

<sup>10</sup> <http://www.salome-platform.org/>

l'amélioration de performances des machines qui suivent la loi de Moore. Il faut souligner les (trop rares !) expériences qui visent à faire mieux se connaître les utilisateurs du calcul scientifique comme le CEMRACS qui réunit des mathématiciens, des physiciens et des ingénieurs, chaque année depuis 1996 et pendant six semaines à Marseille, sur des projets ayant une thématique scientifique commune (qui change chaque année), ainsi que les écoles d'été CEA-EDF-INRIA (deux par an, une en informatique, une en analyse numérique) qui existent depuis 20 ans. On pourrait aussi parler ici du rôle des GdR, comme par exemple le GdR MOMAS qui s'inscrit dans les actions "PACE", sur les problèmes de retraitement de déchet, cette structure fonctionne sur projet (il y en a 15) et fait interagir des équipes de EDF, CEA et notamment l'ANDRA qui est moteur dans ce projet.

Il s'agit d'une certaine façon de mettre les acteurs de la recherche en réseau (et pas seulement les ordinateurs!). Ces projets favorisent les collaborations, vont dans le sens d'une meilleure structuration de la recherche et sont peut-être aussi importants que le nombre de Téraflops.

En d'autres termes (entendus lors du 15<sup>ème</sup> Forum ORAP), il serait important de passer d'un logiciel pour une communauté (scientifique) à une communauté pour le logiciel (scientifique). De ce point de vue, ORAP a un rôle structurant dans lequel sont associés le CEA, le CNRS et l'INRIA mais aussi, au sein du conseil scientifique, des représentants du monde industriel et il est donc important d'y participer<sup>11</sup> et d'en renforcer la visibilité. De même, le groupe calcul<sup>12</sup>, à travers son site Internet et surtout, sa liste de discussion, a l'ambition de renforcer les liens entre les acteurs du HPC.

---

<sup>11</sup> Vous pouvez vous abonner gratuitement à la liste de diffusion et au bulletin Bi-ORAP sur le site d'ORAP <http://www.irisa.fr/orap/>

<sup>12</sup> Le site du groupe calcul : <http://www.math.cnrs.fr/calcul>. Pour s'abonner à la liste de discussion, envoyer un mail à [calcul-request@math.cnrs.fr](mailto:calcul-request@math.cnrs.fr) avec, comme sujet, le mot « subscribe ».



## 2

### LA CONFRONTATION ENTRE AMBITION ET MOYENS

C'est au début de l'année 2002 que l'Académie des Technologies a décidé de charger un groupe de travail de réfléchir à la situation de la simulation numérique en France et de voir, en particulier, comment cette situation avait évolué depuis 1992. En 1992, en effet, le CADAS (dont est issue l'Académie des Technologies) avait présenté un état de cette situation, sous la signature de Robert Dautray. Diagnostic assez optimiste, comme l'a rappelé l'Introduction de cet ouvrage.

Depuis cette époque, les différents forums de l'ORAP, auxquels participaient plusieurs membres de l'Académie, avaient indiqué que les efforts consacrés à la simulation semblaient plus importants à l'étranger qu'en France. Mais surtout, le témoignage irrécusable du classement des centres de traitement au sein du TOP500, qui a été commenté lors du chapitre précédent, *ne laissait aucun doute sur l'existence d'un décalage croissant entre notre pays et ses différents voisins.*

Pour comprendre l'origine de cette situation, et en mesurer les conséquences éventuelles, le groupe a rencontré, au cours d'une vingtaine d'entretiens, des représentants de divers secteurs de la recherche et de l'industrie. C'est ainsi qu'il a rencontré des représentants de communautés recherche ou industrie très diverses : Elaboration des métaux, Climat/Environnement, Biologie, Mécanique/matériaux, Réalité virtuelle, Finances ... Ces entretiens ont permis de construire un questionnaire portant à la fois sur les objectifs, les moyens, les performances limites, et l'organisation de l'activité de simulation. Ce questionnaire a été envoyé à une cinquantaine de nouveaux acteurs : responsables de projets, mais aussi décideurs qui se posent la question de la place occupée par la simulation, de son rapport performance/coût, et des progrès qu'elle permet d'accomplir.

Le texte qui suit est donc rédigé à partir des entretiens et des réponses au questionnaire que nous commençons à recevoir. Il ne peut être considéré comme exprimant l'opinion définitive de celle-ci, mais seulement celle des auteurs du chapitre, qui

reconnaissent d'ailleurs qu'il leur manque beaucoup d'éléments pour atteindre à des certitudes complètes.

La plupart des personnes interrogées sont très conscientes de l'existence d'un décalage croissant entre la France et ses voisins. La préparation du rapport du GIEC (Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat, organisation qui a été mis en place en 1988, à la demande du G7) sur l'évolution du climat est un bon exemple de cette situation, car elle fait appel aux contributions de très nombreux pays. Les responsables français considèrent qu'entre les ressources mises à leur disposition et celles dont disposent les anglais ou les allemands l'écart est de l'ordre de 10 : ils en déduisent que la contribution française ne pourra être que marginale<sup>1</sup>. Dans un domaine très différent, le calcul des turboréacteurs et de la combustion, la comparaison France - Japon conduit à des constatations analogues.

Mais ces constatations ne sont pas suffisantes en elles-mêmes. Elles appellent une analyse plus approfondie et un essai d'explication. Cette analyse conduit à distinguer au moins deux groupes de simulations :

- celles qui sont insérées dans une activité opérationnelle, qu'elle soit industrielle (aéronautique, automobile, etc.), ou qu'elle relève de la puissance publique ;
- celles qui appartiennent au monde de la recherche.

On constate alors que les simulations de recherche se séparent en deux familles très différentes, qui correspondent à ce que l'on peut appeler deux modèles de développement. On constate également que de multiples freins s'opposent, en France, à la croissance de l'activité de simulation selon ces deux modèles.

Quant aux simulations du monde opérationnel, ce qui les menace c'est l'émergence d'une sorte de « développement dual », qui sera présenté en détail deux paragraphes plus bas, et qui conduit également à une croissance faible.

## Recherche : deux modèles de développement

L'histoire des quinze dernières années montre que la simulation est utilisée de plus en plus systématiquement par toutes les disciplines. Elle montre également qu'on ne peut pas considérer que cette utilisation correspond partout aux mêmes besoins, ni qu'elle adopte une organisation et un mode de développement homogène partout. Bien au contraire, on constate qu'on se trouve confronté à *deux modèles de développement* :

1. Le premier conduit à la mise en commun d'efforts importants, sur une longue période de temps (plus d'une décennie). Au cours de cette période, c'est le système de simulation qui assure l'unité du groupe, et la pérennité des développements. Le système lui-même nécessite des puissances de calcul élevées. Par ail-

---

<sup>1</sup> Ce point peut d'ailleurs être discuté. En effet, le déficit concerne les puissances maximales de calcul, alors que la contribution au rapport GIEC dépend beaucoup des temps machine mis à disposition de la simulation.

leurs (on peut ajouter : « et c'est là le point essentiel ») il met en jeu des « objets informatiques » (logiciels et données) de grande taille.

2. Le second repose sur de multiples équipes de taille moyenne, qui ne sont liées que par une inter-comparaison entre les résultats, par une mise en commun d'une partie des données, et par une programmation commune très souple. Les logiciels et les données peuvent rester assez modestes, même lorsque la puissance de traitement demandée devient énorme.

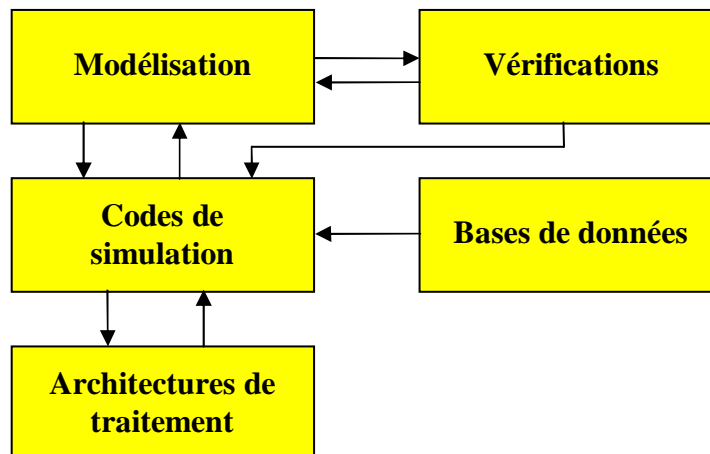
Ces deux modèles de Développement de l'activité de simulation *n'apparaissent pas au hasard*. Le premier correspond à *l'étude des systèmes complexes*, subdivisés en un grand nombre de sous-systèmes plus simples, à la fois très différents entre eux, et néanmoins très interactifs. Le second aura les caractéristiques opposées : on essaiera de franchir, par la simulation, une *difficulté « centrale »* unique, qui relèvera en général d'une seule discipline.

On voit bien que l'usage intensif de la simulation, même s'il correspond en général à l'existence d'un « Problème - frontière pour la recherche, exigeant des ressources exceptionnelles » n'est pas superposable à la notion plus spécifique de « Problème exigeant le travail de différentes équipes, pour la construction d'une cathédrale unique ». Il est donc intéressant de regarder de plus près comment fonctionnent les deux modèles que l'on a ainsi distingués.

### **Grands systèmes unifiés. Le premier modèle**

Ce qui fait l'intérêt et la difficulté des systèmes complexes, c'est qu'on doit les subdiviser en sous-systèmes (faute de quoi, on est incapable de travailler) mais que le couplage entre ces sous-systèmes est assez fort pour qu'il soit impossible de les étudier séparément : leur comportement « couplé » diffère de leur comportement « non-couplé ». C'est ce qui explique que ces grands systèmes posent des problèmes redoutables de gestion et d'organisation, avant même de poser des problèmes informatiques.

L'organisation à mettre en place est, en effet, d'autant plus complexe que le travail à faire concerne (au moins) cinq domaines très différents, comme l'indique le schéma ci-dessous.



Chacun des domaines concernés demande des ressources et une expertise spécifique. Chacun obéit à des plannings (des constantes de temps) spécifiques. Construire une « cathédrale » commune soulève donc beaucoup de difficultés. Cette cathédrale est, par ailleurs, composée de différentes parties, correspondant aux sous-systèmes qui viennent d'être évoqués, et qui se développent d'autant mieux et d'autant plus rapidement qu'elles peuvent être considérées comme autonomes. Ce qui oblige à considérer que chaque sous-système (ou partie) relève d'un schéma d'organisation qui lui est propre, tandis que le système lui-même relève du même schéma, mais globalement. Le défi posé aux responsables est donc de garantir *la cohérence de l'ensemble*, en même temps que *l'extensibilité, la souplesse des parties*.

Ce défi peut se décliner en notant qu'on veut à la fois :

- garantir une véritable autonomie dans la modélisation et l'écriture des codes des sous-systèmes (par exemple, changement de modèle de maille) ;
- garantir l'indépendance des codes par rapport aux données, car les responsables des uns et des autres sont différents ;
- garantir l'autonomie des sous-systèmes, et du système lui-même, par rapport aux architectures de traitement ;
- tout en assurant la cohérence d'ensemble et le couplage qui sont nécessaires pour que l'ensemble fonctionne.

On voit donc que la construction de grands systèmes unifiés rencontre beaucoup d'obstacles, et que la taille des architectures de traitement n'est peut-être pas le plus important d'entre eux. Sur le moyen terme, le développement est freiné par les difficultés d'organisation, et par l'insuffisance des ressources humaines.

Le premier point correspond à la difficulté que rencontrent les grands projets, et à la réticence des communautés de recherche à appeler « projet », et à traiter comme tel, la construction d'un système de simulation capable de résister au temps. L'exemple du

« Earth Simulator » japonais montre que, dans beaucoup de domaines, de tels projets pourraient naître. Il montre aussi que, dans le cas du Japon, c'est l'installation annoncée d'une architecture surpuissante qui les a, en quelque sorte, obligé à naître.

Le deuxième point est une conséquence du premier. Il correspond à la nécessité de former, de sélectionner, mais aussi de récompenser les chercheurs nécessaires pour concevoir, mettre en place, et faire évoluer le système.

### Fronts d'attaque dispersés. Le second modèle

L'organisation à laquelle conduit ce modèle est beaucoup plus simple<sup>2</sup>. Au contraire du précédent, il se contentera d'une coordination assez lâche (au moyen d'un simple système de *benchmarking*) qui permettra néanmoins de s'assurer que le « front d'attaque » des problèmes progresse de façon régulière. De sorte que chaque équipe a une conscience claire, à la fois des « problèmes à résoudre » et de ceux qui sont considérés comme « résolus ». Mais surtout, le besoin de permanence, de sauvegarde des acquis, est beaucoup plus limité.

Les outils jugés nécessaires dans le cadre du premier modèle (par exemple, les grandes Bases de Données ou les très grands ordinateurs) sont considérés comme moins essentiels, parfois même comme accessoires. Le niveau méthodologique (outils de coordination) est maintenu assez bas, tous les efforts se concentrant sur la « modélisation innovante » même si elle s'accompagne de simulations parfois peu significatives.

Jusqu'ici, en France, les simulations de ce type se sont développées sur des serveurs, des machines dédiées, situées au niveau de la « méso-informatique » dont parlait l'Introduction. Par contre, des pays comme les USA<sup>3</sup> ou le Japon<sup>4</sup> ont fait croître la puissance de ces machines *dédiées à une discipline* qui dépassent maintenant le Téraflopps, et figurent parmi les candidats pour des machines plus puissantes.

C'est ainsi que le second modèle de développement, qui jusqu'ici a différé du premier par la taille des architectures impliquées, pourrait le rattraper ou même le dépasser. Il restera distinct de celui-ci, néanmoins, par son caractère mono-disciplinaire, et par la (relative) simplicité des problèmes d'organisation qui sont les siens.

---

<sup>2</sup> On trouvera une description prémonitoire de ce modèle dans « La logique de la liberté » de Michel Polanyi. Pour cet auteur, il s'agit du seul modèle possible pour l'activité scientifique. On voit à quel point l'émergence des problèmes complexes (qui a rendu le premier modèle incontournable) est venue modifier les choses.

<sup>3</sup> On trouvera des références dans IBM Systems Journal « *Blue Gene: A vision for protein science using a petaflop supercomputer* » Mars 2001. Et dans « *Creating Science-driven computer architecture: a new path to scientific leadership* », LBNL/PUB-5483

<sup>4</sup> National research Grid Initiative (NAREGI); Projet Biogrid France/Japan Workshop on grid computing, Mars 8-9 2004, Paris

## La simulation opérationnelle

Il n'est plus nécessaire, aujourd'hui, de souligner l'importance prise par la simulation, à la fois dans le monde industriel et pour les missions de surveillance et de prévision prises en charge par les Pouvoirs Publics. On pourrait donc penser que la croissance des sites informatiques correspondants a suivi la même évolution que le TOP500. En d'autres termes que, tout en restant moins importants que les grandes installations de recherche, les centres opérationnels ont conservé à peu près le même rang dans le classement. En fait, on constate qu'un recul a eu lieu (au moins en moyenne), recul que l'on peut expliquer en introduisant la notion de « développement dual ». Ce type de développement correspond à la réponse naturelle aux défis du fonctionnement opérationnel, comme on va le montrer.

Les Centres opérationnels jouent depuis longtemps (l'Aéronautique a été pionnière, aux USA comme en France) un rôle clé dans l'ingénierie de conception et de construction. Etant situés au cœur même des processus industriels, ils sont soumis à des contraintes très sévères de fiabilité et de sécurité d'exploitation. Ils subissent donc *l'évolution classique des systèmes informatiques vers la rigidité* (la structure « vissée-collée »). D'où les tensions entre les besoins d'évolution et d'intégration du progrès d'une part, le besoin de sécurité d'autre part. Ces tensions sont les mêmes pour les centres relevant des Pouvoirs Publics mais consacrés à des missions opérationnelles comme la prévision météorologique.

Pour répondre à ces tensions, la solution qui semble choisie le plus souvent est le développement d'une simulation « avancée », en général en collaboration étroite avec la recherche publique, qui se *situera à côté et en complément du système opérationnel*. Cette solution semble au dessus de tout reproche : elle concilie solidité et évolutivité, elle permet de rassembler autour de la simulation de recherche le meilleur de la recherche française.

Mais elle est également lourde de menaces, menaces que résume le terme de « développement dual ». L'évolution du système opérationnel peut être trop lente, l'écart peut se creuser. Le ou les systèmes de recherche peuvent rester marginalisés et centrés sur des questions partielles. Et on peut s'habituer à voir les deux systèmes s'écarter progressivement l'un de l'autre : l'industrie aéronautique européenne a pris conscience de ce risque, et prépare actuellement un rapprochement entre codes industriels et codes de recherche dans le domaine aérodynamique. On peut ajouter que ce phénomène ne concerne pas seulement la France, et les applications industrielles. Selon plusieurs observateurs, le fonctionnement des centres météorologiques américains correspond exactement au modèle qui vient d'être décrit.

Pour fonctionner de façon idéale, le modèle dual voudrait que le système de recherche soit potentiellement aussi global que celui qu'il devra, à terme, remplacer. On constate qu'il n'en est rien, en général : la recherche fait du « *problem-solving* », très innovant, mais partiel.

Cela peut conduire les systèmes opérationnels à se transformer lentement en « centres de coût » (à spécificités constantes), les nouveautés étant réparties sur plusieurs sous-systèmes qui ne constituent pas un système. Cette évolution rend parfait

tement compte du glissement constaté dans la taille des centres opérationnels, alors même que beaucoup d'innovations sont apparues en recherche.

## **Quelques mots de conclusion**

Ce chapitre cherchait avant tout à proposer des modèles d'analyse, et si possible d'explication. Les conclusions viendront plus tard, au chapitre 9 de cet ouvrage. On peut néanmoins souligner, dès à présent, deux constatations de portée assez générale.

Tout d'abord, on a proposé trois modèles de développement, deux dans la recherche et un dans le domaine opérationnel. Ces trois modèles sont extrêmement différents, et il est peu probable que les mêmes conclusions, et encore moins les mêmes recommandations, soient valables simultanément pour les trois.

Ensuite, on a vu se dessiner, au travers des exemples analysés, une sorte de relation dialectique entre, d'une part, l'évolution de la simulation, activité complexe qui dépend de multiples ressources en dehors des moyens de traitement, et d'autre part la croissance de ces moyens eux-mêmes. De grandes ambitions en matière de simulation ne peuvent pas se développer si les moyens de traitement sont, durablement, trop faibles. Réciproquement, les décideurs hésiteront toujours à investir dans des moyens s'ils se trouvent face à des communautés hésitantes ou mal organisées. De même, la collaboration recherche - industrie peut s'exprimer dans des simulations très ambitieuses, mais elle hésitera à le faire si elle n'est pas assurée de pouvoir trouver les architectures qui hébergeront ces projets.



## 3

### QUELLES FORMATIONS POUR LE HPC ?

Le calcul scientifique à haute performance désigne d'une part la modélisation qui nécessite des connaissances fondamentales et d'autre part les simulations basées sur des modèles mathématiques et relevant du calcul à haute performance. Il s'est imposé dans les laboratoires et dans l'industrie comme un complément ou une alternative aux expériences traditionnelles. C'est un domaine interdisciplinaire faisant intervenir certains aspects des mathématiques, l'informatique mais aussi de nombreux domaines d'application comme la mécanique des fluides, les sciences du climat, de l'océan et de l'atmosphère, l'électromagnétisme ou la chimie. Les utilisateurs du calcul scientifique à haute performance ont besoin de l'aide de numériciens et d'informaticiens pour bien employer les ressources des ordinateurs. Toutefois, un effort de formation très important est nécessaire, en particulier pour les concepteurs d'algorithmes optimisés. Il est donc souhaitable que les spécialistes des applications concernées maîtrisent eux-mêmes certains aspects du calcul numérique et des techniques informatiques concernées. C'est l'un des objectifs de la formation nécessaire en HPC : donner une connaissance en calcul haute performance suffisante aux chercheurs scientifiques et ingénieurs.

Depuis quelques années, des universités, des écoles et des laboratoires de recherche ont conçu des cours d'algorithmique et de programmation sur ordinateurs parallèles, faisant partie des cursus habituels (maîtrises, DESS, DEA, 3<sup>ème</sup> année d'écoles d'ingénieurs,...) et ont organisé des sessions de formation courte pour les chercheurs et les ingénieurs. Toutefois, ces enseignements restent souvent trop théoriques et une connaissance approfondie des bases et des outils pour le calcul scientifique à haute performance doit faire partie de la formation scientifique.

#### Etat des lieux en France

Liste (partielle) des principales formations recensées en France qui offrent un enseignement en calcul scientifique intensif ; ces enseignements sont dispensés dans les

Grandes Ecoles, les Universités via les Ecoles Doctorales et les DEA et masters s’y rattachant, ou les DESS.

- Ecole Doctorale de Mathématiques et d’Informatique de Bordeaux. DEA de Mathématiques Appliquées et Calcul Scientifique de Bordeaux, ENS d’Electronique, Informatique et radiocommunications.
- Ecole d’Ingénieurs en Modélisation Mathématique et Mécanique (MATMECA), Bordeaux.
- Ecole Doctorale Sciences pour l’Ingénieur de Lille, Ecole Centrale de Lille.
- Ecole Doctorale Informatique, Télécommunications et Electronique, Paris VI, ENSTA Paris, ESPCI Paris, ENS Télécommunications Paris, Ecole Nationale des Ponts Paris, ENS Paris.
- Ecole Doctorale Mathématiques & Applications, Toulouse. INSA – Ecole Nationale Supérieure Aéronautique et Espace.
- Ecole Doctorale Informatique et Télécommunications, Toulouse. INSA – Institut National Polytechnique.
- Ecole Doctorale Mathématiques et Informatique de Marseille.
- Ecole Doctorale Mécanique, Physique et modélisation, Marseille.
- Ecole Doctorale Mathématiques, Sciences et Technologie de l’Information, Grenoble. Institut National Polytechnique de Grenoble.
- Ecole Doctorale Sciences pour l’Ingénieur. Ecole Centrale des Arts et Manufactures
- Ecole Doctorale Mathématiques et Informatique Fondamentale, Lyon Ecole Centrale Lyon – INSA – ENS Lyon.
- Ecole Doctorale Mathématiques, Informatique, Signal, Electronique et Télécommunications, Rennes. INSA Rennes – IRISA.
- Ecole Doctorale Sciences Mathématiques de Paris Centre. DEA Mathématiques de la modélisation, simulation et applications de la physique.
- Ecole Doctorale Décision, Informatique, Mathématiques, Organisation, Paris. DEA EDP et Applications.
- Ecole Doctorale Informatique de Paris Sud Orsay – SUPELEC
- Cours « Calcul Scientifique Intensif » Université Paris VI <sup>1</sup>
- Cours « Génie logiciel Scientifique et Calcul Global » UVSQ (labo de recherche)<sup>2</sup>

Enfin, il faut signaler l’existence de cours de calcul numérique et de méthodes numériques dans de très nombreuses filières (écoles, universités), par exemple les cours de DEUG et de Maîtrise de Physique à l’Université de Tours<sup>3</sup>.

---

<sup>1</sup> <http://www.lmcp.jussieu.fr/enseignement>

<sup>2</sup> <http://www.prism.uvsq.fr/~mag>

<sup>3</sup> <http://www.phys.univ-tours.fr/~nicolis>

Il faut noter que peu de cours sont enseignés par des chercheurs ayant une importante expérience en HPC ; sauf lorsque ceux-ci sont assurés par des enseignants extérieurs venant de l'industrie ou des grands organismes de recherche. Les enseignants sont en général des spécialistes exclusifs de l'aspect informatique, de l'aspect numérique ou de l'aspect lié à un domaine scientifique. Seuls certains aspects du HPC sont donc enseignés, souvent sans aucune relation avec les autres aspects.

On constate que le livre « Numerical Recipes »<sup>4</sup> est indispensable à cet enseignement. Néanmoins, l'enseignement doit dépasser l'aspect « recette » sur lequel est basé ce livre. Il existe de nombreux autres livres anglo-saxons sur le thème. On peut noter qu'il existe très peu de livres en français. L'enseignement concerné est réparti entre de nombreux livres, quand ils existent. Les bibliothèques universitaires n'ont par ailleurs que très peu de livres dans les domaines concernés par le HPC. Par exemple, dans une grande université scientifique française, des étudiants n'ont pu récemment trouver un seul livre en bibliothèque, quelque soit la langue, sur les fonctions élémentaires. Le peu de machines parallèles dans les écoles et universités françaises est aussi un handicap pour monter des formations en HPC.

De nombreux cours listés sont des cours optionnels de dernière année d'école ou de troisième cycle. Il faut noter que très peu d'étudiants choisissent ces enseignements qui ne sont donc souvent pas ouverts ou pour des effectifs très réduits. Par exemple, l'Ecole Polytechnique Universitaire de Lille propose en troisième année du département de « Génie Informatique et Statistique » un cours de calcul intensif haute performance avec des TP sur une des machines les plus puissantes sur un campus universitaire français. Ce cours est complémentaire des cours de calcul numérique de première et seconde année et propose donc une formation de base minimale en HPC. Dans le cadre de cette formation, il est aussi proposé aux étudiants des projets de seconde année et de troisième année, ainsi que la possibilité de faire un stage de fin d'études dans le domaine. Bien que les étudiants aient une formation de base en mathématique requise pour intégrer cette formation, ils sont très peu nombreux à choisir ce cours optionnel qui n'est que rarement ouvert, d'autant qu'ils ne voient ni les débouchés, ni l'intérêt pour leur future carrière d'un tel choix. Nous retrouvons donc ici le problème des carrières quasi-inexistantes dans le domaine ou mal identifiées. Ce manque de débouchés engendre aussi des suppressions de cours en HPC là où des collègues se sont investis depuis de nombreuses années pour monter de telles formations.

Par ailleurs, la mise en place progressive des LMD restructure ces enseignements. La possibilité ouverte de faire des travaux dirigés et des travaux encadrés en Master va permettre plus facilement des expérimentations sur machines parallèles, par exemple. Cela peut permettre, à terme, de penser cette formation au niveau européen. Il est donc souhaitable d'avoir quelques formations de références dans le domaine en France.

---

<sup>4</sup> <http://www.library.cornell.edu/nr>

En résumé, ce bilan fait ressortir les points suivants :

- Les écoles doctorales fédèrent des équipes de recherche et il faut noter qu'actuellement, ces écoles doctorales proposant une formation en calcul haute performance croisent toujours une école d'ingénieurs
- Le milieu académique, milieu d'excellence pour la recherche fondamentale et les développements fondamentaux en calcul scientifique est donc démuné.
- Le manque de machines puissantes sur les campus, la non reconnaissance par de nombreux chercheurs et les directions des formations concernées du HPC comme stratégie ainsi qu'une mauvaise identification des carrières en HPC ne motive pas les étudiants.

## Quelques exemples à l'étranger

Depuis près de vingt ans, de nombreuses universités américaines proposent des formations en HPC avec des travaux encadrés ou des projets sur machines parallèles. Par exemple, à la fin des années 80, les étudiants « undergraduates » de Yale développaient déjà des projets numériques sur machines parallèles. De très bon cours sont proposés par de grands spécialistes du HPC dans plusieurs universités. Le fait que la recherche dans le domaine soit très présente dans les universités, contrairement à ce qui se passe en France, facilite cela. Par exemple, David Keyes a monté dès son arrivée à l'université Columbia, en 2004, un cours très complet en HPC comportant la réalisation d'un projet. Les étudiants y sont motivés car ils savent l'intérêt de ces formations qui illustrent directement des cours de « Computational Science and Engineering » (CSE). De plus, lors de nombreux travaux de recherche liés à la préparation d'un MS, le HPC est pris en compte ; et pas uniquement en informatique.

D'autres universités ouvrent de nouvelles formations en HPC et recrutent de nombreux enseignants-chercheurs. L'université Virginia Tech. a recruté récemment plus de douze personnes pour développer un nouveau cursus en HPC et CSE. C'est à cette occasion que cette université a construit une machine parallèle qui fut une des rares machines Teraflopique de l'année 2003, avec l'aide quasi-exclusive d'étudiants « undergraduates ». Celle-ci fut réalisée en particulier pour promouvoir la formation. Avec succès, car la presse nationale américaine (le « New-York Times ») s'est fait l'écho de cette machine et de cette formation.

Les enseignements proposés aux USA sont donc nombreux et souvent de bonne qualité. Surtout, les étudiants sont sensibilisés dans leurs cours de sciences où le HPC est introduit comme la suite logique de la programmation scientifique qui y est déjà enseignée. De plus, les carrières et l'utilisation du HPC en recherche sont bien visibles et identifiées dès le début de la formation.

Néanmoins, il ne faut pas croire que chaque université a sa formation en HPC. Les grandes universités proposent cette formation, qui est en général de qualité et dont l'enseignement est assuré par des personnes connaissant bien le domaine et possédant une expérience du HPC. De plus, les problèmes des frontières scientifiques traversant le HPC existent aussi parfois, en fonction du découpage des départements. Si les chercheurs en analyse numérique sont dans les départements d'informatique ou dans

un autre département, si les mathématiques appliquées sont dans le même département que la physique appliquée, etc., les formations auront des orientations différentes.

## Autres formations

### Formation permanente

Des centres de recherche ou de calcul intensif se sont dotés de centres de formation. C'est le cas d'EDF, du CEA ou de l'IDRIS. Ces centres organisent des formations sur des sujets d'actualité en calcul intensif. Ils permettent de connaître les techniques les plus modernes, mais elles ne peuvent se substituer à une formation initiale dans le domaine.

### Double compétence

Les formations "double compétence" sont principalement assurées par les DESS qui remplissent très bien ce rôle. Malheureusement, les étudiants quittent ensuite le monde académique ou de la recherche alors que cette double compétence serait un réel atout pour faire le pont entre les disciplines.

### Ecoles d'été

L'exemple des Ecoles d'Été CEA-EDF-INRIA<sup>5</sup>.

Les écoles d'analyse numérique existent depuis 1961, celles d'informatique depuis 1969. Les thèmes abordés par les écoles d'analyse numérique montrent l'évolution de la discipline sur plus de 40 ans ! Des équations aux dérivées partielles aux ondelettes, des méthodes particulières à l'analyse et la gestion des risques, toutes ces notions sont à connaître lorsque l'on aborde le calcul haute performance. Dans le domaine de l'informatique, les thèmes retenus depuis 1969 montrent également la grande variété de la discipline : système d'exploitation, interface homme-machine, sécurité des systèmes d'information, bases de données, calcul parallèle, architecture des logiciels scientifiques. Chacun de ces thèmes correspond même à un métier inconnu auparavant. Le paradoxe est là, l'informatique a débouché sur cent métiers et le calcul haute performance nécessite des connaissances dans chacun de ces métiers.

Le thème de l'Ecole d'Été Analyse Numérique 2004 CEA-EDF-INRIA : « *Les méthodes numériques et informatiques de couplages multi-physiques* ».

Le thème de l'Ecole d'Été Informatique 2004 CEA-EDF-INRIA : « *Sécurité des systèmes d'information en environnements hétérogènes et distribués* ».

---

<sup>5</sup> <http://ecole-ete.bruyeres.cea.fr/>

La simulation numérique intégrant simultanément la résolution de plusieurs modèles physiques devient une préoccupation grandissante. Pour parvenir à construire des outils de calcul efficaces et robustes, des problèmes se posent tant au niveau de l'analyse numérique de problèmes couplés qu'au niveau d'une mise en œuvre informatique des couplages de codes élaborés.

Evolutions == interdisciplinarité

## Industriels

Interview du responsable du service transversal de calcul numérique à EDF :

*« Les profils recrutés au service transversal de calcul numérique à EDF sont variés. Son responsable cherche néanmoins à recruter des ingénieurs ayant une solide culture générale en informatique, maîtrisant les outils de développement, connaissant Unix ou Linux, sachant programmer dans un langage objet, si possible dans le domaine du calcul scientifique. La plupart du temps, leurs ingénieurs se forment sur le tas pour ce qui concerne la gestion de projets, les aspects qualité et les langages à utiliser. Il réclame une culture générale en analyse numérique sans plus. Les doubles compétences sont très recherchées : numéricien-informaticien ou physicien-développeur informatique. Pour ce qui concerne les connaissances en architecture de machine, celles-ci sont utiles pour comprendre les enjeux de l'optimisation des codes mais pas du tout dans une optique d'architecte concepteur de machines. Les connaissances en calcul intensif sont un avantage certain, mais les nouveaux recrutés rejoignant une équipe déjà constituée sont rapidement mis à niveau par les autres membres de l'équipe elle-même ».*

## Analyse critique

L'analyse de l'évolution des métiers de l'informatique et du calcul scientifique montre une évolution constante depuis de nombreuses années. Former des spécialistes dans un domaine en pleine mouvance est une gageure. L'analyse de cette évolution nous amène à distinguer les connaissances de base, des connaissances « gadget ». Les connaissances de base concernent l'analyse numérique, les mathématiques appliquées, l'algorithmique, l'architecture, l'arithmétique flottante, les langages, le génie logiciel. Les connaissances « gadget » correspondent à l'état de l'art à un instant donné et sont amenées à évoluer régulièrement. Il est important de faire passer cette notion aux futurs spécialistes du calcul intensif, afin qu'ils maîtrisent les connaissances de base et se tiennent prêts à faire évoluer leurs connaissances des produits « gadget » au fur et à mesure de leur apparition. Pour appréhender ces différences, il pourrait être temps de mettre en œuvre un module d'histoire du calcul intensif qui présenterait les principales notions d'un point de vue historique : algorithmique, apparition du calcul flottant et diffusion des différentes résolutions (32, 60, 64, 128 bits, ...), programmation parallèle, diffusion de l'information (du document papier au WWW), apparition, disparition puis réapparition de certaines techniques (VLIW, ) ...

Une autre notion importante à faire passer aux étudiants concerne la validation des programmes de calcul intensif, la rigueur avec laquelle cette activité doit être menée, la difficulté de validation de tous les cas limites. Comment faire passer ces notions qui relèvent de l'expérience plutôt que de la formation ?

Les formations en calcul intensif existent maintenant dans des cadres variés. Elles doivent former des spécialistes ouverts aux autres techniques et capables de rejoindre des équipes pluridisciplinaires.

## Appendice

Extraits du Rapport de la fondation canadienne pour l'innovation (FCI)<sup>6</sup> sur les discussions tenues lors de l'atelier sur le calcul haute performance (CHP) en avril 2004 :

*Aujourd'hui, plusieurs domaines de la biologie, de la chimie, du génie, des sciences environnementales, des sciences de la terre, des sciences des matériaux et de la physique dépendent à divers degrés du calcul de haute performance (CHP), soit de la capacité d'entreposage de vastes ensembles de données ou de la capacité d'analyser ces vastes ensembles de données suivant les problèmes à résoudre. Concurrément, la recherche qui se fait dans quelques domaines des sciences informatiques s'attaque à des problèmes pressants qui confrontent ces disciplines. Il existe cependant un énorme potentiel à exploiter parce que les chercheurs de toutes les disciplines ne profitent pas pleinement des nouveaux développements dans le domaine du CHP....De plus, les chercheurs sont souvent peu enclins à utiliser le CHP en raison de l'apprentissage difficile qu'il exige et du coût important du développement des applications parallèles. De meilleures communications entre tous les utilisateurs et les développeurs de CHP, sur leur propre campus et entre les établissements, aideraient considérablement à remédier à cette situation... Il est important d'attirer des étudiants dans des programmes pertinents de premier cycle en leur fournissant des cours de base de CHP et une expérience pratique du matériel le plus moderne. Par exemple, sauf en animation, on offre très rarement aux étudiants du premier cycle l'accès à des programmes en visualisation, connaissance essentielle aux nombreux utilisateurs de machines haut de gamme.... Le calcul de haute performance connaît manifestement une phase de transition. Il est très difficile de prévoir les besoins futurs dans ce domaine étant donné l'évolution de la capacité de calcul, mais on peut au moins constater qu'il existe un besoin constant de coordonner tous les niveaux de l'infrastructure, le matériel, les réseaux, les programmes de recherche, le personnel, l'intégration sectorielle, etc.*

---

<sup>6</sup> [http://www.innovation.ca/publications/print\\_content\\_f.cfm?websiteid=133](http://www.innovation.ca/publications/print_content_f.cfm?websiteid=133)



# 4

## LE CONTEXTE MONDIAL

Avant de regarder plus en détail la situation en Europe et en France, il nous a paru utile d'analyser rapidement la situation du calcul de haute performance dans le monde et dans quelques pays particulièrement actifs dans ce secteur.

Ne pouvant être exhaustifs, nous avons choisi de parler des Etats-Unis, du Japon et de la Chine. Bien sûr d'autres pays ont une activité croissante dans le domaine du calcul scientifique et tout d'abord l'Inde qui brille non seulement par la qualité de ses informaticiens, de ses entreprises logicielles, mais s'est aussi dotée de moyens de calcul importants, en particulier au centre du C-DAC (*Center for Development of Advanced Computing*) dont le système « PARAM » est sur la liste du TOP500. Il faudrait aussi considérer Israël, la Corée du sud, le Mexique, le Canada, le Brésil, la Russie, etc. L'impression générale est celle d'une présence croissante de ces pays que l'on dit « émergents ».

### L'évolution des moyens de calcul dans le monde

La liste TOP500<sup>1</sup> des 500 ordinateurs les plus puissants installés dans le monde est reconnue depuis longtemps comme un outil fiable. Si le critère permettant de mesurer cette puissance (le benchmark Linpack « résolution d'un système d'équations linéaires ») doit être amélioré et surtout enrichi pour tenir compte de la diversité des applications exploitées sur ces ordinateurs, le TOP500 reste un indicateur précis et admis par la communauté.

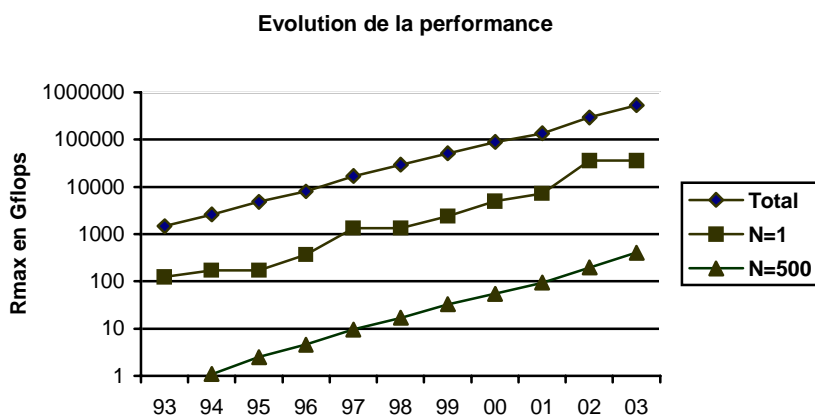
Nous regarderons l'évolution de quelques paramètres, depuis 1993 jusqu'en novembre 2003.

---

<sup>1</sup> <http://www.top500.org>

## Evolution de la performance

Le graphique suivant montre l'évolution de la performance des 500 premiers systèmes du TOP500 : performance Linpack (« Rmax ») cumulée, performance du système le plus puissant (classé en position 1) et du dernier système de la liste (N=500). L'échelle des ordonnées est une échelle logarithmique.



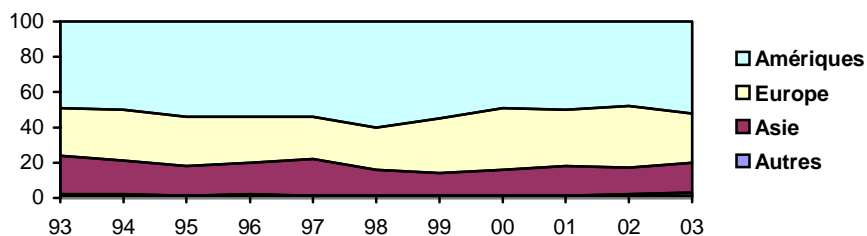
On constate que la fameuse Loi de Moore continue de s'appliquer : la performance double tous les 18 mois

## Distribution géographique et types d'installations

La distribution géographique des sites abritant ces ordinateurs a évolué depuis dix ans, l'Europe représentant maintenant plus du tiers de ces sites, les pays « autres » étant aussi en croissance (Asie du Sud-Est, Amérique du Sud, Afrique, Australie), tandis que la place du Japon diminue (bien que représentant encore 10% des sites).

La domination américaine est encore plus importante en terme de performance installée (au détriment de l'Europe qui a 28% des systèmes mais moins de 20% de la performance).

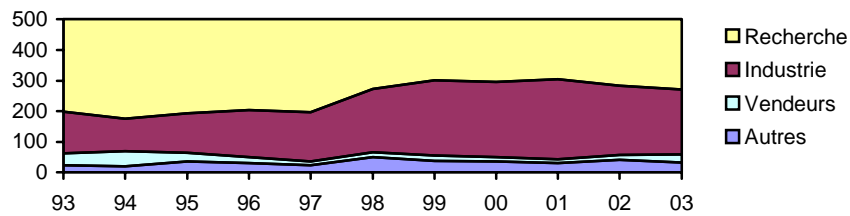
Distribution géographique (% en nombre)



Les types d'installation : on constate une augmentation de la part de l'industrie, ce qui inclut les industries manufacturières, l'énergie, le transport, la finance, etc. Cela traduit bien sûr la place croissante de l'informatique y compris de haute performance dans la vie quotidienne des entreprises. La recherche représente tout de même près de la moitié des installations du TOP500 et la totalité des dix premières. Elle garde ainsi son rôle de pionnière.

Si l'on se base sur la performance installée, la recherche prend une importance beaucoup plus significative avec 65% de la puissance (contre 27% aux entreprises).

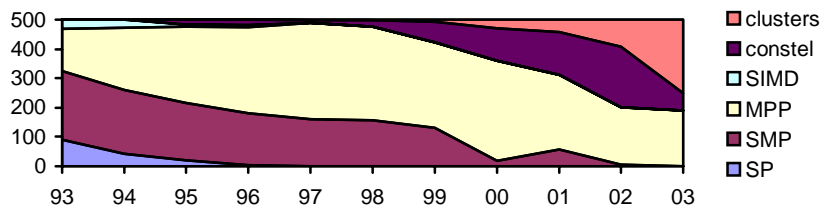
Types d'installations (nombre)



### Evolution des architectures

Les architectures ont profondément évolué depuis dix ans. Les clusters et les systèmes de type « massivement parallèle » dominent largement, les « constellations » (ensemble de systèmes homogènes reliés par un réseau local) ayant connu une « vague » assez éphémère.

Distribution des architectures (nombre)



## Les Etats-Unis

Nous avons vu que ce pays domine très largement le domaine du calcul de haute performance, que ce soit sur le plan de la construction de ces systèmes (90% des systèmes du TOP500 ont été fabriqués dans ce pays) que sur le plan des installations et donc de leur utilisation. Quelles sont les caractéristiques et les raisons de cette situation ?

### Grands programmes nationaux

Aux Etats-Unis, la progression impressionnante, massive et multiforme de tous les éléments du calcul scientifique de haute performance est le résultat d'une forte volonté politique au plus haut niveau de l'Etat, suivant en cela une tradition revendiquée : « *Many of the most visible and influential of today's computing and networking capabilities originated in Federally funded research conducted to support key missions of Federal agencies* » (rapport du NITRD : *Networking and Information Technology Research and Development*).

La collaboration très active des agences fédérales, en particulier la DARPA (Défense) et le DoE (Energie), de grands industriels (constructeurs de matériels informatiques, de réseaux d'interconnexion, etc) et des universités rend ces programmes particulièrement intéressants.

En 1995 était lancé le programme « *Accelerated Strategic Computing Initiative* » (ASCI), pour compenser l'arrêt des essais nucléaires. Le programme du CEA-DAM en est le modèle réduit. Une série impressionnante de très gros ordinateurs a été construite, le plus puissant étant ASCI-White, à Los Alamos, d'une puissance de crête de 12 Téraflopps.

Pendant ce temps là, le « *President's Information Technology Advisory Committee* » (PITAC<sup>2</sup>) multipliait les rapports au Président sur les avantages variés des progrès des Technologies de l'Information. Ces rapports ont eu des retombées budgétaires, par exemple le supplément au budget présidentiel pour l'année 2002, déjà cité plus haut, et dont l'objectif est clairement exprimé dans l'Abstract<sup>3</sup>:

« *The Federal agencies that participate in the Networking and Information Technology Research and Development (NITRD) effort work collaboratively in fundamental, long-term research and development activities to assure continuing U.S. leadership in advanced computing, networking, communications, and information technologies.* »

Le supplément budgétaire en question était distribué à de nombreuses agences : NSF, DARPA, NIH, NASA, DOE, NSA, etc. Ce programme couvre aussi une grande variété de champs qui se complètent et forment un tout cohérent, depuis la puce jusqu'aux grandes architectures, du hardware au software, des supports aux applications, sans oublier les réseaux.

---

<sup>2</sup> <http://www.hpcc.gov/pitac/>

<sup>3</sup> <http://www.itrd.gov/pubs/blue02/abstract.html>

Pour 2003, le rapport « FY 2003 Blue Book » est marqué par le contexte sécuritaire de l'après 11 septembre 2001. Le montant proposé pour le NITRD est de 1889 millions de dollars, la hausse profitant essentiellement aux programmes bio-informatiques du NIH ainsi qu'à la NASA.

Malgré ces progrès, les performances de l'ordinateur japonais « Earth Simulator » qui se hissait au premier niveau mondial, au moins cinq fois plus puissant que le premier ordinateur américain, ont provoqué un véritable choc psychologique aux Etats-Unis. Certains ont ironiquement nommé cela le « computnik » par analogie avec l'effet du spoutnik soviétique il y a un demi siècle. On peut avoir une idée de ce choc en consultant le récit<sup>4</sup> des débats au congrès américain en juillet 2003 : « *The U.S. is falling behind Japan in the area of supercomputing, .... The result is that U.S. companies have less access to supercomputing resources because demand from the U.S. government has traditionally driven the supercomputing industry in the U.S.* ». Le responsable du calcul scientifique intensif chez Ford, Vincent Scarafino, déclare « *The federal government should help with the advancement of high-end processor design ...* »

Raymond Orbach, directeur scientifique du « Department of Energy (DoE) » se réjouissait de l'évènement dans les termes suivants: « *We think that the range of 25 to 50 teraflops opens up a whole new set of opportunities for scientists that have never been realized before. So what we have, thanks to the Japanese now, is existing proof.* »

Plus généralement, tous les intervenants de ce débat mentionnaient le « leadership » des USA. La perte du premier rang mondial en matière d'ordinateur leur fait craindre la perte du premier rang en recherche scientifique et par conséquent en matière militaire et industrielle. Enfin ils n'oublient pas le lien intime entre les progrès dans le domaine du calcul scientifique et dans celui des nanotechnologies. Ces technologies ont bien sûr besoin de calcul pour se développer, mais réciproquement elles apportent à l'industrie du matériel informatique de nouvelles plages pour poursuivre le progrès vertigineux observé ces dernières années.

## ASCI

Nous avons déjà évoqué le rôle joué par le projet ASCI dans le nouvel essor du calcul scientifique américain, et nous avons souligné le volontarisme du gouvernement fédéral dans cet essor. Plusieurs installations de gros systèmes parallèles sont fondés sur des processeurs/mémoires commerciaux et un réseau de communication très dense et efficace. Tous les principaux constructeurs ont été sollicités : Compaq, Cray, Intel, IBM, SGI. Les installations ont reçus des noms pittoresques : ASCI blanc, ASCI bleu horizon, ASCI montagne bleue, ASCI bleu-pacifique, ASCI Q, ASCI Cplant, ASCI rouge et ASCI bonnet blanc (si on peut se permettre de traduire ainsi « white cap »).

---

<sup>4</sup> [http://www.infoworld.com/article/03/07/16/HNsupercong\\_1.html](http://www.infoworld.com/article/03/07/16/HNsupercong_1.html)

*Last but not least*, l'ordinateur IBM Blue Gene/L, d'une puissance attendue de 200 Téraflopps, sera installé au Lawrence Livermore National Laboratory en 2005.

## PACI

Le programme PACI<sup>5</sup> (« Partnership for Advanced Computational Infrastructure ») avait été créé par la NSF (*National Science Foundation*) pour prendre la suite du programme des « Supercomputers Centers » lancé en 1985, ce dernier programme ayant en particulier permis de financer quatre centres nationaux académiques de calcul de haute performance : Cornell, Pittsburgh, San Diego et Illinois. Il comprend trois grands groupes ou sites :

- **Alliance**<sup>6</sup>, regroupant plus de cinquante institutions (académiques ou non), pilotée par le NCSA (*National Center for Supercomputing Applications*, Université de l'Illinois à Urbana-Champaign), dont le but est de développer une vaste infrastructure de calcul ;
- **NPACI**<sup>7</sup> (*National Partnership for Advanced Computational Infrastructure*), piloté par le SDSC (San Diego Supercomputer Center), regroupant 46 institutions et qui est au cœur du développement du projet TeraGrid ;
- **PSC**<sup>8</sup> (Pittsburgh Supercomputing Center), qui exploite l'un des plus grands systèmes destinés à la communauté scientifique académique américaine (6 Téra-flops).

## SciDAC

SciDAC<sup>9</sup> est un programme très ambitieux dont le texte de mission commence par la phrase que nous devrions tous méditer : « *Advanced scientific computing will be a key contributor to scientific research in the 21st Century* ». Depuis son lancement en 2001, 51 projets partagent 57 M\$ annuels. Cette somme est partagée en trois parts à peu près équivalentes entre les applications, des centres intégrés pour l'infrastructure logicielle et la grille.

Ce programme couvre les domaines d'application suivants : programmation scientifique avancée, chimie et énergies chimiques, biologie et environnement, énergie de fusion, hautes énergies et physique nucléaire. Il est motivé par la constatation que les ordinateurs modernes permettent de pénétrer en profondeur les lois fondamentales de la nature et de prédire le comportement de systèmes vastes et complexes (changements climatiques, protéines, combustion chimique, matière condensée, etc.).

Mais, pour exploiter ces opportunités, il faut faire progresser en parallèle les codes scientifiques ; or les progrès actuels sont pilotés par les besoins du marché et non par les nécessités du calcul scientifique. Ce problème ne sera résolu que par un investis-

---

<sup>5</sup> <http://www.paci.org>

<sup>6</sup> <http://www.ncsa.uiuc.edu/Projects/Alliance/>

<sup>7</sup> <http://www.npaci.edu>

<sup>8</sup> <http://www.psc.edu>

<sup>9</sup> <http://www.osti.gov/scidac/index.html>

sement dans les logiciels de calcul, une recherche et développement dans les codes de modélisation scientifique.

Le programme se propose donc de créer une nouvelle génération de codes pour les défis scientifiques, de créer les outils mathématiques et logiciels pour utiliser à bon escient les moyens de calcul « terascale ».

En parallèle avec ce « *Scientific Computing Software Infrastructure* », des moyens de calculs massifs sont mis à la disposition du programme : deux très puissants systèmes IBM SP, un Cray X1, la nouvelle architecture QCDOC. La collaboration des différentes composantes de SCIDAC utilise massivement les grilles de données nationales. La recherche se poursuit sur la sécurité et sur la technologie « middleware » pour les portails scientifiques.

Il faut souligner encore une fois cette manière exemplaire de combiner, pour traiter diverses applications scientifiques difficiles et importantes, des plateformes de calcul du plus haut niveau, la programmation par composants (en forgeant les outils nécessaires), et la grille. Les meilleurs groupes ont été mobilisés et la création d'un « *Collaboratory Software Infrastructure* » permet à des équipes géographiquement distantes de collaborer en de véritables équipes « virtuelles » interdisciplinaires.

Il est utile de rappeler que de nombreux logiciels scientifiques de bases sont développés aux Etats-Unis (Lapack etc....) et alimentent les applications scientifiques de par le monde. Bien que ces logiciels soient souvent élaborés par des non-américains, ils donnent une position de pouvoir aux Etats-Unis qui peuvent à tout moment en interdire la disposition à tel ou tel type de destinataire. C'est la conscience de cet enjeu qui pousse les pouvoirs publics américains à veiller à garder ce leadership en même temps que celui des « hardwares », des réseaux et grilles, etc.

Des projets encore plus ambitieux sont proposés, tel le projet « A Science-base Case for Large-scale Simulation (ScaLeS<sup>10</sup>) ».

## Centres nationaux

Ils dominent le TOP500 puisque 15 systèmes du TOP40 sont situés dans des centres nationaux américains.

- LANL (Los Alamos) : ASCI Q (8192 processeurs Alpha ; 20,5 Téraflops) ; cluster de 2816 processeurs AMD Opteron (Myrinet ; 11,2 Téraflops)
- LBNL (Lawrence Berkeley) : 6656 processeurs IBM SP Power3 (10 Téraflops)
- LLNL (Lawrence Livermore) : cluster de 2304 processeurs Intel Xeon (Quadrics ; 11 Téraflops) ; ASCI White (8192 proc. IBM SP Power3 ; 12,3 Téraflops) ; cluster IBM de 1920 proc. Xeon (Quadrics ; 9,2 Téraflops) ; ASCI Blue Pacific (IBM SP, 822 proc. 604e ; 3,8 Téraflops)
- NASA : cluster HP 1392 proc. Alpha (2,8 Téraflops)

---

<sup>10</sup> [www.pnl.gov/scales](http://www.pnl.gov/scales)

- NCEP (National Center for Environmental Prediction): IBM SP, 704 proc. Power4 (Colony; 3,6 Térafllops); IBM SP, 704 proc. Power4 (Colony; 3,6 Térafllops).
- NOAA (National Oceanic and Atmospheric Administration) : cluster 1536 proc Intel Xeon dual (Myrinet ; 6,7 Térafllops)
- ORNL (Oak Ridge) : IBM SP 864 proc. Power4 (Colony ; 4,4 Tflops) ; Cray X1, 252 proc. (3,2 Térafllops)
- PNNL (Pacific Northwest) : cluster HP de 1936 processeurs Itanium 2 (Quadrics ; 11,6 Térafllops)
- SNL (Sandia) : ASCI Red (9632 proc. Intel ; 3,2 Térafllops)

## Défense

Parmi de nombreux centres :

- ARL (US Army Research Lab) : IBM SP, 800 proc. Power4 (Colony, 4,1 Térafllops)
- Navocean (National Oceanographic Office) : IBM SP, 1184 proc. Power 4 (Colony, 6,1 Térafllops)

Sans oublier un ambitieux « programme de modernisation » des moyens de traitement de l'information des armées américaines.

## Principales universités impliquées dans le CHP

Les « centres nationaux » impulsent des initiatives au niveau des universités et centres de recherche dont le dynamisme frappe quand on visite l'exposition associée à la conférence Supercomputing (à Phoenix en 2003). De nombreuses universités y présentent leurs activités dans le domaine du calcul scientifique et technique. Il n'est pas possible (ni utile !) de les citer toutes dans ce rapport. On peut cependant prendre quelques exemples.

Les deux grands sites sont, sans aucun doute, NCSA (Illinois) et le SDSC (San Diego) que nous avons déjà cités. Ils disposent de moyens importants (même si d'autres universités disposent de moyens plus puissants) mais ils sont surtout au cœur des grands programmes fédéraux (NSF, tout particulièrement).

On peut mentionner d'autres universités équipées de moyens très importants :

- Arizona State University : cluster IBM, 1048 proc. Xeon (Gig-Ethernet ; 5 Térafllops)
- Louisiana State University : cluster 1024 Intel P4 (Myrinet ; 3,7 Térafllops)
- NCSA (Urbana-Champaign) : 2500 processeurs Dell P4 Xeon (15,3 Térafllops) ; cluster 512 proc. Itanium2 (Myrinet ; 2,6 Térafllops)
- PSC (Pittsburgh) : équipé d'un système de 6 Térafllops crête en 2003 (3016 proc. HP Alpha)

- SUNY University at Buffalo : cluster Dell, 600 proc. Xeon (Myrinet; 2,9 Téra-flops)
- University of Texas : cluster Dell, 600 proc. Pentium4 (Myrinet ; 3,7 Téra-flops)
- Virginia Tech : dispose du plus gros réseau de PC (« cluster fait maison ») : 2200 PC Apple G5 à 2 processeurs (17,6 Téra-flops crête)

Sans oublier de nombreuses universités qui, sans disposer de moyens aussi importants, ont des systèmes en bonne position dans les 200 premières places du TOP500 et/ou ont des activités de recherche reconnues dans le domaine du calcul de haute performance : University of Southern California, Cornell University, University of Alaska, Florida State University, University of Houston, Indiana University, University of Kentucky, Pennsylvania State University, Maui High Performance Computing Center, Mississippi State University, Brigham Young University, Ohio Supercomputer Center, North Carolina Supercomputer Center, Vanderbilt University, University of Utah, University of Illinois at Chicago (centre national sur la fouille de données).

## Entreprises

Le rôle dominant des Etats-Unis en tant que fournisseur de solutions matérielles et logicielles ne fait de doute pour personne. Qu'en est-il pour ce qui concerne l'utilisation du CHP ?

Le calcul de haute performance a une place croissante dans les entreprises, aux Etats-Unis comme dans les principaux pays européens. Sur les 211 systèmes du TOP500 (novembre 2003) installés dans des entreprises, 81 sont aux Etats-Unis. Les principaux secteurs concernés sont : l'énergie, l'industrie des semi-conducteurs, l'image de synthèse et l'animation (en lien avec l'industrie cinématographique), la géophysique, l'industrie pétrolière, l'automobile, l'aéronautique, la génomique, et tout un secteur en fort développement : celui des entreprises manipulant de grands volumes de données (finances, grande distribution, opérateurs téléphoniques, etc) et donc développant des techniques de fouille de données.

Enfin, mentionnons le démarrage des services « capacité de calcul à la demande » avec quatre systèmes (performance totale : 6 Téra-flops) dans le cadre du service « *Deep Computing / Capacity on Demand Center* » d'IBM.

## Le Japon

Les constructeurs japonais (Fujitsu, Hitachi, NEC) sont très présents dans le domaine du CHP, même si leur position s'est affaiblie depuis deux ou trois ans.

Le « Earth Simulator » (ES40) est apparu dès son lancement comme une initiative majeure dans le domaine du calcul intensif, initiative que les Etats-Unis ont ressenti comme une forte menace pour leur suprématie dans ce domaine, tant du côté des constructeurs que du côté des scientifiques utilisateurs. Combinée au fait que, peu de temps auparavant, la tentative de NEC d'entrer sur le marché américain n'avait été

arrêtée qu'au prix d'un recours en justice pour « dumping », au grand dam des scientifiques du NCAR, cette initiative a consacré le Japon au rang de leader dans le domaine.

Le « Earth Simulator » est une machine de performance crête égale à 40 Téra-flops, avec 10 Téraoctets de mémoire et 360 Téraoctets de disques. ES40 est construit par assemblage de 640 nœuds, chaque nœud étant constitué de 8 processeurs de type NEC-SX de puissance crête individuelle de 8 Gigaflops, avec une mémoire partagée de 16 Gigaoctets ; chaque nœud représente donc une puissance crête de 64 Gigaflops. Un des éléments remarquables à noter est que, dès son annonce vers le milieu des années 90, un calendrier très ambitieux avait été annoncé, avec une mise en exploitation prévue pour début 2002. Et c'est en effet au tout début 2002 que les premières simulations réalisées sur ES40 ont permis d'atteindre une puissance efficace de 14,5 Téra-flops, et pour seulement une demi-configuration (soit 320 nœuds ou 2560 processeurs individuels). Il ne s'agissait alors que d'une première application à base de simulation atmosphérique, résolue sur 10 pas de temps seulement, mais avec un modèle global de troncature T1279 et possédant 96 niveaux verticaux. Ceci lui donnait néanmoins une première place au TOP500, place préservée depuis, et jusqu'à aujourd'hui, sans trop de concurrence.

Au-delà de son évidente motivation technique et technologique pour favoriser le développement de l'industrie japonaise dans le domaine des calculateurs à haute performance, ES40 a été présenté dès sa conception comme l'outil répondant aux besoins de la simulation numérique dans deux grands domaines, celui du climat, avec l'enjeu de prévoir le climat du 21<sup>ème</sup> siècle modifié par l'effet de serre anthropique, et celui de la géophysique interne, avec la prévision des tremblements de terre en objectif ultime. Il est toutefois intéressant de noter qu'aujourd'hui ES40 est tout autant utilisé pour le climat (environ 30 à 35%) et la géophysique (15 à 20%) que pour d'autres applications en « Computer sciences » (pour environ 10%) et en nano-physique (environ 15%), voire dans des domaines réservés et confidentiels (pour environ 20 à 30%). Le résultat est que ES40 a atteint sa pleine utilisation dès 2003, et que les utilisateurs actuels se plaignent de son encombrement, comme tout autre utilisateur de centre de calcul !

Qui sont ces utilisateurs ? Des groupes japonais pour l'essentiel, car l'accès à ES40 reste très contrôlé. Contrôlé d'une part au niveau physique, puisqu'il faut être effectivement présent sur le site à Yokohama pour pouvoir calculer (aucun réseau ne permet d'atteindre ES40 depuis l'extérieur). Contrôlé aussi quant aux pays qui peuvent y accéder. Les Etats-Unis ont été les premiers à développer une collaboration avec le Japon pour avoir accès à ES40, sur la base d'une collaboration entre le CRIEPI et le NCAR. La Grande-Bretagne et la France, en modélisation océanographique et climatique, ont depuis pu accéder à la machine, non sans avoir dû régler le problème de l'envoi sur place d'un ou plusieurs chercheurs.

Au-delà de ces quelques éléments factuels, quels enseignements peut-on tirer de la mise en place du projet ES40, tant technologiquement que scientifiquement, et tant pour le Japon que pour les autres pays ?

Tout d'abord que l'approche « multi-SMP » n'a pas encore touché ses limites du point de vue technologique. Avec un réseau d'interconnexion « crossbar » à 16 Gigaoctets/s, et des processeurs déjà validés dans les architectures de la gamme NEC-SX, il a été possible d'atteindre les performances visées. Ceci a conforté nombre d'équipes, en particulier dans le domaine climatologique, dans leur opinion que le temps des architectures massivement parallèles n'était pas encore arrivé.

Ensuite l'effet de l'arrivée de ES40 a été de favoriser un regroupement des forces de la communauté japonaise en modélisation. Cette communauté était assez dispersée entre plusieurs groupes universitaires et le service météorologique. La nécessité de développer des modèles performants capables d'utiliser efficacement les capacités de la machine a conduit la communauté japonaise à se regrouper autour de quelques grands modèles, et lui a permis de commencer à rattraper un retard certain en modélisation climatique.

Enfin, si la percée de ES40 a bien encouragé, et fortement, les Etats-Unis à relancer une politique ambitieuse dans le domaine du calcul à haute performance (cf. *supra*), elle ne semble malheureusement pas avoir réussi à réveiller l'Europe.

Signalons qu'un séminaire de travail a réuni à Paris, les 8 et 9 mars 2004, des scientifiques japonais et français, l'objectif de ce séminaire étant de dégager des axes de collaborations dans le domaine des grilles de calcul.

## La Chine<sup>11</sup>

Suite au « Coordinating Committee for Export Control », établi à Paris en 1949, la Chine ne peut importer des superordinateurs. Elle lance alors un vaste programme visant à acquérir des compétences propres dans le domaine. En septembre 1959, le premier supercalculateur chinois, la « Machine 104 », est ainsi développé par l'ICT (Institute of Computing Technology). Sa capacité de calcul n'atteint que 10.000 flops, mais cette machine a eu une place importante dans la recherche et le développement de la première bombe atomique chinoise. En 1983, Le supercalculateur « Galaxy I » développé par l'université (militaire) des sciences et technologies de la défense de Chine atteint jusqu'à 100 Mégaflops. En 1992, Le supercalculateur « Galaxy II » atteint jusqu'à 1 Gigaflops.

En 1994, la dissolution du « Coordinating Committee for Export Control » permet à la Chine d'importer des machines HPC de bas de gamme. La Chine poursuit alors son effort pour obtenir des machines de haut de gamme en intégrant en particulier la technologie à laquelle elle a alors accès : en 1995, le « Dawning » atteint 2.5 Gflops, en 1997 le « Galaxy III » atteint 13 Gigaflops et en 1999 le « Galaxy IV » fut opérationnel. La capacité de calcul de ce dernier est encore classifiée secret défense à ce jour. En juin 2000, le supercalculateur « GodPower I » développé par l'institut militaire « JiangNan Computing » atteint jusqu'à 384 Gigaflops. Le 29 août 2002, le su-

---

<sup>11</sup> « La Chine s'éveille au HPC » ; ceci nous a paru justifier une description un peu plus détaillée des projets en cours.

percalculateur « DeepComp 1800 » développé par le groupe « Lenovo » dépasse le Tflops pour la première fois en Chine. Il atteint jusqu'à 1.297 TéraFlops de performance de crête et rentre à la 82<sup>ème</sup> place dans la liste TOP500 en novembre 2003. En novembre 2003, le supercalculateur « DeepComp 6800 » développé par le Groupe Lenovo sous la direction de LiMin XIAO atteint 4 TéraFlops et intègre le TOP500 à la 14<sup>ème</sup> place, avec devant lui uniquement des machines américaines et japonaises. Le 15 décembre 2003, la compagnie « Dawning Information » a par ailleurs signé un contrat avec SSC (Shanghai Supercomputing Center) pour construire le supercalculateur « Dawning 4000A » dont la capacité de calcul devrait atteindre les 10 TéraFlops en juin 2004.

## Principaux calculateurs chinois<sup>12</sup>

### DEEPCOMP 6800

Le « DeepComp 6800 » est développé par « Lenovo Group Limited » dans le cadre du programme national de la Chine pour les recherches et les développements des hautes technologies. L'architecture du « DeepComp 6800 » est de type « Cluster », avec 265 nœuds regroupant 1060 processeurs Athon II à 1.3 GHz. La mémoire est de 2.6 Téraoctets au total, avec une capacité de 80 Téraoctets de stockage sur disque dur. Les nœuds sont interconnectés par un réseau haut débit QsNet (P2P 300M/S). Le « DeepComp 6800 » est entré en quatorzième position dans le TOP500 en novembre dernier. Il est, par ailleurs, le second en terme d'efficacité (78.5% pour le test LINPACK). La première machine est installée au CNIC (Computer Network Information Center of the Chinese Academy of Sciences). En outre, le « DeepComp 6800 » sera utilisé comme un nœud Pekinois de la Grille CNGrid (GRID National de la Chine, cf. plus bas).

### DAWNING 4000A<sup>13</sup>

Le principal constructeur chinois de supercalculateur, « Dawning Information Compagny », a annoncé pour juin prochain le supercalculateur « Dawning 4000A ». Cette machine sera installée au « Shanghai SuperComputing Center ». Elle s'occupera des énormes échanges de données sur la grille **CNGrid**. Avec cette machine, la Chine souhaite devenir le troisième pays au monde commercialisant des supercalculateurs avec une capacité supérieure à 10 TeraFlops. Le « Dawning 4000A » possédera une architecture « Cluster » de 512 nœuds regroupant 2192 processeurs AMD Opteron800. Le mémoire sera de 2256 Gigaoctets avec une capacité disque de 30 Téraoctets.

Autour de ce projet, un Internet à haut débit de 5 Gbps est prévu. La Chine se donne comme objectif de fabriquer par elle-même les supercalculateurs commercialisés avec les puissances de 1 à 20 TéraFlops. Dans ce cadre, « Dawning » prévoit de

---

<sup>12</sup> HengJia WANG, *Le HPC chinois développe de l'embargo américain*, Economie de connaissance

<sup>13</sup> Dawning Information Industry Co. Ltd. [www.dawning.com.cn](http://www.dawning.com.cn)

développer avant 2006 le supercalculateur « Dawning 4000T » qui aura un enjeu stratégique très important pour la Chine puisque cette machine utilisera les processeurs chinois « Dragon Cœur III », au lieu des CPU Intel ou AMD utilisés pour l'instant. Actuellement les « Dragon Cœur II—Godson » développés par l'ICT possède des performances proche de l'Intel P4 à 1 GHz.

### DEEPSUPER-21C

Le supercalculateur « DeepSuper-21C » développé par l'université Tsinghua est le premier supercalculateur développé par une université chinoise. Il sera installé à l'université de ShenZhen et sera un nœud du GRID de la ville de ShenZhen. « Deep-Super-21C » est un « Cluster » de 128 nœuds regroupant 256 processeurs Intel P4 Xeon à 3.06GHz/2.8GHz. La mémoire est de 128 Gigaoctets. Les nœuds sont interconnectés par trois moyens : Myrinet, 100M EarthNet et Switcher.

### Les programmes chinois pour les grilles de calcul

La Chine possède plusieurs programmes de développement de machines hautes performances et de grilles de calculs, fortement planifiés et aux objectifs précis et affichés : devenir un des très rares pays possédant la capacité de développer seul des machines parmi les plus performantes au monde et de déployer une grille de calcul parmi les plus puissantes. Les moyens engagés, tant financiers qu'humains, sont à la hauteur des enjeux.

Les objectifs de la chine pour les deux ans à venir sont de posséder une grille de calcul d'une capacité de calcul cumulée de 15 Téraflops, avec une capacité de stockage de 260 Téraoctets. Celle-ci interconnectera jusqu'à 100 universités publiques attachées au Ministère de l'Education. La Chine souhaite devenir un des leaders de la recherche fondamentale et appliquée autour du calcul sur grilles. Dans ce cadre, la Chine a déjà plusieurs projets de recherche depuis quelques années.

Par ailleurs IBM a lancé un projet de grille en Chine qu'il présente comme devant être le plus puissant qu'il ait jamais conçu. Baptisé « China Grid System » la puissance visée est de 15 Téraflops. Il sera constitué de serveur Linux interconnectés par Internet. Lorsqu'elle sera complètement déployée, la grille reliera 100 universités et près de 10000 étudiants chinois. Un des objectifs affichés est de permettre le traitement des données sur le SRAS.

### NHPCE<sup>14</sup>

De 1999 à 2001, le programme national de développement des hautes technologies de la Chine, le « *National High Performance Computing Environment* » (NHPCE), a établi neuf nœuds de calcul en utilisant les machines HPC chinoises. La recherche autour de NHPCE a mis l'accent sur le modèle de l'architecture GRID et le modèle

---

<sup>14</sup> *Le base de la recherche de « GRID system software » de ICT, 2003.02.20, The document of China Nationl GRID. [www.vega.ict.ac.cn](http://www.vega.ict.ac.cn)*

des informations sur les GRID. L'ICT a développé un logiciel de moniteur du GRID « GridMon » permettant un affichage identique des ressources hétérogènes et largement dispersées et satisfait les demandes de maintenance et d'interfaces des utilisateurs des couches différents. Les aspects informatiques du GRID furent donc très fortement étudiés dès le début du déploiement du système.

## VEGA GRID

Le VEGA Grid est un projet de ICT. Les recherches portent sur l'architecture et les systèmes pour les grilles. La conception de l'architecture du VEGA Grid considère le GRID comme un système informatique virtuel avec une unique image de système. Le système du GRID est basé sur le « Grid Computing Protocol », GCP. Plusieurs recherches autour de la location des ressources sur la base du mécanisme de routage et de transfert furent menées. Il fut proposé une conception et implémentation du router des ressources sur l'environnement du GRID.

## CNGRID

Le logiciel de système CNGrid est un sous projet de type GRID du programme « logiciels noyaux des supercalculateur et les développements des supercalculateurs ». La Grille Nationale du Ministère de la Science et de la Technologie de la Chine prévoit une capacité de calcul cumulée pouvant atteindre jusqu'à 8Téraflops, avec une capacité de stockage de 30 Téraoctets. Au moins dix centres de calcul sont interconnectés par des réseaux à hauts débits. Sur la base de la recherche de NHPCE, la recherche du logiciel de système CNGrid met l'accent sur l'architecture du GRID, le modèle d'information, le modèle d'espace des ressources, l'environnement des utilisations et développements d'utilisateur. En même temps, elle suit le développement international pour être compatible avec les systèmes internationaux populaires. CNGrid prend la méthode de « Open Operation System » qui est le noyau au fond avec le cadre de haut couche : comme la relation entre le noyau de Linux et GNU. Il est par ailleurs proposé le « GSML » (*Grid Service Markup Language*) un environnement facile et convivial d'utilisation et développement.

## CHINA GRID

En Octobre, 2003, la première phase de ChinaGrid avec 2 millions de yuan investis par le Ministère de l'Éducation Chinois démarrait. ChinaGrid est une partie importante du « 15<sup>ème</sup> Plan National », en particulier. Lors de la première phase, 12 universités chinoises seront interconnectées, 10 nœuds principaux seront établis, une plateforme de service fournira aux utilisateurs les calculs de haute performance, les ressources partagées, la large coopération. Ensuite, la capacité de calcul cumulé de ChinaGrid devrait dépasser le Teraflops, avec une capacité de stockage de 20 Téraoctets.

## Conclusions

En brève conclusion de ce chapitre, on peut remarquer l'effort considérable qui est développé dans le domaine du calcul scientifique dans les pays que nous avons étu-

diés. L'Europe est très largement distancée par les USA et la place de la France se dégrade en Europe. Les Etats-Unis, le Japon et la Chine développent un effort combiné sur plusieurs fronts : l'installation de puissantes plateformes de calcul, réseaux et grilles, le développement de logiciels et de codes, tout ceci en coordination avec les informaticiens. Et, bien sûr, des projets ambitieux dans le domaine des applications en recherche fondamentale, appliquée et dans l'industrie.

Evidement ces pays sont aidés par l'existence de constructeurs nationaux et d'une industrie logicielle mais aussi par une vision stratégique à long terme qui les persuade qu'on ne peut se laisser distancer dans les secteurs de pointe de l'informatique ni dans celui des applications. L'Europe est par contre démoralisée par des échecs répétés et incapable d'unir les forces importantes qui lui restent.

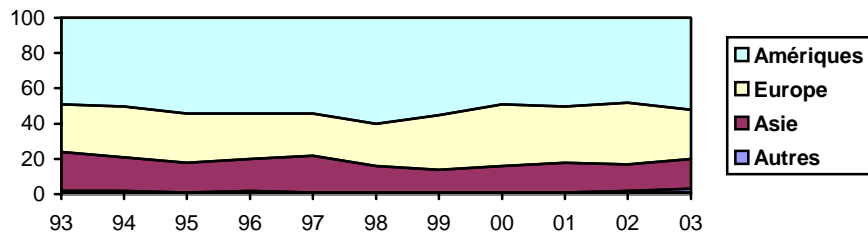


# 5

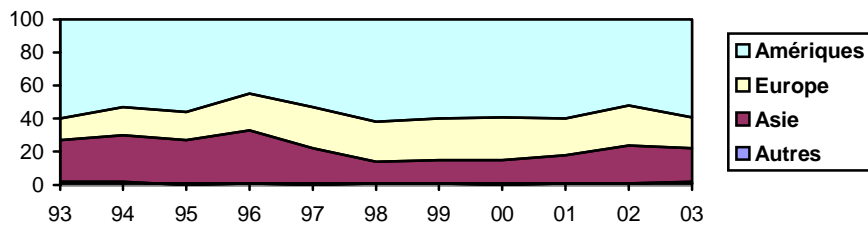
## LE CONTEXTE EUROPEEN

La position de l'Europe, dans le TOP500, est assez médiocre. En effet, les Etats-Unis disposent d'environ 50% des systèmes du TOP500 mais 60% de la puissance installée, l'Europe arrive en seconde position pour le nombre de systèmes mais est à égalité avec le Japon pour la puissance installée. Les deux graphiques ci-dessous résument l'évolution de la situation depuis 1993.

Nombre de systèmes (%)



Puissance Rmax installée (%)

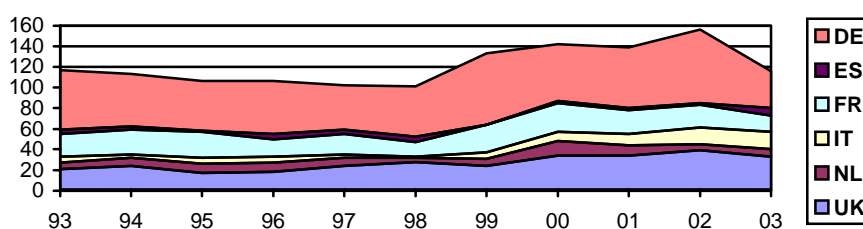


On remarque que la situation de l'Europe s'est dégradée en 2003, tant en nombre de systèmes qu'en puissance installée.

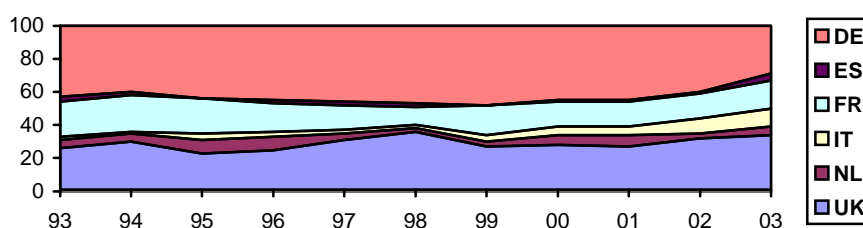
La situation de l'Europe dans le calcul scientifique et technique ne peut pas être considérée que dans sa globalité car elle recouvre des différences très fortes selon les pays. Il nous a semblé utile de regarder ce que font nos voisins les plus proches.

Nous avons retenu l'Allemagne, l'Espagne, la France, l'Italie, les Pays-Bas et le Royaume Uni. Les deux graphiques qui suivent montrent, d'une part l'évolution du nombre de systèmes cités dans le TOP500 de 1993 à 2003 (édition de novembre), d'autre part la distribution de la puissance installée (Rmax) entre ces 6 pays.

Nombre de systèmes installés



Distribution de la puissance Rmax (%)



Deux pays dominant largement : l'Allemagne et le Royaume Uni. La France arrive assez loin derrière et est suivie de près par l'Italie qui a progressé de façon importante depuis deux ans.

## Les programmes de quelques pays européens

La situation des pays dépend pour une large partie de « programmes incitatifs » pilotés et financés par les gouvernements nationaux ou régionaux. Voyons les principaux programmes<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Le site <http://www.arcade-eu.info/academicsupercomputing/> (Academic Supercomputing in Europe) donne de nombreuses informations

## Allemagne

L'Allemagne est très largement en tête des pays européens dans ce domaine, en particulier si l'on se réfère au TOP500 (en novembre 2003, elle héberge 36 systèmes sur les 142 systèmes et représente 25% de la puissance installée en Europe). Ceci résulte d'actions concertées au niveau des « Länder » et de programmes fédéraux, les gouvernements ayant pris la mesure du rôle du calcul scientifique et technique pour la recherche comme pour l'industrie. En 1995 et en 2000, le « Science Council » fédéral allemand a fait des recommandations pour la création de plusieurs centres nationaux devant positionner l'Allemagne à la première place en Europe, et insérés dans un réseau de compétences pour promouvoir les méthodes, les outils et les applications, ainsi que la formation des jeunes scientifiques et ingénieurs. Un comité de coordination a été mis en place en mai 2001.

Les trois « centres nationaux » actuels (HLRS, NIC, LRZ) ne doivent pas masquer l'importance des centres régionaux et/ou universitaires (HLRN, Max Planck Gesellschaft, Fraunhofer Institut, universités de Aachen, Heidelberg, ...). Les différents moyens de calcul sont reliés par des réseaux à haut débit, les technologies de grille étant largement utilisées (UNICORE, UNICORE+, nouvelle initiative D-GRID, à l'instar des initiatives e-Science au Royaume-Uni ou ACI GRID en France).

L'initiative D-GRID devrait avoir un budget global de 300 millions d'euros sur cinq années, 100 M€ venant du gouvernement, 100 M€ de l'industrie et 100 M€ des organismes de recherche.

## HLRS

Il dépend administrativement de l'université de Stuttgart mais reçoit l'essentiel de ses financements du Land du Baden-Württemberg et du gouvernement fédéral. La collaboration entre le HLRS et les industriels allemands de l'automobile se poursuit (partage de ressources, mise en place de programmes de R&D, etc). Le HLRS est aussi fortement impliqué dans des projets européens : HPC-Europa, GRASP, Damien, CrossGRID, COVER (simulation et visualisation), VIRVO (réalité virtuelle), COVISE, etc.

Les principaux moyens de calcul du HLRS (février 2004) sont<sup>2</sup> :

- NEC SX-6 avec 48 processeurs (550 Gigaflops) ; il devrait être remplacé, début 2005, par la nouvelle génération de systèmes SX (SX-8 ?) devant évoluer vers une machine à plus de 12000 Gigaflops
- Cray T3E-900 avec 512 processeurs (460 Gigaflops)
- Hitachi SR8000 avec 16x8 processeurs (128 Gigaflops)

Les premiers domaines applicatifs exploitant ces systèmes sont la mécanique des fluides (40% des ressources) et la physique (30%).

---

<sup>2</sup> Toutes les performances données sont des performances « crête », sauf indication contraire

## NIC

L'institut pour le calcul John von Neumann est une fondation commune du centre de recherche de Jülich et de DESY (Deutsches Elektronen-Synchrotron). Ses moyens sont gérés par le ZAM (institut central pour les mathématiques appliquées) à Jülich et par le centre pour le calcul parallèle de DESY à Zeuthen.

Les principaux moyens de calcul sont :

- Cluster IBM p690 dont la configuration a évolué en mars 2004 pour atteindre 41 nœuds (total : 1312 processeurs Power4+), une mémoire centrale de 5,2 Téraoctets, un espace disques de 56 Téraoctets. La performance crête est de 8.900 Gigaflops.
- Cray T3E-1200 avec 512 nœuds (614 Gigaflops)
- APEmille avec 1124 processeurs (550 Gigaflops), ordinateur spécialisé pour les applications de QCD

## LRZ

Le Leibniz-Rechenzentrum dépend de l'Académie des sciences de Bavière à Munich.

Ses principaux moyens de calcul sont :

- Hitachi SR8000-F1 avec 2016 processeurs (2016 Gigaflops)
- Fujitsu VPP700 avec 52 processeurs (114 Gigaflops)

## ZIB (OU HLRN)

Le ZIB (Zuse Institute Berlin) est un institut de recherche en mathématiques appliquées en informatique. Cet institut s'est spécialisé dans les recherches autour de l'algorithmique parallèle et la programmation des supercalculateurs. Au sein du ZIB existe un centre de supercalcul dont les principaux équipements sont :

- IBM pSeries 690 avec 416 processeurs Power4+, machine qui est connectée à une configuration identique installée à l'université d'Hannovre (puissance de 2.000 Gigaflops chacune). Ces deux machines sont gérées par le HLRN (centre de calcul de haute performance d'Allemagne du Nord)
- Cray T3E (dont l'arrêt est prévu en 2004)

## MAX-PLANCK INSTITUT

L'IPP (Institut für Plasmaphysik) à Garching dispose d'un système IBM pSeries 690 avec 822 processeurs (performance : 4.270 Gigaflops).

## METEO

Le service météorologique allemand a un système IBM SP Power3 avec 1920 processeurs (2.880 Gigaflops) tandis que le DKRZ (recherche sur le climat) a un NEC SX-6 à 128 processeurs (1.540 Gigaflops).

## DANS LES ENTREPRISES

Les constructeurs automobiles (Opel, Volkswagen, et surtout BMW avec cinq systèmes) sont présents dans le TOP500. On trouve aussi l'industrie pharmaceutique, les télécommunications, etc.

## Royaume Uni

### E-SCIENCE

Considérant que la recherche avait besoin de partager de nombreuses ressources (grands moyens de calcul, bases de données, etc), l'OST (*Office of Science and Technology*), au sein du DTI (*Department of Trade and Industry*) britannique, a lancé l'initiative e-Science<sup>3</sup> avec un budget de 213 millions de livres (« *e-Science is about global collaboration in key areas of science and the next generation of infrastructure that will enable it* ». Dr John Taylor, Director General of Research Councils). Cette initiative vise à mettre en place une « grille » de moyens répondant aux besoins des communautés scientifiques, associant les sept « *Research Council* » à travers des projets pilotes. Un « centre national » (financement de 3 M£), huit « centres régionaux » (financement de 1 M£ chacun) et sept « centres d'excellence » (réseaux, visualisation, modélisation de systèmes complexes, etc.) forment la base de cette grille. Cette politique a renforcé la position du Royaume-Uni (en novembre 2003 : 33 systèmes et 29% de la puissance installée en Europe).

### EPCC

Le « centre national » EPCC<sup>4</sup>, à l'université d'Edinburgh, a une longue expérience du calcul parallèle et dispose de l'ordinateur qui était le plus puissant en Europe (il vient d'être dépassé par le NIC allemand), dénommé HPCx. Ce système, construit par IBM et installé à Daresbury, est mis en place en trois étapes. La phase actuelle consiste en 40 machines IBM p690 contenant chacune 32 processeurs Power4 à 1,3 GHz, reliées par un switch Colony (performance crête globale : 6,6 Téraflops). Deux mises à jour doivent permettre de retrouver la première place en Europe pour atteindre une performance crête de 11 Téraflops en 2004 et 22 Téraflops en 2006.

Ce centre a de nombreuses activités en liaison étroite avec la communauté scientifique britannique et l'industrie ; il s'est fortement engagé dans les technologies de type « grille » et a rejoint l'Alliance Globus.

Principaux moyens de calcul :

- Cluster de 40 machines IBM Regatta-H, avec un total de 1280 processeurs Power4 (6.650 Gigaflops)
- Cray T3E-900 avec 344 processeurs Alpha (EV5.6)

---

<sup>3</sup> <http://www.escience-grid.org.uk>

<sup>4</sup> <http://www.epcc.ed.ac.uk>

## CSAR

Le CSAR<sup>5</sup> (*Computer Services for Academic Research*) de l'Université de Manchester est l'un des autres grands centres anglais.

Les principaux moyens de calcul :

- SGI Altix avec 256 processeurs Itanium2 (1.330 Gigaflops)
- Cray T3E-1200 avec 816 processeurs (974 Gigaflops)
- SGI Origin 3800 avec 512 processeurs

## METEOROLOGIE

La Météo européenne (ECMWF) dispose de deux systèmes IBM p690 à 960 processeurs (5.000 Gflops crête chacun). Les services météo britanniques utilisent, de leur côté, deux NEC SX-6 avec 120 processeurs (960 Gigaflops chacun) et deux Cray T3E.

## DANS LES ENTREPRISES

Le principal utilisateur de CHP est la Compagnie Générale de Géophysique avec trois clusters installés au Royaume-Uni (dont un cluster IBM de 1100 processeurs Xeon). On note aussi Williams Racing (automobile), les télécoms, l'électronique (Sony), les finances.

## Espagne

L'Espagne ne disposait pas de réel programme national dans le domaine du calcul de haute performance. Mais le gouvernement espagnol a annoncé, en février 2004, la création d'un centre national de calcul de haute performance, en partenariat avec IBM. Ce centre devrait être équipé, fin 2004, d'un système IBM de 40 Téraflopps de performance crête (4500 processeurs), ce qui en ferait le deuxième centre le plus puissant du monde (après le Earth Simulator). Il fonctionnera en étroite collaboration avec les universités du pays et sera un centre ouvert à toutes les disciplines ayant besoin de grandes puissances de calcul. Le gouvernement espagnol apporte un financement de 70 millions d'euros (sur quatre ans) dans ce projet.

Les centres les plus actifs actuellement, au moins pour la recherche académique, sont : le CESGA<sup>6</sup> (*Centro de Supercomputacion de Galicia*), le CESCAs<sup>7</sup> (*Centre de Supercomputació de Catalunya*), le CEPBA<sup>8</sup> (*European Center for Parallelism of Barcelona*).

---

<sup>5</sup> <http://www.csar.cfs.ac.uk>

<sup>6</sup> <http://www.cesga.es/>

<sup>7</sup> <http://www.cesca.es/>

<sup>8</sup> <http://www.cepba.upc.es>

## CESGA

Créé pour fournir des moyens de calcul à la communauté scientifique de Galice, il dispose du seul système « académique » cité dans le TOP500 de novembre 2003.

Principaux moyens de calcul :

- HP Integrity Superdome avec 128 processeurs

## CESCA – CEPBA – C3

Le CESCA est le résultat de la collaboration de 7 universités de Catalogne, de la *Generalitat de Catalunya* et de la *Fundació Catalana per a la Recerca*.

Le CEPBA dépend de l'université polytechnique de Catalogne (UPC). Par ailleurs, un institut de recherche associe le CEPBA et IBM ; l'un de ses objectifs est l'implémentation d'une technologie mémoire partagée pour les architectures Blue Gene.

Le CESCA et le CEPBA coordonnent leurs activités de service à travers le C3 (Computing and Communications Center of Catalonia).

Principaux moyens de calcul :

- IBM SP2 avec 44 processeurs
- SGI Origin 2000 avec 64 processeurs

## METEO

L'institut national de météorologie dispose d'un Cray X1 (40 processeurs).

## DANS LES ENTREPRISES

Quatre entreprises (télécommunications) disposent de systèmes importants. Par ailleurs, l'institut national de météorologie dispose d'un Cray X1 (40 processeurs).

## Italie

### CINECA

C'est, depuis longtemps, le principal centre de calcul destiné à la communauté scientifique italienne. Installé à Bologne, ses principaux moyens sont :

- IBM xSeries avec 512 processeurs Xeon à 3 GHz (3.130 Gigaflops)
- IBM p690 Turbo avec 512 processeurs (2.660 Gigaflops)

### AUTRES CENTRES ACADEMIQUES

- CASPUR (*Consorzio interuniversitario per le applicazioni di supercalcolo per università e ricerca* : Rome) : le principal système est un IBM p690/670 avec 64+16 processeurs (400 Gigaflops)

- CILEA (*Consorzio Interuniversitario Lombardo per l'Elaborazione Automatica*) : HP SuperDome/64, HP V 2500, ...
- INFN (*Istituto Nazionale di Fisica Nucleare*, Rome) : plusieurs APEmille avec un total de 12000 processeurs

## ENTREPRISES

Les principales entreprises dans le TOP500 (avec un total de 15 systèmes) se situent essentiellement dans les domaines des télécommunications et de la finance.

## Pays-Bas

La NCF<sup>9</sup> (*National Computing Facilities Foundation*) est une fondation indépendante créée par l'Organisation néerlandaise pour la recherche scientifique (NOW) financée par le ministère chargé de l'éducation. Sa mission est de faciliter la recherche scientifique stratégique en fournissant les grands moyens de calcul dont a besoin la communauté scientifique académique. Il répartit les ressources disponibles, en coopération avec un comité scientifique, les centres de calcul de haute performance et les universités. NCF fournit (via NWO) le financement des superordinateurs au niveau national ; les universités financent les ordinateurs locaux, avec l'aide de la NCF pour certains « méso-centres » à la condition que ces derniers soient ouverts à la communauté nationale.

Fin 2003, les moyens disponibles étaient les suivants (les deux premiers systèmes étant « nationaux » et installés à SARA (Amsterdam) :

- SGI Altix 3700 avec 416 processeurs Itanium2 à 1,3 GHz (performance crête globale : 2,2 Téraflops) et une mémoire centrale totale de 632 Gigaoctets ;
- SGI Origin3800 avec 1024 processeurs MIPS à 500 MHz (performance crête globale : 1 Téraflops) et une mémoire centrale totale de 1 Téraoctets ;
- IBM RS 6000/SP avec 4 noeuds Regatta de 32 processeurs Power4 à 1,1 GHz installé à SARA

## DANS LES ENTREPRISES

Quatre systèmes hors de SARA : deux chez le constructeur HP, un dans un organisme financier, un dans l'énergie.

## Les programmes cadres européens de R&D

Depuis plus de dix ans, la Commission européenne a contribué au financement de projets destinés à développer le calcul de haute performance en Europe. Les programmes cadres quadriennaux sont le principal instrument de ce financement : il sont basés sur des « Programmes de travail » et des appels à propositions. Nous nous limiterons ici aux 10 dernières années, mais il ne faut pas oublier que dès le troisième

---

<sup>9</sup> <http://www.now.nl/ncf>

programme cadre, des financements significatifs ont été apportés à des projets avec l'objectif de maintenir et renforcer l'industrie des ordinateurs en Europe.

### Quatrième PCRDT

Le 4<sup>ème</sup> Programme Cadre de Recherche et Développement couvrait la période 1995-1998 et disposait d'un budget global de 12.300 M€ dont 1.911 M€ pour le programme « Technologies de l'Information ». Cette somme de 1.911 M€ était répartie sur les domaines suivants :

<i>Technologie des logiciels</i> (ST)	268 M€
<i>Technologie des composants et des sous-systèmes</i> (TCS)	440 M€
<i>Systèmes multimédia</i> (MS)	153 M€
<b>Faisceaux d'activités ciblées</b>	
Initiative des systèmes microprocesseurs ouverts (OMI)	191 M€
Calcul et réseaux à haute performance (HPCN)	248 M€
Technologies destinées aux processus d'entreprise (TBP)	191 M€
Intégration dans la fabrication (IM)	229 M€
<b>Recherche à long terme</b> (LTR)	191 M€

Le calcul de haute performance avait une place très significative dans ce programme « Technologies de l'Information » puisque un « faisceau d'activités ciblées » lui était consacré avec un budget de 248 M€. De plus, il pouvait être concerné par d'autres domaines tels que ST et LTR.

Le domaine HPCN avait pour objectif d'améliorer, en Europe, la capacité d'exploiter les technologies des calculateurs à haute performance (et du parallélisme en particulier), mais aussi de soutenir une industrie des supercalculateurs en Europe. La priorité était le transfert de technologie et la mise en place de collaborations verticales entre utilisateurs, développeurs d'applications, fournisseurs de matériels et de logiciels, dans le but de promouvoir l'utilisation du CHP dans l'industrie, former les développeurs et les utilisateurs, etc. L'accent était mis sur les « tâches » suivantes :

- Simulation et conception
- Systèmes enfouis
- Gestion de l'information et support de décision
- Technologie des logiciels et des systèmes
- Plate-formes d'exécution
- Initiative en calcul parallèle
- Développement d'une infrastructure HPCN
- Education, formation, promotion<sup>10</sup>

La participation a été très importante, tant de la part des grandes entreprises et des PME que de la part des centres de recherche et des universités. Une des particularités

<sup>10</sup> ORAP a représenté la France dans le projet HOISE, projet qui a donné naissance au serveur d'informations européen et au magazine électronique PRIMEUR.

du programme HPCN a été de financer des projets sur les applications nécessitant l'utilisation de supercalculateurs. Les projets EUROPORT-1, EUROPORT-2 et EUROPORT-D ont financé des activités de portage et le développement d'applications industrielles pour les calculateurs parallèles. A l'issue de ces projets, la Commission a lancé des activités de transfert, en particulier dans le cadre des TTN (Technology Transfer Nodes) qui ont permis d'associer de nombreuses PME, fournisseurs ou utilisateurs de solutions CHP. C'est le cas du « TTN français » ProHPC associant l'ENS Lyon, l'INRIA, Matra Systèmes et Simulog.

On trouvera sur le site Cordis, le rapport d'activité 1998<sup>11</sup> du programme HPCN. Par ailleurs, une étude<sup>12</sup> réalisée pour le compte de la Commission par le BETA de l'Université Louis Pasteur de Strasbourg a montré que chaque Euro de financement de la Commission dans le programme HPCN avait généré 11,2 Euros de revenus (8,4 de revenus directs plus 2,8 de revenus indirects). C'est donc un « retour sur investissement » très correct !

Enfin, n'oublions pas que le calcul de haute performance pouvait trouver une place non négligeable dans les autres domaines du programme IST et dans d'autres programmes du PCRDT, comme « ACTS » (réseaux).

Il faut cependant noter que l'Europe, au travers de ces programmes cadres, n'a pas su développer une industrie des supercalculateurs. De nombreuses sociétés ont été financées pour construire ce type de machines (MEIKO, ACRI, ...) mais très peu ont su tirer leur épingle du jeu. Il faut retenir le succès indirect de MEIKO (puis QUADRICS) qui a su valoriser son savoir-faire dans les réseaux d'interconnexion obtenu lors de la conception de la MEIKO CS-2.

## Cinquième PCRDT

Le budget total du 5<sup>ème</sup> PCRDT (1999-2003) était de 14.940 millions d'Euros, avec quatre « programmes de recherche » :

- Qualité de la vie et gestion des ressources du vivant
- Société de l'information conviviale
- Croissance compétitive et durable
- Préserver l'écosystème

Le programme thématique « Société de l'Information conviviale » (IST), avec un budget de 3600 millions d'Euros, se découpait de la façon suivante :

<b>Action clé 1 – <i>Systèmes et services pour le citoyen</i></b> : santé, administrations, transport, tourisme ...	646 M€
<b>Action clé 2 – <i>Nouvelles perspectives pour le travail et le commerce</i></b> : méthodes et outils de travail flexibles et mobiles, confidentialité et sécurité des informations, ...	547 M€

<sup>11</sup> <http://www.cordis.lu/esprit/src/hp98repo.htm>

<sup>12</sup> Contrat d'étude BANCO n°85183 96/914/17/576. ISBN 92-828-1732-6

<b>Action clé 3 – <i>Contenus et outils multimédia</i></b> : édition électronique et contenu numérique culturel, éducation et formation, technologies liées au langage humain, ...	564 M€
<b>Action clé 4 – <i>Technologies et infrastructures essentielles</i></b> (activités à plus long terme)	1.363 M€
<b><i>Technologies futures et émergentes</i></b>	319 M€
<b><i>Mise en réseau de la recherche</i></b>	161 M€

Plus concentré, tant dans le nombre de domaines que dans les objectifs visés, ce 5<sup>ème</sup> PCRD est davantage piloté par les applications et les usages que par les technologies. Le calcul de haute performance apparaît de façon assez diffuse, essentiellement dans l'action clé 4 avec « *Technologies et ingénierie des logiciels, des systèmes et des services* », « *Technologies de simulation et de visualisation en temps réel et à grande échelle* » et à travers certaines applications dans les autres programmes thématiques :

- biologie, biochimie, génome et maladies d'origine génétique, neurosciences, etc.
- fouille de données, systèmes enfouis, simulation temps-réel, etc.
- « production intelligente », nouveaux matériaux, « technologies critiques » pour l'avionique, etc.
- climatologie, écosystèmes, etc.

Le thème « *Mise en réseau de la recherche* » permettra de poursuivre le développement de l'interconnexion des réseaux de la recherche.

Les espoirs que l'Europe plaçait dans son industrie informatique ont été fortement déçus, et c'est sans doute la principale explication du recul du calcul de haute performance dans ce nouveau programme-cadre. Par ailleurs, la fusion des programmes Esprit, ACTS (Télécommunications) et Telematics a modifié l'approche des technologies informatiques en les situant dans des environnements communicants. L'ISTAG (IST Advisory Group) résumait sa « vision » de la façon suivante : « *Start creating the ambient intelligence landscape for seamless delivery of services and applications in Europe relying also upon test-beds and open source software, develop user friendliness and develop and converge the networking infrastructure in Europe to world class* ». Ceci a conduit à délaissé certains domaines pourtant critiques pour la compétitivité de l'Europe<sup>13</sup> ; c'est le cas des technologies logicielles, en particulier celles destinées au calcul de haute performance.

Les « grilles » apparaissent en cours d'exécution de ce programme-cadre. Un premier financement de 13 M€ intervient en 2000 dans le cadre de l'action transversale « Research Networking » (il permettra de lancer les projets DataGRID, EuroGRID et DAMIEN). Puis est créée une nouvelle action transversale (« *Cross-Program Action* » n°9) qui publiera deux appels à propositions pour un financement global de

<sup>13</sup> Voir l'IPPA (Integrated Programme Portfolio Analysis) du programme IST (juillet 2002).

33 M€ L'analyse de Roman Tirlor, présentée dans le cadre du Forum ORAP de mars 2003, donne la liste des nouveaux projets<sup>14</sup> :

- Infrastructures : Data Tag
- Outils et middleware : GridLab, GRIP
- Applications : EGSO, CrossGrid, FlowGrid, BioGrid, OpenMolGrid, Moses, COG, GEMSS, Grace, MammoGrid, Selene
- P2P / ASP / Webservices : P2People, ASP-BP, WEBSI, MMAPS, Grasp, GRIA
- Clustering : GridStart

## Sixième PCRDT

Le sixième PCRDT (2003-2006) a pour but de créer un véritable « **Espace européen de la recherche** » et son contenu est orienté par la « **vision IST : anywhere anytime natural access to IST services for all** ». Son budget est de 16.270 M€ Il est découpé en trois programmes spécifiques :

- Intégrer et renforcer l'Espace européen de la recherche (11.345 M€)
- Structurer l'Espace européen de la recherche (2.605 M€)
- Renforcer les bases de l'Espace européen de la recherche (320 M€)

Le premier programme spécifique comprend sept domaines thématiques prioritaires :

<i>Sciences de la vie, génomique et biotechnologies pour la santé</i>	2.255 M€
<i>Technologies pour la société de l'information</i>	3.625 M€
<i>Nanotechnologies, matériaux intelligents, nouveaux procédés de production</i>	1.300 M€
<i>Aéronautique et espace</i>	1.075 M€
<i>Sûreté alimentaire et risques pour la santé</i>	685 M€
<i>Développement durable, changement planétaire, écosystèmes</i>	2.120 M€
<i>Citoyens et gouvernance dans la société européenne de la connaissance</i>	225 M€

Le calcul de haute performance peut trouver une certaine place dans les applications de plusieurs domaines thématiques (IST, bien entendu, mais aussi biotechnologies, aéronautique, changement planétaire, ...).

Le programme IST est organisé, au moins pour le programme de travail 2003-2004, autour de 22 « objectifs stratégiques ». Le CHP peut être concerné par les objectifs suivants :

- Repousser les limites du CMOS et préparer l'après-CMOS,
- Large bande pour tous,
- Interfaces multimodales,
- Plates-formes de développement ouvertes pour les logiciels et les services,
- Systèmes enfouis,

<sup>14</sup> Voir aussi <http://www.cordis.lu/ist/cpt/gridtestbeds.htm>

- Systèmes GRID pour la résolution de problèmes complexes, ainsi que par les activités FET (Technologies futures et émergentes).

Le 16 juin 2003, un groupe de quinze experts, co-présidé par Thierry Priol (Irisa/Inria) et Dave Snelling (Fujitsu Lab, UK), a remis, un rapport<sup>15</sup> intitulé « *Next Generation Grid(s)* », présentant ce que devraient être les priorités de la recherche pour les années à venir dans ce contexte européen.

Pour les années 2003-2004, la recherche et le déploiement des « grilles » sont pris en compte à trois niveaux :

- L'objectif « *Systèmes GRID pour la résolution de problèmes complexes* » (unité F2 dirigée par Wolfgang Boch), avec un budget de 125 M€ et qui se concentre sur
  - l'architecture, la conception et l'élaboration de la prochaine génération de grilles,
  - la réalisation de technologies d'application pour la résolution de problèmes complexes dans des domaines exigeant une « approche grille ».
- Les infrastructures de recherche (unité F3 dirigée par Mario Compolargo) avec un budget de 200 M€:
  - le déploiement de grilles spécifiques à hautes performances (on y trouve les projets FP6 DEISA et EGEE),
  - le déploiement du réseau à très haut débit GEANT.
- Certains domaines applicatifs dans lesquels les grilles ont une place significative : eBusiness, eWork, eHealth, eGov.

Le sixième programme cadre donne une place importante aux grilles de calcul et grilles de données, élément important du calcul de haute performance. Les financements communautaires ne vont pas vers les applications scientifiques et techniques (modélisation et simulation à grande échelle, par exemple), ce qui peut être considéré comme regrettable.

---

<sup>15</sup> <http://www.cordis.lu/ist/grids/index.htm>



## 6

### LES PROGRAMMES INCITATIFS EN FRANCE

Nous ne prendrons pas le temps comme fil conducteur mais plutôt les principaux types d'incitations des pouvoirs publics français dans ce domaine pendant les dix dernières années.

Le rapport du groupe de travail sur les grands moyens de calcul scientifique (janvier 1990) piloté par Paul Caseau et Patrick Leroux-Hugon, a montré l'importance du calcul scientifique et de ses composantes : puissances de traitement, moyens d'accès (réseaux), politique de prise en charge des coûts, etc.

Tout le monde s'accorde à considérer que la place de la France dans le domaine du calcul de haute performance était bonne voire très bonne au début des années 1990. Les deux principaux centres nationaux avaient des moyens importants et étaient accompagnés de centres plus ou moins spécialisés qui apportaient également des moyens significatifs à la communauté scientifique : CCVR (Centre de calcul vectoriel pour la recherche), centre de calcul de l'IN2P3 (Lyon), Centre de calcul vectoriel pour les sciences de la terre (IPG, Paris), Inria Sophia-Antipolis, etc.

Rappelons que le CCVR, Groupement d'intérêt économique créé en 1983 et associant le CNRS, la Direction de la recherche du Ministère de l'Education Nationale, la Direction de la Météorologie, l'Ecole polytechnique, l'ONERA, la CISI, l'INRIA et la DGA, a été, d'une certaine façon, un précurseur sur de nombreux points : affectation des ressources disponibles par un conseil scientifique sur la base de programmes scientifiques, donc sans « facturation » aux équipes concernées, pluri-disciplinarité, etc. Il a permis un fort développement des activités de modélisation, y compris dans le monde industriel en formant les spécialistes qui lui étaient nécessaires.

Au début des années 1990, des critiques sont formulées par certains contre une concentration trop forte des moyens de calcul, contre l'existence même des grands instruments de calcul (la station de travail serait la réponse à tous les besoins des chercheurs), allant jusqu'à contester l'intérêt de l'utilisation qui est faite de ces grands moyens (« *les chercheurs feraient mieux de faire moins de calcul et plus de recher-*

che » !). La situation se dégrade alors que nous sommes dans une période de transition entre le « vectoriel » et le « parallèle ».

Le lancement d'ORAP, puis plusieurs rapports vont souligner l'importance du calcul de haute performance. C'est le cas, par exemple, du rapport du groupe « Ordinateurs et calcul parallèles » publié en avril 1997 par l'Observatoire Français des Techniques Avancées (OFTA). Ce rapport traduit les conclusions d'un groupe de travail piloté par Michel Cosnard, et ses recommandations dans trois domaines :

- recherche industrielle et universitaire
- transfert technologique et industrialisation
- acquisition et transfert de connaissances

Nous essayons d'analyser l'évolution de la situation de la France à travers les moyens de calcul disponibles pour la recherche, les « programmes incitatifs », etc.

## **Les centres nationaux de calcul : du ticket modérateur à une affectation de ressources sur dossier scientifique**

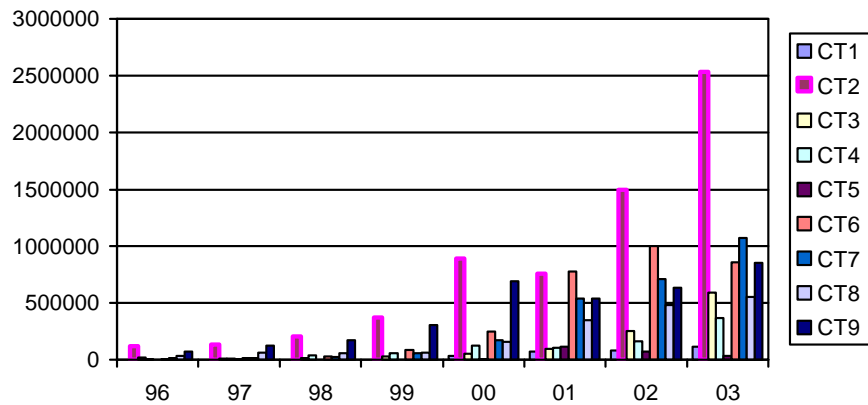
Les deux centres nationaux financés par le ministère chargé de la recherche, cités dans le premier chapitre de ce livre, existent depuis de très nombreuses années, l'IDRIS, installé à Orsay et qui relève du CNRS, ayant pris la suite du CIRCE, tandis que le CINES, situé à Montpellier, a pris la suite du CNUSC créé en 1980. Ces transformations ne sont pas de simples changements de nom et de statut (pour le CINES). En effet, le CIRCE et le CNUSC devaient facturer les services qu'ils fournissaient aux équipes de recherche et équilibrer leurs budgets de fonctionnement ; cette facturation (en « vrais francs ») pesait sur le budget des laboratoires et constituait donc un frein au développement de l'utilisation des grands moyens de calcul. Le Ministère chargé de la recherche, prenant conscience de l'importance croissante du calcul de haute performance, et considérant que ces « grands instruments scientifiques » devaient être accessibles dans de bonnes conditions par la communauté scientifique, a décidé de prendre directement en charge les frais de ces deux centres. Cette « mesure incitative » a joué un rôle important dans le développement de la simulation numérique dans de nombreux domaines.

Les deux centres nationaux (CINES et IDRIS) lancent chaque année un appel à propositions commun pour l'attribution des ressources informatiques pour l'année suivante. L'évaluation scientifique de toutes les demandes est assurée conjointement des Comités Thématiques (constitués chacun d'une dizaine d'experts). Fort de ces expertises, le Conseil Scientifique de chaque centre attribue ses ressources à ses utilisateurs. Les comités thématiques sont les suivants :

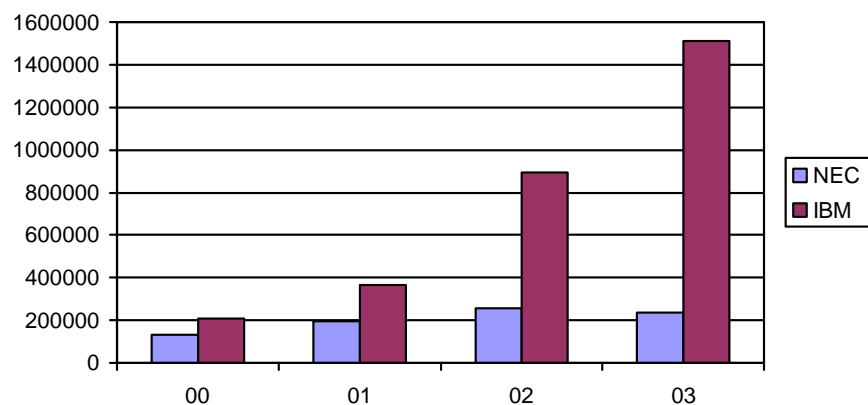
- CT1 : Environnement : modélisation de l'atmosphère, de l'océan et du climat ; modélisation des atmosphères planétaires, ....
- CT2 : Mécanique des fluides
- CT3 : Milieux réactifs : combustion turbulente ; simulation directe des écoulements réactifs ...
- CT4 : Astrophysique, géophysique, terre solide
- CT5 : Electromagnétisme, plasmas chauds

- CT6 : Mathématiques, mathématiques appliquées : Equations aux dérivées partielles ; mécanique statistique ; physique sur réseau et QCD ; physique nucléaire, ...
- CT7 : Systèmes moléculaires organisés et biologie
- CT8 : Chimie quantique et modélisation moléculaire
- CT9 : Physique, chimie et propriétés des matériaux

Les heures de calcul devenant attribuées sur programmes scientifiques, sans « facturation directe », la demande a augmenté très rapidement et est restée supérieure à la capacité disponible dans les centres. Les schémas qui suivent mettent en évidence l'évolution des consommations (heures), d'une part sur les ordinateurs du CINES, d'autre part sur les machines vectorielles (NEC) et scalaires (IBM SP4) de l'IDRIS. Les ordinateurs concernés étant différents, ces schémas ne permettent pas de faire des comparaisons entre les deux centres.



Ressources consommées (CINES)



Ressources consommées (IDRIS)

## CINES

En mars 2003, les principaux moyens de calcul sont :

- Un serveur à architecture SMP IBM SP avec 35 nœuds Power3 ou Power4 (performance crête : 1.000 Gflops)
- Un système SGI Origin 3800 (768 processeur, 768 Gflops)

Un programme d'évolution de ces équipements, devant déboucher sur une puissance crête de 10 Tflops, est à l'étude.

## IDRIS

En mars 2003, les principaux moyens informatiques de l'IDRIS sont les suivants :

- Système IBM SP Power4 (1024 processeurs, 6.550 Gflops)
- 3 systèmes vectoriels NEC SX-5 (total : 40 processeurs, 320 Gflops)

## CCRT

Il faut mentionner à nouveau le rôle du CEA dans le HPC en France, en particulier pour l'industrie. Le Centre de Calcul Recherche et Technologie créé en octobre 2003 a pour partenaires : CEA, EDF, ONERA, SNECMA, TURBOMECA. Ce centre a une vocation de recherche et développement industriel et met en place une animation scientifique (organisation de journées thématiques ...) et des relations avec des centres homologues en Europe (HLRS, EPSRC, CINECA, etc).

Ses moyens actuels sont :

- Système HP AlphaServer SC EV68 à 1.25 GHz 800Go (2560 proc., 2000 Gigaflops)
- NEC SX-6 (352 Gigaflops)

## Les « mésocentres »

Le Comité d'orientation des moyens informatiques (COMI) du CNRS a publié, en mai 1997, un rapport intitulé « Réflexions sur une politique d'équipement mésoinformatique au CNRS ». Constatant l'évolution des besoins des laboratoires de recherche d'une part, des architectures des ordinateurs (de la station de travail au superordinateur, avec Unix comme standard de fait au niveau des systèmes d'exploitation) d'autre part, ce rapport préconise une politique de renforcement des « mésocentres », centres de milieu de gamme entre les clusters locaux et les très grands centres nationaux. Un financement spécifique important (environ 2 M€) est alors dégagé pour trois années : 1997 à 1999.

Ces centres de taille « moyenne » vont également être développés sous l'impulsion de laboratoires de recherche, avec le soutien du ministère de la recherche (généralement à travers des « appels à projets ») et celui des collectivités territoriales (conseils régionaux essentiellement). Ils ont le grand mérite d'être proches (géographiquement, mais aussi souvent thématiquement) des utilisateurs.

Le dernier appel à propositions<sup>1</sup> du Ministère délégué à la recherche et aux nouvelles technologies (2003) rappelle que l'orientation de la politique du ministère « vise, tout en continuant l'équipement des centres nationaux pour les mettre au meilleur niveau et en améliorant leur coordination, à poursuivre la structuration des centres de calcul intermédiaires ». Cet appel concernait les équipements aussi bien pour des besoins de calcul intensif que pour des besoins en archivage et stockage de données. Le budget affecté à cet appel était de 1,5 M€.

Nous ne reviendrons pas sur les sites actuels puisqu'ils sont indiqués dans le premier chapitre de ce livre.

## Les actions concertées incitatives (ACI)

Créé en 1999, le Fonds National de la Science (FNS)<sup>2</sup> est destiné à soutenir des thématiques nouvelles, particulièrement dans les domaines stratégiques à caractère pluridisciplinaire qui nécessitent une coopération forte entre institutions. Il renforce ainsi les moyens mobilisables en faveur des secteurs prioritaires pour le Ministère. Il est à la fois un instrument de financement de projets de recherche et un instrument de structuration coopérative de la recherche.

Les actions concertées incitatives, également créées en 1999, sont adaptées à la poursuite de ces objectifs. D'une durée moyenne de trois ans, elles peuvent être menées conjointement avec les grands organismes de recherche et/ou conduites conjointement avec le Fonds de la Recherche Technologique (FRT) géré par la Direction de la Technologie. Elles sont autant que nécessaire menées en articulation avec les réseaux de recherche et d'innovation technologique dont nous reparlerons dans ce chapitre.

Certaines de ces ACI concernent directement le calcul de haute performance, et nous allons en préciser les objectifs et modalités.

### ACI GRID

*« La globalisation des ressources informatiques et des données consiste en la possibilité d'offrir aux utilisateurs des ressources informatiques "virtuellement illimitées" tant en capacité de stockage qu'en capacité de calcul. Ces ressources sont de plus réparties de manière dynamique sur un ensemble non figé d'équipements, et ceci sans qu'il soit nécessaire à l'utilisateur d'intervenir. Cela correspond donc à une évolution de la notion de réseau de stations de travail vers des réseaux dynamiques, hétérogènes et transparents construits en interconnectant des équipements informatiques standard, des plates-formes expérimentales et des équipements de calcul et de stockage, à travers un réseau à haut débit. »*

---

<sup>1</sup> <http://www.recherche.gouv.fr/appe1/2003/mesocentres.htm>

<sup>2</sup> <http://www.recherche.gouv.fr/recherche/fns/index.htm>

Lancée en 2001, l'ACI GRID<sup>3</sup> a pour objectif de dynamiser et rendre opérationnelles, à un moment critique, la contribution des équipes françaises dans le domaine. Elle était dotée d'un budget de 2,25 M€ en 2001 et 3 M€ en 2002.

Les deux appels à propositions (2001 et 2002) ont mobilisé de très nombreuses équipes, et ont débouché sur la sélection d'une trentaine de projets.

L'ACI GRID n'a pas lancé de nouvel appel à propositions de projets de recherche en 2003, ses principales thématiques ayant été intégrées dans les nouvelles ACI "Masses de données" et "Sécurité informatique".

L'ACI GRID, dirigée par Michel Cosnard de 2001 à 2003, l'est maintenant par Thierry Priol.

### **Programme national GRID 5000**

Dans le cadre de l'ACI GRID, le programme national GRID'5000<sup>4</sup> vise à promouvoir la création d'une plate-forme expérimentale de recherche en informatique constituée d'une grille de calcul et de données de grande ampleur. Cette plate-forme sera développée en associant à terme des organismes de recherche, des collectivités locales ou régionales et des partenaires industriels. La grille expérimentale GRID'5000 devrait être constituée à terme d'une plate-forme matérielle et logicielle, interconnectant à très haut débit dix à quinze grappes de PC de grande taille, typiquement de 500 unités de calcul.

La grille sera ouverte en priorité aux équipes académiques ou industrielles travaillant dans le cadre de projets précédemment labellisés par les ACI GRID, Sécurité Informatique et Masses de données ou par les différents réseaux de recherche et d'innovation technologique (RRIT), en particulier le RNRT et le RNTL. Par ailleurs, GRID'5000 a vocation à s'inscrire dans une politique européenne ambitieuse de développement des grilles de calcul et des recherches associées.

Des compléments intéressants et plus détaillés à cette description rapide des objectifs scientifiques sont présentés<sup>5</sup> dans le rapport "*GRID'5000 : Plate-forme de recherche expérimentale en informatique*" effectué à la demande du MRNT par un groupe d'experts.

En 2003, un premier appel à propositions a permis de financer, sur un budget de 1 M€ cinq sites qui accueilleront des éléments de la plateforme GRID'5000 : Bordeaux (Labri), Lyon (ENS-Lyon), Rennes (IRISA), Sophia-Antipolis (INRIA), Toulouse (FERIA). Le projet d'Orsay (LRI) a été financé par l'ACI Masses de données.

Le deuxième appel (2004) vise à sélectionner un nombre limité de sites, typiquement de 3 à 4, souhaitant être nœud principal de cette grille expérimentale ainsi qu'à financer des équipements réseau pour consolider les nœuds existants. Son budget est également de l'ordre de 1 M€. Ces équipements réseau devront accroître de façon

---

<sup>3</sup> <http://www.recherche.gouv.fr/recherche/fns/grid.htm>

<sup>4</sup> <http://www.recherche.gouv.fr/appel/2004/grid5000.htm>

<sup>5</sup> <http://www-sop.inria.fr/aci/grid/public/Library/rapport-grid5000-V3.pdf>

substantielle la performance de communication au sein de grappes (réseau de type SAN – System Area Network). La notification des projets retenus devait être annoncée le 31 mai 2004.

On trouvera des informations complémentaires sur le site de l'ACI GRID et du programme GRID'5000 : <http://www-sop.inria.fr/aci/grid/public/acigrd.htm>

### **ACI Masses de données**

L'amélioration des dispositifs expérimentaux et la part grandissante de l'informatique et de la simulation dans la plupart des champs disciplinaires conduit à la production de données en quantité de plus en plus importante. C'est le cas par exemple en biologie avec le séquençage des différents génomes, en astronomie avec la multiplication des images transmises par les sondes ou les observatoires, en météorologie avec la simulation des phénomènes atmosphériques et leur visualisation, etc.

Créée en 2003, l'ACI Masses de données<sup>6</sup> a pour objectif de dynamiser la recherche sur l'ensemble des aspects relatifs à ces grandes masses de données : acquisition, stockage, transmission, traitement, modélisation, représentation, structuration, indexation, interrogation, comparaison, manipulation, classification, fusion, extraction de sens, apprentissage, visualisation...

22 projets ont été retenus dans le cadre de l'appel 2003, les résultats de l'appel 2004 seront connus en juin.

### **ACI Sécurité des systèmes d'information**

Créé en 2003, l'Action Concertée Incitative «Sécurité Informatique », pour une durée maximale de 4 ans, est conduite en collaboration avec le département Sciences et Technologies de l'Information et de la Communication du CNRS, l'INRIA et la DGA. La *Sécurité des systèmes et des réseaux* est l'un des trois thèmes principaux, et il concerne bien entendu le calcul de haute performance puisque nous avons vu le rôle croissant des grilles de calcul (l'un des obstacles au développement de ces grilles étant la sécurité).

28 projets ont été sélectionnés à la suite de l'appel 2003 ; l'appel 2004 est ouvert au moment où nous rédigeons ce texte.

Site de l'ACI : <http://acisi.loria.fr/>

---

<sup>6</sup> <http://www.recherche.gouv.fr/recherche/fns/mdonnees.htm>

## Les réseaux nationaux de recherche et d'innovation technologique

Le Ministère chargé de la recherche et le Ministère chargé de l'industrie ont entrepris, à partir de 1998, de soutenir la constitution de réseaux de recherche et d'innovation technologique associant équipes de recherche publiques et industrielles et devant répondre à un double objectif :

- Identifier et lever les problèmes technologiques rencontrés par les entreprises pour le développement de produits innovants ;
- Favoriser la collaboration entre recherche publique et recherche industrielle et contribuer à l'animation de la communauté scientifique et technique.

Le nombre de ces réseaux a augmenté pour dépasser la quinzaine et couvrir des domaines très variés. On peut considérer que deux de ces réseaux ont un impact significatif sur le calcul de haute performance : le RNRT et le RNTL.

### RNRT

Le Réseau National de Recherche en Télécommunications<sup>7</sup> a été le premier réseau créé.

Les thèmes de recherche abordés par les projets labellisés par le RNRT comprennent :

- les réseaux mobiles de troisième génération (UMTS)
- les réseaux optiques
- les nouveaux réseaux d'accès (boucle locale radio, satellite...)
- les nouvelles techniques de traitement du signal (turbo-codes)
- les interfaces homme-machine vocales
- les protocoles de l'Internet du Futur (IPv6)
- la sécurité des réseaux et des transactions

Les projets soumis en réponse aux appels à projets peuvent être de trois types : *exploratoire* (projets « à risque », visant à démontrer la faisabilité d'une approche particulièrement innovante, et donc plutôt pilotés par des laboratoires académiques), *pré-compétitif* (projets « intégrateurs », débouchant sur des démonstrateurs intégrant les fonctionnalités recherchées et donc plutôt pilotés par des industriels), *plate-forme* (visant à construire le support nécessaire à l'expérimentation de projets des deux types précédents).

Parmi les presque 200 projets labellisés entre 1998 et 2002, on trouve des projets qui concernent directement le calcul de haute performance, dans le domaine de la sécurité, de la qualité de service, de l'accès aux grandes masses de données, ... On trouve aussi une plateforme labellisée en 1999 (VTHD) puis reconduite en 2001 (VTHD++) destinée au développement et à l'expérimentation des briques technologi-

---

<sup>7</sup> On trouvera des détails sur ce réseau, les projets et plateformes labellisés sur le site <http://www.telecom.gouv.fr/rnrt>

ques nécessaires au déploiement de l'Internet Nouvelle Génération sur un réseau national à très haut débit (plusieurs de 2,5 Gbits/s à 10 Gbits/s dans le réseau). Elle sera largement utilisée dans des travaux de recherche autour des grilles de calcul et grilles de données, de la visualisation à distance de grandes masses de données, etc.

On trouvera sur le site du RNRT un bilan des actions menées de 1998 à 2001.

## RNTL

Le Réseau National de recherche et d'innovation en Technologies Logicielles<sup>8</sup> a été mis en place en 2000.

Divers projets de R&D ou « plateformes », labellisés depuis 2001, concernent le calcul et la simulation. On citera, comme exemples :

- *Casp* (création de services Internet déportés sur une machine parallèle de type cluster pour des grosses applications industrielles),
- *e-Toile* (Environnement matériel et logiciel pour le développement et l'expérimentation de grilles de calcul), qui représente le premier grand projet français de grille informatique à haute performance (plate-forme labellisée en 2001),
- *Casp* (approche hiérarchique des serveurs de calcul, projet exploratoire labellisé en 2001),
- *Perf-RV* (Plateforme française de réalité virtuelle, bureau d'étude du futur, labellisée en 2000),
- *Salomé* (plateforme logicielle labellisée en 2000, destinée à produire des environnements pour les codes de simulation numérique).

Un « Livre blanc » faisant un bilan des activités du RNTL entre 2000 et 2003 a été publié début 2004.

## Liens entre recherche académique et entreprises

Le couplage « industrie / recherche académique » se fait de façon insuffisante, alors que ce couplage est beaucoup plus fort dans des pays tels que les Etats-Unis, le Japon ou l'Allemagne. Ceci n'est pas nouveau et a été fréquemment souligné depuis de nombreuses années. Les ACI n'incitent pas à améliorer ce couplage.

Les réseaux nationaux de recherche et d'innovation technologique forment un outil intéressant de ce point de vue ; mais le calcul de haute performance y a une place marginale. Dans ce contexte des RNxx, le modèle de transfert « recherche vers industrie » n'est pas nécessairement adapté. Par exemple, le développement de nouveaux logiciels nécessite

---

<sup>8</sup> On trouvera des détails sur ce réseau, les projets et plateformes labellisés sur le site <http://www.telecom.gouv.fr/rntl>

- un fort « couplage » entre recherche et industrie utilisant un schéma itératif laboratoire <=> utilisateur ;
- une approche basée sur les standards.

## Forces et faiblesses de ces actions

L'évolution des centres nationaux, considérés comme de grands instruments scientifiques et utilisables sur la base de projets scientifiques, des programmes tels que l'ACI GRID ont un rôle tout à fait positif.

Un bilan global des programmes incitatifs lancés et financés depuis 2001 serait très certainement souhaitable. Un certain nombre de points doivent être abordés :

- Le lien entre la production scientifique et l'importance des moyens de calcul disponibles (une comparaison avec quelques autres pays, discipline par discipline, peut être instructive)
- L'interdisciplinarité, en commençant par une meilleure collaboration entre informaticiens et mathématiciens. La création du laboratoire ASCI (Applications scientifiques pour le calcul intensif) associée à la transformation CIRCE – IDRIS, était un signe positif (la réalité a-t-elle été à la mesure des espoirs ?). Les programmes actuels favorisent-ils cette interdisciplinarité ? L'ACI « Nouvelles interfaces des mathématiques »<sup>9</sup>, créée en 2003, peut y contribuer.
- Les budgets dégagés sont-ils à la mesure de nos ambitions ? Rappelons que le projet allemand D-GRID porte sur un budget de l'ordre de 300 millions d'euros sur cinq années, alors que le budget cumulé des actions incitatives françaises, y compris les centres nationaux, sur la période 2001-2005, est sans doute inférieur à 30 millions d'euros.

## Conclusion

Les exemples américains (nombreux, y compris le projet Blue Gene d'IBM), japonais (Earth Simulator), britanniques (e-SCIENCE) ou allemands montrent clairement qu'il s'agit avant tout de se définir des stratégies scientifiques et de dégager ensuite les moyens qui leur correspondent, tout en soutenant une industrie du « matériel informatique ».

Quelle est la stratégie de chacune des disciplines scientifiques ? C'est cette stratégie qui permettra de lancer de grands projets structurant, mobilisant des équipes complémentaires (utilisateurs, mathématiciens, informaticiens), associant le développement de codes adaptés, la mise en place de plateformes matérielles, la formation, le transfert vers l'industrie, etc.

Ceci doit-il être fait à l'échelle nationale ou européenne ?

---

<sup>9</sup> <http://www.recherche.gouv.fr/recherche/fns/nim.htm>

# 7

## DIX ANNEES D'EVOLUTION TECHNOLOGIQUE

Il y a dix ans naissait ORAP. Un an auparavant commençait la publication systématique, tous les six mois, des 500 plus puissantes configurations mondiales dédiées au calcul intensif et étalonnées par la performance délivrée pour exécuter la bibliothèque LINPACK d'Algèbre linéaire ([www.top500.org](http://www.top500.org)).

Certes cet étalon est restrictif par rapport à la diversité des applications du calcul intensif, néglige certains aspects qui font la performance globale et peut privilégier certaines formes de configurations. Néanmoins l'étude des publications du TOP500 au cours de ces dix dernières années (de Novembre 1993 à Novembre 2003) constitue un bon témoignage des profonds bouleversements technologiques qui ont eu lieu, qu'il s'agisse des performances maximales atteintes, de l'architecture des configurations utilisées et des processeurs employés, ainsi que de leur mode de programmation.

### Comparaison des performances

En désignant par Pc la puissance de crête et Ps la puissance soutenue sur le programme LINPACK, la comparaison s'établit ainsi entre les premiers de chaque classement.

Novembre 1993	Novembre 2003
Pc = 236 Gigaflops	Pc = 40360 Gigaflops
Ps = 124,5 Gigaflops	Ps = 35860 Gigaflops
avec 140 processeurs vectoriels	avec 5120 processeurs vectoriels

De fait, ces performances ont été atteintes par des systèmes très spécifiques et peu représentatifs des configurations présentes dans le reste des classements (Numerical Wind Tunnel (Japon) en 1993, Earth Simulator (Japon) en 2003).

Une autre façon d'apprécier le saut de performance sur la décennie est de remarquer que le cumul des performances du classement de 1993 ne permettrait de rentrer qu'en 70<sup>ème</sup> position en 2003.

La différence considérable entre ces niveaux de performance s'explique par la combinaison de plusieurs phénomènes :

- les effets de la loi de Moore (doublement du nombre de transistors par circuit intégré tous les deux ans) appliqués à chaque processeur ;
- l'évolution de l'architecture des processeurs ;
- la maîtrise des infrastructures de système à haut degré de parallélisme permettant d'accumuler en leur sein un grand nombre de processeurs ;
- la capacité d'élaborer des algorithmes et des programmes qui savent exploiter un grand nombre de processeurs.

## Comparaison des configurations

La situation en Novembre 1993 reflète la fin du modèle dominant au début des années 80, à savoir : la machine vectorielle mono-processeur qui ne représente plus que 18% des configurations.

A l'inverse, au moment où se prépare la création d'ORAP(allèlisme), c'est le modèle des systèmes parallèles qui caractérise l'essentiel des configurations classées. A cette date, ce sont les machines parallèles à mémoire partagée SMP qui sont majoritaires (47%) mais on assiste à une poussée significative d'architectures nouvelles fondées sur le principe de mémoire distribuée avec échange de messages (30% des configurations). Ces nouvelles architectures, encore appelées MPP (Massively Parallel Processing), permettent d'éviter a priori les problèmes de contention d'accès à une mémoire partagée par un grand nombre de processeurs ( $\geq 128$ ). Elles sont le fait, pour l'essentiel, de petites entreprises innovantes, exception faite toutefois de la machine Paragon d'Intel qui représentera cependant un point singulier dans l'histoire des réalisations de cette entreprise. Néanmoins aucune de ces entreprises (Thinking Machines, KSR, Masspar, Meiko,...) n'a survécu.

Il convient en effet de remarquer, qu'à cette époque, l'énorme tâche qui consiste à reprogrammer les codes de calcul existant ou à en concevoir de nouveaux pour des machines parallèles ne fait que commencer.

Aucun standard de programmation parallèle tels que nous les connaissons aujourd'hui avec OpenMP pour la mémoire partagée et MPI pour la mémoire distribuée, ne s'est encore imposé. Les applications commerciales ne sont pas encore prêtes à prendre en compte le type d'architecture proposée et les processeurs utilisés par ces machines leur sont spécifiques et ne trouvent aucun débouché en dehors de ces machines elles mêmes. Il en résulte pour chacune des compagnies concernées un marché très étroit qui ne suffit pas pour dégager les marges nécessaires à la poursuite des investissements R&D et par conséquent conduit à la disparition de ces entreprises.

L'analyse du classement de Novembre 1993 fait apparaître un autre phénomène marquant et qui concerne la nature des processeurs utilisés. Si les processeurs vectoriels restent encore dominants au sein des configurations classées (61% de l'ensemble des processeurs employés), un nombre significatif de processeurs scalaires (30%) font leur apparition. On découvre ainsi que des performances raisonnables pour l'époque peuvent être atteintes avec des processeurs plus universels et non spécifiquement dédiés au calcul numérique. Ce mouvement va aller en s'amplifiant au cours de la décennie puisqu'en novembre 2003, les processeurs vectoriels ne représentent plus que 7% du total des processeurs employés dans le TOP500.

### **Venons en donc à 2003.**

Si l'on excepte l'Earth Simulator qui dépasse largement le reste des systèmes concurrents mais reste unique en son genre, de par les technologies employées, les briques technologiques gagnantes sont celles qui ont pu bénéficier d'un marché de volume qui va largement au delà de celui du calcul scientifique. Ainsi 93% des processeurs sont des processeurs du commerce et 67% des configurations sont obtenues par l'interconnexion (« clustérisation ») de machines (ou cartes mères) vendues pour les applications commerciales, voire individuelles. Le reste des configurations est constitué de machines MPP spécifiques utilisant par ailleurs, pour certaines, aussi des processeurs du commerce. Avec de telles « briques standard », on est alors capable de constituer des configurations de très grande ampleur regroupant plusieurs milliers de processeurs avec un ratio prix / performance tout à fait compétitif. Notons en particulier qu'un seul processeur Itanium2 d'Intel est capable actuellement de livrer une performance soutenue pour LINPACK supérieure à 5 Gflops. De plus, le phénomène de standardisation permet à des sociétés indépendantes des constructeurs informatique de se spécialiser sur le marché des réseaux d'interconnexion pour créer des offres extrêmement performantes en matière de débit, mais aussi et surtout en terme de latence des réseaux (Quadrics, Myricom, ...).

Un des intérêts importants d'une architecture de système en clusters et qu'elle fournit une grande souplesse en matière d'augmentation de puissance d'une configuration. Celle-ci peut en effet s'opérer selon deux dimensions :

- ajout de machines - de nœuds - supplémentaires au sein du cluster : « scale-out »,
- ajout de processeurs aux nœuds de type SMP : « scale-up ».

On dispose alors d'une possibilité d'adaptation à un grand nombre d'applications différentes qui peuvent varier selon la granularité des tâches individuelles et le taux de communication par tâche. En simplifiant, des tâches à faible granularité et/ou fortement communicantes entre elles ont intérêt à être regroupées dans un nœud SMP pour bénéficier de la faible latence et du débit rapide qu'autorise une communication par mémoire partagée, ou encore pour éviter d'échanger des messages, alors que des tâches à forte granularité et/ou peu communicante pourront être distribuées sur des nœuds différents.

L'augmentation de puissance par ajout de machines pose des problèmes non négligeables d'augmentation de la surface occupée au sol, d'augmentation de la consommation électrique ou encore de la duplication de certaines ressources. L'arrivée de serveurs dits « à lames » permet d'optimiser la surface utilisée, la consommation ainsi que les ressources d'archivage (disques) et de communication qui peuvent alors être partagées. D'autre part, on assiste à l'arrivée sur le marché de serveurs SMP au delà de 4 processeurs, construits à partir de briques de base standards (processeurs, carte mères) et qui autorisent un « scale-up » avec un ratio prix / performance tout à fait compétitif par rapport à un « scale-out » fait à partir de petits serveurs du commerce.

Bien entendu, il ne suffit pas simplement d'interconnecter un ensemble de machines pour obtenir la performance maximale pour une application donnée. L'énergie qu'il convient de dépenser pour ce faire et la complexité de réalisation associée se situent aussi ailleurs.

Elles se situent d'une part dans la difficulté qu'il peut y avoir à concevoir et mettre au point une application très parallélisée. En effet, il peut exister des limites intrinsèques au problème traité sur le niveau de parallélisme possible ; de plus l'exercice de mise au point d'un programme comportant un grand nombre d'agents indépendants et ne disposant pas d'un état global cohérent du système reste une tâche difficile.

Le second domaine qui hérite de la complexité générée par une configuration de type cluster est celui du logiciel de base. Il convient en effet de faire en sorte que, du point de vue des utilisateurs et des applications, un ensemble de serveurs interconnectés puisse être aussi simple que possible à administrer et opérer, et permettre notamment le partage de fichiers et l'accès parallèle à ces fichiers.

Des progrès substantiels ont été réalisés pour mettre en place des administrations de cluster centralisées qui permettent la distribution optimisée des tâches sur les ressources de calcul, la surveillance de l'ensemble des ressources et la haute disponibilité du système en cas de panne d'un ou plusieurs composants (les cas de panne devenant hautement probables compte tenu du nombre de composants impliquées dans une configuration importante). Remarquons cependant que, la taille des configurations ne cessant d'augmenter, l'administration du cluster se trouve confrontée à sa propre « scalabilité ».

En ce qui concerne les systèmes de fichiers, plusieurs solutions existent maintenant pour que l'ensemble des nœuds d'un cluster ait une vue globale des répertoires de systèmes de fichiers, des meta-données qui caractérisent l'implantation physique des blocs d'information et puisse accéder en parallèle à ces blocs. Néanmoins remarquons que les applications sont amenées de plus en plus à traiter des volumes de données considérables qui peuvent se chiffrer en dizaine de Téraoctets.

Dans ces conditions, l'accès aux meta-données et les performances des systèmes d'entrée/sortie constituent actuellement de vrais goulots d'étranglement. Pour pallier ces difficultés, les configurations les plus performantes dédient une partie des nœuds de l'infrastructure au support exclusif du système de fichiers. Néanmoins des progrès importants restent à accomplir pour disposer d'une infrastructure d'entrée / sortie compatible avec les besoins d'applications.

Nous avons rappelé le mouvement de standardisation des briques matérielles utilisées au calcul scientifique. Il est intéressant de constater que ce mouvement sur le matériel s'accompagne d'un mouvement équivalent en matière de logiciel et ceci grâce au phénomène Linux et Open Source. De plus en plus, les chercheurs vont aussi bénéficier d'un environnement de logiciels de base standard qui va faciliter le travail en communauté et la capitalisation des résultats tout en rendant les applications indépendantes d'une infrastructure matérielle donnée.

Le phénomène de standardisation que l'on vient d'évoquer, l'abaissement du ratio prix / performance conduisent à une plus grande généralisation du calcul scientifique. Ce phénomène est perceptible dans le classement de novembre 2003. Ainsi, le nombre de configurations du classement qui appartiennent à des entreprises privées utilisatrices est non seulement en augmentation significative par rapport à 1993 mais elles concernent aussi des secteurs d'applications bien plus nombreux. Alors qu'en 1993 trois secteurs d'activité étaient principalement représentés : industrie automobile, aéronautique et pétrolière, il faut ajouter à ceux-ci, en 2003, les secteurs bancaires, semi-conducteurs, multimédia, chimie, pharmacie, ingénierie.

## Evolution des processeurs standards

Nous avons évoqué la loi de Moore comme moteur de l'évolution de la puissance des processeurs.

D'autres facteurs contribuent à l'amélioration des performances. Ils concernent en particulier l'ordonnancement de l'exécution des instructions au sein du processeur. En effet le budget de transistors sur un circuit augmentant, il devient possible de dupliquer au sein d'un même processeur ses unités fonctionnelles. Plusieurs instructions peuvent alors être exécutées en parallèle dans le même cycle d'horloge, quitte à renommer automatiquement les registres pour diminuer les conflits entre instructions. Le nombre d'instructions qui peuvent être ainsi parallélisées peut s'élever jusqu'à 6 dans le cas du processeur Itanium2 d'Intel (architecture : « Very Long Instruction Word »).

D'autres mécanismes permettent ainsi d'optimiser la vitesse globale d'exécution de la suite d'instructions d'un programme. Le principe de « pipeline » permet de débiter l'exécution d'une instruction avant même que la ou les précédentes se soient terminées. Le branchement spéculatif offre la possibilité au processeur de s'engager dans une branche d'un test avant même que ce dernier ait été évalué, quitte à revenir en arrière en cas de spéculation erronée. Le principe d'exécution dans le désordre autorise quant à lui une remise en cause de la suite des instructions afin d'optimiser l'utilisation des ressources internes à un processeur.

La loi de Moore combinée aux dispositifs qui viennent d'être évoqués a permis, au cours de la vingtaine d'années écoulées, une amélioration de la performance annuelle de 50 à 60% selon les analystes.

Cependant, dans le même temps, la vitesse d'accès à la mémoire n'a elle progressé que de 7% par an. Cet écart conduit à faire de l'accès à la mémoire le frein essentiel à l'amélioration des performances.

Une première voie de contournement est de disposer sur le « chip » processeur de caches de très grandes tailles (9 Mégaoctets actuellement pour l'Itanium2). Une autre voie complémentaire est de rechercher, non pas seulement l'accélération du débit d'un seul flot d'instructions, mais celle d'un ensemble de flots indépendants d'instructions appartenant au même processus de calcul (multithreading).

La réplication des registres au sein d'un processeur permet alors d'engager simultanément plusieurs flots d'instructions, la commutation par le processeur d'un flot à un autre pouvant, par exemple, s'effectuer lors de l'absence d'une information (données ou instructions) dans le cache et qu'un accès à la mémoire s'avère alors nécessaire. Ce principe peut de plus être étendu, toujours grâce à la loi de Moore, non pas en répliquant seulement la base de registres d'un processeur, mais en dupliquant les processeurs eux-mêmes au sein d'un même « chip ». Le processeur Power d'IBM, qui regroupe deux cœurs de processeurs dans un même circuit, a montré la voie dans ce sens.

Pour le futur, plusieurs directions sont actuellement explorées. Certaines reposent sur des recherches fondamentales qui peuvent amener à modifier profondément le modèle de programmation utilisé. D'autres voies d'études conduisent à imaginer des ressources de calcul au sein même de la mémoire (Processor in Memory). Sans aller jusque là, on verra bientôt apparaître sur le marché des barrettes mémoires dotées chacune de tampons rapides dans lesquels seront disposées, soit les valeurs à écrire ultérieurement dans la barrette, soit les valeurs qui devront être lues dans des cycles ultérieurs (« fully buffered DIMM »). Dans tous les cas, l'ajout d'« intelligence » proche des composants de la mémoire paraît être une tendance de fond.

En 2010, la loi de Moore prévoit théoriquement que l'on pourra disposer de circuits de 2 milliards de transistors et fonctionnant à 15GHz. Le montant de ce budget de transistors autorise un grand nombre de spéculations et de recherches sur les architectures futures. Certes on pourra loger sur un circuit un grand nombre de processeurs mais on peut aussi imaginer des architectures reconfigurables dynamiquement en fonction des applications. A l'inverse, et puisque la surface de silicium occupée par un seul processeur décroît singulièrement, on peut aussi penser à des architecture regroupant dans un volume faible (1mètre cube) des milliers de processeurs interconnectés, disposant chacun de leur mémoire locale et éventuellement d'un adressage global. Avec « BlueGene », un prototype de ce nouveau type de MPP a été réalisé par IBM pour les besoins de la génomique. Signalons toutefois que les fréquences qui seront alors atteintes et l'accumulation de processeurs poseront des problèmes non négligeables de consommation électrique et de dissipation thermique.

A côté des évolutions des processeurs universels, il est intéressant de remarquer que les cartes graphiques du commerce, poussées par des ventes en très grands volumes, offrent déjà des puissances vectorielles de plusieurs dizaines de Gigaflops et pourraient éventuellement servir de co-processeurs à des processeurs génériques;

En fin de ce paragraphe, il est aussi important de souligner parallèlement aux progrès amenés par les évolutions du matériel, les progrès des compilateurs ont été tout aussi significatifs pour que chaque programme puisse bénéficier au mieux de l'amélioration de performance potentielle amenée par les nouvelles architectures.

## Conclusion

Nous avons pris le parti d'évoquer les évolutions technologiques de la décennie écoulée en comparant les classements dits du TOP500 entre novembre 1993 et novembre 2003. On peut rapidement caractériser ces évolutions en indiquant d'une part qu'elles ont été associées à la réutilisation pour le calcul scientifique de composants standards (serveurs, processeurs, réseaux) qui seuls pouvaient disposer d'un modèle économique permettant l'investissement nécessaire à la quête de performances accrues. Ces évolutions se sont accompagnées d'autre part d'une généralisation du calcul parallèle. Pour le futur, c'est une question ouverte que de savoir si ce modèle de progrès perdurera ou si l'initiative d'un Etat infléchira cette tendance pour des raisons qualifiées alors de stratégiques.

Le type d'analyse que nous avons menée a exclu de fait l'examen d'un autre phénomène important de ces dernières années, celui qui correspond au déploiement de grilles de calcul. Dans ce cas, on est alors amené à considérer de vastes clusters (qui peuvent être élaborés dynamiquement) dont le réseau d'interconnexion est l'Internet. Cependant la latence des réseaux de télécommunication, si ce n'est leur débit, est telle que ces configurations ne peuvent encore être compétitives en matière de performances maximales. Néanmoins leurs usages permettront de réutiliser à distances des ressources de calcul inoccupées à certains moments, de favoriser diverses formes de coopérations entre applications, voire exécuter de longs calculs dans un contexte où la productivité dans l'obtention des résultats n'est pas un critère majeur.

Dans les dix ans qui viennent, il va falloir s'attendre aussi à des évolutions aussi profondes que celles que nous venons d'évoquer et le Pétaflops sera atteint et dépassé. Nul doute qu'il y aura là nombre de sujets à débattre pour le vingtième anniversaire d'ORAP.



# 8

## QUELQUES EXEMPLES D'UTILISATIONS

### Introduction

Le calcul de haute performance concerne de très nombreux secteurs, de la recherche (académique ou industrielle), de l'industrie, des finances, etc.

Un graphique du chapitre 6 met en évidence les domaines de recherche qui sont les plus gros « consommateurs » de grands moyens de calcul. Plutôt que de résumer de façon très imparfaite ces applications, nous invitons le lecteur de cet ouvrage à consulter les rapports scientifiques des grands centres, en particulier : CINES, IDRIS, IN2P3, ....

Nous avons donc fait le choix de développer deux exemples illustrant l'Industrie et la Défense.

## Industrie

L'évolution du TOP500 montre l'ampleur du développement du HPC dans l'industrie. Si on regarde le dernier TOP500, les entreprises françaises y apparaissent cinq fois :

- TotalFinaElf (55<sup>ème</sup> rang) : IBM xSeries Cluster Xeon (1024 proc., 4915 Gigaflops crête)
- Société Générale (rang 61) : IBM xSeries Cluster Xeon (968 proc., 4646 Gigaflops)
- Total Exploration Production (rang 192) : SGI Altix 3700 (256 proc., 921 Gigaflops)
- GIE Cegetel SI (rang 358) : HP SuperDome 875 MHz (224 proc., 784 Gigaflops)
- IB Solution (rang 446) : HP SuperDome 875 MHz (192 proc., 672 Gigaflops)

Par ailleurs, la liste de juin 2003 comprenait aussi des systèmes chez France Télécom, Texas Instruments et Bouygues Télécom, et de nombreux industriels ont préféré remplacer les supercalculateurs centraux (qui étaient susceptibles d'entrer dans le TOP500) par des systèmes départementaux ou spécialisés, en particulier des clusters. L'article de Stéphane Requena présentant l'évolution des moyens de calcul de l'IFP (Bi-ORAP n° 38) est tout à fait significatif. Ceci est également vrai chez les constructeurs automobiles (spécialisation des systèmes : crash, mécanique des fluides, etc) et dans l'aéronautique.

### Calcul de haute performance dans l'industrie et les services

L'accès et la maîtrise des différents composants du calcul haute performance sont devenus pour la plupart des acteurs de l'industrie et des services, un enjeu stratégique différenciant fort en terme de compétitivité et de productivité.

- Les outils de modélisation, de simulation et d'optimisation sont un maillon essentiel pour l'analyse et la conception de nouveaux produits et services. Ils permettent, par une analyse détaillée de l'influence des paramètres du système, une appréhension complète des problèmes étudiés. Ils autorisent, dans le cadre de prototypage actuel, l'exploration de solutions innovantes sans un recours systématique à des maquettes et des expérimentations coûteuses, difficiles voire impossibles. Ainsi, par leur flexibilité et leur facilité d'utilisation, ils apportent à la fois gain de temps et réduction des coûts, éléments essentiels pour une entreprise, tout en améliorant la qualité des produits et services conçus. Le développement du concept de P.L.M. permet désormais de prolonger ces acquis tout au long du cycle de vie du produit en garantissant une cohérence au niveau des données et des méthodes.

- La maîtrise, l'exploitation et la diffusion des informations, maintenant entièrement numériques, sous toutes leurs formes (données – images – vidéo – texte...), informations issues de résultats d'expériences ou de calculs, de suivis de fonctionnement ou d'exploitation..., sont devenues un enjeu considérable pour toutes les organisations. Elles nécessitent bien souvent des moyens très importants, tant en terme de capacités de stockage qu'en terme de puissance de calcul et de visualisation. Le traitement des données financières pour une banque, des données expérimentales en biologie, des résultats de calculs tridimensionnels complexes nécessitent de fortes capacités en terme de calcul haute performance.
- Les nouveaux modes de travail, notamment le travail collaboratif dans le cadre de grands projets, sont très souvent liés à la disponibilité des moyens importants de calcul, matériels et logiciels, en permettant à des équipes géographiquement réparties de travailler dans le cadre d'une organisation virtuelle.

Tous ces éléments montrent combien la disponibilité et la maîtrise du calcul haute performance sont devenus un élément stratégique pour une entreprise. Ils ont entraîné des évolutions importantes tant au niveau des techniques scientifiques que dans les secteurs d'application et les modes d'utilisation.

#### QUELQUES EVOLUTIONS ET ORIENTATIONS TECHNIQUES

Ces évolutions concernent à la fois les aspects logiciels et algorithmiques et les nouvelles architectures des systèmes d'information, ces deux éléments étant de plus en plus étroitement liés.

- Les algorithmes numériques doivent maintenant prendre en compte des phénomènes complexes, tridimensionnels, évolutifs, multi-physiques et très souvent multi-échelles. Ces points nécessitent la conception de méthodes numériques nouvelles, telles que des outils de couplage de codes, des algorithmes adaptés au parallélisme, de nouvelles approches pour l'approximation (méthodes sans maillage par exemple), de même que les méthodes permettant de garantir la précision et la qualité numérique des résultats de simulation. Si les compétences scientifiques françaises dans ces domaines sont au tout premier plan, on ne peut que regretter que peu d'initiatives aient permis de faire émerger des produits valorisant celles-ci. Les actions autour des logiciels libres tels que ASTER, SCILAB et la plateforme SALOME sont assurément fortement à encourager notamment dans le cadre de consortia industriels.
- Les méthodes d'optimisation, d'identification de paramètres, de conception optimale sont de plus en plus associées aux outils de simulation. Reposant sur des méthodes classiques, elles font de plus en plus appel à des approches nouvelles, telles que algorithmes génétiques, recuit simulé,... Elles correspondent aux besoins de base de la conception de produits ou de l'optimisation de process.
- Comme indiqué en introduction, la composante traitement et analyse des données est devenu un élément indispensable, tant pour les données expérimentales que pour les résultats de calcul. Il est impossible d'exploiter de manière correcte des résultats tridimensionnels, évolutifs pour des grands maillages sans outils adaptés. Ceci nécessite l'utilisation conjointe d'équipements de visualisation, type

« mur d'images » et de logiciels de traitement et de visualisation. Sur ce point, les techniques de réalité virtuelle ont clairement à jouer un rôle très grand par les capacités nouvelles qu'elles apportent. L'initiative RNTL PERFRV et les actions européennes actuelles et futures sont assurément des briques de base dans ce domaine.

- Un élément clé concerne la nécessité de disposer de plateformes logicielles permettant, dans le cadre d'une architecture logicielle globale, d'assurer d'une part la cohérence entre les différentes disciplines et utilisations et, d'autre part, une vue d'ensemble de toute la chaîne logicielle des outils, de la représentation géométrique aux logiciels de post-traitement et de visualisation en passant par les logiciels de simulation, tout en garantissant une supervision totale de la chaîne ainsi conçue. L'initiative SALOME, développée dans le cadre des actions plateformes du RNTL et qui regroupe 22 partenaires industriels et académiques, doit pouvoir jouer un rôle fédérateur fort du niveau national, voire européen.
- Par ailleurs, de nouvelles architectures, distribuées et parallèles, sont de plus en plus utilisées dans l'industrie et les services, donnant accès à des puissances importantes et permettant de rationaliser au mieux les investissements informatiques. Il convient de citer en premier lieu les architectures « cluster » qui peuvent atteindre de très grande taille ; ainsi la société CGG dispose de 17000 PC. A côté des centres nationaux destinés à la recherche académique, IDRIS et CINES, des pôles de compétence Haute Performance se mettent en place pour offrir aux partenaires, notamment industriels, des environnements complets d'accès à ces nouvelles technologies. Parmi ceux-ci, en France, il convient de citer le pôle TERATEC créé à l'initiative du CEA avec une puissance de 30 Téraflopes.

Enfin autour des concepts de GRID et de Web Services, de nouvelles capacités haute performance intégrant des moyens géographiquement distribués ou optimisant les partages de ressources, particulièrement bien adaptés aux communautés réunis dans le cadre organisation virtuelle, se mettent en place.

## UN DEVELOPPEMENT DANS TOUS LES SECTEURS

Toutes les évolutions matérielles et logicielles présentées ci-dessus rendent maintenant accessibles, et donc nécessaires, les systèmes de calcul haute performance à tous les secteurs industriels et de services.

Les secteurs originaux de haute technologie restent bien entendu les premiers utilisateurs de calcul haute performance. Le secteur aéronautique et spatial est un utilisateur extrêmement important, les outils de simulation et d'optimisation sont essentiels pour la conception des nouveaux avions (A380, Rafale, ...) (calcul de structures, écoulements externes, furtivité, thermique ...) et des nouveaux réacteurs (matériaux, thermique, mécanique des fluides, aéro-acoustique...). Dans le secteur automobile, les techniques numériques sont également devenues indispensables : comportement aérodynamique externe, conception moteur (combustion ...), aéro-acoustique et confort acoustique et, également, en liaison avec les équipementiers (pneumatiques, comportement routier et systèmes d'aide à la conduite ...). L'utilisation de ces techniques est notamment à l'origine d'une réduction très importante du temps de conception de nouveaux modèles.

Le secteur de l'énergie est aussi un axe très important d'utilisation des outils de simulation. L'article, ci-après, de Jean-Yves Berthou présente de manière très complète la situation et les perspectives d'EDF. Dans le domaine pétrolier, des moyens considérables sont mis en œuvre pour des problèmes tels que la recherche d'hydrocarbures (simulation sismique ou imagerie sismique), l'exploitation de gisements ou la conception des grandes plateformes pétrolières.

Parmi les autres grands secteurs utilisateurs, il faut signaler aussi le domaine des micro et nano technologies, les simulations tridimensionnelles et la conception de nouveaux matériaux faisant largement appel aux technologies du calcul haute performance.

L'ensemble des secteurs industriels traditionnels fait également de plus en plus appel aux calculs. Citons par exemple les secteurs autour des matériaux (sidérurgie, aluminium...), les travaux publics, notamment pour la conception des grands ouvrages d'art, le secteur chimie et agroalimentaire, par exemple pour la simulation et l'optimisation des grands process ou l'ensemble des activités autour des problèmes de l'environnement, de la gestion des ressources naturelles ou de la maîtrise des risques.

De nombreux nouveaux domaines deviennent également extrêmement demandeurs de ces outils. On peut, à titre d'exemple, citer trois cas particulièrement révélateurs. Le premier concerne le monde financier (banque, assurance) où l'usage des méthodes numériques est devenue indispensable pour la conception et l'évaluation de nouveaux produits financiers, pour l'analyse des risques ou pour la gestion optimale de portefeuilles. Le deuxième est l'ensemble des activités biologie et médecine, tout particulièrement pour la recherche de nouvelles molécules et pour la conception de nouveaux traitements, instruments ou prothèses. Le troisième secteur concerne les activités autour des contenus multimédia notamment à base d'images réelles ou de synthèse, activités qui font appel à des techniques telles que la réalité virtuelle et sont fortement demandeuses de puissance de calcul.

Enfin, à l'interface entre la recherche et l'industrie, de grands défis technologiques (changement climatique, matériaux, biologie, nanotechnologies ...), font appel à des puissances de calcul extrêmement importantes et sont souvent à l'origine des machines les plus performantes et des logiciels les plus ambitieux. Ils sont des moteurs très puissants pour la recherche, l'innovation et les nouveaux développements.

En conclusion, il est évident que le calcul haute performance représente un enjeu considérable pour l'innovation et la compétitivité des industries et services. Ce point essentiel pour le développement économique de la France et de l'Europe devrait être considéré, en tant que tel, comme un axe majeur des programmes nationaux et européens. La création et la coordination de grands projets réunissant les principaux acteurs, autour de domaines stratégiques, devraient être favorisées, en permettant ainsi la création d'une véritable industrie des logiciels et services autour du calcul haute performance. Disposant d'une école mathématique et informatique de premier plan, la France dispose de toutes les compétences pour réussir ce challenge porteur de développement économique.

## **La simulation numérique Haute Performance à EDF : état des lieux et perspectives**

### **La simulation numérique, un outil stratégique pour EDF**

Pour garantir la sûreté, accroître la durée de vie ou optimiser les performances des outils de production thermique, hydraulique ou autres énergies renouvelables, tout comme pour le transport, la distribution ou la vente, la simulation numérique est devenue au fil des ans un outil incontournable et stratégique pour l'entreprise. Depuis plusieurs dizaines d'années, EDF développe des codes de calcul dans les domaines aussi variés que la neutronique, la dynamique moléculaire, la thermo-hydraulique, la mécanique des structures, l'hydrologie, l'hydraulique, les mathématiques financières ou encore l'optimisation combinatoire.

Il est apparu clairement, à la fin des années 90, que la simulation devait se renouveler pour permettre de fournir de nouveaux bénéfices majeurs : parmi les évolutions jugées comme nécessaires, le couplage de codes 3D multi-physiques, multi-échelles et ma mise à disposition de très grandes puissances de calcul.

Pour répondre à ces enjeux deux types de projets ont été engagés,

- l'évolution des grands codes de simulation disciplinaire,
- de nouveaux développements d'architecture logicielle et d'infrastructure de calcul.

La suite de cet article présente quelques exemples illustrant l'état des lieux et les perspectives sur ces deux grands axes. Ces actions s'inscrivent dans le cadre de la démarche défi qui structure l'ambition de R&D moyen terme d'EDF.

Le défi « Simulation 2010 », qui fédère la plupart des actions présentées ci-après, s'appuie de façon déterminante sur le calcul hautes performances mais il prend aussi en compte la nécessité de faire évoluer en cohérence l'ensemble des outils et environnements de simulation. C'est une démarche d'anticipation qui n'est pas gouvernée par la seule notion de « besoins » : les nouveaux progrès du calcul et de la simulation sont considérés comme intrinsèquement porteurs d'opportunités pour les différents métiers de l'Entreprise.

Les quelques exemples qui suivent illustrent comment le calcul hautes performances s'accompagne à EDF d'une diversité d'initiatives visant à poursuivre concrètement une démarche industrielle ambitieuse en matière de simulation.

## Evolution des grands codes de simulation disciplinaire : quelques exemples

### DECOMPOSITION DE DOMAINE DANS « CODE\_ASTER »

EDF a choisi de capitaliser ses développements en thermo-mécanique dans un code interne unique : *Code\_Aster*[Ast] pour optimiser ses efforts de R&D et d'ingénierie dans le domaine et garder une certaine indépendance vis-à-vis des éditeurs de logiciels.

Même avec des maillages et des modélisations optimisés (maillage adaptatif, symétrie, éléments structuraux ...), les problèmes à résoudre demandent des ressources de calcul toujours croissantes.

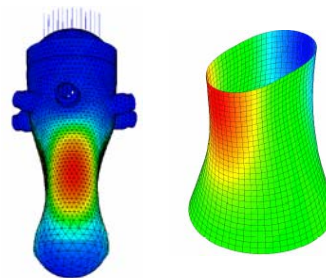
- statique ou dynamique 3D non-linéaire
- chargements complexes (cyclique, dynamique rapide...),
- analyses particulières (recalage ou assimilation de données, optimisation, sensibilité, fiabilité, étude paramétrique...).



Ces coûts calculs sont principalement issus des inversions de systèmes linéaires souvent enfouies au plus profond d'autres algorithmes numériques : solveurs non-linéaires, EDO, modaux... Depuis 50 ans, deux types de solveurs linéaires se disputent la suprématie : les solveurs directs et les itératifs. Les premiers sont robustes mais requièrent des capacités de stockage qui croissent rapidement avec la taille du problème ; ils ne permettent pas un parallélisme massif efficace. Les seconds répondent aux critères inverses ! D'où l'idée séduisante de les mixer au sein d'une troisième catégorie, la Décomposition de Domaine[Ddm] (DD), afin de tirer profit de leurs avantages respectifs.

Actuellement des développements sont en cours dans la version 7 de *Code\_Aster* pour insérer ce type de solveur DD. Il s'agit d'une méthode duale de type FETI [Boi03][DC00] qui semble, hormis la sous-structuration classique, la méthode DD la plus éprouvée en mécanique des structures et la plus déployée dans les codes industriels (ONERA [FFX00], SAMCEF [GCD96], HUTCHINSON [SW03]).

Le déploiement de ce type de solveur parallélisé devrait permettre d'absorber une charge croissante en utilisant les ressources des machines massivement parallèles à mémoire distribuée. C'est dans cette perspective qu'EDF s'est associé en 2003 au CEA pour accéder au Centre de Calcul Recherche et Technologie (CCRT) de Bruyère le Châtel qui comporte notamment une COMPAQ-HP à 800 processeurs.



Outre ces aspects performances indéniables, la DD revêt aussi un aspect modularité et souplesse d'utilisation (travail collaboratif, raccord de maillages..) et constitue un cadre élégant, évolutif et efficace pour traiter des problématiques montantes (couplage, multi-échelles, traitement par zones...).

#### THERMO-HYDRAULIQUE : EVOLUTION VERS LE MASSIVEMENT PARALLELE

En thermohydraulique, les efforts d'EDF sont aujourd'hui concentrés sur deux grands projets logiciels : NEPTUNE et *Code\_Saturne*. NEPTUNE est un projet de co-développement EDF/CEA, lancé en 2002 avec un support IRSN et FRAMATOME-ANP, pour la nouvelle génération d'outils en thermohydraulique diphasique eau-vapeur. *Code\_Saturne* [Arc04] est dédié à la thermohydraulique nucléaire monophasique, mais permet également la modélisation de la combustion dans les centrales thermiques à flamme, la prise en compte des spécificités liées à l'effet Joule et aux arcs électriques, ainsi que la simulation lagrangienne d'écoulements diphasiques.

Au-delà de la recherche de précision sur les méthodes numériques, la précision de la modélisation des écoulements monophasiques ou multiphasiques peut être atteinte de deux façons distinctes : représenter les écoulements jusqu'à des échelles plus fines et améliorer la modélisation à échelle donnée.

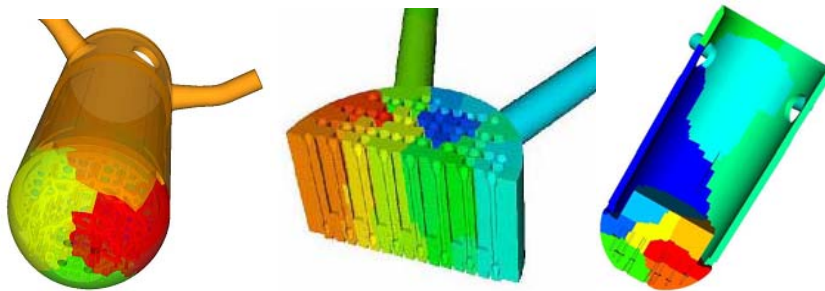
Dans le premier cas on cherche à limiter l'impact des hypothèses de modélisation, des processus de moyenne ou de filtrage des équations locales : industrialisation des techniques de LES et de DNS, développement de la CFD diphasique locale, prise en compte locale de géométries réelles en diphasique et en monophasique . Dans le deuxième cas on tente, sans changer d'échelle, d'améliorer la description des écoulements en développant des modèles physiques avancés : modélisation de la turbulence, traitement en paroi, diphasique, échelle 3D homogénéisée et échelle 3D locale, détermination et maîtrise des incertitudes de calcul.

Le raffinement des échelles de simulation requiert des maillages très volumineux et la complexité croissante des modèles a un impact fort sur le temps calcul. Ceci est naturellement vrai dans les phases d'utilisation industrielle des codes, mais également lors de la mise au point des modèles (analyses de sensibilité, de convergence en espace et en temps...). Dans tous les cas l'amélioration de la précision (ou même la simple faisabilité des simulations) se traduit par d'importants besoins en calcul hautes performances.

L'amélioration des outils et des méthodologies passe également par l'usage de plus en plus intensif des couplages inter-échelles et inter-disciplinaires, qui mettent en jeu un nombre toujours plus important de codes différents, d'échelles de temps et d'espace très diverses. Les besoins en calcul haute performance sont donc transverses aux différentes échelles de simulation (même les plus macroscopiques) car toutes ont un impact significatif sur la durée des études d'ingénierie, qui constitue un facteur de compétitivité important. La réalisation de tels couplages multi-échelles et multi-disciplinaires nécessite une analyse globale des problèmes selon plusieurs axes de compétence tels que, par exemple : l'architecture logicielle des différents codes, la nature numérique des systèmes d'équations à coupler et les schémas utilisés, la nature physique des informations transférées.

*Code\_Saturne* (depuis 2002) et NEPTUNE 3D local (depuis 2003) sont parallèles et fonctionnent sur machines à mémoire distribuée. Il est en effet primordial que les logiciels puissent à la fois fonctionner sur les supercalculateurs massivement parallèles tels que le Centre de Calcul Recherche et Technologie du CEA à Bruyères le Châtel (CCRT) et sur des clusters de PC ou des PC biprocesseurs de bureau relativement peu onéreux.

*Code\_Saturne* et NEPTUNE 3D local reposent sur la même approche SPMD (*Single Program Multiple Data*). La méthode consiste à répartir tout d'abord les cellules du maillage en « sous-domaines » (une cellule est affectée à un et un seul sous-domaine) qui sont ensuite traités par un unique processus sur la machine virtuelle. Cette « distribution » est obtenue en appliquant la bibliothèque Metis [Kar98] au graphe de connectivité du maillage : l'équilibrage de la charge de calcul qui en résulte apparaît relativement satisfaisant.



**Distribution de domaine (cuve 3 boucles, plénum supérieur et cuve 4 boucles)**

L'utilisation industrielle systématique de calculateurs parallèles et massivement parallèles, qui n'en est encore qu'à ses débuts dans ce domaine, fournit un premier retour d'expérience très prometteur. A court terme ces infrastructures devraient permettre de franchir une étape significative en termes de capacité d'analyse (études de sensibilité systématiques sur des maillages de l'ordre du million de mailles pour quelques centaines d'heures de calcul).

#### COMPORTEMENT DES MATERIAUX SOUS IRRADIATION : PROJET PERFECT

Les composants des centrales nucléaires (cuve, structure interne) subissent différentes sollicitations (température élevée, rayonnement neutronique, corrosion) dont les conséquences sur les matériaux (notamment l'acier de cuve) font depuis de nombreuses années l'objet d'études approfondies.

La plupart de ces études comportent des programmes d'irradiation en réacteur expérimental suivis d'essais mécaniques sur les matériaux irradiés. Depuis le début des années 90 ces essais sont complétés par des simulations numériques.

Il s'agit d'essayer de prédire l'évolution de la microstructure et des caractéristiques mécaniques du matériau (accroissement de la limite d'élasticité) à partir de la

composition chimique de l'acier et des conditions d'irradiation (température, durée d'irradiation, flux).

La construction de ces outils, appelés réacteurs virtuels, consiste à modéliser les phénomènes élémentaires et à chaîner les simulations effectuées à différentes échelles spatiales. Ce travail a commencé dans le cadre du projet REVE (REacteur Virtuel d'Etude) initié par EDF en collaboration en Europe avec le CEA, le SCK-CEN et des laboratoires universitaires (LMGPM à Lille, Université de Rouen, ...) ainsi que des organismes américains et japonais. Il se poursuit aujourd'hui dans le cadre du projet européen PERFECT piloté par EDF au sein du 6<sup>ème</sup> programme cadre EURATOM.

Le défi consiste à faire le lien entre les mécanismes élémentaires à l'échelle atomique (angström) d'une durée de l'ordre de la pico-seconde, et le composant de taille métrique étudié sur des durées de plusieurs dizaines d'années ce qui nécessite une modélisation multi-échelles : la construction d'un premier réacteur virtuel (RPV-1) a nécessité de chaîner six types de code différents, utilisant trois bases de données de résultats. Si l'utilisation de RPV-1 s'exécute en quelques heures sur un PC, la constitution des bases de données et la détermination des données d'entrée (grandeurs physiques élémentaires) nécessitent des ressources informatiques importantes. Depuis 1996, les simulations les plus complexes sont réalisées sur les machines massivement parallèle du centre de calcul du CEA et plus récemment sur le CCRT.

L'évolution des outils de simulation des matériaux devrait se poursuivre dans la prochaine décennie en tirant parti de l'augmentation constante de la puissance de calcul disponible.

La dynamique moléculaire *ab initio* pourrait être utilisée par exemple pour étudier des cas bien particuliers comme la diffusion de défauts complexes (tels que les interstitiels) ; ce qui peut conduire à des calculs 100 à 1000 fois plus longs que ceux qui sont réalisés aujourd'hui. Par ailleurs, la simulation de systèmes de l'ordre de 500 atomes serait nécessaire pour étudier des amas de défauts ponctuels ou les effets de cœur des dislocations (structure, interaction avec des espèces chimiques) ; de tels calculs seraient 50 fois plus long (par rapport à un calcul avec une centaine d'atomes).

On voit donc que les gains de performance apportés par la technologie des ordinateurs devront aussi être accompagnés de progrès en matière d'algorithmique avec notamment les méthodes dites d'ordre N, consistant à obtenir un coût de calcul linéaire avec la taille du système traitée.

## THERMOMECHANIQUE

Les études de nouvelles gestions de combustible nucléaire à fort et très fort taux de combustion s'appuient sur d'importants programmes expérimentaux et de modélisation. La simulation de l'Interaction Pastille Gaine ou IPG (interactions thermo mécaniques entre les pastilles de combustible et la gaine acier au sein de laquelle elles sont empilées) requiert des volumes de calcul de plus en plus importants qui ont conduit au développement d'une solution sur cluster de PC.

Dans cette nouvelle configuration il est aujourd'hui possible de simuler un assemblage complet (264 crayons) en moins de deux heures et un huitième de cœur com-

plet (31 assemblages, soit 8184 crayons) en environ deux jours. En comparaison, les études conventionnelles exploitant une station Unix performante peuvent au mieux traiter trois crayons en deux heures.

La disponibilité à faible coût de cette puissance de calcul locale autorise la mise en œuvre d'une modélisation fine à tous les stades de la modélisation et ouvre de nouvelles perspectives d'optimisation.

#### PERSPECTIVES DANS LE DOMAINE DES MATHÉMATIQUES FINANCIÈRES

La « gestion prévisionnelle de la production » consiste à déterminer des stratégies d'utilisation des moyens de production qui optimisent des critères économiques spécifiques, et ceci sur des horizons temporels variés.

Sur le plan mathématique, il s'agit de problèmes d'optimisation stochastique de grande taille, le plus souvent en variables mixtes, i.e. faisant intervenir des variables continues et entières, et qui requièrent la mise en œuvre de méthodes et d'outils avancés d'optimisation et de recherche opérationnelle. On trouve communément dans ce domaine des problèmes comportant plusieurs dizaines de milliers de variables et de contraintes.

L'importance croissante de la prise en compte du « risque » a complexifié encore ces problèmes en augmentant leur dimension stochastique. Schématiquement, il ne s'agit plus seulement d'optimiser des critères économiques sur une vision en espérances des aléas, problème déjà extrêmement complexe en lui-même, mais également d'imposer des « contraintes de risque », par exemple minimiser la variance d'un coût tout en bornant son espérance. Dans ce contexte il est clair que des besoins très importants en calcul haute performance existent dans ce domaine.

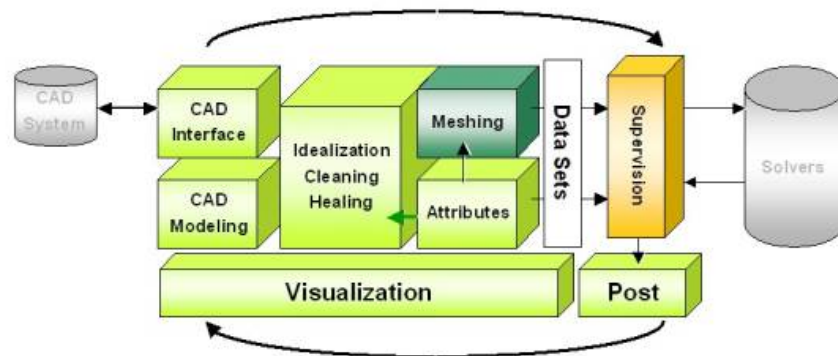
D'un point de vue statistique, le nombre de scénarios simulés doit être suffisamment grand pour garantir une robustesse acceptable des indicateurs recherchés. Les architectures parallèles sont une réponse efficace à cette problématique.

### **Architectures logicielles et infrastructures informatiques**

#### PLATE-FORME LOGICIELLE POUR LE CALCUL HAUTE PERFORMANCE

Le projet P@L/SALOME a pour objectif d'une part, de définir une architecture logicielle partagée par l'ensemble des disciplines et d'autre part de concevoir et de produire une plate-forme de simulation multi-physique haute performance. Haute-performance signifiant qu'elle doit être capable de mettre en œuvre des simulations couplées d'applications parallèles. La plate-forme réalise la liaison CAO, maillage, supervision de calcul et post-traitement et doit donc gérer les grands volumes de données produits par chacun de ces composants. Elle est développée en collaboration avec le CEA.

Le projet [P@L/SALOME](http://www.salome-platform.org/) s'inscrit dans le cadre des projets RNTL SALOME (2001-2002, 9 partenaires) et SALOME2<sup>1</sup> (2003-2005, 22 partenaires). SALOME et SALOME2 réunissent industriels et universitaires qui partagent une vision commune de la simulation numérique et se donnent pour objectif de fournir à la communauté scientifique et technique une plate-forme Open Source adaptable aux besoins les plus variés. SALOME2 regroupe en effet des équipes provenant du génie civil, des Géosciences, du naval, de l'aéronautique et de l'énergie.



**Architecture générale de la plate-forme SALOME**

La plate-forme doit être suffisamment générique pour s'adapter à l'ensemble des besoins d'étude et développement dans le domaine du calcul scientifique. Le projet est également le lieu où architectes logiciel et spécialistes des domaines disciplinaires concernés définissent ensemble l'architecture générale des futurs codes de simulation ainsi qu'un modèle d'échange de données commun à tous les codes de type éléments finis et volumes finis. Ainsi l'objectif dans les années qui viennent, est de disposer d'un ensemble de composants logiciels pour les différentes disciplines, assemblables à l'aide d'un langage de commandes graphique ou textuel. Ces « composants métiers » doivent de plus pouvoir s'exécuter dans un environnement commun, la plate-forme SALOME, partageant une même vision architecturale et les mêmes outils pour la préparation, l'exécution des calculs et le traitement des résultats.

Les gains attendus sont la réduction des coûts de développement des grands logiciels scientifiques, l'extension des possibilités d'études pluridisciplinaires, la réutilisation facilitée des composants et enfin une meilleure utilisation des nouvelles architectures matérielles parallèles.

Une plate-forme industrielle sera disponible en 2004 et validée par de premiers essais de couplages thermo-hydraulique - neutronique. A horizon 2006 cette plate-forme intégrera l'ensemble des codes co-développés avec le CEA (neutronique, thermo-hydraulique, comportement des matériaux sous irradiation, thermo-mécanique du

<sup>1</sup> <http://www.salome-platform.org/>

crayon combustible) ainsi que les fonctions de visualisation avancées et de calcul d'incertitudes décrites ci-après.

### VISUALISATION 3D

L'augmentation rapide du volume des données amène à repenser la question de la visualisation : l'utilisateur rencontre des difficultés grandissantes à dépouiller ses données. Les interfaces 3D interactives doivent permettre la présentation et l'analyse collaborative de grandes quantités d'information afin d'améliorer la performance des analyses et des diagnostics.

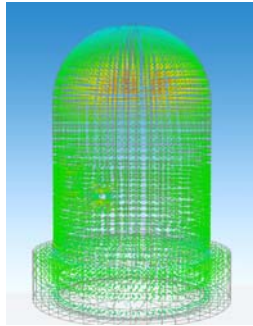
Le projet « Visualisation Scientifique Interactive Collaborative 3D » met au service des chaînes de calcul, d'une part, les technologies de réalité Virtuelle, qui ont démontré leur puissance dans les jeux vidéo, et d'autre part, les apports de la physiologie qui permet de connaître les facteurs à privilégier pour faciliter la compréhension des phénomènes.

Un premier exemple montrer l'intérêt du trio « calcul scientifique – réalité virtuelle – physiologie ». Dans une étude d'endommagement mécanique, la visualisation des valeurs du tenseur des contraintes aux points de Gauss des mailles volumiques de calcul pourrait classiquement consister à afficher une petite sphère en chaque point de Gauss, sphère formée de quelques dizaines de triangles (approche classique en visualisation scientifique) ; mais une telle masse de triangles reste actuellement difficile à animer en temps réel, ce qui contraint l'utilisateur à ne produire que des vues fixes et l'empêche d'explorer ses données à la recherche des phénomènes intéressants.

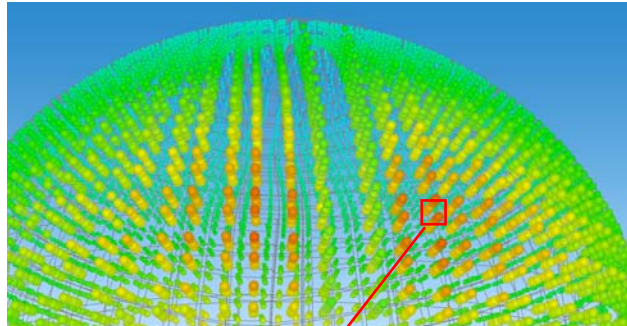
En remplaçant chaque sphère par une texture (approche classique en réalité virtuelle et jeu vidéo) mimant l'aspect sphérique de manière suffisamment fine pour que le système visuel humain ne détecte pas la supercherie (aspects psychophysiologiques), on peut utiliser pleinement les ressources matérielles des cartes graphiques (étage de traitement vidéo).

On atteint un affichage temps réel (supérieur à 15 images par seconde), ce qui permet alors d'exploiter toute la ressource cérébrale de perception dans le mouvement (l'humain est doué d'une capacité très ancienne d'exploration spatiale rapide - de l'ordre de 100 milli-secondes).

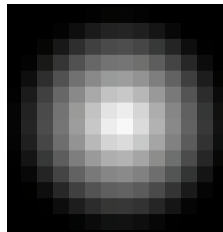
L'utilisateur peut ainsi se livrer à l'exploration active d'un nuage formé de centaines de milliers de points de Gauss et trouver la bonne position d'observation du phénomène d'endommagement. La même accélération est valable pour les plans de coupe interactifs.



Vue générale

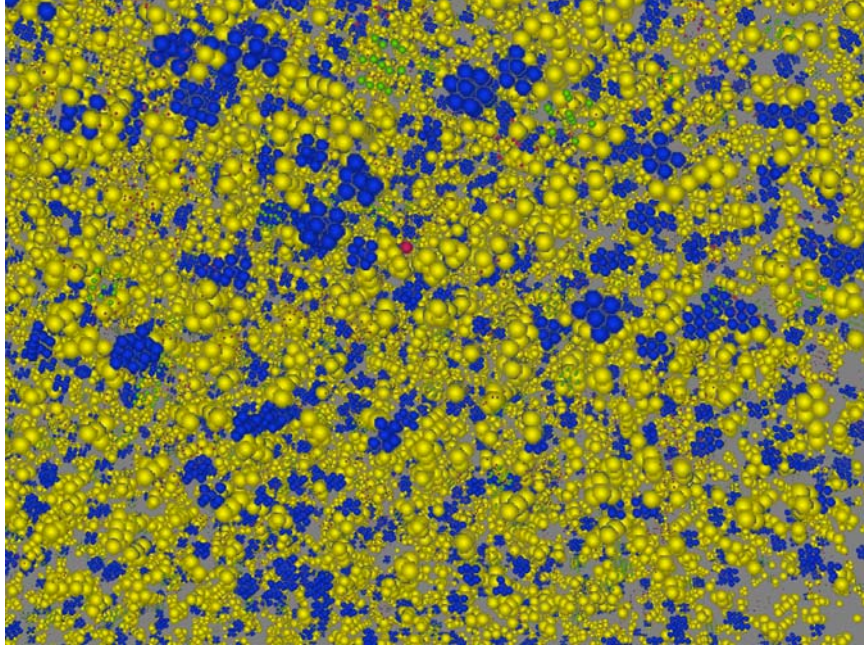


Vue de détail



Texture de transparence mimant une sphère (les pixels noirs sont considérés comme transparents lors du rendu) ; on parle de « point sprite »

Si l'on examine maintenant un exemple de simulation des dislocations au niveau atomique où la quantité d'atomes et de dislocations à afficher peut atteindre plusieurs centaines de millions sur un millier de pas de temps, l'exploitation de cette même primitive graphique « point sprite » est constatable visuellement sur l'image suivante :



**500.000 atomes simulés, en rendu interactif (plus de 15 images par seconde) via les « point sprite » ; noter les petits amas verts ou rouge qui restent lisibles dans la masse de données**

Plus largement, les progrès récents de la neurophysiologie (issus en particulier des avancées en imagerie médicale) enseignent que la compréhension d'un processus est fortement liée à notre capacité d'agir sur ce processus. Les actions « percevoir, agir, comprendre » semblent en effet être fortement liées au sein même de notre cerveau : la pensée est élaborée dans le mouvement, et le mouvement est lié à une perception et à une action. Il devient donc nécessaire de pouvoir interagir dans le mouvement avec les résultats de simulations numériques (Wexler & Klam).

Ainsi, le rapprochement en cours entre Technologie de l'Information (Réalité Virtuelle en particulier) et Sciences du Vivant (neurosciences) permet d'envisager des post-traitements guidés par les capacités de perception de l'utilisateur final pour lui présenter toutes les informations dont il a besoin, et seulement ces informations, en créant des outils informatiques apportant les aides dans les domaines où nos capacités humaines sont les plus faibles et en sollicitant l'acteur humain pour les domaines où il a des capacités supérieures à la machine.

Parmi les partenaires actifs d'EDF dans le domaine de la visualisation scientifique interactive et collaborative, on trouve notamment le Collège de France (CNRS Paris : Laboratoire de Physiologie de la Perception et de l'Action, pour les aspects perception et cognition), l'INRIA-GRAVIR (Grenoble, pour les aspects visualisation multi-résolution), le LSITT (CNRS Strasbourg sur les primitives graphiques textures et la simulation dirigée), le LABRI (INRIA, Université de Bordeaux I, sur la simulation

dirigée), l'Université de Stuttgart (pour le travail collaboratif autour d'une représentation 3D).

## INCERTITUDES ET ASSIMILATION DE DONNEES

L'exigence croissante sur les marges de toute nature impose de mieux quantifier des incertitudes qui sont omniprésentes dans la démarche de simulation (aléa, imprécision des données, multiplicité et couplage des modèles ...).

De nombreux métiers d'EDF font l'objet de d'études de propagation d'incertitudes dans des codes numériques : mécanique de la rupture, vieillissement des ouvrages de génie civil (en lien avec l'IFMA), dispersion des polluants atmosphériques (en lien avec l'Ecole des Ponts), confinement des déchets nucléaires sur une très longue durée (en lien avec l'ANDRA), propagation des micro-polluants dans l'environnement biologique (en lien avec l'IRSN), événements hydrologiques extrêmes,

Un intérêt majeur est porté d'une part aux méthodes statistiques bayésiennes directes sur les données (en lien avec l'INRIA), et d'autre part aux méthodes d'assimilation numérique (en lien avec le CERFACS notamment). La simulation future devra intégrer l'ensemble des informations disponibles, en particulier les données issues du retour d'expérience ou de données de surveillance : les techniques d'assimilation de données forment donc un des ingrédients indispensables de la « boîte à outils » de simulation de demain.

Des approches innovantes doivent être également expérimentées sur les problèmes « durs », notamment l'agrégation d'incertitudes multi- modèles et multi- physiques, les problèmes physiques non réguliers voire chaotiques, les questions dynamiques d'optimisation, les modélisations stochastiques avancées (éléments finis stochastiques, équations différentielles stochastiques...).

Plusieurs problèmes représentent en effet de réel les difficultés pour la propagation d'incertitudes, à mi-chemin entre performance de calcul et justification mathématique théorique. Il en ressort un besoin de simulation probabiliste de la variabilité de la réponse des codes ou enchaînements de codes. Le dilemme est alors de trouver le juste milieu entre deux grandes approches :

- des processus de simulation de type Monte-Carlo, dont la justification universelle est assurée par les grands théorèmes statistiques, mais qui sont extrêmement exigeants en performance de calcul (multipliant le nombre de calculs déterministes par un facteur  $10^2$  à  $10^5$  suivant la probabilité de l'accident)
- diverses méthodes d'accélération adaptative des tirages ou d'approximation variationnelle bénéficiant souvent de la différentiation des codes déterministes (qui peuvent souvent réduire le facteur à moins de  $10^2$ ); ces méthodes sont bien connues heuristiquement mais demandent une grande attention théorique quant à l'influence des non-régularités de la réponse physique.

Des travaux innovants, en lien avec le CEA notamment, doivent permettre d'avancer dans cette problématique complexe.

## NOUVEAUX MODELES DE PROGRAMMATION

Les codes de calculs étaient et sont encore majoritairement développés en Fortran. Cependant les langages objets séduisent par leur souplesse et leur puissance d'abstraction. EDF mène une réflexion sur les techniques de programmation générique en C++ , déjà utilisées avec succès dans quelques projets pour concilier un haut niveau d'abstraction et des performances optimales [MELL03]. Quelles sont les premières conclusions ? Les codes développés selon cette méthode sont plus courts (un facteur 10 dans certains cas par rapport à leur version initiale en Fortran), plus modulaires, plus maintenables et permettent de mieux séparer les différents domaines scientifiques impliqués, modélisation physique, analyse numérique et informatique. Cette meilleure organisation, validée sur des codes séquentiels, semble une voie prometteuse pour la maîtrise des efforts de parallélisation.

Une collaboration est en cours de montage avec de l'équipe du Professeur Bjarne Stroustrup de l'Université du Texas A&M<sup>2</sup>, autour des outils et méthodes de programmation générique en C++ pour le calcul haute performance. Deux sujets de recherche développés par ce laboratoire (l'exploitation de la sémantique de concept pour l'aide à la programmation générique et le développement de STAPL) trouveront une utilisation directe pour la réalisation des codes EDF s'appuyant sur ce paradigme de programmation.

## ARCHITECTURES LINUX

Le projet CALIBRE a été lancé fin 2000 pour définir et mettre en œuvre un référentiel commun à toute la communauté EDF du calcul scientifique reposant sur le tandem PC Intel + LINUX. En octobre 2001, la souche CALIBRE est devenu le système LINUX de référence (SR-LINUX) d'EDF.

Une des originalités de cette solution tient à l'intégration de l'outil VMware qui permet de partager les éléments matériels du poste cible entre plusieurs systèmes d'exploitation. Ainsi un PC standard peut héberger une machine LINUX, et une machine virtuelle Windows sur laquelle fonctionne la bureautique. Le logiciel Samba permet aux deux systèmes, LINUX et Windows de partager un unique système de fichiers.

D'autre part, le projet a consacré une part importante de son activité à rendre utilisables et exploitables les grappes de PCs sous LINUX en environnement industriel.

Pour rendre cette solution industrielle, il fallait intégrer la souche Linux à une suite logicielle supportée par les constructeurs et disposant d'outils de clustering au meilleur niveau. Le choix s'est porté sur OSCAR<sup>3</sup>. Le laboratoire Oak Ridge National Laboratory est un acteur majeur du consortium OSCAR et un centre d'excellence mondialement reconnu dans le domaine du calcul scientifique haute performance. EDF a initié début 2004 une collaboration avec ce laboratoire et l'INRIA en vue no-

---

<sup>2</sup> <http://parasol.tamu.edu/people/bs/>, <http://parasol.tamu.edu/compilers/research/STAPL>

<sup>3</sup> <http://oscar.sourceforge.net/>

tamment de travailler à l'intégration de l'outil Kerrighed, Système à Image Unique [VALL03a, MORI04] sur lequel EDF collabore avec l'IRISA depuis fin 2000. La collaboration EDF-INRIA-ORNL permettra d'étendre les fonctionnalités de Kerrighed aux clusters de grande taille et à la fédération de clusters.

## REFERENCES :

- [Ast] Site officiel de *Code\_Aster* : <http://www.code-aster.org>.
- [Arc04] F. Archambeau, N. Méchitoua et M. Sakiz, *Code\_Saturne : a Finite Volume Code for the Computation of Turbulent Incompressible Flows – Industrial Applications*, International Journal on Finite Volumes, (2004).
- [Boi03] O. BOITEAU. *Décomposition de domaine et parallélisme en mécanique des structures : état de l'art et benchmark pour une implantation raisonnée dans Code\_Aster*. Note interne EDF R&D HI-23/03/009 (2003).
- [Ddm] Site fédérateur des développements en DD : <http://www.ddm.org>.
- [DC00] D.DUREISSEX & L.CHAMPANEY. *Calcul des structures et parallélisme: un bilan et quelques développements récents*. Mec. Ind., 1 (2000), pp43-60.
- [FFX00] F.FEYEL & F.X.ROUX. *Use of domain decomposition methods for non-linear structural computations*. IASS-IACM 2000, Chania (2000).
- [GCD96] M.GERARDIN, D.COULON & J.P.DELSEMME. *Parallelization of the SAMCEF finite element software though domain decomposition and FETI algorithm*. SAMCEF User conference, Liège (1996).
- [Kar98] G. Karypis, V. Kumar, *MeTiS -- A Software Package for Partitioning Unstructured Graphs, Partitioning Meshes and Computing Fill-Reducing Orderings of Sparse Matrices -- Version 4.0*, University of Minnesota, September 1998
- [MELL03] Ullises Mello and Ildar Khabibrakhmanov, **On the Numeric Efficiency of C++ Packages in Scientific Computing**, 4th LCI International Conference on Linux Clusters: The HPC Revolution 2003, June 23-26 .San Jose, California, <http://www.linuxclustersinstitute.org/Linux-HPC-Revolution/Archive/2003techpapers.html>
- [MORI04] Christine Morin, Pascal Gallard, Renaud Lottiaux and Geoffroy Vallée. *Towards an Efficient Single System Image Cluster Operating System*. In Future Generation Computer Systems, Elsevier Science, To appear, January 2004.
- [SW03] J.L.SORTAIS & I.WANDER. *Résolution de problèmes industriels avec contact au sein du groupe Hutchinson*. Actes de la journées PHIAS-IPSI XXVII n°2 (2003).
- [VALL93a] Geoffroy Vallée, Renaud Lottiaux, Louis Rilling, Jean-Yves Berthou, Ivan Dutka-Malhen, Christine Morin. *A Case for Single System Image Cluster Operating Systems: Kerrighed Approach*. In Parallel Processing Letters, June 2003.

## Défense

### Introduction

Tout concourt, aujourd'hui, à accroître la complexité des systèmes de défense : la multiplicité des échelles rencontrées, la variété des phénomènes physiques mis en œuvre, le grand nombre d'acteurs différents impliqués. Dès lors, afin de garantir, souvent sans essai de qualification global, la bonne définition des principales fonctions de ces systèmes (quelquefois embarqués), les moyens informatiques utilisés sont de plus en plus impressionnants. Ainsi, par exemple, les nouvelles générations de capteurs fournissent des données de plus en plus hétérogènes qu'il faut transformer par des algorithmes de plus en plus complexes afin d'en extraire l'information utile à la prise de décision.

Si l'on s'intéresse à des produits aussi complexes qu'un système de défense multi-forces, la complexité tient alors plus dans le nombre des objets à modéliser et leurs interactions que dans la complexité des modèles eux-mêmes.

Bien entendu, la tendance actuelle est à concevoir des systèmes de systèmes où la simulation numérique est uniformément présente, que ce soit au niveau de la conception du système global par la prise en compte des interactions fines des systèmes autonomes entre eux qu'au niveau de la modélisation toujours plus fine des systèmes élémentaires.

Afin d'illustrer notre propos, nous avons choisi de vous présenter dans le détail l'infrastructure mise en place par le CEA-DAM pour garantir la sûreté, la fiabilité et la performance des armes nucléaires françaises sans recourir à des essais réels.

N'oublions pas des domaines de la défense qui prennent de l'importance, comme celui de la sécurité. La cryptographie, par exemple, utilise des méthodes mathématiques de plus en plus complexes<sup>1</sup> et des moyens de calcul de plus en plus puissants, soit en architecture SMP (calcul demandant une grande mémoire partagée), soit en architecture MPP (distribution de tâches de réclamant aucun partage spécifique de mémoire).

---

<sup>1</sup> Voir, par exemple, les travaux de Reynald Lercier, du CELAR (Centre d'électronique de l'armement) : <http://www.medicis.polytechnique.fr/~lercier/>

# Calcul de haute performance au CEA/DAM : le projet TERA

## Résumé

Dans le cadre du « programme simulation », la conception et la garantie des armes de la force de dissuasion française sont assurées par la simulation numérique. Il est donc nécessaire non seulement de disposer de logiciels de simulation validés par l'expérience mais aussi de systèmes informatiques de grande puissance compatibles avec les besoins de ces logiciels. Le projet TERA a pour objectif de mettre en place ces systèmes. Il comprend trois étapes devant aboutir en 2009 à une puissance de 100 Téraflopps soutenus. Le supercalculateur TERA-1, première étape du projet installé en décembre 2001, est en production depuis septembre 2002. Grâce à ses 2560 processeurs, ce supercalculateur d'une puissance de 5 Téraflopps crête a démontré sa capacité à atteindre plus de 1 Téraflopps soutenus sur des applications représentatives. Utilisé par les physiciens et concepteurs du CEA – DAM, il produit plus 3 Téraoctets de résultats par jour. Cette machine est complétée par un système de stockage de données d'une capacité de 1 Pétaoctets dont la capacité sera amenée à croître d'un Pétaoctets par an. Un bâtiment, adapté aux contraintes d'installation de ces équipements (surface au sol, dissipation de chaleur) a été construit pour les accueillir. La seconde étape, TERA-10, qui a commencé conduira à une puissance de calcul de 10 Téraflopps soutenus à la fin de l'année 2005.

## Le « programme simulation »

En février 1996, après avoir réaffirmé que la dissuasion nucléaire constituera pour longtemps un élément essentiel de notre défense, le Président de la République concluait la dernière série de tests effectués dans le Pacifique en demandant au CEA - DAM de relever le défi de la simulation.

En l'absence définitive d'essais nucléaires, le « programme simulation » a pour objectif de garantir la sûreté, la fiabilité et la performance des armes nucléaires françaises et d'assurer leur crédibilité. Les grandes échéances de ce programme imposent que les moyens nécessaires pour atteindre cet objectif soient opérationnels en 2009.

Ce programme comprend trois grands volets :

- l'amélioration des modèles physiques décrivant le fonctionnement des charges nucléaires;
- la simulation numérique ;
- la validation expérimentale.

Les simulations numériques, qui mettent en œuvre ces modèles physiques améliorés, sont validées de deux manières :

- par comparaison avec les mesures réalisées lors des essais nucléaires passés ;
- par des expériences de physique menées dans des domaines partiels du fonctionnement, en particulier implosion froide et ignition du mélange Deuterium-Tritium.

Ces dernières sont effectuées, ou le seront, à l'aide des deux grands outils expérimentaux du CEA - DAM : la machine radiographique AIRIX et le futur laser mégajoule.

Durant la même période et pour des raisons semblables, les Etats-Unis décidaient la mise en place du programme ASCI (*Advanced Simulation and Computing Program*) avec pour effet l'injection de plusieurs centaines de millions de dollars dans l'informatique de haute performance.

### **Accéder au résultat global par la simulation numérique**

La qualité des simulations numériques repose sur la modélisation fine des phénomènes physiques, sur la prise en compte de leurs interactions et sur la description détaillée des objets. Le recours fréquent à des calculs tridimensionnels est également nécessaire pour prendre en compte certains phénomènes physiques et certaines géométries. Ces exigences impliquent à la fois une amélioration des logiciels de simulation et une augmentation importante des capacités de calcul.

Cette dernière est indispensable pour conserver des durées raisonnables pour un calcul : résultats le lendemain pour un calcul paramétrique ou au bout de quelques semaines pour une simulation complète. Ainsi, la capacité de production doit être à l'horizon 2009 accrue d'un facteur 10000 par rapport à celle qui était en place au moment du lancement du « programme simulation » ce qui se traduira alors par une puissance soutenue de 100 Téraflops. Un accroissement équivalent est nécessaire en terme de taille mémoire et de capacité de stockage ce qui conduira alors à des volumes de respectivement plusieurs centaines de Téraoctets et de plusieurs centaines de Pétaoctets. La manipulation et l'interprétation de l'énorme quantité de résultats produite suppose des moyens dimensionnés en conséquences : logiciels appropriés, réseaux rapides, stations de travail performantes, équipements avancés de visualisation.

De telles caractéristiques ne peuvent être atteintes que grâce au parallélisme. En particulier, la puissance de calcul est obtenue en utilisant simultanément un nombre important de processeurs. Ceci nécessite des logiciels de simulation basés sur des algorithmes numériques capables de fonctionner efficacement dans un tel contexte. Le développement et la mise au point d'algorithmes extensibles (dont l'efficacité reste élevée quand le nombre de processeurs augmente) à plusieurs centaines voire milliers de processeurs constituent une partie importante du travail des équipes d'ingénieurs numériques et informaticiens du CEA - DAM.

Dans ce contexte, le projet TERA a pour objectif de mettre à disposition des physiciens et concepteurs du CEA - DAM les équipements de simulation numérique nécessaires au « programme simulation ». L'objectif final est ainsi de disposer en 2010 d'une puissance informatique de 100 Téraflops soutenus avec deux phases intermédiaires en 2001 et en 2005.

## Quelques ordres de grandeur

Un exemple caractéristique des simulations numériques de ce programme est lié à la préparation et l'interprétation des expériences d'implosion de cibles par confinement inertiel destinées à la Ligne d'Intégration Laser (LIL) puis au Laser Megajoule (LMJ) (*figure 1*). Ces expériences nécessitent la réalisation de logiciels de simulation des phénomènes multi-physiques tridimensionnels et instationnaires régissant la physique des plasmas laser. Les tailles des maillages nécessaires à de telles simulations sont au moins de plusieurs dizaines de millions de mailles et pourraient atteindre quelques centaines de millions de mailles. Ceci conduira à produire plusieurs teraoctets de données en sortie d'un seul calcul. Afin de pouvoir obtenir des résultats en un temps acceptable, le logiciel de simulation doit pouvoir s'exécuter sur plusieurs centaines voire plusieurs milliers de processeurs.

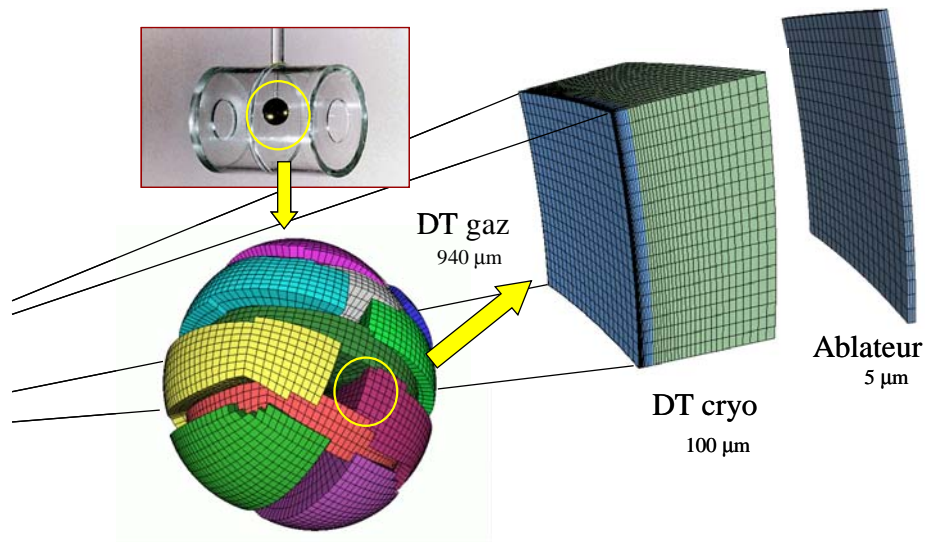


Figure 1 – Cibles laser

## Le projet TERA

Le projet TERA comprend donc trois étapes principales en matière de supercalculateurs (*figure 2*) :

- installation de 1 Téraflops soutenu fin 2001 (TERA-1),
- puis 10 Téraflops soutenus en 2005 (TERA-10),
- enfin 100 Téraflops soutenus en 2009 (TERA-100).

Ce projet couvre à chaque étape la mise en place d'un nouveau supercalculateur fournissant la puissance visée. Il comprend également l'ensemble des actions indispensables pour permettre aux utilisateurs de tirer partie de cette puissance. Ainsi, il est nécessaire à chaque étape :

- de mettre en place un environnement informatique cohérent avec la puissance du supercalculateur (architecture du centre de calcul, moyens de stockage et dispositifs de visualisation et d'analyse des résultats de simulation),
- de veiller au développement à la validation et à l'implantation des codes et des logiciels de simulation sur ces moyens de calcul,
- d'adapter les règles et procédures d'exploitation du centre de calcul permettant de garantir une bonne gestion des ressources.

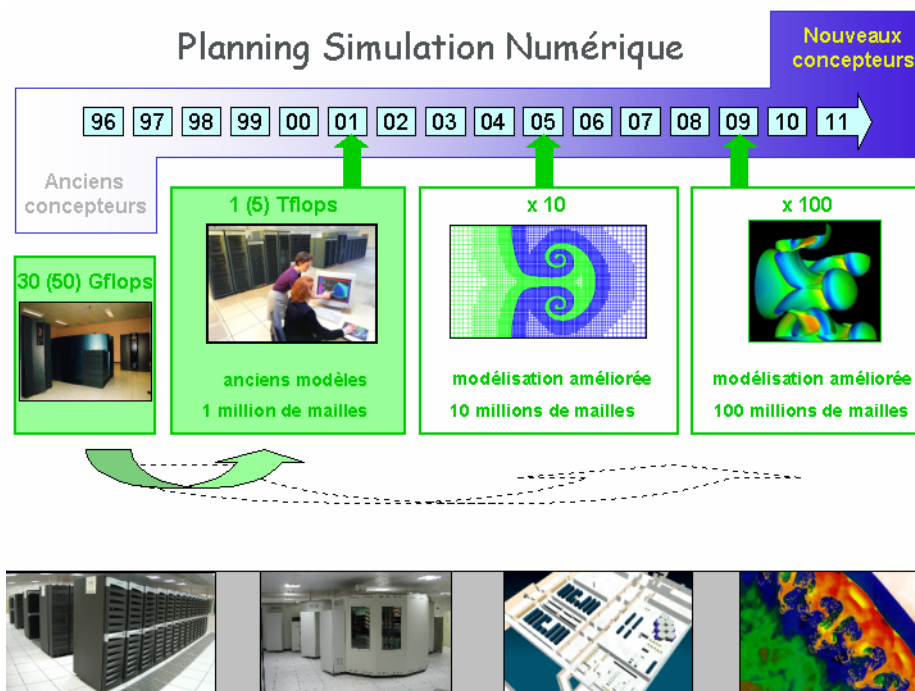


Figure 2 – Le planning du « Programme simulation »

## Supercalculateurs

### L'ARCHITECTURE « CLUSTER DE SMP »

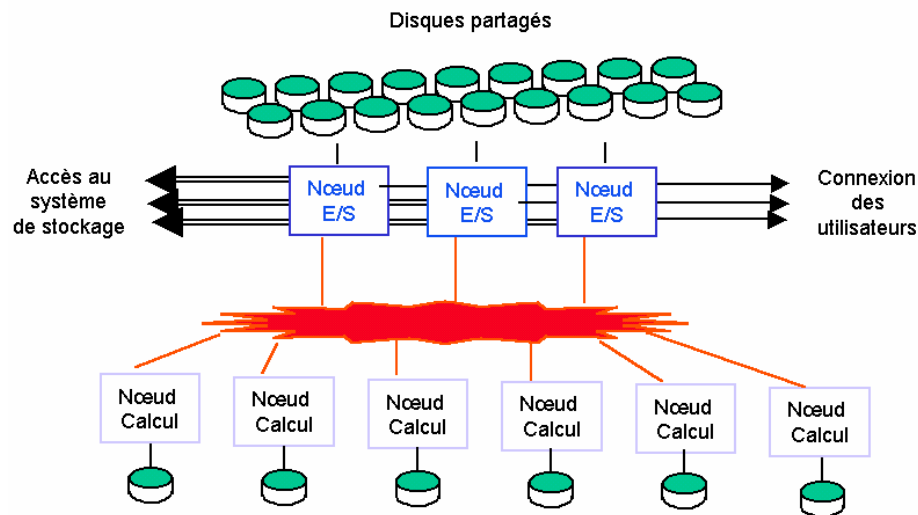
L'architecture retenue pour les supercalculateurs du projet TERA est dite en « Cluster de SMP » (figure 3). Bénéficiant d'un fort soutien de l'industrie informatique, sa pérennité et son extensibilité doivent permettre de conserver la même architecture pendant toute la durée du projet. Fabriquée à partir de composants de grande diffusion, elle permet la réalisation de supercalculateurs d'un bon rapport performance / prix.

La brique de base d'un supercalculateur de type « cluster de SMP » est un mini-ordinateur comportant plusieurs microprocesseurs qui partagent une mémoire com-

mune. Ces briques de base, appelées nœuds, sont reliées entre elles par un réseau d'interconnexion rapide. La puissance cumulée de quelques centaines de ces nœuds atteint actuellement plusieurs Téraflops. Cette puissance est disponible pour une seule application parallèle requérant toutes les ressources du supercalculateur ou pour de multiples applications indépendantes, parallèles ou non, ne nécessitant chacune qu'une partie des ressources. Elle est donc bien adaptée à la diversité des logiciels de simulation du CEA – DAM.

La caractéristique souvent mise en avant pour décrire un supercalculateur est sa puissance de calcul. Cependant l'aspect entrées – sorties est également très important dans la mesure où les grandes chaînes de simulation lisent et produisent de très grands volumes de données. Il faut donc disposer d'un espace disque partagé (*accessible à tous les nœuds de calculs*) offrant une grande capacité de stockage et un débit élevé. Cet espace est typiquement constitué de batteries de disques reliées à des nœuds d'entrées - sorties qui assurent la gestion de ces disques. Afin d'offrir des performances élevées, le parallélisme est employé pour les entrées - sorties comme pour le calcul. Ceci nécessite des systèmes de fichiers globaux parallèles\* autorisant un accès transparent et performant à l'espace disque partagé.

Offrant des puissances de calcul considérables, les « clusters de SMP » posent néanmoins plusieurs défis. Parmi les plus importants, nous citerons la conception et la programmation de logiciels de simulations capables de tirer parti d'un grand nombre de processeurs et la mise au point des systèmes d'exploitation et des logiciels associés, compatibles avec de telles configurations et tolérants aux pannes.



(figure 3)

Figure 3 – Schéma de principe d'un supercalculateur type « cluster de SMP »

## LE SUPERCALCULATEUR TERA-1

Installée en décembre 2001 au CEA – DAM - Île-de-France la machine TERA-1 est composée de 640 nœuds de calcul et possède une puissance de calcul crête de 5 Téraflops. Un nœud, brique de base de TERA-1, est un mini-ordinateur à 4 processeurs Alpha EV68 à 1 Gigahertz qui possède une mémoire de 4 Gigaoctets et fournit une puissance totale de 8 Gigaflops.

Les 640 nœuds (soit 2560 processeurs) sont interconnectés par un réseau rapide conçu par la société Quadrics. L'architecture du réseau d'interconnexion comporte deux étages. Pour des raisons de performance et de tolérance aux pannes, il y a deux réseaux indépendants identiques dans la machine, chaque nœud étant connecté aux deux réseaux. Pour les entrées - sorties, le système de fichiers global offre un espace de stockage de 50 Téraoctets avec une bande passante total de 7,5 Gigaoctets/s.

## Une architecture de centre de calcul distribuée

Précédemment, les systèmes *Cray* assuraient à la fois le service calcul et le service stockage de données. Le passage de cette architecture intégrée à une architecture distribuée, séparant calcul et stockage, a été étudié et validé en parallèle avec l'expérimentation des « Cluster de SMP ». Cette étude a conduit à une nouvelle architecture du centre de calcul, illustrée sur la *figure 4*. Cette architecture est caractérisée par une indépendance entre la partie « serveur de calcul » et la partie « serveur de données », cette dernière étant basée sur le logiciel HPSS [2].

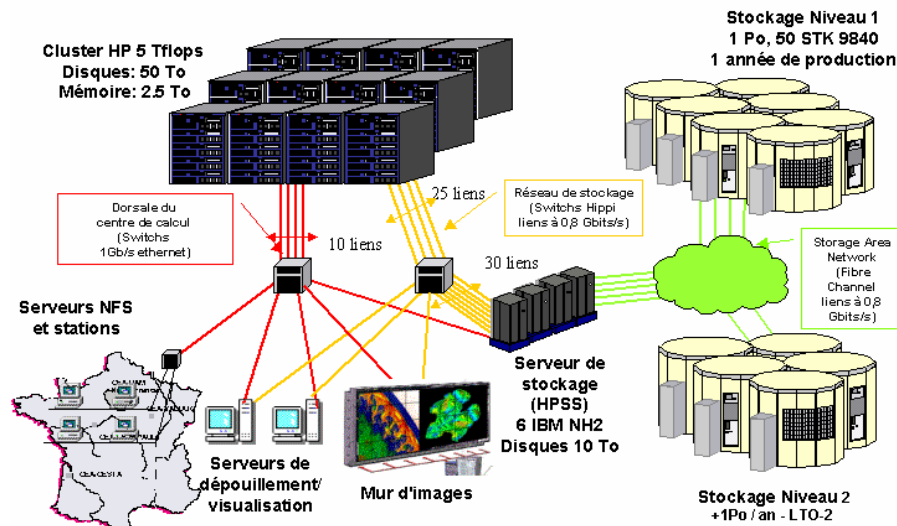


Figure 4 – Architecture du centre de calcul

Pour l'étape TERA-1, compte tenu de la très grande quantité de données à stocker, deux niveaux de stockage sur bande ont été prévus. Le premier supporte une année de production sur des médias rapides (*capacité de 1 Pétaoctets adaptée à la production moyenne de données de 3 Téraoctets par jour de TERA-1*). Le second contient les données plus anciennes sur des médias plus lents mais de capacités plus importantes. Afin de rendre cette architecture aussi transparente que possible pour les utilisateurs, des logiciels ont été développés. Ils assurent de manière automatique la migration des données entre le calculateur et le système de stockage.

Pour permettre d'analyser les résultats des simulations effectuées sur le supercalculateur et contenus dans le système de stockage, un mur d'image a été installé [2]. En outre, un accroissement de la capacité des équipements utilisés pour le dépouillement des calculs a été effectué.

## **Evolution des codes de simulation et des logiciels d'environnement**

Pendant environ 20 ans, les machines de production du CEA - DAM furent des machines vectorielles de type *Cray*. Les codes de simulation et les logiciels d'environnement étaient optimisés pour ces machines. Il a été nécessaire d'améliorer leur portabilité, ce qui a été fait en plusieurs étapes :

- en 1996, avec l'installation d'un *Cray* manipulant des nombres au format IEEE. Cette représentation des nombres dans un ordinateur est adoptée par l'ensemble des constructeurs informatiques, à l'exception de *Cray* qui avait développé son propre standard ;
- en 1997 / 1999, avec une phase d'expérimentation de l'architecture « clusters de SMP » ;
- en 2000 / 2001, sur la machine TERA 1.

Outre l'adaptation et l'optimisation (*parallélisation dans certains cas*) des codes de simulations à l'architecture « cluster de SMP », il a fallu adapter les logiciels d'environnement (pré- et post- traitement, gestion des bases de données, logiciels d'entrées-sorties) à ce type de supercalculateur et à la nouvelle architecture du centre de calcul. De plus les possibilités de dysfonctionnements étant nombreuses dans un ensemble comprenant autant de composants (*matériels et logiciels*), des mécanismes de tolérance aux pannes ont donc été introduits dans ces logiciels d'environnement du CEA - DAM.

Au-delà de l'adaptation des logiciels existants, un effort important est consacré à la réalisation d'un environnement de travail commun à tous les codes de simulation, capable de tirer parti de l'augmentation de la puissance de traitement prévu par le programme.

## **Infrastructures**

Les « clusters de SMP » mettent en œuvre des technologies électroniques refroidies à l'air. Il en résulte un encombrement au sol, une puissance électrique consommée et une dissipation de chaleur dans l'ambiance très importants (de l'ordre de plusieurs MWatts). Un bâtiment exceptionnel a été conçu et réalisé pour accueillir les

équipements informatiques du projet TERA. L'opération a été menée par les équipes d'ingénierie du CEA - DAM.

Ce bâtiment (*figure 5*) comprend deux salles machines. La première, destinée aux calculateurs, a une surface de 1 250 m<sup>2</sup>. La seconde, destinée aux systèmes de stockage, a une surface de 750 m<sup>2</sup>. Ces deux salles sont munies de faux planchers de 1,2 m de hauteur, recevant les câbles de données et d'alimentation électriques tout en préservant l'espace indispensable à la circulation de l'air pour le refroidissement des machines. Avec peu de poteaux, ces salles sont susceptibles de recevoir des équipements encombrants et / ou nécessitant des dispositions particulières, notamment pour minimiser des longueurs de câbles.

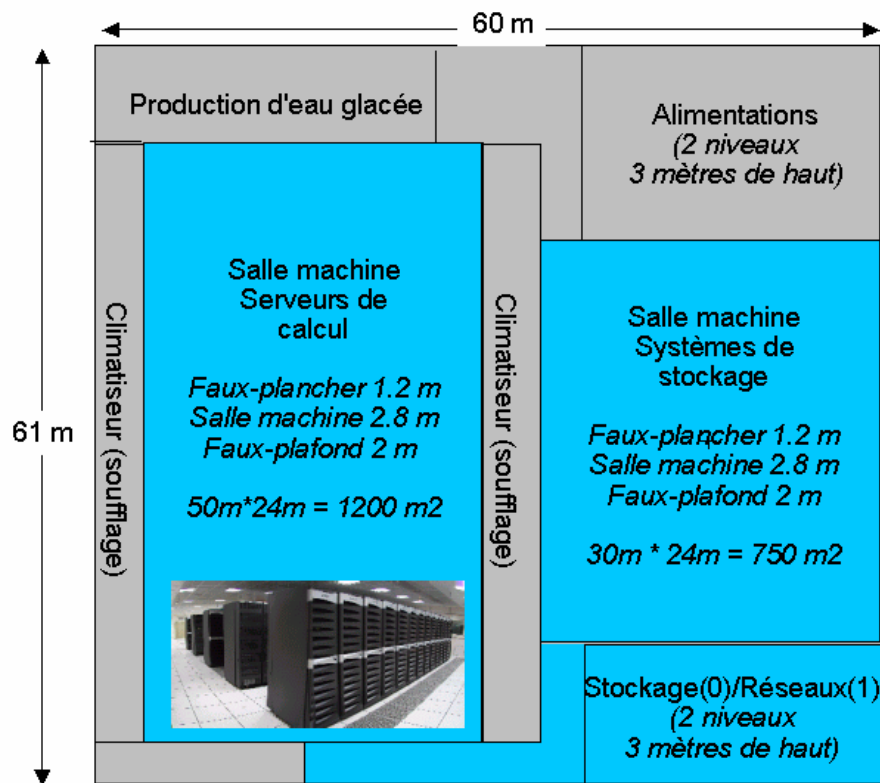


Figure 5 - Plan simplifié du bâtiment TERA

## Gestion des risques et politique d'ouverture

Pour relever les défis scientifiques et techniques de ce programme il est nécessaire de s'appuyer sur la communauté scientifique du calcul scientifique de haute performance. Une politique d'ouverture et de collaborations avec un grand nombre d'équipes académiques ou industrielles est donc activement entreprise.

En effet un projet aussi ambitieux que TERA présente des risques de plusieurs ordres : techniques bien entendu mais aussi organisationnels (*incapacité de maintenir au meilleur niveau les équipes capables de concevoir et de mettre en œuvre de tels systèmes*), financiers (*dérive des coûts*) et politiques (*accès à ces moyens*).

Une manière de minimiser un risque est de le partager. C'est ainsi qu'en 1997, nous avons choisi l'architecture « cluster de SMP », en concertation avec nos homologues américains lancés dans le programme ASCI (*programme destiné à développer et à mettre en place les outils de simulation numérique nécessaires au maintien de l'arsenal nucléaire américain*). La collaboration entre les équipes du CEA - DAM, du Los Alamos National Laboratory, du Lawrence Livermore National Laboratory et du Sandia National Laboratory, a été concrétisée par la signature en mars 2002, par le CEA - DAM et le DOE (*ministère de l'énergie américain*), d'un accord de collaboration sur l'informatique haute performance.

Une autre manière est de collaborer avec les fournisseurs informatiques pour les inciter à continuer à développer une offre dans le domaine des très grands systèmes. A ce titre, des coopérations ont été mises en place avec deux constructeurs informatiques :

- un premier accord a été signé en mars 2002 entre le CEA et la société Compaq (aujourd'hui HP) ;
- un second accord a été établi en décembre 2002 entre le CEA et la société BULL.

De plus, pour pouvoir anticiper les opportunités mais aussi les risques du marché et contribuer au développement des compétences dans le domaine du calcul scientifique haute performance, le CEA - DAM mène, en collaboration avec de nombreuses équipes universitaires des travaux permettant d'étudier en environnement opérationnel des solutions techniques émergentes. Citons notamment l'évaluation de systèmes à base de processeurs Intel 64 bits de nouvelle génération, les nouvelles technologies d'interconnexion comme Infiniband ou 10Gigabit, mais aussi les systèmes parallèles de fichiers, l'optimisation automatique de programme, les bibliothèques de gestion de threads, et les dernières technologies matérielles et logicielles de visualisation des résultats de simulation.

Enfin les experts du CEA-DAM ont aussi pour mission de s'insérer dans les réseaux de compétences afin de contribuer à la résolution de très grands challenges scientifiques. Ceci s'est notamment traduit par des calculs intensifs de comparaison de séquences protéiques au travers de l'initiative *Téraprot* regroupant le Génopôle d'Evry (laboratoire Infobiogen), le CEA-DAM et des entreprises privées. Les résultats de ces calculs sont actuellement à disposition de la communauté internationale sur le Web (<http://www.infobiogen.fr>).

## **Mise en service du calculateur TERA-1**

L'installation de la machine TERA-1 a eu lieu au dernier trimestre 2001. Elle a mobilisé une équipe d'environ 10 personnes pour installer les 170 armoires et les relier par 90 km de câbles. Le 13 décembre 2001 les équipes du CEA - DAM et de Compaq ont obtenu une puissance de 1,39 Téraflopps soutenus, sur un code d'hydro-

dynamique 3D [1], représentatif des applications en production. Au même moment le mur d'images (Mirage) a affiché ses premières images. Cet outil de visualisation préfigure les futurs outils d'analyse des résultats prévus à l'horizon 2005.

TERA-1 a été ensuite ouverte à des utilisateurs « pilotes ». Ceux-ci ont aidé à la mise au point et au réglage des paramètres du système d'exploitation. En juin 2002 ce calculateur était classé à la quatrième place du TOP500, et premier européen. L'ouverture générale en production s'est déroulée au dernier trimestre 2002.

Depuis la fin de l'année 2002, la machine TERA est totalement opérationnelle. C'est l'unique machine de production du CEA - DAM (*taux d'occupation dépassant 80%*). Elle produit chaque jour plus de 3 Teraoctets de données, soit en moins de 10 jours plus de données que celles produites par l'ensemble des machines Cray entre 1981 et 2002.

Parallèlement à l'installation du calculateur, celle des systèmes de stockages associés a été effectuée. Le premier niveau de stockage a été totalement installé en mi-2003 (*1 Pétaoctets*). L'installation du second niveau de stockage a commencé à la fin de 2002 et se poursuivra en fonction des besoins (*montée prévue : 1 Pétaoctet par an*).

## Conclusion

TERA-1, première étape du projet d'équipement informatique de grande puissance prévu par le programme « simulation », est aujourd'hui dans sa phase opérationnelle. La puissance atteinte par certaines de nos applications dépasse le Téraflops. Un environnement matériel et logiciel cohérent avec ce niveau de puissance permet d'en tirer le meilleur parti en production. La deuxième étape a démarré et se traduira par la mise en œuvre, en 2005, d'une machine dix fois plus puissante. Elle contribuera à la validation du futur environnement logiciel de simulation du physicien et concepteur du CEA - DAM

Ainsi pour relever le défi de la *simulation*, la Direction des applications militaires du CEA a décidé de se doter d'un des plus importants complexes de calcul scientifique européen. Avec la mise en place d'une politique d'ouverture et de collaborations, nous pensons que le programme « simulation » représente, par les défis scientifiques qu'il doit relever, un formidable facteur de mobilisation de la communauté scientifique du calcul haute performance.

## Références

[1] B. MELTZ, « Simulation numérique térafloppique en hydrodynamique », revue *Chocs numéro 28 – octobre 2003*,

[2] O. BRESSAND, G. COLIN DE VERDIERE, J.-C. LAFOUCRIERE, J.-P. NOMINE, I. SURIN « Exploitation des résultats de calcul : du stockage à la visualisation des données », revue *Chocs numéro 28 – octobre 2003*



## 9

**CONCLUSIONS**

Au terme des dix premières années de la vie d'ORAP, ce qui frappe le plus l'observateur, c'est peut-être la vitalité du calcul scientifique, de la simulation et du traitement des données. C'est le fait que, lorsqu'on la regarde sur une période assez longue, l'évolution est étonnamment régulière. Nous avons connu une croissance d'un facteur voisin de 500 en 10 ans. Le bon sens dirait : « Les arbres ne montent jamais jusqu'au ciel, la croissance va certainement s'infléchir » ; et pourtant, tout indique que, après que le Téraflops soit devenu un objet de consommation courante (surtout hors de France), le Pétaflops viendra à son heure, et que celle-ci est assez proche.

De son côté, la simulation numérique est complètement entrée dans les mœurs, et figure aujourd'hui parmi les outils incontournables du travail de recherche. Simulation qui nécessite, selon les cas, des architectures moyennes ou extrêmes, des serveurs aussi bien que des réseaux. Lorsqu'elle n'est pas exagérément contrainte par le financement, la pyramide des moyens de traitement se déforme de façon assez homothétique : l'évolution (la sélection des espèces!) travaille pour exclure aussi bien les pyramides sans tête que celles réduites à quelques centres complètement dominants. C'est ainsi que, à côté du « Earth Simulator » ou des machines ASCI est apparue une pléiade de machines à 5 ou 10 Téraflops.

L'évolution française, elle, a visiblement été contrainte. De sorte que chacun s'est efforcé de s'adapter (parfois de façon efficace) à un outil de travail qui prenait progressivement du retard sur le « point moyen » des grands pays scientifiques. Dans ce type d'évolution, le rôle des responsables de la simulation et donc du « problème à simuler » est essentiel. En effet, c'est lorsqu'on définit les projets de simulation qu'on définit également le niveau des ressources nécessaires, en relation avec le niveau d'ambition du projet. Le dialogue entre simulateurs et décideurs, ou plutôt la multitude des dialogues qui se déroulent au sein des organismes, est donc ce qui décide, *in fine*, de l'évolution. Au vu de ce que les divers chapitres ont décrit, on peut estimer que ce dialogue a été moins efficace en France que dans les pays qui sont, aujourd'hui, mieux placés que nous.

Au-delà de ce qu'on peut appeler la « gouvernance » de l'activité de simulation, ou plus généralement du calcul hautes performances, on peut noter que, dans sa gestion même, cette activité ne dispose pas toujours des ressources qui lui seraient nécessaires. En matière d'organisation d'abord : les grands projets bien identifiés et stables sur plusieurs années sont rares. La définition de responsabilités aussi importantes que le choix de l'architecture des codes ou celui des outils matériels et logiciels reste très insuffisante. Le vocabulaire même montre le décalage : alors que certains sont prêts à considérer qu'un centre de traitement est un « Grand Equipement », on ne croit pas nécessaire d'identifier les projets et ceux qui les dirigent. C'est ainsi que les carrières correspondantes sont trop peu attirantes, et que la formation des ingénieurs et chercheurs n'a pas le débouché qui serait nécessaire : un éventail de métiers et de carrières scientifiques de haut niveau.

Ajoutons que l'absence d'une vision stratégique et de la stimulation d'une forte industrie des ordinateurs européenne conduit à considérer les moyens de calculs comme de simples ressources qu'on risque de distribuer sans une réelle vision des projets et sans ambition.

## **Quelques propositions**

Les traitements permis par les ordinateurs de puissance actuels ne peuvent être utilisés à bon escient qu'au prix d'une *maîtrise de la complexité* : complexité de la modélisation, complexité des méthodes mathématiques et algorithmiques, complexité de l'informatique et des techniques de validation. Cela exige un travail d'équipes multidisciplinaires. La constitution de telles équipes doit pouvoir se faire autour d'un projet structuré, qui se donne des objectifs clairs et des jalons.

La capitalisation des connaissances s'effectue de plus en plus dans le logiciel dont il faut alors maîtriser les évolutions et la pérennité. Ce travail à long terme autour des logiciels exige la collaboration d'ingénieurs et de chercheurs, la collaboration des spécialistes de l'application et du génie logiciel.

Une part de l'accroissement des investissements dans le domaine passe par une vision et des objectifs intégrés (accroissement de la base industrielle et technique ; développement de logiciels de base ; pilotage de développements OpenSource ; simulations « frontière », dépassant ce qui correspond au simple état de l'art). Il faut plaider pour une action coordonnée, analogue à ce que font les Etats-Unis avec SCIDAC, qui combine le développement des gros moyens de calcul, des réseaux, des logiciels et codes, des applications. Ces différents éléments se stimulent les uns les autres alors que le saupoudrage d'argent sur des secteurs particuliers au sein d'un environnement défavorable n'aboutit à rien.

Les moyens de calcul doivent être diversifiés : centres nationaux et régionaux généralistes, centres thématiques nationaux ou européens, car, pour les gros utilisateurs, des installations adaptées impliquent une économie et une interaction plus facile entre matériel-logiciel-applications, enfin des moyens locaux dans les laboratoires, typiquement des ordinateurs personnels ou stations de travail. Il faut adapter les moyens aux projets et non l'inverse.

Simultanément, il faut continuer à développer les réseaux et tout le « middle-ware » permettant de les utiliser au mieux : calcul distribué bases de données distribuées, récupération des puissances de calcul dormantes, etc. Il faut profiter des progrès que permettent les « grilles ».

La formation au calcul scientifique doit être démultipliée dans les universités dès les premières années. Une formation devenant plus spécialisée et plus technique devrait être mise en place dans le cadre de la plupart des masters scientifiques et la formation doctorale devrait également intégrer systématiquement des offres de formation en calcul scientifique. Là aussi les spécialistes des applications et les informaticiens devraient collaborer.

La France connaît cette année une vaste et multiple réflexion autour de l'avenir de la recherche. La question du calcul scientifique doit être posée explicitement comme une impérieuse priorité. Le calcul scientifique fait partie des secteurs dans lesquels le retard accumulé par la France est à la fois important et préoccupant. Nous souhaitons que le « Comité d'Initiative et de proposition » des Etats Généraux de la Recherche et de l'Enseignement Supérieur s'empare du problème.

De même que les sciences du vivant, le calcul scientifique pâtit d'une multiplicité d'institutions qui en ont la charge. ORAP, qui a été fondé et s'est développé grâce à la collaboration de ces institutions et d'importantes entreprises, pense qu'une coordination serait nécessaire pour un nouvel essor du calcul scientifique, tout en respectant la multiplicité des solutions adaptées à de multiples problèmes.

Il faut encourager les collaborations internationales et en particulier européennes. Il faut plaider pour que l'Europe ait, dans ce domaine, une véritable politique scientifique et insister pour que les choses se fassent de façon plus souple, plus transparente et moins soumise aux lobbies.

**Le conseil scientifique d'ORAP espère que sa contribution au débat sur la recherche et l'enseignement supérieur sera entendu et que le calcul scientifique sera pris en compte dans la prochaine loi de programmation et d'orientation.**



## GLOSSAIRE

**ACI** : Action Concertée Incitative

**ASCI** : Accelerated strategic computing initiative

**CADAS** : Comité des Applications de l'Académie des Sciences

**CEA** : Commissariat à l'Energie Atomique

**CEA-DAM** : CEA – Direction des Applications Militaires

**CINES** : Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur

**Cluster** : ensemble d'ordinateurs (nœuds) interconnectés pour constituer un système informatique avec une puissance totale théorique égale à la somme de la puissance des nœuds

**CNRS** : Centre National de la Recherche Scientifique

**EPIC** : Etablissement public à caractère industriel et commercial

**EPST** : Etablissement public à caractère scientifique et technologique

**Flops** : unité de puissance de calcul dans le domaine scientifique (abréviation de floating point operation per second). 1 Flops correspond à l'exécution d'une instruction (*portant sur des nombres flottants*) par seconde. Les multiples suivants sont plus usités : 1 Gigaflops (*Gflops*) = 1 milliard de flops ; 1 Téraflops (*Tflops*) = 1000 Gflops.

**Grid Computing** : coordination, pour la résolution de problèmes, de l'accès à des ressources distribuées et partagées dans des organisations virtuelles, dynamiques, multidimensionnelles (essai de définition, d'après Ian Foster)

**IDRIS** : Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique

**IN2P3** : Institut National de Physique Nucléaire et de Physique des Particules

**INRIA** : Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique

**Logiciel d'environnement** : Logiciel assurant les fonctions de pré-traitement (préparation du calcul), post-traitement (dépouillement et visualisation des résultats) et/ou de gestion des données pour le compte d'un code de simulation.

**Logiciel de simulation** : désigne dans ce document à la fois un logiciel d'environnement et un code de simulation.

**Machine de production** : Dans ce document, désigne un équipement informatique utilisé pour leur travail quotidien par les physiciens et concepteurs du CEA – DAM.

**MPP** : Massively Parallel Processing

**Nœud** : Ordinateur élément de base d'un cluster.

**Octet** : unité de stockage de données. 1 Octet correspond à 8 bits et permet de stocker 1 / 8 de nombre flottant ou 1 caractère. Les multiples suivants sont plus utilisés : 1 Gigaoctet (*Go*) = 1 milliard d'octets, 1 Téraoctet (*To*) = 1 000 Go, 1 Pétaoctet (*Po*) = 1 000 To.

**Parallèle** : système informatique mettant en œuvre le parallélisme ou logiciel informatique capable de tirer parti d'un tel système.

**Parallélisme** : Agrégation d'entités élémentaires pour obtenir un système ayant des performances ou capacités supérieures à la performance ou à la capacité d'une seule entité (idéalement : la somme des performances ou des capacités).

**PCRDT** : Programme Cadre (européen) de Recherche et Développement Technologique

**Peer-to-Peer (P2P)** : architecture distribuée à architecture d'égal à égal

**RENATER** : Réseau National de Télécommunications pour la Technologie, l'Enseignement et la Recherche

**SMP** : Symetric Multi-Processing ou ordinateur multiprocesseur à mémoire partagée.

## AUTEURS – REMERCIEMENTS

La rédaction de cet ouvrage a été pilotée par le conseil scientifique d'ORAP. Les principales contributions sont citées ci-dessous.

Introduction	Claudine Schmidt-Lainé et Paul Caseau.
Chapitre 1	Stéphane Cordier. Remerciements à Violaine Louvet et Thierry Dumont (Maply, CNRS, Lyon).
Chapitre 2	Paul Caseau, avec les contributions de Pierre Perrier et A Pineau (Académie des Technologies).
Chapitre 3	Marie-Madeleine Rohmer et Serge Petiton, avec les contributions de Marie-Alice Foujols (IPSL, Paris) et Jean-Yves Berthou
Chapitre 4	Olivier Pene, avec les contributions de Jean-Claude André, Jean-Loïc Delhayé, Serge Petiton. Remerciements à He Haiwu pour l'aide qu'il a apportée dans la rédaction de la partie concernant la Chine.
Chapitre 5	Jean-Loïc Delhayé, avec la contribution de Thierry Priol.
Chapitre 6	Jean-Loïc Delhayé.
Chapitre 7	Gérard Roucairol.
Chapitre 8	Jean-Yves Berthou et Jean-François Hamelin (EDF) ; Jean Gonnord, Pierre Leca, François Robin (CEA-DAM) ; avec les contributions de Christian Saguez et de Guillaume Alléon.

