

Préface du président du CNRS

Le calcul intensif et son écosystème (moyens de calcul, de communication et de stockage, traitement et exploitation des données...) sont au cœur de la plupart des avancées de la recherche au sein du CNRS comme dans l'ensemble de la communauté scientifique. Les enjeux ne sont pas seulement scientifiques mais aussi sociétaux, économiques, financiers et éthiques.

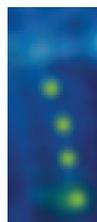
L'ensemble des instituts du CNRS est concerné par la simulation numérique ou le traitement des grands volumes de données, en vue, par exemple, de modéliser des systèmes complexes ou d'exploiter des données en sciences de la vie.

L'exercice qui consiste à analyser et à cartographier l'utilisation du calcul intensif au sein des instituts du CNRS permet d'identifier les forces et les faiblesses de notre organisme et amène à plusieurs constats dont certains n'étaient pas immédiats :

- Les pratiques liées au calcul intensif telles que répertoriées dans ce livre blanc concernent plus de 2 500 chercheurs et enseignants-chercheurs au sein du CNRS, soit l'une des plus importantes communautés en Europe.
- Le «Big Data» qui est, depuis peu, considéré comme le quatrième pilier de la science moderne (le troisième étant constitué par la modélisation et la simulation), est devenu un enjeu majeur dont les divers aspects ne sont pas encore bien pris en compte.
- Les besoins ne sont pas satisfaits dans toutes les disciplines et de multiples avancées dépendent encore de l'évolution des ressources informatiques.

Maîtriser tous les aspects du calcul intensif requiert un travail par essence interdisciplinaire, reposant sur la connaissance d'un domaine applicatif et un savoir-faire en modélisation, simulation numérique et exploitation de l'outil informatique, dans lequel un organisme de recherche tel que le CNRS se doit par nature d'exceller.

Alain Fuchs
Président du CNRS



Sommaire

LE CALCUL INTENSIF : SYNTHÈSE	4	2. 5. Institut de physique (INP)	23
RECOMMANDATIONS	5	2.5.1. Les thématiques du calcul haute performance à l'INP.....	23
1. INTRODUCTION	6	2.5.2. Enjeux, défis et besoins à moyen terme.....	23
2. LE CALCUL INTENSIF AU SEIN DES INSTITUTS DU CNRS	8	Annexe : Liste des laboratoires de l'INP.....	25
2. 1. Institut de chimie (INC)	8	2. 6. L'institut national des sciences de l'Univers (INSU)	27
2.1.1. Les thématiques de la chimie théorique en France.....	8	2.6.1. Les thématiques scientifiques du calcul intensif à l'INSU.....	27
2.1.2. Les enjeux, les défis et les besoins à moyen terme.....	8	2.6.2. Enjeux et défis méthodologiques du calcul à l'INSU.....	28
2.1.3. Demande et satisfaction de la chimie en moyens de calcul haute performance.....	9	2.6.3. Enjeux algorithmiques et logiciels.....	29
Annexe : Liste des laboratoires de chimie théorique.....	9	2.6.4. Enjeux en termes d'infrastructures et de politique pour le calcul intensif.....	29
2. 2. Institut des sciences de l'information et de leurs interactions (INS2I)	12	Annexe : Liste des principaux laboratoires impliqués dans le calcul intensif.....	30
2.2.1. Le calcul haute performance au sein d'INS2I.....	12	2. 7. L'Institut national de physique nucléaire et de physique des particules (IN2P3)	32
2.2.2. Les infrastructures distribuées à grande échelle.....	12	2.7.1. Présentation générale du Centre de Calcul de l'IN2P3 (CC-IN2P3).....	32
2.2.3. Le traitement des grandes masses de données.....	13	2.7.2. Configuration actuelle du CC-IN2P3.....	32
Annexe : Liste des équipes ou équipes-projets au sein de l'INS2I.....	14	2.7.3. La chromodynamique quantique sur réseau (LQCD).....	33
2. 3. Institut des sciences de l'ingénierie et des systèmes (INSIS)	16	2.7.4. Le CC-IN2P3 et la recherche informatique.....	33
2.3.1. Introduction/État des lieux.....	16	2.7.5. Le CC-IN2P3 et les grilles.....	33
2.3.2. Enjeux et défis.....	16	2.7.6. Les clouds et l'ouverture pluridisciplinaire.....	33
2.3.3. Les principaux acteurs.....	18	2.7.7. Moyens informatiques dans les laboratoires de l'IN2P3.....	34
2. 4. Institut national des sciences mathématiques et de leurs interactions (INSMI)	19	2. 8. L'Institut des grilles et du cloud (IDGC)	35
2.4.1. Les thématiques de recherche mathématiques en France en relation avec le calcul haute performance.....	19	2.8.1. France grilles.....	35
2.4.2. Les enjeux, les défis et les besoins à moyen terme.....	19	2.8.2. Grilles de production : utilisation et impact scientifique.....	35
Annexe : Liste des laboratoires de mathématiques.....	20	2.8.3. Perspectives : de la grille vers le cloud.....	36

2. 9. L'Institut du développement et des ressources en informatique scientifique (IDRIS)	37	3. Le contexte international pour le calcul intensif	39
2.9.1. Présentation.....	37	3. 1. Le calcul intensif en Europe : les projets européens.....	39
2.9.2. Configuration actuelle de l'IDRIS.....	37	3. 2. Le calcul intensif au Japon.....	40
2.9.3. Utilisation des ressources de l'IDRIS.....	38	3. 3. Le calcul intensif aux États-Unis.....	42
		4. CONCLUSION	43



Le calcul intensif : synthèse

1. Les pratiques liées au calcul intensif telles que répertoriées dans ce livre blanc concernent plus de 2 500 chercheurs et enseignants-chercheurs au sein du CNRS soit l'une des plus importantes communautés en Europe (et sans doute au niveau mondial).
2. La simulation numérique est au cœur de la plupart des avancées actuelles au plan mondial. Le calcul intensif est redevenu un enjeu stratégique (UE, USA, Japon, Chine...). En Europe, le partenariat européen PRACE a été créé pour permettre à l'Europe d'avoir une place mondiale compétitive. En France, GENCI, société civile dont le CNRS dispose de 20 % des parts, a été créée en 2007 pour rattraper le retard français en matière de supercalculateurs disponibles pour les scientifiques français et pour être le représentant français dans PRACE. L'implication sur la durée du CNRS dans GENCI, qui est aussi le coordinateur du projet d'équipement calcul haute performance (HPC) des centres régionaux (Equip@meso), est fondamentale afin de disposer des meilleures infrastructures HPC nécessaires aux besoins du CNRS.
3. Le calcul intensif est une activité transverse au sein du CNRS inhérente aux pratiques de la plupart des Instituts que ce soit sur les aspects simulation numérique, méthodes et outils, mais aussi ceux liés à l'émergence du traitement sur les grands volumes de données. L'exploitation de ces masses de données (le « Big Data »), qui est depuis peu considérée comme le quatrième pilier de la science moderne (le troisième étant la simulation), est devenue un challenge majeur.
4. Dans la plupart des domaines, les défis d'aujourd'hui concernent la modélisation de systèmes complexes avec l'objectif de traiter mieux et de manière plus précise des systèmes plus grands et de plus en plus complexes. Par essence, les phénomènes que l'on doit modéliser sont complexes, couplés, multi-physiques et multi-échelles, que ce soit en espace (de la taille de la molécule à celle du système) ou en temps. Les problèmes de visualisation et de traitement de grandes masses de données sont aussi au cœur des préoccupations, de même que la quantification de l'incertitude. Le développement de nouvelles méthodes probabilistes et stochastiques permettant de prendre en compte et de quantifier les incertitudes, directes et inverses, ainsi que les événements extrêmes, doivent faire l'objet de réelles avancées.
5. La possibilité de couplage de codes de nature différente ouvre des perspectives nouvelles pour aborder des phénomènes multi-physiques complexes en tirant parti des acquis de chacune des disciplines concernées, ce qui requiert la convergence de compétences disciplinaires tant dans l'établissement des modèles que dans celui du développement des codes. Il s'agit donc de favoriser la pluridisciplinarité et la complémentarité des expertises pour une plus grande efficacité d'utilisation des ressources matérielles, logicielles et numériques.
6. Le développement de méthodes innovantes de traitement et d'analyse des données est une priorité scientifique. Ces données sont issues des systèmes d'observation, des grands instruments et des simulations numériques. Afin d'en extraire des informations nouvelles, des méthodes performantes d'imagerie, d'inversion et d'assimilation de données permettant de contrôler et de confronter ces modèles aux observations sont devenues essentielles. Si la puissance de calcul et des capacités de stockage évoluent rapidement, la bande passante des E/S séquentielles et des réseaux de communication, ainsi que leurs latences et coûts, ne permettent plus de suivre la vitesse d'évolution des volumes des données. Ceci implique la nécessité de penser une nouvelle architecture et urbanisation des infrastructures de données, en synergie avec les centres de données et les diverses entités produisant les données.
7. La préparation des codes face aux évolutions actuelles (passage à l'échelle, programmation, hétérogénéité des architectures avec les processeurs multi-cœurs, apparition récente d'accélérateurs de type GPU) est devenue cruciale. Constituer des communautés autour de ces codes pour assurer leur pérennité est un élément important. Bien évaluer les coûts de conception/développement des applications reste essentiel. La collaboration entre spécialistes des applications, informaticiens, mathématiciens et numériciens est indispensable, le « co-design » étant l'un des moyens d'exploiter au mieux les architectures novatrices.
8. Quelques communautés ont des codes pouvant exploiter dès aujourd'hui un parallélisme à haut degré (jusqu'à 300 000 cœurs) par exemple en combustion, astrophysique et géophysique. Mais les besoins en matière de calcul de certaines communautés ne sont pas toujours satisfaits par les allocations d'heures sur les centres nationaux et via les appels à projets européens. Par ailleurs, un accès très flexible aux centres de calcul et aux clusters régionaux pour tester de nouvelles méthodes numériques, bien en amont de les mettre « en production », est indispensable.
9. Les besoins en moyens humains, bien formés, pour la parallélisation de codes existants, le développement de nouveaux outils (de programmation permettant de s'adapter aux évolutions architecturales et à la communication entre codes de calcul, de gestion/exploitation/visualisation des grands volumes de données, de gestion performante des E/S...) sont criants, d'où l'importance de la formation. Nous proposons la mise en place de programmes/diplômes de formation en HPC, aux niveaux master et doctorat en commençant la sensibilisation dès le niveau de licence (voire plus tôt comme au Japon). La formation et le recrutement de spécialistes HPC en prise avec les applications sont de réels enjeux de même que le rôle des méso-centres et des centres nationaux. Le CNRS doit être un acteur majeur au sein de ces réflexions.
10. La préservation des données et la problématique de l'accès à moyen et long termes doivent être considérées comme de nouveaux paradigmes et pris en compte de manière durable dans les programmes scientifiques.
11. L'émergence des clouds scientifiques basés sur des techniques de virtualisation permet d'envisager de créer des infrastructures informatiques beaucoup plus souples et accessibles à l'ensemble des communautés scientifiques qui répondent à un certain nombre de besoins (e.g. analyse sur les données).



Recommandations

1. Le CNRS devrait contribuer à la mise en place d'une approche holistique intégrant tous les aspects de la simulation des systèmes complexes : nouvelles méthodes d'exploration et d'analyse statistique de données, de simulation et de modélisation numérique, nouveaux modèles d'algorithmique et de programmation parallèle, nouvelles architectures et urbanisation des infrastructures de calcul et de données. Les avancées scientifiques et l'innovation dans de multiples domaines (dont ceux des sciences de la vie et de l'environnement en pleine explosion actuellement et sans doute rapidement celui des sciences humaines et sociales) dépendent de manière cruciale d'une politique du CNRS, et d'un renforcement des capacités des infrastructures pour le calcul et l'analyse de données. Cette nouvelle politique, et stratégie, au niveau du CNRS doit s'appuyer sur l'ensemble des expertises et des acquis du CNRS dans les domaines du calcul intensif et des données au travers des différents Instituts. Elle doit faire émerger une urbanisation des infrastructures de calcul et de données, intégrant HPC, grilles, cloud et les grands centres de données des Instituts s'insérant dans le contexte national et européen. Elle pourra s'appuyer sur les acquis de l'IDRIS, de l'IdGC, du CC-IN2P3 et des divers instituts et communautés en son sein.
2. De par son rôle central, le CNRS doit contribuer à la promotion du calcul intensif à tous les niveaux (centres nationaux, méso-centres) et continuer à s'impliquer fortement dans GENCI dont il est un des partenaires majeurs... Il doit aussi contribuer à une réponse face à l'émergence rapide d'un fort besoin en matière de stockage/traitement sur les grands volumes de données éventuellement délocalisés.
3. Aux niveaux Tiers-0 et Tiers-1, la contribution du CNRS au sein de GENCI est essentielle afin de mieux prendre en compte les besoins des équipes de différents Instituts. Il est tout aussi important de renforcer l'IDRIS, au-delà d'un rôle d'opérateur de ressources, en tant que pôle d'expertise et de soutien, en synergie avec la Maison de la simulation, aux communautés scientifiques et à leurs grands projets ANR et européens.
4. Au niveau Tiers-2, il est indispensable de maintenir un équilibre de ressources. Cela ne pourra se faire sans une politique active du CNRS, en synergie avec les grands pôles universitaires émergents, les communautés scientifiques et des projets structurants tel Equip@meso.
5. Le CNRS doit veiller à :
 - préserver l'évolution rapide des moyens de calcul et plus particulièrement ceux des centres nationaux avec une montée en puissance planifiée des calculateurs haute performance ;
 - préserver la diversité et la complémentarité des architectures afin de répondre aux besoins des différents domaines ;
 - préserver la possibilité d'utiliser une partie des potentialités de ces centres pour expérimenter de nouvelles architectures ;
 - promouvoir le développement d'infrastructures du type grilles ou cloud de calcul pour le calcul intensif distribué et le traitement des grands volumes de données lorsque cela correspond aux besoins des communautés ;
 - promouvoir la mise en place d'infrastructures matérielles ou logicielles permettant de mutualiser les efforts au sein de communautés bien ciblées ;
 - promouvoir tous les aspects liés à la sauvegarde, à la distribution et à la maintenance des codes de calcul scientifique et du patrimoine logiciel développés dans toutes les unités du CNRS (des actions/réflexions autour de cette problématique existent : PLUME Groupe Calcul, initiatives du type GFORGE...) ;
 - développer la réflexion autour de la reconnaissance et de l'évolution des carrières au sein du CNRS est essentielle (voir par exemple le rapport sur l'étude des métiers de l'informatique en appui à la recherche <http://www.sg.cnrs.fr/drh/omes/documents/pdf/etude-metiers-bap-e.pdf>) ;
 - instaurer une politique pro-active de création de postes d'ingénieur de recherche en calcul haute performance.
6. Le CNRS a en son sein tout l'écosystème du calcul intensif : PRACE au travers de GENCI, IDRIS, CC-IN2P3, Institut des grilles et du cloud, recherche, interaction avec les méso-centres (GDR Calcul, UMR...) ainsi que toute la diversité des besoins/pratiques (HPC, grilles, cloud, grands volumes de données...). Pour cette raison et du fait de son caractère interdisciplinaire, le CNRS doit assumer son rôle d'acteur majeur dans le domaine aux niveaux national et international.
7. Les échanges entre les communautés HPC/grilles/cloud sont importants, de même que la synergie entre les acteurs du HPC (CNRS, CEA, GENCI, Inria, Maison de la Simulation, universités...). En cela, le CNRS a un rôle majeur à jouer.
8. L'IDRIS est un service central pour le CNRS qui doit capitaliser son expertise et réfléchir à une stratégie autour de l'IDRIS en cohérence avec la politique mise en œuvre par GENCI autour des centres nationaux, définir une politique de moyens ainsi que les liens avec la communauté grilles/cloud et l'exploitation des grands volumes de données... Dans cet esprit, la localisation au CNRS de l'IDRIS, de l'Institut des grilles et du cloud et du CC-IN2P3 est un atout très fort que nous devrions encore mieux exploiter.
9. La Maison de la simulation peut contribuer à dynamiser les activités menées en lien avec l'IDRIS, à rapprocher l'IDRIS des utilisateurs autour de nouveaux projets ambitieux à la pointe de la recherche HPC et ainsi accroître la visibilité du centre. De par ses missions, elle peut participer à l'élargissement du nombre d'équipes pluridisciplinaires, au développement et à la pérennisation d'outils pour le HPC.



1. Introduction

Ce livre blanc a été réalisé en 2011 à partir de données collectées au travers des divers instituts de recherche du CNRS mais également d'informations issues des rapports d'activités, sites Web et rapports AERES disponibles.

Ce rapport vise à effectuer une synthèse relative à l'utilisation du calcul intensif au sein des instituts du CNRS et aux recherches qu'il permet de développer. Deux domaines étroitement liés au calcul intensif sont aussi abordés : les infrastructures distribuées à grande échelle et l'exploitation des grands volumes de données issues de simulations numériques de grande taille ou issues d'observations, nécessitant des traitements coûteux pour l'extraction d'information.

Cette étude sera réactualisée périodiquement (tous les deux ans) et permettra à terme de collecter les données de tous les instituts du CNRS.

Ce rapport permet d'avoir une vue synthétique des grandes thématiques et du nombre de chercheurs/enseignants-chercheurs par institut.

Les enjeux liés au calcul intensif pour la modélisation et la simulation numérique dans de multiples domaines sont colossaux et ne sont effectivement pas seulement scientifiques. Ils exercent également un impact considérable aux plans sociétal (e.g. énergie, santé, environnement), économique et financier (e.g. compétitivité industrielle) et éthique (e.g. biologie). La modélisation et la simulation apparaissent de plus en plus comme des outils d'aide à la décision pour un certain nombre de situations critiques.

La complexité croissante des modèles s'explique par la prise en compte à la fois (i) de phénomènes non-linéaires couplant différentes physiques et différentes échelles spatiales et temporelles, (ii) de la grande dimension inhérente à la résolution des modèles étudiés et/ou (iii) de données réelles généralement de très grandes tailles et bruitées. La modélisation et la simulation doivent dorénavant prendre en considération les incertitudes épistémologiques et aléatoires afin de refléter le monde physique et de permettre à terme de supporter les décisions ; cela se traduit dans un premier temps par la quantification des incertitudes (i) dans les modèles et les simulations numériques et (ii) des marges des systèmes, puis dans un deuxième temps, par l'optimisation de ces systèmes sous incertitudes.

Le calcul intensif est donc redevenu un thème crucial et la recommandation 2 du Comité stratégique du calcul intensif en 2009/2010 le souligne : « Il est donc essentiel d'aider les chercheurs du calcul haute performance, d'abord en leur donnant la reconnaissance qu'ils méritent et surtout les moyens de faire grandir leurs équipes et de diffuser leur savoir-faire ». De même, la recommandation 5 relève les efforts de formation et d'interaction entre les communautés : « Une puissance multi Pétaflopique sera nécessaire à l'horizon 2015 pour lever certains verrous technologiques. Pour s'y préparer il faudrait renforcer les équipes sur la simulation. Le recrutement des chercheurs ayant la triple compétence physique/calcul haute performance/informatique est un problème qui nécessite un effort de formation à long terme. ».

La maîtrise de tous les aspects du calcul haute performance, afin d'aborder la résolution de ces modèles complexes, est donc incontournable. De plus, la demande de puissance de calcul est dans certains

domaines continuellement aux limites de la technologie. On utilise le terme de Pétaflops pour évoquer les besoins actuels et d'Exaflops d'ici quelques années.

Cette évolution constante des besoins induit de multiples préoccupations liées à la consommation énergétique (de l'ordre de 50-100 MW pour des machines exaflopiques avec pour objectif de se limiter à 20 MW), au problème de la tolérance aux pannes (qui deviennent fréquentes avec des architectures composées de plusieurs centaines de milliers de cœurs), au besoin souvent évoqué de nouveaux langages pour exprimer le parallélisme massif, mais aussi au support d'exécution, à la gestion de l'énergie... L'amélioration du ratio performance/consommation a amené les constructeurs à développer les approches multi-cœurs et à considérer l'utilisation d'accélérateurs de calcul du type GPU en attendant que ces accélérateurs soient intégrés aux futurs processeurs.

L'impact sur le développement des logiciels est énorme : passage à l'échelle des applications, approches algorithmiques permettant de tirer parti de plus de 100 000 cœurs, utilisation de nouveaux paradigmes de programmation, tolérance aux fautes, disponibilité de bibliothèques de calcul optimisées... deviennent des problématiques critiques. Le développement de codes efficaces et leur préparation aux nouvelles architectures deviennent cruciaux et parfois coûteux (utilisation de CUDA ou OpenCL...) et nécessitent la coopération de spécialistes du HPC et des applications. Le co-design (développement des codes au plus près des architectures) devient une priorité par exemple pour le « Department Of Energy » (DOE aux USA) et ne fait que souligner le manque de spécialistes du HPC et de la modélisation aptes à travailler au plus près des grands domaines scientifiques (besoins en formation, unités de recherche multi-disciplinaires...). La constitution de communautés autour de « grands » codes de simulation comme dans certaines disciplines devient une priorité.

Depuis plus de dix ans, les infrastructures distribuées à grande échelle dont les grilles informatiques et maintenant le « cloud » font l'objet d'une attention considérable aussi bien en Europe qu'aux États-Unis et au Japon. Les grilles sont déjà largement utilisées par la communauté scientifique pour mener à bien des activités de production (e.g. analyse des données du LHC). De multiples domaines scientifiques ont depuis démontré leur intérêt pour ce paradigme en sciences du vivant, de la planète et de l'Univers, à la fois avec des grilles orientées vers le traitement de données et des grilles de calcul, comme indiqué dans le rapport du Comité stratégique du calcul intensif : « Les grilles de calcul sont aussi des outils pour la simulation de puissance. Par exemple, les connaissances « grilles » pour l'archivage des données et leur mise à disposition pouvaient profiter à plusieurs communautés dont celle du HPC. ».

Le traitement des données massives issues ou non de la simulation numérique, avec des sources de données éventuellement multiples, distribuées/réparties à grande échelle, et hétérogènes (structures, formats, logiciels, serveurs...) et une volumétrie en données allant du Toctets au Poctets (et à l'Exaotets dans un futur proche) est devenu fondamental. Il en résulte des problématiques autour de la gestion de ces données (indexation, stockage local ou distant avec bases de données centralisées ou distribuées, entrepôts de données, virtualisation du stockage...), du traitement de ces données avec de l'extraction de connaissances sur des infrastructures souvent distribuées (fouille de données, classifica-

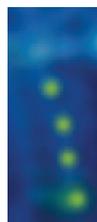
tion, assimilation de données...) et enfin du post-traitement permettant d'exploiter/visualiser ces informations.

Tirer parti de manière efficace de toutes ces évolutions requiert donc des efforts sur (entre autres) :

- La conception/l'exploitation efficace des futures architectures (hardware, système, support d'exécution) avec la généralisation du

parallélisme et de l'hétérogénéité.

- L'impact des technologies du type GPU ou cloud computing.
- La maîtrise du passage à l'échelle.
- La modélisation/les méthodes numériques/les algorithmiques avec la conception de codes et de bibliothèques de calcul adaptées.
- Le traitement des grandes masses d'informations.



2. Le calcul intensif au sein des instituts du CNRS

2.1. Institut de chimie (INC)

Le calcul HP à l'INC est rassemblé dans un réseau disciplinaire autour de la chimie théorique, de ses concepts, de ses méthodes et de ses traitements par simulation numérique.

Cette communauté compte environ 260 chercheurs et enseignants-chercheurs et 140 doctorants, regroupés dans près d'une trentaine de laboratoires universitaires totalement ou partiellement dédiés à la chimie théorique (voir la liste de ces laboratoires à forte composante théorique en annexe), ainsi qu'un grand nombre de laboratoires appartenant à divers organismes et des chercheurs dispersés dans des laboratoires à spectre plus large.

2.1.1. Les thématiques de la chimie théorique en France

La chimie théorique est aujourd'hui une discipline très recherchée dans la mesure où la chimie s'attache de plus en plus à comprendre et à expliquer les principales étapes et les mécanismes mis en jeu dans les phénomènes chimiques complexes étudiés. Longtemps limitée à ces aspects descriptifs et explicatifs, la chimie théorique apparaît aujourd'hui comme une discipline prédictive permettant de guider l'expérimentation voire de la remplacer grâce aux moyens de simulation numérique qu'elle développe au travers du calcul intensif haute performance.

Il existe actuellement en France une grande diversité de thématiques largement ouvertes au niveau international. En effet, les systèmes étudiés comportent aussi bien les molécules isolées que les systèmes périodiques, les agrégats et les systèmes complexes (milieu condensé peu ou pas organisé, macro-molécules d'intérêt biologique ou technologique) et les modes d'approche incluent à la fois les théories de base, la méthodologie des calculs et le développement de simulations en relation avec des problèmes spécifiques de physico-chimie (spectroscopie, dynamique réactionnelle, réactivité, propriétés optiques...).

2.1.2. Les enjeux, les défis et les besoins à moyen terme

Tendre vers une chimie prédictive et atteindre la « précision expérimentale » nécessitent généralement la description la plus adéquate possible des modèles, le choix des méthodes les plus sophistiquées pour les traiter, la plus grande précision possible des calculs numériques générés... C'est aussi donner à des objets sous étude une description spatiale (Å, nm, µm) et temporelle (10-15s ; 10-9s, 10-6s...).

L'évolution générale de la chimie théorique tend vers l'usage de méthodes multiples couplées au développement d'approches multi-échelles allant de l'électronique, à l'atomistique, jusqu'au mésoscopique (coarse graining), voire le macroscopique.

La communauté des chimistes théoriciens embrasse aujourd'hui l'ensemble de ces préoccupations avec un penchant encore très marqué

pour des approches de chimie quantique et de dynamique moléculaire. La modélisation moléculaire basée sur la mécanique statistique a fait une entrée remarquable ces dernières années dans les préoccupations de cette communauté où elle a permis des avancées spectaculaires dans la connaissance des propriétés des semi-conducteurs, des liquides, des sels fondus...

Pour ces domaines, les défis concernent aujourd'hui la modélisation de systèmes complexes (taille, environnement, hétérogénéité, processus réactionnels complexes, dynamique longue, systèmes loin de l'équilibre...) avec l'objectif de traiter mieux et de manière plus précise des systèmes plus grands et de plus en plus complexes. Cet outil de modélisation s'ouvre de plus vers de nombreuses disciplines connexes à la chimie : biologie moléculaire, science des matériaux, fluides complexes, géochimie. Le fait de lever les verrous et réussir cette mutation demandent à la fois :

- La convergence de compétences disciplinaires aussi bien pour établir des modèles que pour développer des codes.
- L'évolution rapide des moyens de calcul et plus particulièrement ceux des centres nationaux avec une montée en puissance planifiée des calculateurs haute performance.
- La possibilité d'utiliser une partie des potentialités de ces centres pour expérimenter de nouvelles architectures.
- Le développement de grilles de calcul particulièrement adaptées au calcul intensif distribué.
- La mise en place d'un centre européen pour mener à bien des projets coordonnés de « grande envergure » et le renforcement par la chimie de la Grille européenne de simulation numérique.

2.1.3. Demande et satisfaction de la chimie en moyens de calcul haute performance

Les demandes de la communauté des chimistes en moyens de calcul haute performance se font essentiellement au travers de la commission thématique 8 (CT8) « Chimie quantique et modélisation moléculaire » bien que des demandes, en nombre plus limité, émergent aussi dans les commissions « Systèmes moléculaires organisés et biologie » (CT7) et « Propriétés des matériaux » (CT9).

La communauté des chimistes relevant de la CT8 est la deuxième en termes de projets déposés (103 sur 568 en 2011). Si la grande majorité des projets sont des renouvellements, il faut noter aussi que 20 % d'entre eux sont nouveaux et correspondent souvent à de nouvelles orientations thématiques.

Sur les 38 millions d'heures demandées (33 millions équitablement répartis entre IDRIS et CINES ; 5 millions CCRT) la très grande majorité nécessite des moyens de calcul de type cluster MPP (12 millions h) et SMP nœuds fins (20.5 millions h), le reste se répartissant essentiellement sur des clusters de type SMP nœuds larges.

Les taux de satisfaction des demandes dépendent en partie de l'évaluation (60 % de dossiers AA et 40 % de dossiers AB) mais surtout de la pression exercée par les autres demandes des 10 commissions thématiques, ramenant à 50 % environ le taux de satisfaction des demandeurs « chimistes ».

ANNEXE

Liste des laboratoires de chimie théorique utilisant les moyens de calcul HP Composition et principales thématiques

Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, UMR5626

Directeur d'unité : Fernand Spiegelman
Université Toulouse III
(30 EC et C, 12 doctorants)

Thématiques : méthodes et modélisation, spectroscopie et dynamique, dynamique d'agrégats, magnétisme moléculaire, étude de complexes d'actinides.

Laboratoire de Physique et Chimie des Nano-Objets, UMR5215

Directeur d'unité : Bruno Chaudret
Université Toulouse III, INSA
Équipe de Modélisation Physique et Chimique – Responsable Romuald Poteau
(5 EC et C, 4 doctorants)

Thématiques : interaction et réactivité molécules-surface, agrégats, spectroscopies de systèmes biologiques, dynamique moléculaire, étude de complexes d'actinides.

Institut Charles Gerhard, UMR5253

Directeur de l'unité : François Fajula
Université Montpellier II
Équipe Structure et Dynamique des systèmes moléculaires et solides – Responsable Odile Eisenstein
(11 EC et C, 5 doctorants)

Thématiques : dynamique des réactions moléculaires, structure électronique des solides, mécanismes de réactions de systèmes organométalliques et inorganiques.

Institut de Chimie de Strasbourg, UMR 7177

Directeur de l'unité : Michel Rohmer
Université Strasbourg I
Équipe de chimie théorique
(11 EC et C, 7 doctorants), responsable Chantal Daniel

Thématiques : structure électronique des complexes bi et polymétalliques, réactivité photochimique, structure et réactivité des systèmes organométalliques, développement de logiciels pour la chimie, effets relativistes Dirac-Fock, potentiels électrostatiques dans les molécules biologiques.

Laboratoire de Chimie Théorique, UMR7616

Directeur de l'unité : Olivier Parisel
Université Paris VI

(22 EC et C, 12 doctorants)

Thématiques : méthodologie quantique, réactivité en phase condensée, réactivité moléculaire.

Laboratoire Modélisation et Simulation Multi-Echelle, UMR8208

Directeur de l'unité : Christian Soize
Université de Marne la Vallée
Équipe de Chimie Théorique – Responsable équipe Gilberte Chambaud (9EC, 2 IGR, 8 doctorants)

Thématiques : surface de potentiel électronique, spectroscopie ro-vibrationnelle, réactivité moléculaire, composés métalliques, interactions molécule-surface.

Laboratoire de Chimie, UMR5182

Directeur de l'unité : Philippe Sautet
ENS Lyon
Équipe de théoriciens : 16 EC et C, 8 doctorants

Thématiques : chimie supramoléculaire, matériaux moléculaires, RMN fondamentale, étude des solides et des surfaces, structure électronique de complexes de métaux de transition.

Laboratoire de Spectrométrie Ionique et Moléculaire (LASIM), UMR5579

Directeur de l'unité : Christian Bordas
Université Lyon I
Équipe de théoriciens : Physico-Chimie Théorique
(6 EC et C, 3 doctorants)

Thématiques : dynamique et interactions (transfert de charge, photodissociation), agrégats libres, systèmes moléculaires complexes, spectroscopie moléculaire et optique non linéaire.

Département de Chimie Moléculaire, UMR5250

Directeur de l'unité : Pascal Dumy
Université de Grenoble I
Équipe de théoriciens : 4 EC, 3 doctorants
Thématiques : développement DFT et TD-DFT (algorithmique, états excités, photo-chimie), étude théorique de la réactivité chimique (ab initio, méthodes mixtes, dynamique ab initio), interactions inter-moléculaires.

Institut Pluridisciplinaire de Recherche sur l'Environnement et les Matériaux – IPREM, UMR5254

Directeur de l'unité : Olivier Donard
Université de Pau et des Pays de l'Adour
Équipe de Chimie Physique (Danièle Gonbeau) : Groupe Chimie Théorique et Réactivité – Responsable : Claude Pouchan
Équipe de théoriciens : 10 EC et C, 2 IGR, 4 doctorants
Thématiques : développements méthodologiques : surfaces de potentiel d'agrégats, propriétés électriques et magnétiques, spectroscopie vibrationnelle et vibronique. Applications : réactivité en phase gaz et condensée, ONL, matériaux à propriétés spécifiques.

Institut des Sciences Moléculaires, UMR5255

Directeur de l'unité : Philippe Garrigues

Université Bordeaux I
Équipe de Physico-Chimie Moléculaire (LPCM) – Responsable Jean-Claude Rayez
Équipe de théoriciens : 13 EC et C, 7 doctorants
Thématiques : réactivité : acte chimique élémentaire, physicochimie des surfaces, interfaces et couches minces, échanges chimiques en milieu fluide, dynamique et interactions en phase solide.

Sciences Chimiques de Rennes, UMR6226

Directeur de l'unité : Jean-Yves Saillard
Université de Rennes I
Équipe de Chimie du solide et inorganique moléculaire – Responsable Lahcène Ouahab
Équipe de théoriciens : 8 EC et C, 3 doctorants
Thématiques : matériaux à cluster, cristallographie et réactivité des solides, matériaux moléculaires à transfert de charge, étude théorique de la liaison chimique dans les composés solides et moléculaires, intermétalliques.

Laboratoire Chimie Provence, UMR6264

Directeur de l'unité : Philippe Knauth
Université de Provence, AM1
Équipe Biologie et radicaux libres - Responsable Denis Bertin
Équipe de théoriciens : 4 EC et C, 3 doctorants
Thématiques : réactivité et spectroscopie de radicaux, développement des méthodes QM/MM.

Institut des Sciences Moléculaires de Marseille (ISM2), UMR6263

Directeur de l'unité Jean-Antoine Rodriguez
Université Aix Marseille III
Équipe Synthèse Modèles, Implications Biologiques - Responsable Jean-Antoine Rodriguez
Équipe de théoriciens : 4 EC et 2 doctorants
Thématiques : Réactivité Chimique.

Laboratoire de Dynamique, Interactions et Réactivité (LADIR), UMR7075

Directeur de l'unité : Esmail Alhikani
Université Paris VI
Équipe de théoriciens : 5 EC et C, 4 doctorants
Thématiques : acte élémentaire de la réactivité, interactions moléculaires faibles.

Laboratoire Interfaces, Traitements, Organisation et Dynamique des Systèmes (ITODYS), UMR7086

Directeur de l'unité : Michel Delamar
Université Paris VII
Équipe de théoriciens : 6 EC et C, 5 doctorants
Thématiques : drug design, Interaction ligand-macromolécules, étude de mécanismes sélectifs.

Laboratoire de Structures et Réactivité des Systèmes Moléculaires Complexes, UMR7565

Directeur de l'unité : Yves Fort

Université Nancy I
Équipe de théoriciens : 16 EC et C, 12 doctorants
Thématiques : modélisation et théorie de la réactivité, méthodes mixtes QM/MM.

Laboratoire d'Électrochimie et de Chimie Analytique, UMR7575

Directeur de l'unité : Michel Cassir
E.N.S.C.P.
Équipe de théoriciens : « Modélisation des Systèmes Complexes » (3 EC et C, 2 IE, 2 doctorants)
Thématiques : modélisation des systèmes complexes, développement des méthodes DFT, modélisation de matériaux hybrides, photomagnétisme, dynamique moléculaire.

Laboratoire des Mécanismes Réactionnels, UMR7651

Directeur de l'unité : Gilles Ohanessian
École Polytechnique
(12 EC et C, 6 doctorants)
Thématiques : structure, réactivité et spectroscopie vibrationnelle d'ions gazeux. Analyse environnementale et biomédicale. Analyse de peptides et de protéines.

Laboratoire de Chimie Physique d'Orsay, UMR8000

Directeur de l'unité : Mehran Mostafavi
Université Paris XI
Équipe Chimie-Théorique, 11 EC et C, 9 doctorants
Thématiques : simulation des propriétés de fluides confinés, dynamique quantique, Chimie théorique, simulation des propriétés de protéines fluorescentes.

Unité de Catalyse et de Chimie du solide, UMR8181

Directeur de l'unité : Lionel Montagne
Université de Lille I
Équipe de théoriciens : 2 EC + 2 doctorants
Thématiques : interaction molécules surfaces, mécanismes réactionnels en catalyse (homogène et hétérogène).

Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman, UMR8516

Directeur de l'unité : Guy Buntinx
Université de Lille I
Équipe de théoriciens : 5 EC et C, 4 doctorants
Thématiques : chimie quantique appliquée à la spectroscopie moléculaire (vibrationnelle et électronique), modélisation des systèmes hétérogènes avec l'accent sur les caractéristiques dynamiques, surfaces d'énergie potentielle.

Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Molécules, UMR8523

Directeur de l'unité : Georges Wlodarczak
Université Lille I
Équipe de théoriciens : 9 EC et C, 3 doctorants
Thématiques : spectroscopie électronique des molécules (ionisation et excitation de cœur et de valence), développement de méthodes et pro-

priétés physico-chimiques de molécules contenant des éléments lourds, dynamique classique et quantiques (collisions réactives, interaction surface-molécules).

Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement, UMR8587

Directrice de l'unité : Jeanine Tortajada

Université d'Évry-Val d'Essonne

Équipe de théoriciens : Interaction des assemblages moléculaires complexes : théorie et modélisation (10 EC et C, 3 doctorants)

Thématiques : réactivité et spectrochimie, dynamique moléculaire ab-initio de biomolécules, solvatation des molécules complexes et interactions effectives.

Laboratoire Processus d'Activation Sélective par Transfert d'Énergie Uni-électronique ou Radiatif

« PASTEUR », UMR8640

Directeur de l'Unité : Ludovic Jullien

ENS rue d'Ulm

Équipe de théoriciens (7 C/EC, 6 doctorants) : Directeur J. Haynes

Thématiques : réactivité en milieu complexe, dynamique de protéines par spectroscopie ultra-rapide, modélisation ab-initio de processus photochimiques en solution, solvatation de biomolécules.

Ces activités de recherche représentent un total de 239 chercheurs et enseignants-chercheurs.

2.2. Institut des sciences de l'information et de leurs interactions (INS2I)

Les problèmes de passage à l'échelle, d'hétérogénéité des architectures avec les processeurs multi-cœurs et l'utilisation d'accélérateurs (GPU...) et tous les aspects liés à la gestion des données et aux communications interpellent largement la communauté informatique dont celles du HPC, des grilles, des clusters et plus généralement des infrastructures de grande taille. Il n'est donc pas surprenant de retrouver les mêmes équipes sur le front des grilles/clouds/clusters de grande taille à la fois dans un contexte très général mais aussi avec des objectifs très spécifiques au calcul haute performance (noyaux de calcul haute performance, support d'exécution, paradigmes de programmation...).

Le traitement des grands volumes de données est fortement connecté au calcul intensif pour des données issues de simulations de grande taille mais aussi issues d'observations ou d'expérimentations. Ces traitements induisent parfois des calculs intensifs. Ils sont souvent effectués sur des infrastructures distribuées à grande échelle (clusters, grilles ou cloud) et relèvent donc en partie du périmètre de ce livre blanc.

Les activités de recherche d'INS2I dans le domaine du calcul intensif s'organisent donc autour de trois axes :

- la recherche liée au calcul haute-performance,
- la recherche liée plus généralement aux infrastructures distribuées à grande échelle,
- la recherche liée au traitement des grands volumes de données.

Pour l'ensemble des recherches informatiques développées au sein d'INS2I autour du calcul intensif, c'est-à-dire liées aux infrastructures distribuées à grande échelle, on dénombre environ 450 EC + 52 Inria + 28 CNRS + 2 DSNA + 2 CERFACS + 1 Inrets soit un total d'environ 530 chercheurs.

Les activités de recherche autour des masses de données sont constituées d'environ 425 EC + 27 Inria + 14 Inria + 2 Inserm + 2 DSNA soit de l'ordre de 470 chercheurs.

Ces communautés sont détaillées dans les sous-sections suivantes.

2.2.1. Le calcul haute performance au sein d'INS2I

La communauté affichant des activités de recherche spécifiquement orientées vers le HPC représente au sein d'INS2I un total de 121 chercheurs (81 EC + 8 CNRS + 28 Inria + 2 DSNA + 2 CERFACS). La liste des équipes identifiées est donnée en annexe. En toute rigueur, on doit additionner à ces équipes une partie des équipes identifiées sur les thématiques liées aux infrastructures distribuées à grande échelle/grille/cloud (voir sous-section suivante 2.2.2.).

Les thèmes de recherche développés sont les suivants (avec les équipes impliquées et répertoriées en annexe) :

- Support d'exécution (RUNTIME, GRAND LARGE).

- Compilation, optimisation, sémantique (ICPS).
- Architecture, compilation, logiciel (ARPA, ALCHEMY).
- Langages de programmation (MAP).
- Parallélisme massif et exploitation des architectures multi-cœur/GPU (ALF suite de CAPS, ALGORILLE).
- Noyaux de calcul, algorithmique numérique dont algèbre linéaire dense et creuse (APO, GRAAL, GRAND LARGE, MAP).
- Calcul formel (ARITH).
- Modélisation, analyse numérique, calcul scientifique et applications (SYMBIOSE, axe MAAD/MIS au LIMOS, Bacchus et HiePACS).

Les verrous soulevés sont essentiellement liés aux évolutions requises par le passage à l'Exaflops soit entre autres :

- L'impact du parallélisme massif et de l'hétérogénéité dans les nouvelles architectures (support d'exécution, résilience, langages de programmation, multi-cœur, accélérateurs du type GPU...).
- La maîtrise du passage à l'échelle.
- Les modélisations/méthodes numériques/algorithmiques avec la conception de codes et bibliothèques de calcul adaptées (co-design).
- L'impact du cloud computing.
- Le traitement des grands volumes d'informations.
- ...

2.2.2. Les infrastructures distribuées à grande échelle

Depuis plus de dix ans, les infrastructures distribuées à grande échelle, dont les grilles informatiques et maintenant le « cloud computing », font l'objet d'une attention considérable aussi bien en Europe qu'aux États-Unis et au Japon.

Les grilles sont déjà largement utilisées par la communauté scientifique pour mener à bien des activités de production à la fois avec des grilles orientées vers le traitement de données et des grilles de calcul. Les grilles/clouds permettent aussi de traiter les grands volumes de données issues de simulations numériques à grande échelle sur des architectures au niveau du PétaFlops.

Les thèmes généraux relatifs aux infrastructures distribuées à grande échelle au niveau national peuvent se répertorier de la façon suivante :

- Environnement pour les infrastructures à grande échelle : supports d'exécution haute performance, réseaux, communications, énergie, hétérogénéité, intergiciel, systèmes et objets distribués, infrastructures logicielles réparties, sécurité dans les grands systèmes, virtualisation, reconfiguration, réseaux haute performance
- Passage à l'échelle.
- Gestion des ressources : résilience, virtualisation, administration autonome, adaptation dynamique... .
- Gestion des services : calcul orienté service, gestion, workflows... .
- Gestion de données dans les systèmes distribués à grande échelle (grappes, grilles et pair-à-pair, cloud), stockage réparti des données.
- Applications réparties : nouveaux concepts, support de langages et outils, applications sensibles au contexte, abstraction, modélisation, bibliothèques, raffinement et développement des programmes parallèles et preuve, application des langages formels, modèles.

- Architectures à objets ou composants logiciels pour les systèmes à intelligence répartie.
- Algorithmique et ordonnancement : algorithmes distribués, P2P, calcul à grande échelle, problèmes NP-complet, combinatoire...
- Modélisation et utilisation d'infrastructures de calcul et de données distribuées de grande taille.
- Gridification/cloudification/parallélisation d'applications : simulations et algorithmes numériques sur des grilles de calcul appliqués à divers domaines (environnement, électromagnétisme, génie chimique, biologie et santé, algèbre linéaire).
- grilles pervasives/smart grids.

Les principaux verrous sont liés aux évolutions actuelles avec des architectures massivement parallèles et hétérogènes, les préoccupations énergétiques, l'avènement du cloud et le « déluge » de données que l'on constate.

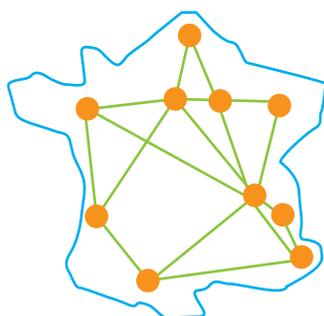
On peut estimer que l'ensemble de la communauté concernée par ces thématiques très générales représente environ 530 chercheurs dont environ 450 enseignants-chercheurs, une cinquantaine de chercheurs Inria et une trentaine de chercheurs CNRS (voir les équipes répertoriées en annexe). Sur 530 chercheurs, environ 320 affichent clairement une activité dans le domaine des grilles, du cloud et des grands clusters.

Ces recherches autour des infrastructures distribuées à grande échelle représentent environ 12 % des chercheurs, que ce soit pour l'INS2I ou l'ensemble de la section 7.

Structuration de la recherche autour des grilles en France

Le principal élément structurant de la recherche sur les grilles en France est la plate-forme GRID'5000.

Pour rappel, Grid'5000 est constituée de onze sites français (Bordeaux, Grenoble, Lille, Lyon, Nancy, Orsay, Sophia-Antipolis, Toulouse et Rennes et récemment Luxembourg et Reims), connectés par le Réseau National de télécommunication pour la Technologie, l'Enseignement et la Recherche (RENATER), ainsi que d'un site brésilien (Porto Alegre).



L'objet de Grid'5000 est de développer une infrastructure nationale de grande taille pour la recherche autour du calcul distribué et à grande échelle.

Dans l'action de grande envergure HEMERA qui structure la recherche

autour de Grid'5000, on dénombre 21 équipes de recherche toutes localisées dans des laboratoires associés au CNRS dont 16 Inria (les cinq équipes de recherche n'appartenant pas à l'Inria sont localisées à Toulouse). Cela représente un ensemble de 174 chercheurs (en partant des effectifs des diverses équipes même si tous les membres d'une équipe ne sont pas forcément impliqués dans les activités de recherche qui nous intéressent) avec :

- 119 enseignants-chercheurs
- 38 chercheurs Inria
- 17 chercheurs CNRS

On en déduit qu'environ les 3/5^e des recherches affichées autour des grilles et du cloud se structurent autour de GRID'5000.

Les équipes de recherche rattachées à HEMERA à ce jour sont les suivantes (par site) :

- Bordeaux : CEPAGE and RUNTIME (LaBRI)
- Grenoble : MESCAL (LIG)
- Lille : DOLPHIN (LIFL)
- Lyon : GRAAL and RESO (LIP)
- Nantes : ASCOLA (LINA)
- Paris : GRAND-LARGE (LRI) and REGAL (LIP6)
- Rennes : ASAP, KERDATA, MYRIADS, SAGE (IRISA)
- Nice-Sophia : OASIS (I3S)
- Strasbourg : ALGORILLE (LORIA), ICPS (LSIT)
- Toulouse : ACADIE, APO, ASTRE (IRIT), MINC and MRS (LAAS)

Cependant toutes les équipes de recherche tournées vers la grille ne figurent pas dans HEMERA ; en voici une liste non exhaustive :

- Equipe de David Hill (LIMOS, Univ. Clermont)
- AND and CARTOON (LIFC, Univ. Franche-Comté)
- MAP (LIFL, Lille)
- ATLAS-GDD (LINA, Nantes)
- PRV (LIFO, Orléans)
- Groupe grilles (LAL, Orsay)
- PEQUAN (LIP6, Paris)
- T2I (LMA, Univ. Pau)
- Groupe SysCom (CRESTIC, Univ. Reims)
- MODALIS (I3S, Sophia)

2.2.3. Le traitement des grandes masses de données

Le traitement des données à grande échelle, avec des sources de données éventuellement multiples, distribuées/réparties, et hétérogènes (structures, formats, logiciels, serveurs...) et une volumétrie en données allant du Toctets au Poctets (et à l'Exaotets dans un futur proche), le plus souvent sur des infrastructures distribuées, est central pour de multiples domaines allant du Web sémantique à la simulation numérique avec des applications en biologie/santé, ingénierie, etc.

Ces volumes de données sont souvent traités sur des infrastructures distribuées à grande échelle (e.g. traitement des données du LHC). Les stocker, les indexer et effectuer un post-traitement pour en extraire de l'information ou en vue d'une visualisation est encore souvent un défi et nécessite des interactions entre les diverses communautés (grille/cloud,

visualisation, bases/entrepôts de données...).

Les problématiques centrales se situent autour des aspects liés :

- à la gestion de ces données : stockage (BD centralisées ou distribuées, entrepôts de données, virtualisation du stockage...), indexation et recherche d'information,
- au traitement de ces données et à l'extraction de connaissances sur des infrastructures souvent distribuées et à grande échelle (exemple l'infrastructure en tiers déployée autour du LHC) avec des techniques de fouille de données, de classification, d'assimilation de données permettant d'affiner les modèles...
- au post-traitement permettant d'exploiter/de visualiser ces informations : visualisation 3D, réalité virtuelle... mais aussi utilisation de méta-modèles permettant d'extraire de l'information, de prédire/d'approcher des résultats à partir d'expérimentations passées à base de méthodes statistiques, réseaux de neurones, filtres de Kalman, multi-agents adaptatifs...

Cette activité autour des masses de données représente un potentiel d'au moins 369 chercheurs (324 EC + 26 CNRS + 15 Inria + 2 Inserm + 2 DSNA). Se reporter en annexe pour la liste des équipes identifiées.

ANNEXE

Équipes ou équipes/projets au sein de l'INS2I

Légende : EC = enseignant-chercheur, CNRS = chargé de recherche ou directeur de recherche, Inria = chargé de recherche ou directeur de recherche Inria

Équipes affichant une activité de recherche en calcul haute performance

- ALCHEMY (LRI, Paris), 3 EC + 3 Inria
- ALF (IRISA, Rennes), 2 EC + 3 Inria
- ALGORILLE (LORIA, Nancy), 5 EC + 1 Inria
- APO (IRIT, Toulouse), 10 EC + 1 CNRS + 2 MEDTL (DSNA)
- ARIHT (LIRMM, Montpellier), 5 EC + 2 CNRS
- ARPA (PRISM, Versailles), 4 EC
- GRAAL (LIP, ENS Lyon), 5 EC + 5 Inria + 2 CNRS recomposé en deux équipes-projets AVALON et ROMA
- GRAND LARGE (LRI, Paris), 6 EC + 2 Inria
- ICPS (LSIT, Strasbourg), 7 EC
- Axe MAAD, Modélisation, Intégration, Simulation (LIMOS, Clermont), 12 EC + 1 CNRS
- MAP (LIFL, Lille), 1 EC
- RUNTIME (LaBRI, Bordeaux), 6 EC + 4 Inria
- SCALAPPLIX (LaBRI, Bordeaux), 9 EC + 3 Inria recomposé actuellement en Bacchus (6 EC, 2 Inria) et HiePACS projet-joint avec le CERFACS (2 EC, 4 Inria, 2 CERFACS)
- SYMBIOSE (IRISA, Rennes), 4 EC + 4 Inria + 2 CNRS

Soit un total de 81 EC + 8 CNRS + 28 Inria + 2 DSNA + 2 CERFACS = 121 chercheurs

Participants à l'action d'envergure HEMERA

Les équipes de recherche rattachées à HEMERA à ce jour sont les suivantes (par site avec leur effectif et leur institut CNRS principal de rattachement) :

- **Bordeaux :**
 - CEPAGE – Chercher et Essaimer dans les plates-formes à Grande Échelle (LaBRI, Bordeaux, INS2I), 3 EC + 2 Inria + 3 CNRS
 - RUNTIME – Efficient runtime systems for parallel architectures (LaBRI, Bordeaux, INS2I), 6 EC + 4 Inria
- **Grenoble :**
 - MESCAL – Middleware efficiently scalable (LIG, Grenoble, INS2I), 6 EC + 3 Inria + 1 CNRS
- **Lille :**
 - DOLPHIN – Parallel Cooperative Multi-criteria Optimization (LIFL, Lille, INS2I), 6 EC + 2 Inria
- **Lyon :**
 - GRAAL – Algorithms and Scheduling for Distributed Heterogeneous Platforms (LIP, ENS Lyon, INS2I), 5 EC + 5 Inria + 2 CNRS recomposé en deux équipes-projet AVALON et ROMA.
 - RESO – Protocols and softwares for very high-performance network (LIP, Lyon, INS2I), 4 EC + 3 Inria
- **Nantes :**
 - ASCOLA – Aspect and composition languages (LINA, Nantes, INS2I), 9 EC + 2 Inria
- **Paris :**
 - GRAND-LARGE – Global parallel and distributed computing (LRI, Paris, INS2I), 6 EC + 2 Inria
 - REGAL – Large-Scale Distributed Systems and Applications (LIP6, Paris, INS2I), 8 EC + 3 Inria
- **Rennes :**
 - ASAP – As Scalable As Possible: foundations of large scale dynamic distributed systems (IRISA, Rennes, INS2I), 3 EC + 4 Inria
 - KERDATA – cloud and Grid Storage for Very Large Distributed Data (IRISA, Rennes, INS2I), 1 EC + 1 Inria
 - MYRIADS – Design and Implementation of Autonomous Distributed Systems (IRISA, Rennes, INS2I), 4 EC + 3 Inria
 - SAGE – Simulations and Algorithms on Grids for Environment (IRISA, Rennes, INS2I), 2 Inria + 1 CNRS
- **Sophia :**
 - OASIS – Active objects, semantics, Internet and security (I3S, Nice-Sophia, INS2I), 3 EC + 1 CNRS + 1 Inria
- **Strasbourg :**
 - ALGORILLE – Algorithms for the Grid (LORIA, Nancy, INS2I), 5 EC + 1 Inria
 - ICPS – Scientific Parallel Computing and Imaging (LSIT, Strasbourg, INS2I), 8 EC
- **Toulouse :**
 - ACADIE – Assistance à la Certification d'Applications Distribuées et Embarquées (IRIT, Toulouse, INS2I), 12 EC + 2 CNRS
 - APO – Algorithmes Parallèles et Optimisation (IRIT, Toulouse, INS2I), 10 EC + 1 CNRS + 2 chercheurs DSNA (Direction des Services de la Navigation Aérienne).

- ASTRE – Architectures, Real-Time and Embedded Systems (IRIT, Toulouse, INS2I), 11 EC
- MINC – Micro et Nanosystèmes pour les Communications sans fils (LAAS, Toulouse, INSIS), 3 EC + 1 CNRS
- MRS : Modélisation et contrôle des Réseaux et Signaux (LAAS, Toulouse, INSIS), 2 EC + 5 CNRS

**Soit un total de 115 EC, 38 Inria, 17 CNRS, 2 DSNA
= 172 chercheurs**

Équipes impliquées dans une activité informatique distribuée/répartie et non mentionnées précédemment

- ACMES (SAMOVAR, Télécom Sud Paris), 9 EC
- SOC (LIRIS, Lyon), 7 EC
- MOASIS (LIG, Grenoble), 8 EC + 2 Inria
- SARDES (LIG, Grenoble), 7 EC + 2 CNRS + 2 Inria
- D-NET (LIP, ENS Lyon), 1 EC + 1 Inria
- Langage, système et réseaux (LaBRI, Bordeaux), 14 EC
- RAINBOW (I3S, Sophia), 8 EC
- ACES (IRISA, Rennes), 1 EC + 2 Inria
- AOC (LIPN, Paris Nord), 11 EC
- Concurrence et modélisation (PPS, Jussieu), 3 EC + 3 CNRS
- Comète (LIX, Saclay), 1 Inria + 2 CNRS
- MOSEL (LORIA, Nancy), 3 EC + 1 Inria
- TRIO (LORIA, Nancy), 3 EC + 3 Inria
- APR (LIP6, Paris), 9 EC
- BD (LIP6, Paris), 6 EC
- ADAM (LIFL, Lille), 5 EC + 1 Inrets + 1 Inria
- CARO (PRISM, Versailles), 8 EC
- SFAL (PRISM, Versailles), 2 EC

**Soit un total de 105 EC, + 7 CNRS + 13 Inria + 1 Inrets
= 126 chercheurs**

Équipes affichant une activité de recherche sur les « masses de données »

- Algorithmique pour les masses de données (LAMSADE, Paris), 6 EC
- IC2 groupe DBWEB (LTCI, Télécom Paris), 4 EC
- DRIM (LIRIS, Lyon), 12 EC + 1 CR CNRS
- HADAS (LIG, Grenoble), 6 EC
- MRIM (LIG, Grenoble), 5 EC + 2 CNRS
- PYRAMIDE (IRIT, Toulouse), 3 EC

- SIG (IRIT, Toulouse), 23 EC
- VORTEX (IRIT, Toulouse), 14 EC
- APO (IRIT, Toulouse), 10 EC + 1 CNRS + 2 DSNA
- IDC (LIRMM, Montpellier), 4 EC
- TaToo (LIRMM, Montpellier), 7 EC
- Modèles et Algorithmes pour la Bioinformatique et la Visualisation (LaBRI, Bordeaux), 13 EC + 2 CNRS + 1 Inria
- SCALAPPLIX (LaBRO, Bordeaux), 9 EC + 3 Inria
- KEIA (I3S, Nice), 4 EC
- KEWI (I3S, Nice)
- DoDoLa (GREYC, Caen), 12 EC
- TEXMEX (IRISA, Rennes), 5 EC + 2 CNRS + 2 Inria
- ATLAS (IRISA, Rennes), 5 EC + 2 Inria
- VISAGES (IRISA, Rennes), 3 EC + 1 CNRS + 4 Inria + 2 Inserm
- AXE 1 – Projet 3 (LIMOS, Clermont), 3 EC
- AXE-2 – Projet 1 (LIMOS, Clermont), 6 EC
- Bases de données et Apprentissage Automatique (LIF, Marseille), 13 EC
- WICSI (LSIS, Marseille), 4 EC
- IM (LSIS, Marseille), 14 EC + 3 CNRS
- SIMGRAPH (LSIS, Marseille), 5 EC
- ATLAS-GRIM (LINA, Nantes), 6 EC
- COD (LINA, Nantes), 14 EC
- MIV (LSIT, Strasbourg), 16 EC + 2 CNRS
- TRIO (LSIT, Strasbourg), 14 EC + 2 CNRS
- A3 (LIPN, Paris Nord), 2 EC
- ORPAILLEUR (LORIA, Nancy), 4 EC + 3 CNRS + 2 Inria
- PEQUAN (LIP6, Paris), 13 EC.
- MALIRE (LIP6, Paris), 17 EC + 3 CNRS
- FOX-MIIRE (LIFL, Lille), 3 EC
- MOSTRARE (LIFL, Lille), 9 EC + 1 Inria
- SEQUOIA (LIFL, Lille), 5 EC + 3 CNRS
- Équipe Indexation multimédia et intégration de données (ETIS, Cergy), 7 EC
- AMIS (PRISM, Versailles), 4 EC
- DIM (PRISM, Versailles), 5 EC
- Traitement des informations imparfaites, dynamiques, contextuelles et multi-sources (CRIL, Lens), 10 EC + 1 CNRS
- BD (LRI, Paris), 5 EC

**Soit un total de 324 EC + 26 CNRS + 15 Inria + 2 Inserm
+ 2 DSNA = 369 chercheurs**

2.3. Institut des sciences de l'ingénierie et des systèmes (INSIS)

2.3.1. Introduction/État des lieux

L'Institut des sciences de l'ingénierie et des systèmes (INSIS) rassemble environ 6 000 chercheurs et enseignants-chercheurs (dont 1 200 chercheurs CNRS), répartis dans une centaine d'unités de recherche. Ses thématiques couvrent une partie des sections 4 (fusion par confinement magnétique, ITER), 7 (signal, image, automatique, robotique), 30 (bio ingénierie), la totalité des sections 8 (micro et nano-technologies, électronique, photonique, électromagnétisme, énergie électrique), 9 (ingénierie des matériaux et des structures, mécanique des solides, acoustique) et 10 (milieux fluides et réactifs : transports, transferts, procédés de transformation) du Comité national.

Cet institut est l'un des principaux utilisateurs du calcul haute performance au CNRS puisque, au vu des attributions de ressources sur les centres nationaux de GENCI (janvier 2011), il représente :

- environ 130 projets,
- plus de 25 % des ressources attribuées sur Vargas (IBM SP6 IDRIS) et Jade (SGI Altix, CINES),
- plus de 40 % des ressources attribuées sur Babel (IBM BlueGene, IDRIS).¹

Ce poids de l'INSIS cache en fait une très grosse disparité selon les thématiques : plus de 90 % des ressources sont consommées par la mécanique des fluides, au sens large du terme, définie ici comme résolution des équations de Navier-Stokes et des équations associées (mécanique des fluides, combustion, écoulements diphasiques, transferts thermiques, plasmas, magnétohydrodynamique, aéro-acoustique, transport sédimentaire...) par un petit nombre de laboratoires (moins d'une dizaine) et de chercheurs rattachés pour la plupart à la section 10 du Comité national. Les communautés « mécanique des solides » et « matériaux et structures », bien que revendiquant une activité calcul intensif, sont absentes : un seul projet, tandis que les quelques projets interaction fluide/structure sont le fait de laboratoires nettement identifiés « mécanique des fluides ». Les projets restants concernent l'électromagnétisme, l'interaction laser/matière et la chimie (calculs ab-initio, diagramme de phase...).²

Les raisons de la quasi absence des thématiques autres que mécanique des fluides révélées par l'analyse des allocations de GENCI ne sont pas claires et font l'objet d'une enquête actuellement en cours.³ Elles sont probablement de plusieurs ordres : utilisation de machines locales ou de

1. Ce chiffre doit probablement être pris avec prudence car rien n'indique que les ressources attribuées seront effectivement consommées (dimensionnement difficile des demandes pour une machine très spécifique dont les utilisateurs ont encore peu d'expérience, et sur laquelle la pression était faible début 2011).

2. Cette utilisation « chimie » n'est pas significative. Outre son faible volume, elle est principalement le fait de chercheurs relevant des sections chimie du Comité national mais rattachés à un laboratoire INSIS. Elle entre plutôt dans la prospective de l'Institut de chimie (INC). De même, quelques projets relèvent de l'Institut de physique (INP).

3. Le Conseil scientifique d'Institut (CSI) de l'INSIS s'est saisi de cette question.

méso-centres, recours à des codes commerciaux ou semi commerciaux peu adaptés aux machines massivement parallèles, autocensure des chercheurs qui adaptent leurs problèmes aux moyens locaux dont ils disposent, méconnaissance de l'offre des centres nationaux... Il ne faut pas non plus sous-estimer une certaine réticence à l'égard de calculs dits « de production », perçus comme peu scientifiques : autant les chercheurs en mécanique des fluides ont depuis longtemps l'habitude de développer eux-mêmes leurs outils, autant les autres communautés considèrent que le calcul intensif relève d'ingénieurs devant être recrutés spécifiquement, et non de chercheurs dont le rôle devrait se limiter à en montrer la faisabilité.

2.3.2. Enjeux et défis

L'objectif de la simulation numérique en sciences de l'ingénieur est la prédiction du comportement de tout ou partie d'un système tel qu'un avion, une automobile, des systèmes propulsifs, des dispositifs de production et de stockage d'énergie, etc. Le but ultime est de pouvoir concevoir, développer et optimiser un système en réduisant au maximum la construction et les tests de prototypes, toujours longs et coûteux.⁴ Par essence, les phénomènes que doit modéliser l'ingénieur sont complexes, couplés, multi-physiques et multi-échelles, que ce soit en espace (de la taille de la molécule, à celle du système⁵) ou en temps.⁶

Le HPC a permis des avancées considérables en mécanique des fluides, notamment en permettant la simulation du comportement instationnaire des écoulements, alors que la modélisation se limitait le plus souvent à chercher à déterminer l'écoulement moyen, donnant accès à une meilleure description de la turbulence, à la prédiction d'éventuelles instabilités, en général nuisibles dans un système industriel, ou aux émissions sonores. Deux approches ont connu un développement considérable :

- La simulation numérique directe (ou DNS, pour direct numerical simulation) consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes, calculant explicitement toutes les échelles spatiales et temporelles de la turbulence sans modélisation.⁷ Très exigeante en ressources de calcul, et ce d'autant plus que l'intensité de la turbulence est élevée, la simulation directe permettait à ses débuts dans les années 1980 d'étudier des problèmes académiques dans des volumes de l'ordre du mm³ tandis qu'elle permet aujourd'hui de simuler certaines expériences de laboratoire. Elle reste néanmoins un outil d'étude, véritable expérience numérique, destinée à la compréhension des phénomènes et au développement de modèles.⁸

4. L'exploitation efficace du calcul en bureau d'études industriel requiert un temps de restitution typique de l'ordre de la nuit : l'ingénieur lance un calcul le soir avant de quitter son travail et trouve le résultat en arrivant le lendemain. Occasionnellement, des calculs plus longs peuvent être envisagés sur des problèmes spécifiques.

5. Typiquement de l'ordre de quelques centimètres (chambre de combustion de moteur automobile) à plusieurs dizaines de mètres (avion). Cette dimension peut atteindre plusieurs kilomètres dans des cas extrêmes (propagation d'un feu de forêt).

6. Certaines réactions chimiques rencontrées en combustion ont des temps caractéristiques inférieurs à 10⁻⁶ s quand le temps de fonctionnement d'un système se compte en heures, voire en années pour les problèmes de vieillissement.

7. Si la turbulence est entièrement calculée, des modèles restent toutefois nécessaires pour les autres phénomènes, tels que les réactions chimiques de combustion.

8. Les plus grosses simulations numériques directes réalisées à ce jour en combustion sont le fait du Sandia National Lab de Livermore (USA), dans le cadre d'un programme calcul intensif piloté par le DOE.

- La simulation aux grandes échelles (LES, pour Large Eddy Simulation) consiste à calculer explicitement les plus grandes échelles turbulentes de l'écoulement, qui sont aussi les plus énergétiques, tandis que seul l'effet des plus petites, dont le comportement est supposé plus universel, est modélisé. Intermédiaire entre simulation numérique directe et calcul des écoulements moyens en termes de coûts calcul, cette méthode permet aujourd'hui des simulations réalistes de systèmes complexes et a été l'occasion de quelques premières mondiales de la part de la communauté française (simulation de l'allumage d'une chambre de combustion de turbine d'hélicoptère, simulation de quelques cycles d'un moteur automobile à quatre cylindres...).

Toutes ces simulations sont destinées à se poursuivre dans plusieurs directions : niveaux de turbulence plus élevés et plus proches des applications, résolution spatiale plus fine, domaines de calculs plus grands, durées de simulation plus longues (la simulation moteur mentionnée ci-dessus ne porte aujourd'hui que sur une dizaine de cycles pour un seul régime, durée insuffisante pour analyser finement le comportement du moteur), chimie détaillée pour les écoulements réactifs (ceux-ci sont décrits aujourd'hui avec des schémas cinétiques globaux relativement simples, alors que la combustion d'un hydrocarbure met en jeu plusieurs centaines d'espèces et milliers de réactions, qu'il faut prendre en compte, par exemple, pour prédire les émissions polluantes), magnétohydrodynamique, en particulier autour de ITER.⁹ Il ne faut pas oublier que de nombreuses simulations d'une même configuration sont nécessaires pour étudier le comportement d'un système : sensibilité aux modèles employés, aux paramètres numériques (maillage, etc), à la géométrie ou aux conditions opératoires. On assiste d'ailleurs à l'apparition de calculs d'optimisation sous contraintes d'un système pour déterminer la meilleure configuration en fonction de critères de choix tout en minimisant le nombre de cas simulés. Un nouveau volet est également en plein développement : la quantification des incertitudes (ou UQ, Uncertainties Quantification), qui consiste à déterminer l'impact des paramètres des modèles ou de caractéristiques physiques mal connues sur les résultats.

La possibilité de coupler des codes de nature différente, tournant simultanément sur machines parallèles en échangeant des données, ouvre des perspectives nouvelles pour aborder des phénomènes multi physiques complexes en tirant parti des acquis de chacune des disciplines. Quelques tentatives ont déjà été entreprises : couplage fluide/structure, couplage combustion/rayonnement,¹⁰ couplage écoulements/transferts thermiques dans les matériaux, pour les aubages de turbines haute pression des moteurs aéronautiques, mais le potentiel offert par cette approche lui promet un développement rapide : couplage d'écoulements

9. Les simulations sont actuellement limitées par les temps de restitution d'un calcul, donc la puissance des machines disponibles, et non par les phénomènes physiques. Plus les machines futures seront puissantes, plus il sera possible de prendre en compte des phénomènes complexes avec des résolutions plus fines. L'utilisateur adapte alors son problème à la machine dont il peut disposer, rendant impossible la réponse à la question « de quelle puissance avez-vous besoin ? ».

10. Il est intéressant de noter que les calculs de combustion ou plus généralement de mécanique des fluides, basés sur des bilans locaux, sont parallélisés par partition du domaine physique (chaque processeur traite un morceau du domaine), tandis que les transferts radiatifs mettent en jeu des interactions à longue distance et sont plutôt parallélisés par bande spectrale et par direction de propagation. Le couplage permet de respecter la structure optimale de chaque code.

réactifs ou non/matériaux (refroidissement, corrosion, fatigue...), génie des procédés (solides, milieux granulaires, poudres, liquides...), etc ; le but ultime étant la simulation d'un système complet.

Le développement du calcul intensif sur machines massivement parallèles dans la communauté des sciences de l'ingénieur nécessite un profond changement de culture dont l'importance et ses conséquences ne sont pas toujours clairement perçues par les chercheurs eux-mêmes. Les codes de « production »¹¹ devront exploiter efficacement plusieurs milliers, voire dizaine de milliers de processeurs. Ce constat a plusieurs implications :

- La manière de formuler un problème, le choix des techniques de résolution et le développement de modèles doivent intégrer dès le début l'architecture des machines. Un modèle physiquement intéressant aura peu d'avenir s'il n'est pas compatible avec une implantation efficace sur machines massivement parallèles, par exemple s'il requiert de trop nombreuses communications entre processeurs.
- Développer des codes qui exploitent au mieux les architectures massivement parallèles, voire des GPU, dépasse largement les compétences d'un chercheur « physicien », « chimiste » ou « mécanicien » et nécessite de rassembler des compétences diverses, depuis les mathématiques, les méthodes numériques, l'algorithmique, l'informatique, le génie logiciel jusqu'à la physique des phénomènes étudiés. C'est un travail de longue haleine et d'équipe.¹²

Cette situation suggère que chaque communauté ne pourra se partager que quelques outils développés en commun, autour d'une politique de génie logiciel bien définie. Cette approche est de longue date celle de la communauté « climat » qui met en commun des outils représentant chacun des centaines d'hommes-années. La simulation numérique de la combustion s'est, en partie, structurée autour du code AVBP (CERFACS / IFP-En).¹³ Une expérience similaire est menée par le laboratoire TREFLE (aujourd'hui I2M, Bordeaux) autour du logiciel AQUILON (transferts thermiques), tandis que le CEA mutualise quelques outils phares tels que TRIO (thermo-hydraulique) ou qu'EDF met à la disposition de la communauté scientifique son code SATURNE.

Il importe aujourd'hui de susciter, de construire et d'accompagner cette mutualisation là où elle n'existe pas encore (et où quelques réticences sont à vaincre) et de la renforcer dans les communautés qui la pratiquent. Elle ne concerne bien évidemment pas que les codes de calcul proprement dits et doit s'étendre à tous les outils concernés (pré- et post-traitement des calculs, visualisation...), voire aux bases de données générées par les calculs. Une telle construction n'est toutefois pas évidente et pose un certain nombre de problèmes pratiques dont la discussion dépasse le cadre de ce rapport.

11. Définis ici comme des codes destinés à l'étude de phénomènes physiques et aux tests de modèles mais dont le « moteur numérique » reste relativement figé. Il s'agit des codes qui utilisent au maximum les ressources offertes par le HPC (grands domaines, temps de calcul et de restitution longs).

12. La Maison de la simulation, si elle atteint l'envergure espérée, pourrait être le lieu de ces développements.

13. Un second code, YALES2, développé par le CORIA (Rouen) et mieux adapté aux écoulements basse vitesse, vient de rejoindre AVBP pour une utilisation complémentaire. Un GIS, en cours de signature (CNRS/CERFACS/IFP-En), officialisera le partenariat des différents acteurs.

2.3.3. Les principaux acteurs

Ces acteurs sont identifiés ici comme ayant une activité significative sur les machines des centres nationaux et donc travaillant essentiellement en mécanique des fluides. Cette liste devra également comporter les utilisateurs de calcul intensif qui utilisent des machines locales, des méso-centres voire des machines à l'étranger :

- CORIA (UMR6614, Rouen) : turbulence, écoulements compressibles, écoulements diphasiques, combustion.
- EM2C (UPR288, Châtenay-Malabry) : combustion, écoulements cryotechniques, transferts radiatifs.
- I2M (UMR8508, Bordeaux) : mécanique des fluides, transferts thermiques, sédimentation.
- IJLRA (UMR7190, Paris 6) : aérodynamique, acoustique, écoulements diphasiques.
- IMFT (UMR5502, Toulouse) : mécanique des fluides, écoulements diphasiques, écoulements gaz/particules, combustion cryotechnique.
- IUSTI (UMR6595, Marseille) : écoulements super et hypersoniques, transport sédimentaire, écoulements thermo-convectifs.
- LadHyX (UMR7646, Palaiseau) : instabilités tourbillonnaires, analyse et contrôle du bruit.
- LEGI (UMR5519, Grenoble) : ondes de gravité, écoulements turbulents, cavitation.
- LIMSIS (UPR3251, Orsay) : écoulements turbulents, effet dynamo, convection naturelle.
- LMF (UMR6598, Nantes) : hydrodynamique, couplage fluide/structure.
- LMFA (UMR5509, Lyon) : turbulence, acoustique, hydrodynamique, écoulements diphasiques, turbomachines.
- M2P2 (UMR6181, Marseille) : écoulements turbulents, écoulements en rotation, transferts de chaleur et de masse, magnétohydrodynamique.
- MSME (UMR8208, Marne la Vallée) : couplage fluide/structure, convection naturelle et mixte.
- P2IM (UMR6633, Marseille) : magnétohydrodynamique (ITER), interactions atomes/surfaces. Laboratoire rattaché à la section 04 du Comité National, avec une forte composante INP.
- PPRIME (UPR3346, Poitiers) : écoulements turbulents, écoulements compressibles, combustion.
- PROMES (UPR8521, Perpignan) : écoulements turbulents.
- SPE (UMR6134, Corte) : feux de forêts.

Il faut ajouter à cette liste quelques laboratoires d'autres instituts (INSMI, INSU, INC), qui ont une activité mécanique des fluides numériques marquée, souvent avec des chercheurs dépendant de la section 10 du Comité national : Cassiopée (Nice, transport de particules, magnétohydrodynamique), I3M (Montpellier, écoulements sanguins), IJL (Nancy, magnétohydrodynamique, ITER), LJAD (Nice, écoulements turbulents, magnétohydrodynamique)... Enfin, le CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique, Toulouse), société civile de droit privé, joue un rôle moteur en mécanique des fluides numériques : plusieurs laboratoires académiques utilisent le code AVBP que le CERFACS développe avec IFP-En et il est partenaire de nombreux contrats ANR autour du calcul intensif (c'est souvent lui qui réalise en pratique les plus grosses simulations). Son équipe « computational fluid dynamics » est d'ailleurs animée par un directeur de recherche CNRS.

2.4. Institut national des sciences mathématiques et de leurs interactions (INSMI)

Le calcul haute performance (HPC) à l'INSMI est rassemblé dans des unités de recherche et des équipes diverses, autour des mathématiques et leurs applications.

Le Groupe Calcul (<http://calcul.math.cnrs.fr/>), composé du GDR Calcul (<http://calcul.math.cnrs.fr/spip.php?rubrique42>), d'un réseau métier (<http://calcul.math.cnrs.fr/spip.php?article89>) et d'un GDS, MATHRICE (<http://www.mathrice.org/>), joue un rôle primordial dans l'organisation, la formation et l'animation du calcul scientifique entre les unités.

La communauté compte environ 600 personnes. Elle est composée d'enseignants-chercheurs (75 %), chercheurs (21 %, dont 15 % CNRS et 6 % Inria) et d'ingénieurs (4 %), et regroupée dans une trentaine de laboratoires/équipes universitaires, totalement ou partiellement dédiés au calcul scientifique (voir la liste de ces laboratoires/équipes en annexe).

2.4.1. Les thématiques de recherche mathématiques en France, en relation avec le calcul haute performance

Il existe actuellement en France une grande diversité de thématiques, allant des mathématiques fondamentales, passant par l'analyse numérique et aboutissant jusqu'aux applications, toutes ayant une activité soutenue en HPC.

En mathématiques fondamentales on peut citer la géométrie algébrique réelle, le calcul formel, la cryptographie, les codes correcteurs d'erreurs (*IRMAR – UMR6625, Rennes*), le calcul exact et les systèmes dynamiques (*LJK-UMR5224-Grenoble*), les automates cellulaires, la calculabilité, la dynamique symbolique (*LAMA-UMR5127-Chambéry*).

Une activité très importante au sein de l'INSMI est l'analyse numérique et le développement de nouveaux algorithmes qui exploitent efficacement les nouvelles architectures, massivement parallèles (*LJLL – UMR 7598 – Paris ; LJK – UMR 5224 – Grenoble ; LMAP – UMR 5142 – Pau ; LPP – UMR 8524 – Lille*).

Les applications sont largement traitées par les équipes de l'INSMI, souvent en lien étroit avec d'autres disciplines. Ici on signalera les sciences de l'environnement (*océanographie, géophysique, météorologie : LJK – UMR 5224 – Grenoble, LJAD – UMR 6621 – Nice, LM – UMR 6620 – Clermont, LMAP – UMR 5142 – Pau*), les sciences de l'ingénieur (*turbulence, plasmas, nanomatériaux, combustion : UMPA – UMR 5669 – Lyon, IRMA – UMR 7501 – Strasbourg, LJAD – UMR 6621 – Nice*), et les sciences du vivant (*écoulements sanguins, modélisation de croissance de tumeurs, imagerie médicale, physiologie... : CMLA – UMR 8536 – Cachan, LAGA – UMR 7539 – Paris, LMO – UMR 8628 – Orsay*). Ce sont tous des systèmes complexes, non-linéaires et multi-physiques, qui nécessitent une approche HPC. Une activité croissante en bio-informa-

tique, génomique et méthodes statistiques (*LBBE – UMR 5558 – Lyon, SG – UMR 8071 – Evry*) est à signaler.

2.4.2. Les enjeux, les défis et les besoins à moyen terme

Avec l'arrivée des nouvelles architectures « many-core », éventuellement hybrides (CPU-GPU) et massivement parallèles, l'attention doit être portée sur l'analyse et l'implémentation de nouveaux algorithmes de calcul scientifique. Ici, il s'agit des briques qui sont les bases de tous les logiciels de calcul numérique (voir : « Defining Software Requirements for Scientific Computing », Phillip Colella, 2004). Ces développements nécessiteront des collaborations étroites entre informaticiens et mathématiciens/numériciens. Nous visons, à terme, le « co-design », où l'algorithme et l'architecture sont conçus ensemble et de façon optimale pour une classe d'algorithmes donnée. Ici il s'agit de recherche transdisciplinaire, mathématiques-informatique afin de relever le défi du passage à l'échelle.

En simulant des modèles avec une résolution de plus en plus fine, nous arrivons à des problèmes de visualisation et de traitement de grandes masses de données. Dans certaines applications de reconnaissance visuelle, une seule base de données atteint déjà les 6 To. De plus, des instruments de mesure (satellites, sondes, etc.) fournissent des masses de données atteignant les Po (péta-octets) et qui servent comme entrée pour l'assimilation de données dans des modèles d'océanographie et de météorologie. On parle du 4^e paradigme de la science, où la recherche est désormais pilotée par des données (voir : <http://research.microsoft.com/en-us/collaboration/fourthparadigm/>).

Finalement, nous commençons à aborder le traitement et la quantification de l'incertitude qui est inhérente dans les modèles et les données dès lors que nous voulons simuler (de manière réaliste) un système physique complexe. Cette quantification exige de nouveaux modèles théoriques (modélisation stochastique, statistique, plans d'expériences numériques) et algorithmiques. Par exemple, la parallélisation des trajectoires et de réalisations, les méthodes de Monte Carlo, des filtres particuliers, etc. Si on doit monter en complexité et répondre aux défis actuels, la vérification (suis-je en train de résoudre correctement les équations ?) et la validation (suis-je en train de résoudre des équations correctes ?) sont indispensables. Ces deux aspects sont étroitement liés à la quantification d'incertitudes.

Afin de pouvoir relever ces défis, nous avons besoin de :

- Moyens humains, bien formés, pour la parallélisation de codes existants et le développement de nouveaux outils.
- Programmes/diplômes de formation en HPC, aux niveaux master et doctorat, commençant la sensibilisation dès le niveau de licence.
- Favoriser la pluridisciplinarité et la complémentarité des expertises pour une plus grande efficacité d'utilisation des ressources hardware, software et numériques.
- Centres de données facilement accessibles.
- Accès très flexible aux centres de calcul et aux clusters régionaux pour tester des nouvelles méthodes numériques, bien en amont de la mise « en production ».
- Outils de programmation adaptés aux changements d'architecture et à la communication entre codes de calcul. Outils de gestion des

gros volumes de données favorisant les E/S performantes.

- Renforcer le Groupe Calcul afin de fournir une plateforme de sauvegarde, de distribution et de maintenance des codes de calcul scientifique et du patrimoine logiciel développés dans toutes les unités du CNRS.

Puis, pour ce qui concerne l'offre nationale, nous avons besoin de :

- L'évolution rapide des moyens de calcul et plus particulièrement ceux des centres nationaux avec une montée en puissance planifiée des calculateurs haute performance.
- La possibilité d'utiliser une partie des potentialités de ces centres pour des expérimentations vers de nouvelles architectures.
- Le développement de grilles de calcul particulièrement adaptées au calcul intensif distribué et au stockage de données distribué.

Annexe

Liste des laboratoires de mathématiques pratiquant le calcul HP

Composition et principales thématiques

Laboratoire de Statistique et Génome, UMR8071 (INSMI – INB – Inra)

Directeur d'unité : Christophe AMBROISE

Université d'Évry

15 EC, 2 CNRS

Thématiques : statistique génétique, phylogénie, classification (bio-informatique).

Laboratoire de Mathématiques, UMR6620

Directeur d'unité : Michael Heusener (contact calcul : Thierry Dubois)

Université de Clermont

14 EC, 1 CNRS

Thématiques : méthodes numériques (EF, VF, DF), applications en mécanique des fluides, électromagnétisme.

Unité de Mathématiques Pures et Appliquées (UMPA), UMR5569

Directeur d'unité : Laurent Berger

ENS de Lyon

2 EC, 2 CNRS, 1 Inria

Thématiques : EDP, modélisation.

Institut de Recherche Mathématiques de Rennes (IRMAR), UMR6625

Directeur d'unité : Bachir Bekka (contacts calcul : Loïc Le Marrec,

Sylvain Desquesne, Florian Méhats)

Université de Rennes

41 EC, 4 CNRS, 2 Inria, 4 ITA/IR

Thématiques : ondes, vibrations, géométrie algébrique réelle, calcul formel, cryptographie, codes correcteurs d'erreurs, méthodes numériques, modélisation de phénomènes physiques.

Centre de Mathématique et de leurs Applications (CMLA), UMR8536

Directeur d'unité : Frédéric Pascal (contact calcul : Christophe Labourdette)

ENS de Cachan

5 EC, 10 CNRS, 1 IR

Thématiques : Mécanique des fluides, calcul scientifique, traitement d'images.

Laboratoire J.A. Dieudonné, UMR6621

Directeur d'unité : Philippe Maisonobe (contacts calcul : Médéric Argentina, Richard Pasquetti, Didier Auroux)

Université de Nice

35 EC, 17 CNRS, 1 Inria, 3 IR/ITA

Thématiques : 1) Systèmes complexes (2) Modélisation numérique et dynamique des fluides (3) Modèles cinétiques, contrôle optimal, analyse numérique, mathématiques appliquées à la biologie, analyse d'images, analyse fonctionnelle, assimilation de données (océanographie), plasmas de tokamak.

Laboratoire Amiénois de Mathématique Fondamentale et Appliquée, UMR6140

Directeur d'unité : Olivier Goubet (contact calcul : Mark Asch)

Université d'Amiens

8 EC

Thématiques : problèmes inverses (acoustique), décomposition de domaines (océanographie), éléments discrets (dynamique de milieux granulaires).

Laboratoire Biométrie et Biologie Évolutive (LBBE), UMR5558

Directeur d'unité : Dominique Mouchiroud

Université de Lyon

14 EC, 13 CNRS, 2 Inria, 1 Inra

Thématiques : bioinformatique, génomique évolutive, statistique, modélisation.

Laboratoire de Glaciologie et Géophysique de l'Environnement (LGGE) UMR5183 (INSU/INSIS/INEE)

Directeur d'unité : Paolo Laj (contacts calcul : Gallée, Hubert et Gagliardini, Olivier)

Université de Grenoble Joseph Fournier

3 EC, 5 CNRS

Thématiques : océan-atmosphère, climatologie, modélisation éléments finis des écoulements de glace.

Institut de Mathématiques de Bourgogne (IMB), UMR5584

Directrice d'unité : Lucy MOSER (contact calcul : Christian Klein)
Université de Dijon
11 EC, 2 CNRS

Thématiques : EDP dispersives.

Laboratoire Analyse, Géométrie Applications (LAGA), UMR7539

Directrice d'unité : Laurence Halpern (contact calcul : Gilles Scarella)
Université de Paris XII
7 EC, 2 CNRS, 1 IR/ITA

Thématiques : décomposition de domaines, simulation numérique pour les écoulements sanguins et milieux poreux, traitement d'images.

Laboratoire Jean Kuntzmann, UMR5224

Directeur d'unité : Éric Bonnetier (contacts calcul : Éric Blayo, Brigitte Bidégaray, Antoine Girard, Jérôme Lelong)
Université de Grenoble
26 EC, 5 CNRS, 7 Inria, 4 IR/ITA

Thématiques :

- MOISE : modélisation et calcul scientifique pour les sciences de l'environnement en collaboration avec les laboratoires de physiques de l'environnement de Grenoble et les différentes communautés liées à l'environnement (MERCATOR, LOCEAN...).
- EDP : modélisation, analyse et calcul scientifique appliqué aux sciences du vivant et aux sciences des matériaux. Applications en biologie, en mécanique des fluides, en micromagnétisme, nano-physique...
- LEAR : reconnaissance visuelle et apprentissage automatique.
- CASYS : calcul exact systèmes dynamiques.
- MATHFI : méthodes numériques probabilistes, mathématiques financières, calcul HPC pour les algorithmes probabilistes.

Institut de Recherche Mathématique Avancée (IRMA), UMR7501

Directeur d'unité : Thomas Delzant (contact calcul : Éric Sonnendruker)
Université de Strasbourg
8 EC, 1 CNRS, 2 Inria, 1 IR/ITA

Thématiques : calcul scientifique, EDP, théorie du contrôle.

Laboratoire Jacques-Louis Lions, UMR7598

Directeur d'unité : Yvon Maday
Université de Paris VI
43 EC, 9 CNRS, 8 Inria, 6 ITA

Thématiques : modélisation, analyse, analyse numérique, simulation, contrôle, optimisation.

Laboratoire Mathématique d'Orsay (LMO), UMR8628

Directeur d'unité : Patrick Gérard (contact calcul : Bertrand Maury)
Université de Paris XI
28 EC, 6 CNRS, 3 ITA

Thématiques : mécanique des fluides (compressibles, complexes, granulaires), sciences du vivant (respiration, écoulement sanguin, nage de micro-organismes), EDP non linéaires (ondes, Schrödinger).

Mathématiques-Analyse, Probabilités, Modélisations Orléans (APMO), UMR6628

Directeur d'unité : Stéphane Cordier
Université d'Orléans-Tours
9 EC, 1 ITA

Thématiques : contrôle, imagerie, modèles de croissance, milieux poreux, volcanologie.

Laboratoire d'Analyse, Topologie, Probabilités (LATP), UMR7353

Directeur d'unité : Jérôme Los (contact calcul : Gérard Henry)
Université de Marseille
30 EC, 1 CNRS, 1 ITA

Thématiques : analyses et méthodes numériques (volumes finis, éléments finis, ondelettes, décomposition de domaines, méthodes multi-grilles).

Institut Elie Cartan de Nancy (IECN), UMR7502

Directeur d'unité : M. Tucsnak (contact calcul : Xavier Antoine)
Université de Nancy
18 EC, 2 CNRS, 1 Inria, 1 ITA

Thématiques : mécanique des fluides, interaction fluide structure, acoustique, électromagnétisme, physique des plasmas, problèmes inverses, optimisation de forme.

Laboratoire de Mathématiques (LAMA), UMR5127

Directeur d'unité : Didier Bresch (contact calcul : Philippe Briand, Tom Hirschowitz)
Université de Chambéry
19 EC, 4 CNRS, 1 IR

Thématiques : simulation de type Monte-Carlo, simulation numérique en mécanique et mécanique des fluides, estimation de la complexité de communication des automates cellulaires élémentaires, algorithme de minimisation en imagerie.

Laboratoire de Mathématiques et leurs Applications (LMAP), UMR5142

Directeur d'unité : Laurent Bordes
Université de Pau
13 EC, 4 CNRS, 2 IR/ITA, 4 Inria

Thématiques : calcul scientifique 3D haute-résolution en géophysique et propagation d'ondes, résolution de grands systèmes et développement de méthodes numériques sophistiquées, écoulements complexes et multiphasiques, milieux poreux, simulation de réservoirs, transport de pollution, simulation numérique en aéronautique.

Laboratoire de Mathématiques de Besançon (LMB), UMR6623

Directeur d'unité : P. Hild (contact calcul : Gawtum Namah)
Besançon
10 EC, 2 IR/ITA

Thématiques : modélisation mathématiques et simulation du vivant ; algorithme parallèle pour écoulements en eaux peu profondes, simulation de la propagation des ondes acoustiques (pression) et élastiques

(déplacement) dans les matériaux à bandes interdites, problèmes à frontières libres, les méthodes de bases réduites.

Laboratoire Paul Painlevé, UMR8524

Directeur d'unité : Christophe Besse

Lille

22 EC, 3 Inria, 2 ITA/IR

Thématiques : (1) algèbre matricielle numérique (méthodes de projection de type Lanczos, valeurs de Ritz, fonctions de matrices, interaction avec la théorie du potentiel logarithmique, méthodes de préconditionnement), modélisation et calcul scientifique (physique des plasmas, transfert radiatif, biologie, dynamique moléculaire, méthodes éléments finis et volumes finis, influence des conditions aux limites), (2) systèmes de particules, les e.d.p. stochastiques, les théorèmes limites, la sélection de modèles, la statistique bayésienne, la fiabilité, les modèles d'économétrie, le traitement d'image et l'analyse de données.

Laboratoire Jean Leray, UMR6629

Directeur d'unité : Benoit Grebert (contact calcul : Christophe Berthon)

Nantes

11 EC, 1 IR

Thématiques : modélisation de la biologie (electrocardiologie), des sciences de l'environnement (st venant), de la physique (transfert radiatif) et de la mécanique. Les directions de recherche de l'équipe peuvent se regrouper en quatre thèmes : analyse numérique des EDP, calcul scientifique, statistique et statistique appliquée (géométrie aléatoire, processus temporels).

Institut de Mathématiques de Bordeaux (IMB), UMR5251,

Directeur d'unité : Jaulent (contact calcul : Luc Mieussens)

Bordeaux

17 EC, 1 CNRS, 4 Inria, 4 IR/ITA

Thématiques : calcul scientifique haute performance pour les écoulements compressibles et la propagation d'ondes, méthodes numériques pour les systèmes de particules, simulation de fluides complexes, contrôle de flot et optimisation de forme.

Institut de Mathématiques et de Modélisation de Montpellier (I3M), UMR5149

Directeur d'unité : Paradan (contact calcul : Rémi Carles)

Montpellier

23 EC, 2 CNRS, 1 IR

Thématiques : analyse convexe et optimisation, calcul scientifique, mécanique des fluides numérique (turbulence, optimisation de formes).

Centre de Mathématiques Appliquées (CMAP), UMR7641

Directeur d'unité : Vincent Giovangigli

Palaiseau

13 EC, 2 IR/ITA

Thématiques : traitement d'images, EDP dispersives, systèmes de particules.

Institut Camille Jordan (ICJ), UMR5208

Directrice d'unité : Elisabeth Mironescu (contacts calcul : Thierry Dumont, Damien Tromeur)

Lyon

7 EC, 2 CNRS, 1 Inria, 3 IR/ITA

Thématiques : méthodes de décomposition de domaine (Aitken-Schwarz, décomposition en temps), parallélisation de système d'EDO/EDA, accélération de la résolution de problèmes nonlinéaire, techniques de préconditionnement parallèles purement algébriques, réduction de modèles, application aux modèles d'écoulement en milieu poreux, au calcul de dérivées de solution de Navier-Stokes par rapport aux paramètres de la simulation, problèmes de réaction diffusion (combustion, environnement).

Institut de Mathématiques de Toulouse (IMT), UMR5219

Directeur d'unité : Patrick Cattiaux (contact calcul : Michel Fournié, Jérôme Monnier)

Toulouse

25 EC, 3 IR

Thématiques : dev d'outils : librairie Getfem++, integration de solveurs // (MUMPS), gestion automatique du parallélisme. Dev d'algo se prêtant bien au calcul // (décomposition de domaine par exemple) ; Application en Fluide (Navier-Stokes), Fluide-Structure pour aller vers Fluide-Structure-Contrôle. Imagerie avec des approches stochastiques et statistiques. Modélisation écoulements surfaces libres. Analyse de sensibilité, assimilation de données (variationnelle). Applications en hydrologie et glaciologie.

Autres laboratoires de l'INSMI ayant une activité de calcul :

- Angers : UMR 6093, Directeur : Loïc Chaumont
- Brest/Vannes : UMR 6205, Directeur : Thierry Levasseur
- Cergy : UMR 8088, Directeur : Vladimir Georgescu
- Marne la Vallée : UMR 8050, Directeur : François Bouchut
- Paris-CEREMADE : UMR 7534, Directeur : Olivier Glass
- Paris-MAP5 : UMR 8145, Directrice : Annie Raoult
- Poitiers : UMR 7348, Directeur : Pol Vanhaecke
- Rouen : UMR 6085, Directeur : Nourdine Mir
- Versailles : UMR 8100, Directrice : Ariane Mézard

Soit environ : 447 EC, 94 CNRS, 35 Inria et 48 IR/ITA

2.5. Institut de physique (INP)

Le calcul HP à l'INP couvre un nombre de domaines très variés. Sont impliqués une soixantaine de chercheurs et d'enseignants-chercheurs et un nombre comparable de doctorants et de post-doctorants. Ceux-ci sont regroupés dans près d'une vingtaine de laboratoires. Bien que le nombre de chercheurs directement concernés soit relativement restreint, les résultats des travaux effectués par ces experts intéressent un nombre beaucoup plus important de scientifiques et de laboratoires, notamment ceux dont les travaux expérimentaux nécessitent des études théoriques poussées. C'est le cas, par exemple, des expériences en physique des particules élémentaires où l'interprétation des résultats d'une grande expérience telle que LHCb, faite auprès du Large Hadron Collider (LHC) du CERN, nécessite des calculs précis en chromodynamique quantique non perturbative. C'est le cas également des mesures par spectroscopie Raman sur molécule unique de systèmes et des phénomènes impliquant des protéines très complexes et dont l'interprétation nécessite des simulations sur des temps longs (microseconde) de plusieurs centaines de milliers à un million d'atomes.

2.5.1. Les thématiques du calcul haute performance à l'INP

Le calcul haute performance est utilisé dans de nombreux domaines au sein de l'INP. En majorité, trois comités thématiques de GENCI sont concernés : 5 Physique théorique et physique des plasmas (*CELIA, CPT, LKB, LOA, LPTO, LPTT, LPTMC, MSC*), 8 Chimie quantique et modélisation moléculaire (*IMPMC, LPCNO, LCPQ, PhLAM*), 9 Physique, chimie et propriétés des matériaux (*IMPMC, CEMES, CPTX, IEMN*). Cette dernière communauté est structurée autour du GDR CoDFT. Il y a également des contributions aux thématiques 7 Systèmes moléculaires organisés et biologie (*LIC, ICB*) et 10 Nouvelles applications (*LULI*). Les différents domaines comprennent :

- La physique statistique et de la matière condensée, couvrant les systèmes de spins (LKB, LMSC, LPTMC), les effets de localisation (LKB), y compris les ondes en milieux complexes/désordonnés et la diffusion multiple (LOA), les liquides et gaz quantiques (LPTMC), les systèmes de fermions fortement corrélés (LPTT) envisagés également à l'aide de la DMFT (CPhT), les mouvements Browniens fractionnaires de sondes locales de la dynamique de molécules complexes (ICB).
- La physique des plasmas chauds rencontrée dans les problèmes liés à la fusion magnétique, et plus particulièrement aux interactions onde-particule (IJL, CELIA).
- La physique des particules élémentaires où les propriétés fondamentales de la matière sont étudiées ab initio par des simulations de la chromodynamique quantique (QCD) sur réseau (CPT, LPTO). Le domaine comprend plus généralement l'étude des phénomènes non perturbatifs en théorie quantique des champs (QFT) et ses applications à la physique des particules et nucléaire. Cette communauté est structurée autour du GDR « Physique subatomique et calculs sur réseau ».
- La physique moléculaire, allant de la modélisation des propriétés de nano-objets (LPCNO) à l'étude de propriétés de biomolécules (IMPMC, LIC, ICB), en passant par l'étude de complexes d'ions lourds

(PhLAM), ou par la simulation de la compression du fer par laser à haute intensité pour l'étude du noyau terrestre (LULI).

- La physique des matériaux, qui va de l'étude de matériaux à fortes corrélations électroniques (CPTX) à l'étude de matériaux spécifiques avec applications industrielles (CEMES), en passant par l'étude ab initio de systèmes moléculaires sous conditions extrêmes (IMPMC) ou par les propriétés de nanostructures (CEMES, IEMN).

2.5.2. Enjeux, défis et besoins à moyen terme

Les équipes de physique moléculaire et de physique des matériaux ont des préoccupations scientifiques proches de celles de la chimie théorique. De ce fait, les enjeux dans ces domaines ont des recouvrements importants. Il s'agit de développer une physique prédictive pertinente pour l'expérience ou qui peut même se substituer à l'expérience. Cela implique, en général, l'usage de méthodes multiples couplées au développement d'approches multi-échelles, allant du domaine électronique au domaine atomique, et tendant vers le mésoscopique, voire le macroscopique. Les défis concernent la modélisation de systèmes de plus en plus complexes par leur taille, leur hétérogénéité, leur environnement, leur dynamique, etc. Par exemple, certaines équipes font des simulations de dynamique moléculaire ab initio sur des systèmes contenant du désordre, en lien avec l'expérience, pour lesquelles la statistique requise est très importante, et qui nécessiteraient un ordre de grandeur supplémentaire en allocation de ressources CPU pour aboutir.

De plus, ces outils s'ouvrent à des domaines connexes tels la biologie moléculaire, la chimie et la science des matériaux. Un des objectifs dans ce domaine est de simuler la fragmentation de systèmes modèles (bases, sucres de l'ADN ou de l'ARN) ionisés. L'enjeu est une meilleure compréhension des processus physico-chimiques ultra-rapides ayant lieu lors de l'irradiation de tissus biologiques et qui mènent à la mort cellulaire ou à la formation d'aberrations chromosomiques. Ces problèmes sont étudiés à l'aide de codes de TD-DFT qui permettent de suivre la dynamique des noyaux guidée par les forces locales qui découlent des réarrangements électroniques. Ces codes sont très coûteux en temps de calcul et l'étude de systèmes de plus en plus réalistes en biologie demande l'amélioration constante des performances des supercalculateurs des centres nationaux.

Un des autres défis, dans le domaine de la physique appliquée aux molécules biologiques, concerne la simulation numérique des signaux physiques (fluorescence, spectroscopies) de systèmes biologiques (essentiellement des protéines) in vivo, c'est-à-dire dans un environnement imitant au mieux celui de la cellule. Cela concerne, par exemple, la compréhension du repliement assisté par des chaperons et du mauvais repliement (maladies d'Alzheimer) de protéines en interactions avec leurs partenaires dans la cellule. Les simulations numériques utilisent des modèles atomistiques impliquant des millions d'atomes couplés à des simulations multi-échelles utilisant des modèles microscopiques simplifiés à gros grains en dynamique moléculaire ou par Monte Carlo. De tels calculs peuvent être réalisés sur des machines dédiées (Anton, David Shaw's group) ou exploiter la puissance crête de supercalculateurs avec une très grande efficacité car les calculs sont hautement parallélisables puisqu'il s'agit de générer le plus grand ensemble possible de configurations indépendantes afin de calculer la surface d'énergie libre du système.

Pour tous ces domaines, il est souhaitable de continuer à élargir la capacité de calcul des centres nationaux, tout en prenant en compte les spécificités de chaque application. Par exemple, dans les calculs les plus lourds de structure électronique utilisant le code DIRAC, on peut avoir besoin de 32Go (voir plus) de mémoire par processus MPI, en plus de grandes quantités (~1-2 To) d'espace sur disque pendant le calcul. Ce sont des demandes très différentes de celles pour les calculs de dynamique moléculaire classique, qui nécessitent un grand nombre de processeurs mais peu de mémoire par processus (donc la situation idéale pour profiter d'une machine de type Blue Gene).

Les calculs de Monte Carlo quantique en matière condensée ont progressé continûment ces dernières années. Ils permettent de quantifier les effets de corrélation et une comparaison directe avec les expériences, en particulier pour les gaz quantiques. Pour les systèmes électroniques, les calculs de haute précision permettent de valider des approches approximées traditionnellement utilisées pour calculer la structure électronique des matériaux. Un des grands défis dans les approches de Monte Carlo quantique est l'extrapolation des résultats obtenue à taille finie à la limite thermodynamique. Ces calculs peuvent être efficacement faits sur des supercalculateurs massivement parallèles avec de nombreux calculs quasi-indépendants. La diversité et la complexité des codes et la petite communauté des chercheurs dans ce domaine restent un problème.

Toujours en physique de la matière condensée, un des enjeux majeurs est la compréhension de supraconducteurs à haute T_c . Ici, il est probable que les méthodes de DMFT mènent à des progrès importants dans un avenir proche. Ce serait d'ailleurs une réussite majeure du HPC que d'en révéler les mécanismes et, plus encore, que d'indiquer de nouvelles structures supraconductrices possibles.

Dans le domaine des atomes ultra-froids, la complexité accrue des expériences (mélanges de bosons et/ou de fermions, polarisés ou non) devrait générer de nouvelles phases, plus ou moins exotiques, dont l'analyse détaillée nécessitera probablement des développements méthodologiques nouveaux et sûrement des études numériques en HPC.

En ce qui concerne la théorie quantique des champs, la QCD sur réseau a connu des progrès majeurs ces cinq dernières années, notamment grâce à des équipes françaises et aux moyens que GENCI a mis à leur disposition. Il est maintenant possible de faire des calculs rigoureux de processus importants en physique des particules et nucléaire. Cette arrivée à maturité, pour certains problèmes parmi les plus simples, ne fait que multiplier les pistes d'étude de phénomènes non perturbatifs en QFT.

En physique des particules élémentaires, ces enjeux se déclinent le long de deux axes principaux. Le premier mène aux très hautes énergies, où des accélérateurs de plus en plus puissants recherchent de nouvelles particules et interactions fondamentales. En particulier, le LHC du CERN cherche à mettre en évidence la brisure de la symétrie électrofaible qui donne une masse aux particules élémentaires. Ici, le travail en QFT sur réseau consiste principalement à explorer l'espace des théories dans lequel ce phénomène serait le résultat de nouvelles interactions fortes. Le long du second axe, la nouvelle physique est recherchée indirectement en effectuant des mesures de haute précision, y compris sur des processus très rares, comme le fait par exemple l'expérience LHCb au CERN. Là, la QCD sur réseau se doit de décrire, avec une grande pré-

cision, les effets de l'interaction forte sur ces phénomènes. Le rôle que joueront les simulations numériques de théories quantiques des champs dans l'élucidation de toutes ces questions ne fera que croître dans les années à venir.

En physique nucléaire, un des enjeux majeurs est de décrire la physique des noyaux atomiques et de la matière nucléaire, en termes de quarks et de gluons, à l'aide de la théorie fondamentale, la QCD. Au-delà de l'intérêt qu'il y a à montrer que la QCD décrit correctement le monde nucléaire, il s'agit de calculer des quantités importantes qui sont très difficiles, voire impossibles à mesurer expérimentalement. Par exemple, les taux de certaines réactions, impliquant des petits noyaux et des particules instables (les hyperons), sont très importants pour la nucléosynthèse stellaire et la dynamique des supernovae, mais ne sont pas mesurables en pratique. Un autre exemple est constitué par les interactions multi-nucléons (au-delà de deux), qui sont essentielles pour décrire correctement les noyaux atomiques.

Les simulations numériques en QFT peuvent exploiter un large éventail de plateformes matérielles. D'ailleurs, ces simulations ont été et sont encore souvent le moteur du développement d'ordinateurs à très hautes performances (« extreme capability computers ») qu'elles exploitent généralement avec des efficacités élevées, entre 20 et 50 % de la puissance crête. Ces ordinateurs (de type IBM Blue Gene, par exemple) sont nécessaires pour produire les ensembles de configurations qui forment la base de tout calcul de QFT sur réseau. Les ensembles sont des échantillons de Monte Carlo générés par une longue chaîne de Markov. Les différentes grandeurs physiques doivent ensuite être calculées sur chaque membre de l'échantillon avant d'être moyennées sur l'ensemble. Il s'agit, ici, de nombreux calculs indépendants. Ceux-ci peuvent être efficacement faits sur de plus petites partitions d'un gros supercalculateur ou, si les systèmes étudiés ne sont pas trop gros, sur des fermes de PCs ou de GPUs.

Pour répondre à chacun des nombreux défis dans ce domaine, il faudra que les chercheurs aient accès à des supercalculateurs massivement parallèles à l'échelle de l'exaflop/s, avec une montée en puissance planifiée des moyens de calcul disponibles dans les centres nationaux et européens. En cela, les calculs ab initio en physique des particules et nucléaire ressemblent aux autres très gros consommateurs de temps de calcul, tels la climatologie, l'océanographie ou la chimie quantique.

Parmi les problèmes auxquels sont confrontés de nombreux domaines numériques, il y a la diversité et la complexité croissante des codes et des ordinateurs. Bien que ces derniers ouvrent la possibilité d'aborder des problèmes inimaginables il y a encore quelques années, pour être pleinement exploités ils imposent aux développeurs d'algorithmes et de codes une compréhension détaillée de leurs architectures et une grande versatilité. Ils imposent également de repenser les stratégies de programmation de façon fréquente. Dans ce contexte, il est impératif d'investir dans la formation de scientifiques avec des qualifications pointues dans le développement d'algorithmes et de codes HP. Ici, la Maison de la simulation a un rôle important à jouer. Il est également important d'offrir aux plus brillants de ces scientifiques des opportunités de carrière intéressantes en recherche, afin de pérenniser leur savoir-faire. Ce genre d'investissement est intéressant, pas seulement pour la recherche fondamentale. En effet, comme le montre l'expérience de la QFT sur réseau,

les scientifiques formés dans ce domaine jouent un rôle important dans le développement du calcul HP au niveau international, dans d'autres domaines et dans l'industrie.

Il est également important de souligner la montée en puissance des besoins en capacité de stockage et d'archivage. À titre d'exemple, les simulations des propriétés physiques de protéines complexes par dynamique moléculaire (qui sont à la frontière de l'état de l'art) génèrent de l'ordre de 40 To de données/an sur le calculateur de l'ICB.

ANNEXE

Laboratoires de l'INP utilisant des moyens de calcul HP

Centre des Lasers Intenses et Applications (CELIA), UMR5107

Responsable(s) : Philippe BALCOU (directeur)
CNRS – CEA – Bordeaux I

Équipe Interaction laser-plasma (resp. projets calcul intensif Emmanuel d'Humièrre, 1 EC, 1 doc)

Thématiques : interaction laser-plasma à haute intensité et développement de codes Particle-In-Cell pour la modélisation des plasmas.

Centre d'Élaboration de Matériaux et d'Études Structurales (CEMES), UPR8011

Responsable(s) : Alain CLAVERIE (directeur), Virginie SERIN (directeur-adjoint)

CNRS Toulouse

Équipe Matériaux cristallins sous contrainte modélisation – simulations (resp. Alain Couret, 22 C/EC, 12 docs/postdocs, resp. projets calcul intensif Magalie Benoît, Nicolas Combe, Joseph Morillo, 3 C ou EC, 1 doc, 1 postdoc)

Thématiques : calculs DFT et dynamique moléculaire ab initio en matière condensée.

Centre de Physique Théorique (CPT), UMR6207

Responsable(s) : Thierry MARTIN (directeur), Serge LAZZARINI (directeur-adjoint)

CNRS – Aix-Marseille

Équipe de Physique des Particules (resp. et resp. projets calcul intensif Laurent Lellouch, 3 C, 2 docs, 1 postdoc, dont 1 C et 3 docs/postdocs HPC)

Thématiques : physique de l'interaction forte et électrofaible, chromodynamique quantique sur réseau, en particulier au sein de la collaboration Budapest-Marseille-Wuppertal.

Centre de Physique Théorique de l'École Polytechnique (CPHT), UMR7644

Responsable(s) : Patrick MORA (directeur)
CNRS – Polytechnique

Équipe Matière Condensée (resp. Antoine Georges, 5 C/EC, 2 docs, 6 postdocs, resp. projets calcul intensif Silke Biermann, 1 EC, 2 docs, 3 postdocs)

Thématiques : physique des systèmes quantiques fortement corrélés, structure électronique de matériaux comme les oxydes de métaux de transition et les composés de terres rares, physique des atomes ultra-froids dans les réseaux optiques.

Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne (ICB), UMR5209

Responsable(s) : Gilles BERTRAND (directeur)

CNRS – Dijon

Équipe Physique appliquée aux protéines (resp. Patrick Senet, 2 EC, 2 docs)

Thématiques : dynamique conformationnelle, modes lents et repliement des protéines, transition de type verre des protéines, physique de l'eau et liaisons hydrogènes, descripteurs de la réactivité chimique & propriétés électroniques de protéines.

Institut d'Électronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie (IEMN), UMR8520

Responsable(s) : Lionel BUCHAILLOT (directeur), Gilles DAMBRINE (directeur-adjoint)

CNRS – Lille I – Valenciennes – ISEN Recherche – Centrale Lille

Groupe Physique (resp. Christophe Delerue) – Équipe Structure électronique (resp. Ludger Wirtz, 4 C, 3 postdocs)

Thématiques : nanocristaux, nanofils, nanotubes, graphène, spectroscopie théorique, calculs ab-initio et semiempiriques.

Institut de Minéralogie et de Physique des Milieux Condensés (IMPMC), UMR7590

Responsable(s) : Bernard CAPELLE (directeur)

CNRS – Paris VI, VII – IPGP – IRD

• Équipe Théorie quantique des matériaux (resp. Matteo Calandra, 7 C/EC)

Thématiques : supraconductivité et propriétés de transport dans les solides, interaction électron-phonon, propriétés dynamiques des solides, spectres vibrationnels, modélisation numérique des spectroscopies (raman électronique et vibrationnelle, infrarouge, de cœur, RMN, RPE), développement de codes.

• Équipe Physique des milieux denses (resp. Stefan Klotz, 14 C/EC, resp. projets calcul intensif, A. Marco Saitta, 2 EC, 3C)

Thématiques : Systèmes moléculaires sous conditions extrêmes de pression et de température, nouvelles propriétés des glaces cristallines et amorphes, purs et salés (plasticité, superionicté), propriétés de l'eau et des solutions aqueuses en phase supercritique, calculs et dynamiques moléculaire ab initio, simulations classiques.

• Équipe Verres et minéraux (resp. George Calas, 10 C/EC, resp. projets calcul intensif Guillaume Ferlat, 1 EC, 1 IR)

Thématiques : structures des verres, modifications structurales à haute température, verres sous pression, insertion des éléments de transition.

• Équipe Mécanismes physiques de létalité et mutagénèse radio-induites (resp. Marie-Françoise Politis 3 C/EC, resp. projets calcul intensif Marie-Anne Hervé du Penhoat, 2 EC)

Thématiques : mécanismes physiques et physico-chimiques à l'ori-

gine de l'inactivation cellulaire et de la cancérisation induites par rayonnements.

- Équipe Minéralogie Environnementale (Resp. Guillaume Morin, 8 C/EC, resp. projets calcul intensif Marc Blanchard, 2 C et 1 doc)

Thématiques : propriétés structurales, vibrationnelles et thermodynamiques (e.g. fractionnements isotopiques) des minéraux importants en Sciences de la Terre, cristallographie des éléments traces et éléments de transition dans les minéraux, processus se produisant à l'interface solide-solution.

Laboratoire Kastler Brossel (LKB), UMR8552

Responsable(s) : Paul INDELICATO (directeur), François BIRABEN (directeur-adjoint)

CNRS – ENS, Paris VI

- Équipe Systèmes Quantiques Complexes (resp. et resp. projets calcul intensif Dominique Delande, 2 EC, 2 docs, 1 postdoc).

Thématiques : transport quantique dans les systèmes désordonnés, localisation dynamique, localisation d'Anderson, dynamique chaotique et transport, dynamique des gaz atomiques ultra-froids, problème à trois corps en mécanique quantique.

- Équipe Électrodynamique Quantique des Ions Lourds et Atomes Exotiques (resp. Paul Indelicato)

Thématiques : calculs des spectres d'atomes ou d'ions lourds, en particulier des effets d'électrodynamique quantique.

Laboratoire de Physique et Chimie des Nano-Objets (LPCNO), UMR5215

Responsable(s) : Bruno CHAUDRET (directeur), Romuald POTEAU (directeur-adjoint)

INSA – CNRS – Toulouse III

Équipe Modélisation Physique et Chimique (resp. et resp. projets calcul intensif Romuald Poteau, 6 C/EC, 5 docs)

Thématiques : interactions molécules – surfaces (graphène, métaux), agrégats et nanoclusters organométalliques, réactivité de complexes greffés en surface, catalyse homogène – complexes de lanthanides, chimie organométallique des ligands amphiphiles, structure et réactivité de complexes d'actinides, peptidomimétique, spectroscopies de molécules d'intérêt biologique.

Institut Langevin « Ondes et Images » (LOA), UMR7587

Responsable(s) : Mathias FINK (directeur), Arnaud TOURIN (directeur-adjoint), Rémi CARMINATI (directeur-adjoint)

CNRS – ESPCI Paris Tech

Équipe Localisation Acoustique (resp. projets calcul intensif Patrick Sebbah)

Thématiques : laser aléatoire, instabilités de speckle, localisation acoustique et forte en cavités micro-ondes.

Laboratoire de Physique Théorique (LPT), UMR5152

Responsable(s) : Clément SIRE (directeur)

CNRS – Toulouse III

Équipe Fermions Fortement Corrélés (resp. Didier Poilblanc, 6 C/EC, 4 docs/postdocs, resp. projets calcul intensif Sylvain Capponi, 4 C et EC, 2 docs et 2 postdocs)

Thématiques : modèles de fermions fortement corrélés de matière condensée, systèmes frustrés, supraconductivité.

Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée (LPTMC), UMR7600

Responsable(s) : Pascal VIOT (directeur)

CNRS – Paris VI

Équipe Corrélations quantiques (resp. projets calcul intensif Markus Holzmann, Philippe Sindzingre, 4 C et EC, 1 IR)

Thématiques : gaz de fermions désordonnés, systèmes de spins quantiques, fermions et bosons fortement corrélés, atomes froids.

Laboratoire de Physique Théorique d'Orsay (LPTO), UMR8627

Responsable(s) : Hendrik J. HILHORST (directeur), Philippe BOUCAUD (directeur-adjoint)

CNRS – Paris XI

Équipe Physique des particules (resp. projets calcul intensif Jaume Carbonell (LPSC), 3 C, 2 docs)

Thématiques : QCD dans l'infrarouge, physique des quarks lourds, théorie des quarks lourds, théorie de Yukawa sur réseau, participation à la collaboration ETM de chromodynamique quantique sur réseau.

Laboratoire pour l'Utilisation des Lasers Intenses (LULI) UMR7605

Responsable(s) : François AMIRANOFF (directeur)

Polytechnique – Paris VI – CEA – CNRS

Équipe Matière à Haute Énergie et Densité Obtenue par Choc laser (MHEDOC) (27 C/EC, resp. projets calcul intensif Michel Koenig, 2 C, 1 postdoc)

Thématiques : matière au confluent de la physique de la matière condensée et de la physique des plasmas.

Laboratoire Matière et Systèmes Complexes (MSC), UMR7057

Responsable(s) : Loïc AUVRAY (directeur)

CNRS – Paris VII

Équipe Théorie des Systèmes Complexes (resp. Jean-Baptiste Fournier, 17 C/EC, resp. projets calcul intensif Pascal Monceau, 2 EC)

Thématiques : systèmes hors d'équilibre, vieillissement associé à des cinétiques stochastiques, organisation, réponses et mouvement collectifs dans les systèmes d'intérêt biologique, modélisation des systèmes biologiques, dynamique chaotique et transport, réseaux de régulation biologique.

Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Molécules (PhLAM), UMR8523

Responsable(s) : Georges WLODARCZAK (directeur)

CNRS – Lille I

Équipe Physico-Chimie Moléculaire Théorique (PCMT) (12 C/EC, 2 docs, resp. projets calcul intensif André Severo Pereira Gomes, 3C/EC, 1 doc)

Thématiques : spectroscopies de molécules d'intérêt biologique, réactivité et dynamique à la surface de la glace, photoluminescence de matériaux en phase condensée, dynamique moléculaire des espèces contenant éléments lourds en solution (développement de champs de force classiques pour les actinides et lanthanides et leur application), développement de codes.

Soit 181 EC-C, 59 doctorants et 2 IR

2.6. L'Institut national des sciences de l'Univers (INSU)

Le calcul intensif a permis ces dernières années des avancées spectaculaires dans les sciences de l'Univers. Il est aujourd'hui un outil de recherche puissant, en complément des approches théoriques et expérimentales en astronomie et astrophysique, climat/océan/atmosphère, sciences de la Terre, surfaces et interfaces continentales.

La communauté des sciences de l'Univers est fortement intégrée et structurée au niveau international autour des systèmes d'observation, des infrastructures d'archivage et de distribution de données ouvertes. Dans ces domaines, l'INSU joue un rôle moteur au travers de nombreux grands projets nationaux, européens et internationaux.

Les applications du calcul intensif portent sur des problèmes fondamentaux concernant la compréhension et l'évolution des systèmes Terre et Univers, ainsi que sur de nombreux problèmes d'intérêt sociétal : prédiction et évolution du climat, prévision et prévention des aléas sismiques et volcaniques et des risques associés (tsunamis, écoulements gravitaires...), exploration et gestion des ressources énergétiques, stockage des déchets et du dioxyde de carbone, prédiction et évaluation des changements environnementaux.

Répondre à ces enjeux scientifiques implique d'intégrer :

- les systèmes et les grands instruments d'observation aux échelles globales et régionales, associant réseaux d'instruments permanents à terre et en mer, technologies de mesures spatiales et campagnes d'observation ciblées ;
- le développement de méthodes innovantes de traitement et d'analyse des gros volumes de données issues des systèmes d'observation, des grands instruments et des simulations numériques afin d'en extraire des informations nouvelles ;
- le développement de nouveaux modèles numériques permettant une résolution multi-échelles et multi-physiques pour la simulation quantitative et prédictive de l'évolution et de la variabilité des grands systèmes issus des sciences de l'Univers ;
- le développement de méthodes performantes d'imagerie, d'inversion et d'assimilation de données permettant de contrôler et de confronter ces modèles aux observations ;
- le développement de nouvelles méthodes probabilistes et stochastiques permettant de prendre en compte et de quantifier les incertitudes, directes et inverses, ainsi que les événements extrêmes.

Les besoins de ces applications en termes d'algorithmes, de développement logiciel et de capacités de calcul et de stockage constituent un des grands défis des prochaines années.

Les taux de production des données générées par les systèmes d'observation et de surveillance et les simulations numériques en sciences de l'Univers défient aujourd'hui nos capacités à les analyser et à les modéliser numériquement.

Afin d'exploiter et de valoriser ces grandes masses de données, de garantir et d'optimiser la conception et l'opération des grands systèmes d'observation, la communauté des sciences de l'Univers est entrée dans un

nouveau paradigme. Les découvertes scientifiques et les innovations à venir dépendent de notre capacité à explorer, analyser, simuler et modéliser (inversion, assimilation) de très grandes masses de données hétérogènes.

Cela exige une approche holistique intégrant de nouvelles méthodes d'exploration et d'analyse statistique de données, de simulation et de modélisation numérique de nouveaux modèles d'algorithmique et de programmation parallèle et de nouvelles architectures et urbanisation des infrastructures de calcul et de données.

La recherche en sciences de l'Univers exploite l'ensemble de la pyramide des ressources de calcul et de données : des grands centres nationaux aux méso centres. L'INSU est un des principaux utilisateurs des grands centres nationaux pilotés par GENCI. Dans le cadre des campagnes nationales d'attribution de ressources, l'INSU représente en 2012 :

- 100 projets retenus dans les comités thématiques CT1 (Environnement) et CT4 (Astrophysique et géophysique) ;
- ~25 % des ressources attribuées sur Vargas (IBM SP6 IDRIS) ; ~14 % des ressources attribuées sur Jade (SGI Altix, CINES) ;
- ~48 % des ressources attribuées sur Brodie (NEC SX8, IDRIS) ;
- 25 % des ressources attribuées sur Titane (Cluster Bull Xéon/GPU, CCRT) ;
- ~8 % des ressources attribuées sur Babel (IBM BlueGene, IDRIS).

Enfin, plusieurs projets (Astronomie et astrophysique, Océan/Atmosphère, Sciences de la Terre) ont été sélectionnés dans le cadre de la machine Curie de PRACE (TGCC).

L'INSU explore par ailleurs et contribue aux nouvelles technologies de calcul et de données en particulier aux travers du réseau national des Observatoires des Sciences de l'Univers (OSU) et dans le cadre de l'Institut des grilles et du cloud (IdGC) du CNRS et de France grilles.

2.6.1. Les thématiques scientifiques du calcul intensif à l'INSU

Les principales thématiques et enjeux brièvement indiqués ici sont extraits des exercices de prospectives de l'INSU (<http://www.insu.cnrs.fr/prospectives>), auxquels on se référera pour plus de détails.

Astronomie et astrophysique : dynamique, formation et évolution du soleil et des étoiles, propagation du vent solaire et interaction avec la magnétosphère et la dynamo terrestre ; formation des planètes et des systèmes planétaires ; étude des astres condensés, trous noirs, physique relativiste ; dynamique et fragmentation du milieu interstellaire, formation des cœurs pré-stellaires (compréhension de la formation des étoiles et du milieu interstellaire diffus) ; calcul et simulation des processus moléculaires dans les milieux interstellaires et circumstellaires et les atmosphères planétaires ; formation, dynamique et évolution des galaxies en interaction avec la formation et l'histoire des étoiles ; cosmologie et formation des grandes structures et des amas de galaxies.

Climat/Océan/Atmosphère : processus affectant la chimie de l'atmosphère et de ses rétroactions sur le climat ; quantification et prédiction des interactions climat-cycles biogéochimiques des écosystèmes marins ; prévision, évolution et variabilité du climat et des changements

climatiques à différentes échelles de temps et d'espace ; comprendre et simuler la dynamique de formation des nuages et des précipitations en interaction avec la simulation et la prévisibilité du climat ; couplage et échanges aux interfaces du système Terre (atmosphère, océan, continent, cryosphère, biosphère...).

Sciences de la Terre : imagerie et tomographie de la structure et des propriétés de la Terre ; détection, caractérisation et imagerie des sources sismiques ; dynamique et évolution du système Terre : fluides géophysiques ; compréhension et simulation du champ magnétique et de la dynamo terrestre et des planètes ; minéralogie et propriétés physiques haute pression – haute température des matériaux terrestres ; compréhension et évaluation et méthodes de surveillance de l'aléa et des risques sismique et volcanique ; étude des environnements de surface actuels et anciens et des couplages, paléoclimats ; exploration et gestion des ressources minérales et énergétiques ; stockage des déchets et du dioxyde de carbone.

Surfaces et Interfaces Continentales : processus d'érosion et de transports aux interfaces et surfaces continentales ; processus de couplage et d'échanges aux différentes interfaces continentales ; prévision et évaluation des changements environnementaux globaux et régionaux.

2.6.2. Enjeux et défis méthodologiques du calcul à l'INSU

À ces enjeux scientifiques correspondent des enjeux méthodologiques et algorithmiques qui traversent l'ensemble des disciplines des sciences de l'Univers et qui stimulent des interfaces de collaboration interdisciplinaire matérialisées et soutenues par de nombreux GDR et programmes ANR.

Simulation numérique

La puissance des nouvelles architectures de calcul intensif contrôle la résolution spatiale et temporelle des simulations numériques. Elles contraignent la durée de ces simulations, le niveau de complexité des modèles, ainsi que le nombre de réalisations et de scénarios nécessaires pour aborder la variabilité et les incertitudes de ces modèles.

Couplage de modèles multi-physique. Les systèmes physiques en sciences de l'Univers sont complexes et fortement couplés. Il est fondamental de pouvoir étudier l'évolution de ces systèmes en tenant compte des interactions entre modèles physiques différents (en termes de dynamique et d'échelles). Cela requiert de nouvelles méthodes de couplage adaptées exploitant les nouvelles architectures massivement multi-cœur.

Modélisation multi-échelles. Les systèmes en sciences de l'Univers impliquent la résolution d'échelles en temps et en espace qui diffèrent de plusieurs ordres de magnitudes. Cela requiert de nouvelles approches, exploitant les nouvelles architectures massivement multi-cœurs et basées sur des stratégies de maillage adaptatif, de méthodes consistantes d'homogénéisation déterministe ou stochastique en temps et en espace, ainsi que de nouvelles méthodes d'intégration en temps.

Modélisation des processus moléculaires. La simulation d'ensemble des propriétés structurales, spectroscopiques et dynamiques fait appel aux méthodes de calcul quantique de la physique moléculaire et de la

chimie théorique. Les enjeux en terme de complexité (taille, hétérogénéité et excitation) sont : la précision des surfaces de potentiel, le nombre de degrés de liberté quantique et la convergence ; la taille des systèmes (grands nombres d'atomes) sur le plan structural, dynamique et thermodynamique ; la durée de simulation et l'échantillonnage statistiquement représentatifs ; les interactions gaz-grain et les processus inélastiques.

Quantifier les incertitudes directes. Ces incertitudes sont associées aux limites intrinsèques de l'observation de la modélisation physique. Caractériser comment ces incertitudes se propagent au travers des différentes échelles et affectent l'évolution et la prédiction de ces modèles, requiert de nouvelles approches stochastique multi-échelles et des réalisations d'ensemble, impliquant un grand nombre de simulations parallèles et la génération de très gros volumes de données à analyser à posteriori de manière probabiliste.

Inversion et/ou assimilation de données

Les sciences de l'Univers sont par nature observationnelles autour d'un cycle acquisition-traitement-analyse-prédiction-contrôle-décision.

Inversion par méthodes d'optimisation globale. Ces méthodes permettent d'explorer de manière globale ou semi-locale l'espace des paramètres, via des algorithmes de type recuit simulé, génétique ou de Monte-Carlo et de caractériser de manière probabiliste les incertitudes inverses. Le développement de nouvelles stratégies parallèles pour l'exploration d'espaces de paramètres de grande dimension, ainsi que l'optimisation du grand nombre de simulations directes impliquées, constituent le défi des prochaines années dont les attendues sont la caractérisation probabiliste de l'espace des modèles.

Inversion par méthodes d'optimisation locale. L'exploitation des méthodes adjointes, associée à une linéarisation locale du problème, offre des perspectives concrètes pour l'inversion et l'assimilation de données via un calcul performant du gradient de la fonction coût dans une stratégie d'optimisation itérative et multi-échelles. Le développement de nouvelles stratégies pour l'optimisation de la résolution parallèle du grand nombre de simulations, associées aux problèmes directs et adjoints, ainsi que du grand nombre d'E/S séquentielles, est un enjeu important en raison des volumes de données associées. À chaque itération et pas de temps, l'état du modèle direct et adjoint doit être stocké. Un autre défi concerne aujourd'hui les solveurs parallèles pour les grands systèmes linéaires et non linéaires qui limitent aujourd'hui ces méthodes dans le cas de formulations implicites ou en fréquence.

Assimilation de données. Ces méthodes reposent principalement aujourd'hui sur des approximations différentes du filtre de Karman, construites par linéarisation des modèles. Les approches classiques (3D-Var et 4D-Var) impliquent l'intégration à chaque itération d'un modèle tangent linéaire et de son adjoint qui est principalement séquentielle en temps avec un grand nombre de communications. Les méthodes d'ensemble du filtre de Karman (ENKF), reposant sur une approximation des distributions de probabilités des états assimilés, constituent aujourd'hui une alternative. Si l'analyse peut être réalisée de manière indépendante pour chaque élément du vecteur d'état, elle implique un grand nombre de degrés de liberté et des besoins importants en termes de calcul et de stockage.

Analyse de très grandes masses de données

Un des grands défis pour les années à venir est la fouille et l'analyse statistique des grandes masses de données issues des systèmes d'observation et des simulations numériques.

Méthodes de fouille de grands volumes de données. Le développement de nouvelles méthodes de découverte et de classification d'objets, et d'événements, au sein de grandes masses de données est un enjeu important. Ces méthodes de « clustering » spatial, de corrélation multidimensionnelle et de classification, impliquent aujourd'hui des approches déterministes et bayésiennes.

Méthodes de traitement et d'analyse de données. L'extraction d'informations nouvelles exploitant la cohérence des observations continues en temps, au sein de réseaux denses ou d'antennes, requiert le développement de nouvelles méthodes de traitement complexe et d'analyse statistique multi-fréquentielle impliquant un grand nombre de corrélations de pair ou d'autres plus élevées et de gros volumes de données multi-attributs.

Méthodes de traitement d'images spatiales. L'analyse des données d'imagerie spatiale, dont la résolution et la fréquence d'acquisition ne cessent d'augmenter, requiert aujourd'hui le développement de chaînes de traitement complexes permettant de manipuler un nombre croissant d'images et des méthodes de filtrage et de corrélation multidimensionnelle complexes.

Méthodes de traitement et d'analyse de données synthétiques. S'il est aujourd'hui possible de simuler les systèmes des sciences de l'Univers à des résolutions spatiales et temporelles croissantes, il est difficile de stocker et d'analyser les données ainsi générées dans un environnement « end-to-end ». C'est devenu crucial pour les nouvelles méthodes de simulation stochastique ou de réalisation d'ensemble, qui requièrent des méthodes d'analyse statistique de très gros volumes de données et de visualisation.

2.6.3. Enjeux algorithmiques et logiciels

Les avancées dans ces domaines dépendent de l'évolution et de la disponibilité de capacités de calcul et de données haute-performance de plus en plus importantes. Dans le même temps, l'exploitation des nouvelles technologies de calcul intensif et de données, basées sur des architectures massivement multi-cœurs et hybrides (AP, GPU), des systèmes de fichiers parallèles et des grandes bases de données scientifiques parallèles, implique un effort important des communautés pour l'adaptation et l'optimisation des applications.

Les nouvelles architectures défient aujourd'hui les modèles classiques de programmation parallèle et requièrent de nouveaux modèles permettant d'exploiter l'hétérogénéité des « processing elements » et la hiérarchie de mémoire et de stockage.

Les principaux enjeux sont :

- l'exploitation d'un haut niveau de concomitance de tâches (communications asynchrones, recouvrement des phases de calcul et de communication) ;

- l'exploitation de nouveaux modèles de programmation hybride pour l'exploitation des architectures de type GPUs ;
- l'exploitation explicite de modèles de localité (horizontal et vertical) au travers de la hiérarchie mémoire-cache-disques (SSD et HDD) ;
- des méthodes d'équilibrage dynamique de charge ;
- l'exploitation de mécanismes de coordination et de synchronisation extensibles (synchronisation point à point, opérations collectives de type MapReduce/Hadoop) ;
- de nouvelles stratégies permettant d'équilibrer les flux de données et les flux de calcul pour les méthodes de fouille et d'analyse de données exploitant les technologies d'E/S parallèles, de grandes bases de données scientifiques parallèles et optimisant la bande passante des E/S séquentielles.

Ces enjeux logiciel et algorithmique, auxquels toutes les disciplines des sciences de l'Univers sont confrontées, ne peuvent être relevés sans une étroite interaction avec d'autres disciplines comme les mathématiques, l'informatique, la physique, la chimie en particulier. L'émergence de la Maison de la simulation (CNRS, CEA, Inria, Université Paris-Sud, USQV), et de la Mission pour l'interdisciplinarité du CNRS constituent autant de nouvelles opportunités. Un deuxième aspect est la nécessité de faire émerger et de valoriser, en termes de reconnaissance scientifique et de carrière, une nouvelle génération de chercheurs et d'ingénieurs de recherche à l'interface avec ces nouvelles technologies de calcul et de données.

2.6.4. Enjeux en termes d'infrastructures et de politique pour le calcul intensif

Les nouvelles avancées scientifiques et l'innovation dans les différents domaines des sciences de l'Univers dépendent de manière cruciale d'une politique du CNRS, et d'un renforcement des capacités des infrastructures, pour le calcul et l'analyse de données.

Il est important de renforcer, et de faire évoluer, l'ensemble des capacités de calcul et de données disponibles aux différents niveaux de la pyramide du calcul intensif.

Aux niveaux Tiers-0 et Tiers-1, la contribution du CNRS au sein de GENCI est essentielle afin de mieux prendre en compte les besoins des équipes de différents Instituts. Il est tout aussi important de renforcer l'IDRIS, au-delà d'un rôle d'opérateur de ressources, en tant que pôle d'expertise et de soutien, en synergie avec la Maison de la simulation, aux communautés scientifiques et à leurs grands projets ANR et européens.

Au niveau Tiers-2, il est indispensable de maintenir un équilibre de ressources. Cela ne pourra se faire sans une politique active du CNRS, en synergie avec les grands pôles universitaires émergents et, pour ce qui concerne l'INSU, en synergie avec les Observatoires des Sciences de l'Univers.

Il est également important que le CNRS renforce le développement de nouvelles technologies d'infrastructures, comme aujourd'hui les grilles et le cloud, et leur synergie avec celles du HPC.

L'explosion des masses de données générées par les systèmes d'observation et les simulations numériques, pose aujourd'hui de formidables

défis pour la gestion, l'exploitation et la valorisation de ces données. Cela requiert une nouvelle approche holistique au niveau du CNRS et une nouvelle politique en termes d'infrastructures de calcul et de données.

Si l'évolution de la puissance de calcul et des capacités de stockage est rapide, la bande passante des E/S séquentielles et des réseaux de communication, ainsi que leurs latences et coûts, ne permettent plus de suivre la vitesse d'évolution des volumes des données. Il est nécessaire aujourd'hui de rapprocher le calcul des données, ce qui implique une nouvelle architecture et une urbanisation des infrastructures de données, en synergie avec les centres de données et les Observatoires des Sciences de l'Univers.

Certains systèmes d'observation en sciences de l'Univers, conçus comme des grands instruments, impliquent de très grands projets internationaux intégrant dès la conception une architecture et des infrastructures de calcul et de données pour l'exploitation et la valorisation des données générées. D'autres se construisent par agrégation de systèmes d'observation de taille plus réduite, dont le financement est plus divers et hétérogène, et dont l'exploitation et la valorisation des données dépendent d'une politique nationale d'infrastructures adaptées.

Une nouvelle politique, et stratégie, au niveau du CNRS doit s'appuyer sur l'ensemble des expertises et des acquis du CNRS dans les domaines du calcul intensif et des données, au travers des différents Instituts. Elle doit faire émerger une urbanisation des infrastructures de calcul et de données, intégrant HPC, grilles, cloud et les grands centres de données des Instituts. Elle pourra s'appuyer sur les acquis de l'IDRIS, d'IdGC et du CC-IN2P3 et des Observatoires en Sciences de l'Univers.

ANNEXE

Principaux laboratoires impliqués dans le calcul intensif

- **Laboratoire Univers et Théorie** (LUTH, UMR8102, Observatoire Paris-Meudon)
- **Service d'Astrophysique – Laboratoire AIM** (AIM, UMR7158, CEA – Saclay)
- **Laboratoire d'Astrophysique de Marseille** (LAM, UMR7326, Université d'Aix-Marseille & Observatoire Astronomique Marseille Provence)
- **AstroParticule et Cosmologie** (APC, UMR7164, Université Paris Diderot – Paris 7)
- **Cassiopeé** (UMR6202, Université de Nice Sophia Antipolis & Observatoire de la Côte d'Azur)
- **Laboratoire d'Étude du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique** (LERMA, UMR8112, Observatoire de Paris-Meudon)
- **Institut de Mécanique Céleste et de Calcul des Éphémérides** (IMCCE, UMR8028, Observatoire de Paris)
- **Laboratoire de Radioastronomie** (LERMA, UMR8112, École Normale Supérieure Paris)

- **Institut de Physique Théorique** (IPhT, URA2306, CEA – Saclay)
- **Institut de Planétologie et d'Astrophysique de Grenoble** (IPAG, UMR5274, Université de Grenoble)
- **Institut d'Astrophysique Spatiale** (IAS, UMR8617, Université Orsay Paris-Sud)
- **Centre de Recherche Astrophysique de Lyon** (UMR5574, Université Lyon 1)
- **Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux** (UMR5804, Université Bordeaux 1)
- **Laboratoire d'Études Spatiales et d'Instrumentation en Astrophysique** (LESIA, UMR8109, Observatoire de Paris-Meudon)
- **Institut de Minéralogie et de Physique des Milieux Condensés** (IMPMC, UMR7590, Université Pierre et Marie Curie – Paris 6)
- **Planétologie et Géodynamique** (UMR6112, Université de Nantes)
- **Laboratoire des Écoulements Géophysiques et Industriels** (EGI, UMR5519, INPG, Université Joseph Fourier, Grenoble)
- **Institut de Physique du Globe de Paris** (IPGP, UMR7154, Université Paris Diderot – Paris 7)
- **Institut des Sciences de la Terre** (ISTerre, UMR5275, Université Joseph Fourier, Grenoble)
- **Institut de Physique du Globe de Strasbourg** (EOST, UMR7516, Université de Strasbourg)
- **Géosciences Montpellier** (UMR5243, Université Montpellier 2)
- **Sismologie, Structures Profondes, Déformations Continentales** (UMR5562, Université Paul Sabatier, Observatoire Midi Pyrénées)
- **Laboratoire Géosciences Azur** (Géozur, UMR6526, Université de Nice Sophia-Antipolis)
- **Laboratoire de Modélisation et Imagerie en Géosciences** (UMR5212, Université de Pau et des Pays de l'Adour)
- **Laboratoire Atmosphères, Milieux, Observations spatiales** (LATMOS/IPSL, UMR8190, Université Versailles Saint-Quentin)
- **Laboratoire d'étude des Transferts en Hydrologie et Environnement** (LTHE, UMR5564, Université Joseph Fourier, Grenoble)
- **Laboratoire d'Aérodynamique** (LA, UMR5560, Observatoire Midi Pyrénées, Université de Toulouse)
- **Laboratoire des Écoulements Géophysiques et Industriels** (LEGI, UMR5519, Université Joseph Fourier Grenoble)
- **Laboratoire de l'Atmosphère et des Cyclones** (LaCY, UMR8105, Université de la Réunion)
- **Laboratoire Climat et Occupation du Sol par Télédétection** (COSTEL-LETG, UMR6554, Université Rennes 2)
- **Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement** (LSCE, UMR1572, CEA-DSM)
- **Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques** (LISA, UMR7583, Université Paris Est Créteil Paris XIII)
- **Laboratoire de Météorologie Physique** (LaMP, UMR6016, Université Blaise Pascal Clermont II)
- **Laboratoire d'Océanographie et du Climat Expérimentations et Approches Numériques** (LOCEAN, UMR7159, IPSL, Université Pierre et Marie Curie – Paris 6)
- **Laboratoire de Physique des Océans** (UMR6523, IFREMER, IRD, Université Bretagne Occidentale)
- **Laboratoire de Météorologie Dynamique** (LMD, UMR8539, École Polytechnique, École Normale Supérieure de Paris, Université Pierre et Marie Curie – Paris 6)
- **Institut Pierre Simon Laplace** (IPSL, FR636, Fédération de Recherche UVSQ, UPMC, CEA-DSM, ENS, École Polytechnique)

- **Laboratoire de Glaciologie et Géophysique de l'Environnement** (LGGE, UMR5183, Université Joseph Fourier, Grenoble)
- **Laboratoire Détection et de Géophysique** (UMR8538, CEA, DAM Arpajon)
- **Sciences de L'Univers au CERFACS** (URA1875, CERFACS/CNRS, Toulouse)
- **Laboratoire d'Optique Atmosphérique** (LOA, CNRS8518, Université de Lille 1)
- **Laboratoire de Sondages Électromagnétiques de l'Environnement Terrestre** (LSEET, UMR6017, Université du Sud Toulon)
- **Laboratoire des Sciences de l'Environnement Marin** (LEMAR,

UMR6539, Institut Universitaire Européen de la mer, Université de Bretagne Occidentale)

- **Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique** (UMR6089, Université de Reims Champagne Ardenne)
- **Centre National de Recherches Météorologiques** (CNRM-GAME, URA1357, Météo-France, Toulouse)
- **Laboratoire de Mécanique des Fluides** (UMR 6598, École Centrale de Nantes)
- **Équipe « Biodiversité et Macroécologie »** (BIOMAC, UMR BO-REA7208, CNRS-MNHN-UPMC-IRD)

2.7. L'institut national de physique nucléaire et de physique des particules (IN2P3)

Créé en 1971, l'Institut national de physique nucléaire et de physique des particules (IN2P3) du CNRS a pour mission de promouvoir et de fédérer les activités de recherche dans les domaines de la physique nucléaire, de la physique des particules et des astroparticules. Il coordonne les programmes dans ces domaines pour le compte du CNRS et des universités, en partenariat avec le CEA.

Ces recherches ont pour but d'explorer la physique des particules élémentaires, leurs interactions fondamentales ainsi que leurs assemblages en noyaux atomiques, d'étudier les propriétés de ces noyaux et d'explorer les connexions entre l'infiniment petit et l'infiniment grand.

Que ce soit avec la physique des particules auprès des grands accélérateurs, la physique des astroparticules avec les expériences embarquées sur satellites, les télescopes et autres détecteurs terrestres, ou encore dans une moindre mesure, la physique nucléaire, les équipes de l'IN2P3 et du CEA/IRFU doivent faire face à des masses de données considérables, qu'il faut stocker, distribuer et analyser. L'ensemble des expériences nécessite également des modélisations par technique de Monte Carlo qui sont elles-mêmes génératrices de grandes quantités de données. L'aspect données et traitement statistique est donc la caractéristique principale de l'informatique pour la physique corpusculaire.

Le traitement statistique global sur une multitude de jeux de données indépendants – une collision de particules correspond à un jeu de données – s'adapte très bien à des architectures informatiques constituées de fermes de calculateurs. D'une manière générale, en dehors des calculs de chromodynamique quantique sur réseau, la physique corpusculaire a très peu besoin de calculateurs parallèles. Cette caractéristique l'a distinguée de bon nombre d'autres disciplines scientifiques pour lesquelles le HPC est une nécessité. La principale complexité du calcul pour la physique corpusculaire provient des masses de données considérables qu'il faut gérer et distribuer sur le réseau mondial, puis traiter au niveau local.

L'ensemble des laboratoires de l'IN2P3 utilise les ressources informatiques du CC-IN2P3 et des grilles LCG et EGI.

2.7.1. Présentation générale du Centre de Calcul de l'IN2P3 (CC-IN2P3)

De façon à répondre aux besoins exposés plus haut, l'IN2P3 s'est doté très tôt d'un centre de calcul dédié, le CC-IN2P3. Tout d'abord situé sur le campus de Jussieu, il s'est délocalisé en 1986 à Villeurbanne sur le campus de la Doua. Équipé à cette époque d'un ordinateur de type « main-frame », le CC-IN2P3 a ensuite évolué vers des fermes de calculateurs reliés par un réseau Ethernet et intégrant de plus en plus de serveurs de stockage (DAS, NAS et SAN). Le CC-IN2P3 opère également depuis très longtemps le système de stockage hiérarchique HPSS d'IBM qui assure

un équilibrage automatique entre les données disponibles sur disques et celles qui sont migrées dans des silos de stockage de cassettes magnétiques robotisés.

Avec la mondialisation des expériences de physique corpusculaire, le CC-IN2P3 fait maintenant partie d'un réseau de centre de traitement de données à l'échelle mondiale. Dès 1999, les données de l'expérience BaBar au Stanford Linear Accelerator Center (SLAC) étaient copiées vers le CC-IN2P3 via le réseau transatlantique. Au total ce sont plusieurs Pétaoctets de données qui ont ainsi été copiés, donnant aux physiciens français un avantage majeur pour l'exploitation scientifique des résultats.

Une vingtaine de laboratoires, plus de cinquante groupes expérimentaux et plusieurs équipes de physiciens théoriciens utilisent intensivement le CC-IN2P3. L'Institut de Recherche sur les lois Fondamentales de l'Univers du CEA (IRFU) est également un partenaire majeur du centre de calcul et contribue à son financement.

Aujourd'hui l'activité principale du CC-IN2P3 concerne la gestion et le traitement des données des quatre expériences installées sur le Large Hadron Collider (LHC) du CERN à Genève. Le CC-IN2P3 fait partie d'un ensemble de onze centres de calcul dits de premier niveau qui se partagent le traitement des données au niveau mondial. Cette organisation repose sur l'infrastructure de Grille LCG (LHC Computing Grid) qui implémente des technologies développées dans le cadre du projet EGEE en Europe, OSG aux États-Unis et NorduGrid dans les pays du nord de l'Europe.

Marginale lors de son émergence y a une quinzaine d'années, la physique des astroparticules se développe considérablement à l'IN2P3 avec là aussi des besoins de traitement informatique importants. Les astroparticules ont très souvent pu se satisfaire du même type de moyens de calcul et de traitement de données que la physique des particules, mais il a fallu dans certains cas mettre en œuvre des ressources spécifiques comme une ferme de calcul parallèle pour certaines simulations ou encore optimiser les accès aux ressources de stockage pour le traitement d'images astronomiques.

D'ici la fin de la décennie, la physique des astroparticules va avoir des besoins très importants en terme de ressources informatiques avec l'arrivée de projets tels que la mission spatiale EUCLID, le télescope LSST ou encore le réseau de télescopes Cherenkov CTA. En 2020, il est prévisible que ces grands projets d'astroparticules nécessiteront autant de ressources informatiques que le LHC qui sera lui-même au milieu d'un vaste programme d'amélioration de ses performances et qui produira donc annuellement beaucoup plus de données qu'aujourd'hui.

2.7.2. Configuration actuelle du CC-IN2P3

Le CC-IN2P3 est financé au travers des très grandes infrastructures de recherche (TGIR). En 2011, son budget TGIR est de 5,25 M€ auquel il faut ajouter 1,1 M€ de contribution de la part du CEA/IRFU, un contrat européen et quelques ressources propres. Ce budget est en très net recul par rapport aux années précédentes (8,75 M€ des TGIR et 1,365 M€ du CEA en 2008).

Le CC-IN2P3 dispose des ressources informatiques suivantes :

- Une ferme de calcul de 20 000 cœurs fonctionnant avec le gestionnaire de tâches Oracle Grid Engine.
- Un système de stockage sur disque de 15 Pétaoctets, dédié à 80 % aux les expériences LHC. Ce stockage est accessible au travers de divers logiciels ou systèmes de fichiers :
 - GPFS (1 Pétaoctet) fournit aux utilisateurs un espace de travail flexible et accessible depuis les machines interactives ou le système de traitement par lot.
 - AFS (Andrew File System) permet de partager les espaces « home » et l'essentiel des distributions de logiciels.
 - Le système de stockage hiérarchique HPSS dispose d'un cache sur disque permettant de gérer la récupération et les migrations de données depuis et vers le système de stockage de masse (cartouches magnétiques).
 - SRM/dCache et xrootd sont des systèmes spécifiques de gestion de données développés par la communauté de la physique des hautes énergies et capables d'absorber des charges très importantes en terme d'entrées/sorties. Ils constituent l'essentiel du stockage au CC-IN2P3.
 - iRods est un système de gestion de données distribué, flexible et capable de gérer facilement des métadonnées. La facilité de mise en œuvre notamment pour des données distribuées géographiquement a rendu iRods populaire et a contribué à son développement.
- Un ensemble de 4 silos robotisés STK/Oracle SL8500 pour le stockage sur cartouches magnétiques. D'une capacité totale de $4 \times 10\,000$ cartouches, ces silos peuvent héberger jusqu'à 200 Pétaoctets avec la dernière technologie de cartouches T10kC (5 To).
- Un ensemble de systèmes de bases de données sous diverses technologies (MySQL, PostgreSQL et Oracle). La base de données de l'expérience OPERA sera d'ici 2 ans l'une des plus grosses bases ORACLE au monde. Le CC-IN2P3 a développé une expertise considérable dans ce domaine et met en œuvre des architectures de clusters de bases de données particulièrement complexes.
- L'ensemble des ressources informatiques est interconnecté sur un réseau dont l'épine dorsale supporte une bande passante de 80 Gb/s qui sera portée prochainement à 160 Gb/s. Les serveurs individuels sont connectés en Ethernet à 1 Gb/s, $n \times 1$ Gb/s ou 10 Gb/s selon les applications. Une partie du stockage exploite aussi la technologie de réseau de données Fiber Channel.

Au printemps 2010, le CC-IN2P3 a mis en service une nouvelle salle machines d'une superficie de 850 m² et capable à terme de fournir une puissance électrique de 3,4 MW pour le matériel informatique hors refroidissement. Cette puissance vient en complément des 1 MW de la salle existante. La conception très moderne de la nouvelle salle (pas de faux plancher, organisation des serveurs en allées avec confinement de la chaleur et traitement de celle-ci par la technique dite InRow, double alimentation EDF redondante, etc.) en fait un équipement de tout premier plan, capable d'accueillir les moyens de calcul et de traitement des données des futures grandes expériences de physique corpusculaire.

2.7.3. La chromodynamique quantique sur réseau (LQCD)

La chromodynamique quantique sur réseau est une activité de recherche

très active à l'IN2P3 et impliquant une petite communauté de chercheurs. La LQCD possède la particularité de nécessiter à la fois l'utilisation de calculateurs massivement parallèles et de grappes de serveurs éventuellement organisés en Grille pour le post-traitement des données. L'aspect stockage est également une dimension très importante puisque plus de 1 Pétaoctets de données sont stockées au CC-IN2P3.

La LQCD constitue un axe de travail intéressant dans le cadre du développement de la complémentarité entre le HPC et les architectures de grilles et de cloud.

2.7.4. Le CC-IN2P3 et la recherche en informatique

Depuis 2008, le CC-IN2P3 accueille un chercheur en informatique (Frédéric Suter) qui développe une activité de recherche sur les thématiques de l'ordonnancement et de la simulation des architectures informatiques. La création d'une activité de recherche en informatique au CC-IN2P3 a permis de développer des passerelles entre le monde de la production et celui de la recherche notamment dans le domaine des grilles de calcul et des clouds.

2.7.5. Le CC-IN2P3 et les grilles

Le CC-IN2P3 a été impliqué dès 2001 dans les développements autour des grilles informatiques avec le projet européen DataGrid, suivi des trois phases d'EGEE (Enabling Grid for E-science) et actuellement EGI (European Grid Initiative). L'expertise du CC-IN2P3 dans le domaine du calcul distribué s'est donc construite sur 10 ans. Outre l'infrastructure matérielle et logicielle qui a été déployée et intégrée dans la Grille, le CC-IN2P3 a été et reste très impliqué dans l'opération de la Grille, dans la dissémination et la formation, ainsi que dans des développements logiciels autour de l'interopérabilité des grilles dans le cadre de l'Open Grid Forum (OGF).

Le CC-IN2P3 opère l'un des 11 centres mondiaux, dits Tier-1 de la Grille LCG (LHC Computing Grid) pour le traitement des données issues des expériences installées sur le collisionneur LHC. À ce titre, le CC-IN2P3 fournit environ 10 % des ressources informatiques mondiales pour le LHC avec des contraintes d'exploitation, de fiabilité et de disponibilité particulièrement importantes.

D'autres nœuds de la Grille LCG de moindres capacités (Tier-2 et Tier-3), existent en France. La coordination de l'ensemble est assurée par le projet LCG-France.

Au niveau français, le CC-IN2P3 est le principal nœud de la Grille française France-grilles.

2.7.6. Les clouds et l'ouverture pluridisciplinaire

Après dix années d'exploitation des grilles de calcul, et malgré le succès considérable de ce modèle pour le traitement des données du LHC et pour quelques autres projets très structurés, force est de constater que sa mise en œuvre reste complexe et que son utilisation nécessite une expertise que beaucoup de communautés ne possèdent pas.

L'émergence des clouds basés sur des techniques de virtualisation permet d'envisager de créer des infrastructures informatiques beaucoup plus souples et accessibles à l'ensemble des communautés scientifiques.

Les techniques de virtualisation seront peu à peu intégrées à la Grille existante, en particulier dans le cadre de LCG et d'EGI. Nous devrions donc assister, à terme, à une convergence des modèles.

Le CC-IN2P3 a récemment lancé le projet CAPRI (cloud Académique Pour la Recherche et l'Innovation) afin de mettre en œuvre et d'opérer un cloud académique multidisciplinaire axé sur le traitement massif de données. Bien qu'à vocation principalement académique, CAPRI sera également ouvert au monde industriel. Plusieurs sites à l'IN2P3 (notamment le LAL à Orsay) et à l'IRFU, actuellement impliqués dans la Grille, s'intéressent aux développements autour des technologies clouds. Associés au CC-IN2P3, ils permettront de mettre en œuvre une architecture de cloud géographiquement distribuée.

CAPRI est en relation étroite avec le monde de la recherche en informatique (LIP/ENS-Lyon) afin de bénéficier des innovations techniques les plus pointues et d'offrir, en retour, un banc de tests en vraie grandeur aux équipes de recherche.

Financée par le Centre de Calcul et le GIS France-grilles, une pré-plateforme de cloud académique est d'ores et déjà en cours d'installation au CC-IN2P3. Celle-ci permettra d'évaluer plusieurs solutions logicielles dès le début de l'année 2012 et de viser une ouverture limitée du cloud académique en bêta-test dès le printemps 2012. Dans un premier temps, il s'agira d'un cloud IaaS (Infrastructure as a Service) communautaire, orienté calcul. Des fonctionnalités seront ajoutées ultérieurement avec l'ambition de mettre en place une structure complète de traitement de données ouverte à toutes les disciplines scientifiques. Des collaborations avec des industriels sont envisagées à divers niveaux :

- La startup SysFera développe des solutions logicielles capables d'exploiter un cloud IaaS et d'offrir des interfaces conviviales aux utilisateurs.
- IBM investit beaucoup dans des développements sur les clouds et pourrait apporter des solutions intéressant le monde de la recherche via un partenariat ciblé avec le CC-IN2P3.

2.7.7. Moyens informatiques dans les laboratoires de l'IN2P3

Tous les laboratoires de l'IN2P3 disposent de moyens de calcul locaux de type cluster associés à un stockage sur disques. Avec le projet LHC, plusieurs laboratoires ont mis en œuvre des nœuds de grilles de niveau (Tiers) 2 et 3 qui s'insèrent dans la Grille mondiale W-LCG.

Dans la région parisienne, les laboratoires de l'IN2P3 et le CEA/IRFU ont fédéré leurs moyens de calcul et de stockage au travers de la Grille pour la Recherche en Île-de-France (GRIF) qui constitue une plateforme de grande capacité ouverte en partie pour des applications pluridisciplinaires.

Les besoins en bande passante nécessaires au traitement des données LHC sur l'infrastructure LCG-France ont été pris en compte par Renater qui fournit une connectivité à 10 Gb/s entre la plupart des sites LCG français et le CC-IN2P3.

Le Laboratoire d'AstroParticule et Cosmologie (APC) à Paris a mis en œuvre le Centre François Arago destiné principalement au traitement des données de la physique des astroparticules. Le couple Centre François Arago/CC-IN2P3 peut être vu comme l'équivalent pour les astroparticules du modèle Tier-1/Tier-2 du LHC.

2.8. L'Institut des grilles et du cloud (IdGC)

Créé en 2007, l'Institut des grilles fédère l'ensemble des actions du CNRS concernant les grilles de calcul et le cloud computing. Il joue le rôle de point de contact vis-à-vis des partenaires, notamment européens, pour tous les projets de grilles. Il est mandataire du Groupement d'Intérêt Scientifique France grilles, qui coordonne le déploiement et l'opération de grilles de production au niveau national pour l'ensemble des communautés scientifiques.

2.8.1. France grilles

L'année 2010 a vu la transformation du paysage européen des grilles et la naissance de l'initiative européenne EGI qui fédère les grilles de production nationale.

En France, les plus grandes institutions scientifiques du pays dont le CEA, le CNRS, les universités, l'Inra, l'Inria, l'Inserm, le ministère de l'Enseignement Supérieur et RENATER, se sont alliées pour créer le Groupement d'Intérêt Scientifique France grilles chargé d'assurer le déploiement et le fonctionnement des grilles informatiques françaises. Celles-ci rassemblent plus de 25 000 processeurs distribués dans une vingtaine de sites sur le territoire français (figure 1).

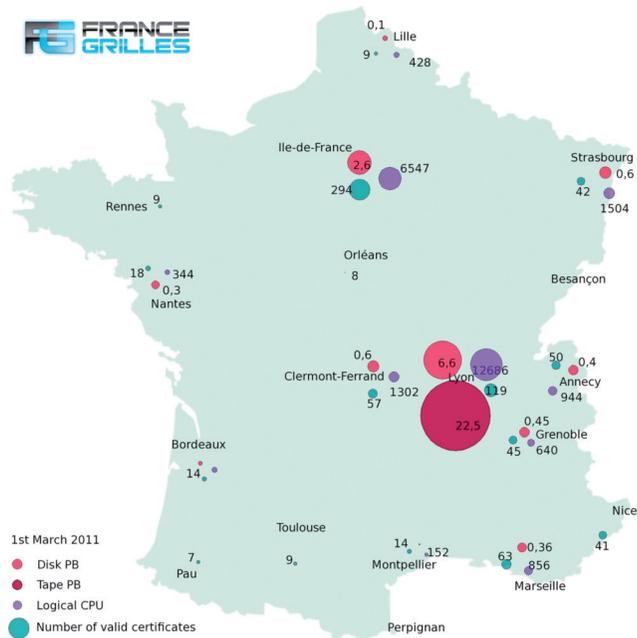


Figure 1 : Répartition géographique des ressources de la Grille et des titulaires de certificats (mars 2011)

Le Groupement d'Intérêt Scientifique France grilles est le représentant français dans EGI et fournit environ 15 % des ressources d'EGI. Il a accueilli en septembre 2011 à Lyon le dernier forum technique d'EGI, occasion du plus gros événement européen sur la Grille et le cloud computing depuis 10 ans.

2.8.2. grilles de production : utilisation et impact scientifique

Par sa vocation pluridisciplinaire, le CNRS a très tôt promu l'adoption des grilles informatiques dans de nombreuses disciplines scientifiques. Si la communauté de physique des particules représente près de la moitié des utilisateurs français, la figure 2 montre que les communautés des sciences de la Terre, des sciences de l'Univers et du vivant sont très actives sur la Grille.

Utilisateurs français inscrits dans des Organisations Virtuelles thématiques

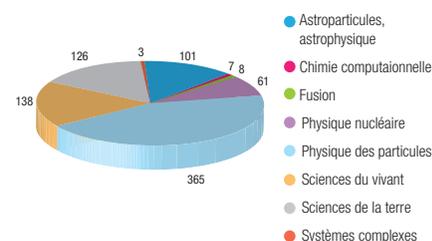


Figure 2 : Distribution thématique des utilisateurs de la Grille en France (mars 2011)

De juin 2010 à mai 2011, un total de 215 millions d'heures CPU normalisées (KSI2K) ont été fournies aux utilisateurs de France grilles. La communauté de physique des particules demeure le principal utilisateur des ressources pour l'analyse des données du LHC, comme le montre la figure 3. Ces ressources constituent la contribution française à la Grille du LHC dans le cadre du projet LCG-France.

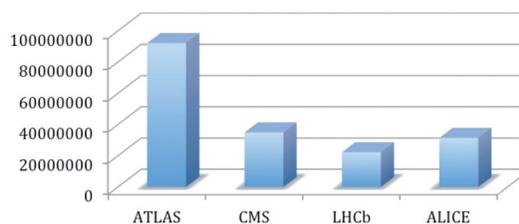


Figure 3 : Nombre d'heures CPU normalisées fournies aux 4 expériences LHC de juin 2010 à mai 2011 dans le cadre du projet LCG-France

La figure 4 présente l'utilisation par les autres communautés.

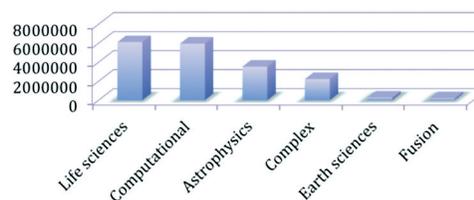


Figure 4 : Nombre d'heures CPU normalisées fournies aux domaines scientifiques hors physique des particules de juin 2010 à mai 2011

Concernant l'impact scientifique, il faut tout d'abord souligner que toutes les données du LHC sont aujourd'hui analysées sur la Grille au niveau mondial. Pour cette communauté scientifique qui a pris le risque des grilles dès le début des années 2000, ce pari est incontestablement une réussite.

Les autres communautés d'utilisateurs n'ont pas investi à la même hauteur mais la vitalité de leur production scientifique est attestée par les 30 contributions reçues aux premières rencontres scientifiques France grilles co-localisées avec le Forum Technique d'EGI à Lyon en septembre 2011.

Plus de 250 articles et notices portant sur les grilles sont aujourd'hui recensés dans la base de données HAL. La majorité est issue de la communauté des chercheurs en informatique autour de Grid5000.

2.8.3. Perspectives : de la grille vers le cloud

Le cloud computing apporte une révolution dans le monde du calcul intensif et du traitement de grandes masses de données. En effet, pour la première fois, les industriels ne se contentent pas de vendre des équipements pour le calcul intensif ou à haut débit mais ils développent des offres concurrentes à celles des centres de calculs académiques. Le business modèle du cloud est beaucoup plus attrayant que celui de la Grille pour les industriels du secteur et la pression va augmenter considérablement pour une externalisation des services informatiques afin d'en réduire les coûts.

Une telle externalisation ne va pas sans risque : perte de contrôle sur l'accès aux données, risques de dérapage des coûts, dépendances techniques, failles de sécurité... Ces risques doivent être évalués et

un juste compromis entre externalisation et maintien d'une expertise en interne doit être trouvé pour préserver au sein du CNRS un réseau d'experts pour l'administration des systèmes, le développement et le déploiement d'applications scientifiques. Les grilles ont permis de structurer et de resserrer ce réseau humain d'experts dont le CC-IN2P3 avec ses ingénieurs est le cœur technique et dont la Grille du LHC est la colonne vertébrale.

Le défi des prochaines années se situe à plusieurs niveaux :

- offrir aux utilisateurs des grilles de production une qualité de service stable,
- développer une infrastructure de clouds académiques adossée aux clouds publics qui se substitue progressivement et de façon transparente à la Grille.

La sécurité des services informatiques demeure un souci permanent et une priorité. Par leur caractère distribué et ouvert, les grilles ont apporté de nouvelles contraintes. Il en sera de même pour le cloud computing avec notamment tous les problèmes posés par la virtualisation.

Enfin, la préservation des données et la problématique de l'accès à moyen et long terme doivent être considérées comme des nouveaux paradigmes et prises en compte de manière durable dans les programmes scientifiques.

2.9. L'Institut du développement et des ressources en informatique scientifique (IDRIS)

2.9.1. Présentation

L'IDRIS, créé en novembre 1993, est le centre majeur du CNRS pour le calcul numérique intensif de très haute performance. Sous la coordination du Grand Équipement National du calcul intensif (GENCI), l'IDRIS participe, avec les autres centres nationaux (CINES pour l'enseignement supérieur et CCRT/TGCC pour le CEA), à la mise en place de ressources informatiques nationales pour le calcul de haute performance, au service de la communauté scientifique publique.

À la fois centre de ressources informatiques et pôle de compétences en calcul intensif, l'IDRIS est une unité propre de service du CNRS, à vocation pluridisciplinaire, placée sous la tutelle de l'INS2I (Institut National des Sciences de l'Information et de leurs Interactions). Les modalités de fonctionnement de l'IDRIS sont proches de celles des très grands équipements scientifiques.

Pour accomplir ses missions, l'IDRIS intervient à deux niveaux :

- Comme structure de services, par la mise en place et l'exploitation d'un environnement de calcul intensif d'avant-garde, diversifié, polyvalent et évolutif, adapté aux très grands défis scientifiques dans le domaine de la simulation numérique. Cet environnement englobe une interface performante de support aux utilisateurs, qui offre des services à très forte valeur ajoutée. Ainsi, l'IDRIS ne se limite pas seulement au dépannage et au conseil mais s'implique également dans l'aide au développement des codes scientifiques et dans l'optimisation de ceux-ci. De plus, il propose depuis sa création un programme très soutenu de formations à destination de ses utilisateurs et au-delà, puisque ses sessions sont ouvertes non seulement à l'ensemble du monde académique, utilisateur ou non de ses ressources informatiques, mais également aux représentants du monde industriel. Au cours de l'année 2011, une vingtaine de sessions de une à quatre journées chacune ont été organisées par l'IDRIS soit dans ses locaux d'Orsay, soit dans d'autres sites en région parisienne ou en province, pour un total de plus de trois cents participants. Ces sessions ont été consacrées aux langages de programmation scientifiques et aux principaux paradigmes de programmation parallèle (MPI, OpenMP et programmation hybride MPI/OpenMP, qui va devenir une clé pour l'utilisation efficace des futures machines qui comporteront un grand nombre de cœurs par nœud de calcul).
- Comme agent de transfert de technologies, de la recherche et du développement en informatique vers les infrastructures nationales de calcul de haute performance (depuis 2011, en synergie avec la Maison de la simulation). Situé à l'intersection de la science (la simulation numérique) et de la technologie (l'informatique scientifique) et très proche des utilisateurs scientifiques, l'IDRIS se trouve dans une situation privilégiée pour favoriser l'intégration progressive des nouvelles technologies dans le système national de la recherche scientifique. Cette activité s'est traduite, dans les années 90, par une contribution importante à la diffusion du calcul parallèle

et aujourd'hui par une expertise reconnue dans le domaine du parallélisme massif. De plus, l'IDRIS s'est fortement impliqué dès le début des années 2000 dans la construction en cours de l'écosystème européen du calcul de haute performance (voir la section 3.1). À ce titre, l'IDRIS a été de 2004 à 2008 le coordinateur du projet européen qui a conçu et déployé l'infrastructure européenne DEISA (voir www.deisa.eu) et il participe actuellement, avec ses partenaires du CEA, du CINES, de GENCI et de l'Inria, au projet PRACE (voir www.prace-ri.eu).

Le personnel de l'IDRIS était composé fin 2011 de 34 personnes, essentiellement réparties entre les équipes en charge du bon fonctionnement matériel et logiciel des supercalculateurs et de toutes les machines de service qui leur sont associées, et une équipe de support aux utilisateurs qui assure notamment, outre une permanence d'assistance, une expertise pour le support applicatif sur projets, un programme ambitieux de formation tel que précisé plus haut, une tâche continue de documentation et une veille technologique sur tous les aspects applicatifs du calcul intensif.

2.9.2. Configuration actuelle de l'IDRIS

L'IDRIS est actuellement équipé de deux supercalculateurs IBM d'architectures complémentaires, installés en 2008¹⁴ :

- une machine IBM de type SMP à nœuds larges de 112 fois 32 processeurs Power6, pour une configuration totale de 3584 processeurs et environ 17,5 To de mémoire globale, délivrant une puissance crête cumulée de 68 Tflop/s ;
- une machine IBM massivement parallèle de type BlueGene/P de 10 240 processeurs quadri-cœurs, soit en tout 40 960 cœurs, avec environ 20 To de mémoire globale, pour une puissance crête cumulée de 139 Tflop/s (cette machine a été classée au 9^e rang du classement mondial des supercalculateurs, dit Top 500, en juin 2008) ;

L'évolution de la configuration de l'IDRIS est prévue à partir du second semestre de 2012.

À ces supercalculateurs, sont évidemment associées un certain nombre de machines de service, dont les principales sont le serveur de pré et de post-traitement et le serveur d'archives de fichiers. Celui-ci est une machine SGI Altix 4700 à 64 cœurs et 128 Go de mémoire, qui gère les données à travers le logiciel de migration propriétaire DMF. Les ressources qui lui sont attachées sont :

- Un stockage de premier niveau sur disques d'une capacité de 800 To. Cet espace héberge aussi l'ensemble des métadonnées et représente environ 35 millions de fichiers utilisateurs.
- Un stockage de deuxième niveau sur cassettes qui peut, grâce à la compression matérielle, archiver environ 10 Po de données. Celui-ci, actuellement utilisé à hauteur de 2,5 Po, est constitué d'une robotique Oracle SL8500 de 5000 cellules, de 12 dérouleurs de cassettes et de 4 500 cassettes (de deux types différents).

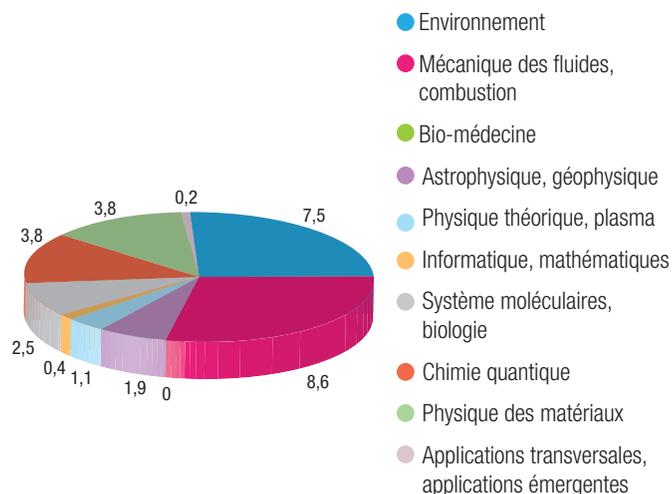
Par les commandes de transfert, ce sont en moyenne 6 To de données

14. Il convient également de noter qu'entre 2006 et décembre 2011, l'IDRIS a également exploité une machine vectorielle NEC SX-8 de 10 nœuds de 8 processeurs vectoriels, soit au total 80 processeurs délivrant une puissance de crête cumulée de 1,3 Tflop/s.

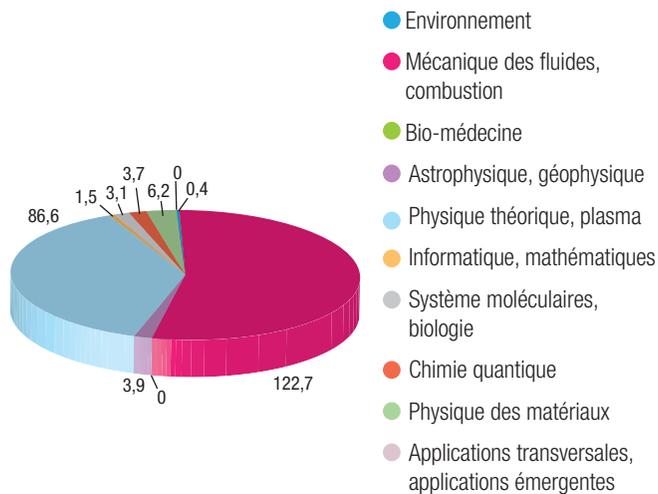
qui sont écrits chaque jour sur ce serveur et 4 To qui sont accédés en lecture.

2.9.3. Utilisation des ressources de l'IDRIS

L'ensemble des communautés scientifiques bénéficient des ressources de l'IDRIS. Voici les attributions (en millions d'heures), par thématiques scientifiques, sur la machine IBM Power6 pour la première session de 2012 des attributions de ressources sur les centres nationaux :



Voici les chiffres correspondants pour les attributions (en millions d'heures¹⁵), par thématiques scientifiques, sur la machine IBM BlueGene/P, toujours pour la première session de 2012 des attributions de ressources sur les centres nationaux :



15. Qui ne se comparent pas directement aux heures sur la machine Power6, dont les processeurs sont individuellement beaucoup plus puissants.



3. Le contexte international pour le calcul intensif

Nous nous limiterons ici à quelques faits majeurs en Europe, aux États-Unis et au Japon.

3.1. Le calcul intensif en Europe : les projets européens

La construction de l'Europe du calcul de haute performance, enjeu majeur d'aujourd'hui, a débuté à la fin des années 90. Les discussions de l'année 1999 entre quelques partenaires qui avaient noué entre eux certaines relations individuelles, centres de calcul, universités, compagnies industrielles, sociétés de services informatiques, a abouti à la mise sur pied du projet pionnier EuroGrid (2000-2003) du 5^e plan cadre européen.

Lui ont succédé de 2004 à mi-2011 les projets DEISA (Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications) du 6^e puis 7^e plan cadre qui ont réuni huit puis onze et enfin quinze partenaires, tous centres de calculs nationaux confondus, appartenant à dix pays différents. Jusqu'à la mi-2008, ce projet a été dirigé par le CNRS, via l'IDRIS, avant que le Max-Planck Institute n'en prenne le relais. L'objectif, fixé et réalisé par DEISA, fut de déployer et de mettre à la disposition de la communauté scientifique européenne un environnement de calcul de haute performance de production à l'échelle continentale, qui soit distribué, stable et pleinement opérationnel, sur un modèle proche de celui adopté à la même époque aux États-Unis par la National Science Foundation (NSF) par l'intermédiaire des projets TeraGrid.

L'objectif à moyen-terme de DEISA était de préparer la voie à l'établissement d'une infrastructure européenne pérenne du calcul intensif, ce qui a été accompli par la symbiose et la fusion qui se sont opérées avec les projets PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) du 7^e plan cadre, qui ont commencé début 2008. Via les projets dits PP (Preparatory Phase) de début 2008 à mi-2010, 1IP (First Implementation Phase) de mi-2010 à mi-2012, 2IP (Second Implementation Phase) de mi-2011 à mi-2013 et 3IP (Third Implementation Phase) prévus de mi-2012 à mi-2014 (et mi-2016 pour les activités relatives aux Pre-Commercial Procurements), PRACE met en place l'organisation et l'infrastructure attendues pour former l'écosystème européen du calcul de haute performance (European HPC Ecosystem). Cela concerne tout d'abord les centres de calcul eux-mêmes, aussi bien les centres nationaux (dits Tier-1), que ceux labellisés centres européens (dits Tier-0), au nombre de trois fin 2011 et qui deviendront six fin 2012, situés dans les quatre pays (Allemagne, Espagne, France et Italie) qui ont pris l'engagement de financement correspondant. Cela concerne également les procédures d'attribution de ressources sur appels à projets européens pour l'accès à la part mutualisée des ressources de ces centres Tier-0

et Tier-1. Pour assurer cette gestion européenne, PRACE s'est doté à l'été 2010 d'une organisation pérenne, la PRACE AISBL, dont le siège est à Bruxelles et qui est composée aujourd'hui des représentants des vingt-quatre États membres.

Le projet HPC-Europa du 6^e plan cadre (2004-2008), avec des partenaires, dont l'IDRIS, appartenant à six pays, suivi dans le 7^e plan cadre par le projet HPC-Europa2 (2009-2012) qui a regroupé des partenaires de onze pays, avait lui pour objectif majeur d'offrir à la communauté scientifique européenne un programme d'accès multidisciplinaire et transnational à des ressources de calcul, via le financement à la fois de séjours de scientifiques dans les centres partenaires et des ressources de calcul employées durant ces séjours.

Parallèlement au domaine strict du calcul intensif, celui des grilles (lui-même actuellement en cours d'évolution vers les modèles du cloud computing) a connu durant la dernière décennie une évolution et une structuration très semblables. Cela avait commencé avec le projet DataGrid du 6^e plan cadre entre 2001 et 2004, qui fut suivi par les trois projets EGEE (Enabling Grids for E-science) dits EGEE (mi-2004 à mi-2006), EGEE-2 (mi-2006 à mi-2008) et enfin dans le 7^e plan cadre EGEE-3 (mi-2008 à mi-2010). Dans ces quatre projets, des laboratoires du CNRS ont joué un rôle majeur, notamment ceux du domaine de la physique des hautes énergies, moteur de ces projets et du développement des technologies de grilles au cours de la décennie écoulée. Ce fut en particulier le cas du CC-IN2P3, centre Tier-1 de l'infrastructure répartie mise en place, mais aussi d'autres laboratoires relevant de ce domaine comme le LAL (Laboratoire de l'Accélérateur Linéaire) d'Orsay. Le CNRS a joué aussi un rôle moteur dans le développement de communautés d'utilisateurs hors de la physique des hautes énergies, notamment dans les sciences du vivant autour du laboratoire CREATIS et de l'univers autour de l'IPSL (Institut Pierre Simon Laplace) et l'IPGP (Institut de Physique du Globe de Paris). Qui plus est, de même que fut mise sur pied l'organisation PRACE AISBL, l'organisation pérenne EGI.eu (European Grid Initiative) a vu le jour début 2010 comme résultat de l'activité du projet EGI-DS (European Grid Initiative Design) entre l'automne 2007 et la fin de 2009, afin de piloter dorénavant toutes les initiatives de ce secteur. EGI regroupe aujourd'hui trente-trois pays et son siège est basé à Amsterdam. L'Institut des grilles et du cloud du CNRS, créé en 2007 pour coordonner l'ensemble des travaux de l'organisme dans le domaine des grilles de production et des grilles de recherche, coordonne également l'ensemble des efforts français dans EGI, notamment dans le projet européen EGI-Inspire.

Maintenir l'Europe dans le peloton de tête pour le développement et l'utilisation du HPC, en particulier au travers de PRACE, est l'un des aspects critiques de la stratégie européenne à horizon 2020.

3.2. Le calcul intensif au Japon

Cette synthèse repose en bonne partie sur les éléments du rapport ci-dessous réactualisés au fil du temps.

S. Petiton, M. Daydé, C. Calvin, F. Cappello, T. N'Kaoua, B. Plateau, M.-M. Rohmer. Supercalculateurs au Japon. Rapport de recherche, ADIT : SMM07 046, Ambassade de France au Japon, juin/june 2007, URL : <http://www.bulletins-electroniques.com/rapports/smm07046.htm>.

Un certain nombre de points relatifs aux initiatives autour du HPC sont repris d'articles de la revue Japan/Asia HPC Digest, High-Performance Computing in Japan & Asia, January/February 2011, July/August 2010, May/June 2010.

Le développement soutenu du calcul haute performance au Japon s'organise autour d'une initiative majeure, actuellement : le projet Kei-Soku conduit par RIKEN. Il s'agissait pour le Japon de reconquérir le leadership mondial en capacité de calcul haute performance en installant une machine d'une puissance de l'ordre de 10 Petaflops à Kobe d'ici 2012. Ce projet s'appuie sur l'expérience acquise avec le « Earth Simulator » et les clusters conçus par exemple à l'AIST, à l'Université de Tsukuba et à TITECH (Tokyo Institute of Technology). L'objectif est de conforter l'excellence japonaise en calcul haute performance pour les années futures. Le nom final de la machine est « K Computer » en anglais (Kei représente 10 Péta et Kei-soku signifie vitesse de 10 PétaFlops).

L'une des caractéristiques japonaises est la multiplicité de projets ayant permis de proposer à ce jour des machines pouvant atteindre plusieurs centaines de Teraflops jusqu'à quelques Petaflops, avec des architectures très variées à partir de recherches menées dans les laboratoires. Par exemple : OpenSupercomputer T2K (design commun aux universités de Tsukuba, Tokyo et Kyoto), MD-GRAPE3 (Université de Tokyo), architectures PACS-CS et FIRST à l'université de Tsukuba, cluster Hybride TSUBAME à TITECH, machine GRAPE à TODAI...

Le Japon est riche en matière d'options architecturales et en modes de programmation étudiés. Le HPC est clairement un enjeu stratégique et la machine Kei-soku repose exclusivement sur des acteurs japonais. En particulier, le processeur scalaire est de conception japonaise (Fujitsu) pour s'affranchir de la domination d'Intel et AMD. Il existe donc un véritable pilotage et une vision stratégique du HPC au Japon.

Les architectures sont souvent le résultat d'une collaboration très étroite entre les chercheurs académiques et les industriels sous l'impulsion du ministère de la recherche. Les liens entre le monde académique et les constructeurs sont intenses sous la supervision de l'État grâce au lancement de programmes pluri-annuels ambitieux. On peut même se demander si, dans les faits, une part non négligeable de la R&D des constructeurs industriels ne repose pas sur la recherche académique.

En corollaire, il existe un important effort de formation au HPC avec des cours proposés dès les premières années universitaires (e.g. à TITECH).

Les principales caractéristiques du HPC au Japon sont donc :

- l'existence d'une recherche riche et variée en architecture et in-

formatique en relation avec des applications dimensionnantes (on construit des machines sur la base d'architectures adaptées à des applications spécifiques),

- la relation entre la recherche académique et des constructeurs reposant sur des projets nationaux d'envergure bien identifiés,
- une formation des futurs utilisateurs dès les premières années de l'enseignement supérieur.

Le Japon possède une recherche dans le domaine du HPC à la fois expérimentale et fondamentale d'un dynamisme étonnant sans se restreindre à un modèle architectural et de programmation unique. Il se donne les moyens d'aborder et d'anticiper le passage à l'exaflops sur la base de programmes gouvernementaux ambitieux.

Quelques points spécifiques :

L'initiative HPCI

Le consortium HPCI pilote une infrastructure pour faciliter l'accès au supercalculateur japonais ainsi qu'aux autres moyens de calcul à la communauté académique et partiellement aux industriels. Ce consortium est composé des centres de calcul et des utilisateurs. La mission est centrée sur la mutualisation de l'utilisation de plusieurs supercalculateurs connectés entre autres par SINET 4 avec un important volume de stockage.

Partenaires du consortium :

- instituts stratégiques hébergeant les communautés d'utilisateurs (sciences de la vie, santé, découverte de médicaments, nouveaux matériaux et nouvelles énergies, évolution du climat et prévision des catastrophes naturelles, conception des objets manufacturés de prochaines générations, origine et structure de l'espace et des matériaux),
- RIKEN (maître d'œuvre du Kei-soku),
- les anciennes 7 universités impériales, Tokyo Institute of Technology (TITECH), et Université de Tsukuba,
- d'autres fournisseurs de ressources HPC tels que les ministères de l'éducation du sport, de la culture, de la science et de la technologie (MEXT), Earth Simulator Center (ESC)...
- et le National Institute of Informatics en charge du réseau.

Advanced Institute for Computational Science (AICS)

fondé en juillet 2010 à Kobé

Les missions de l'AICS sont :

- opérer et faire évoluer la machine Kei-soku (K Computer),
- constituer un centre d'excellence en matière de HPC et simulation numérique,
- contribuer à la définition de la stratégie de développement du calcul intensif (computational science),
- mettre en place le HPCI pour qu'il soit la référence dans les domaines du calcul, du stockage, de la connectique réseau, de l'environnement logiciel et offrir un accès facile des ressources aux utilisateurs,
- promouvoir la formation au travers de séminaires, workshops, écoles d'été...
- proposer des outils de visualisation et participer à la vulgarisation scientifique.

Bien entendu la base de la démarche est la coopération inter-disciplinaire entre informaticiens et spécialistes de la simulation. L'AICS est organisé en deux divisions :

- Division of Computational Science avec 12 équipes,
- Division of Computer Science avec 8 équipes.

Le budget de l'AICS est de 17 M\$ en 2010 et 78 M\$ en 2011.

Programmes autour des processus de nouvelle génération pour la conception des produits manufacturés

Même si la contribution du HPC à la compétitivité de l'industrie est soulignée depuis de nombreuses années, l'utilisation des super-calculateurs par l'industrie nipponne n'est pas encore satisfaisante. La majorité des logiciels commerciaux pour l'ingénierie et la conception ne sont pas prêts à tirer parti des machines massivement parallèles récentes alors que le modèle de tarification des éditeurs commerciaux devient plus coûteux avec l'augmentation du nombre de processeurs.

Afin de réaliser des ruptures et d'utiliser le HPC pour améliorer encore la compétitivité japonaise, le gouvernement a lancé un projet de R&D sur

6 ans appelé « Research on Innovative Simulation Software (RISS) » en 2008 avec un budget total de 2,5 milliards de yens (\approx 29 M\$).

Quelques applications ciblées sont : CFD sur des maillages de taille 100 milliards d'éléments, analyse de vibrations pour un réacteur nucléaire complet...

En parallèle avec le projet RISS, le MEXT a lancé en 2010 le programme sur 5 ans "Next-Generation Manufacturing" (NGM).

Budget global de l'initiative HPCI

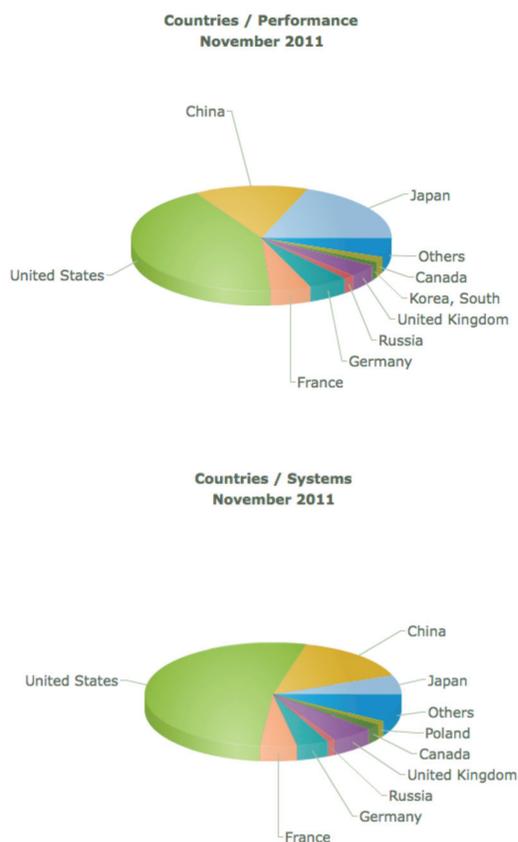
Le budget du HPCI s'organise en deux composantes :

- d'une part, le budget autour du développement du « K Computer » géré par RIKEN : le budget total consacré à la conception et aux divers programmes autour de la machine K est de l'ordre de 542 M\$ pour 2009, 477 M\$ pour 2010 et 211 M\$ pour 2011 ;
- et d'autre part, le budget autour des applications et de l'environnement utilisateur dépendant du MEXT de l'ordre de 114 M\$ en 2009, 22 M\$ en 2010 et 45 M\$ en 2011.

3.3. Le calcul intensif aux États-Unis

Les États-Unis restent largement le pays leader dans le domaine du HPC, à la fois en termes de calculateurs (cf. TOP500) et d'actions d'envergure même si en novembre 2011, les machines les plus puissantes sont le « K Computer » au Japon (10,51 Pétaflop/s sur le Linpac benchmark avec 705.024 cœurs SPARC64) suivi du calculateur chinois Tianhe-1A avec 2,57 Pétaflop/s.

En effet, les États-Unis représentent plus de la moitié des systèmes installés et un peu moins de la moitié de la performance installée au niveau mondial dans le TOP500 (cf. les deux figures ci-dessous issues du Top500).



La stratégie américaine vise à maintenir son leadership mondial en soutenant l'industrie du HPC nationale, ce qui s'accompagne de la présence d'une importante communauté scientifique. L'utilisation du HPC dans l'industrie est aussi très significative avec le soutien de programmes gouvernementaux tel INCITE. L'administration Obama a d'ailleurs listé le calcul Exascale comme l'un des grands enjeux du 21^e siècle.

Les principaux organismes concernés par le HPC sont le « Department of Energy » (DOE), le « Department of Defense » (DoD) incluant la « Defense Advanced Research Projects Agency » (DARPA) et la « National Science Foundation » (NSF). Le programme « Networking and Information Technology Research and Development » (NITRD) coordonne ces organisations au

sein d'une stratégie commune. Le « Interagency Working Group on High End Computing » (HEC IWG) coordonne la partie HPC au sein du NITRD.

Au sein de la DoE, le programme « Advanced Simulation and Computing » (ASC anciennement ASCI) vise à soutenir la simulation, en particulier dans le domaine des armes nucléaires. Ce programme finance le Los Alamos National Lab. (LANL), le Lawrence Livermore National Lab. (LLNL) et Sandia National Labs. Le programme « Advanced Scientific Computing Research » (ASCR) finance la recherche en algorithmique, logiciel et matériel. Ce programme supervise des moyens de calcul tels le NERSC (National Energy Research Scientific Computing Center) à LBNL, les calculateurs hébergés à Oak Ridge, à l'Université du Tennessee et à l'Argonne National Lab (ANL).

Le DoD continue à investir fortement dans le HPC au travers de la DARPA avec des programmes tels HPCS et HPCMP (High Performance Computing Modernization Program).

De même, la NASA est impliquée dans le HPC au travers de sa « Advanced Supercomputing Division ».

Enfin, la NSF finance les super-calculateurs pour la recherche académique dans des domaines tels que le changement climatique, les énergies propres, la biologie et les nanotechnologies.

Quelques sources de financement majeures

Le programme « Innovative and Novel Computational Impact on Theory and Experiment » (INCITE) du Department of Energy (DOE) repose sur les laboratoires nationaux de Argonne et Oak Ridge qui allouent des millions d'heures CPU sur leurs calculateurs de façon à aborder quelques-uns des grands challenges en science et en ingénierie (nouvelles solutions énergétiques, compréhension des évolutions climatiques...). Ce programme est aussi bien ouvert à la recherche académique qu'à l'industrie. En 2012, 1,7 milliard d'heures CPU ont été allouées sur les calculateurs d'Argonne (IBM Blue Gene/P) et d'Oak Ridge (Cray XT), deux des calculateurs les plus puissants au monde.

Le « ASCR leadership challenge » a alloué de l'ordre de 610 millions d'heures en 2010 au NERSC, à Argonne et Oak Ridge et finance des recherches liées aux centres d'intérêt de la DoE.

Le programme « Scientific Discovery through Advanced Computing » (SciDAC) de la DoE visant à financer des développements logiciels et matériels pour les machines haute performance a eu beaucoup de succès et a permis de soutenir de multiples projets interdisciplinaires (énergie, fusion, biologie, environnement...).

Quelques projets Exascale financés actuellement :

- Le projet « International Exascale Software » (IESP) est une initiative internationale visant à définir une ROADMAP pour le développement logiciel sur les machines xascales. Il est financé par la DoE et la NSF.
- La DARPA pilote le « Ubiquitous High Performance Computing Program » qui vise à développer une nouvelle génération de calculateurs. Le premier prototype est attendu pour 2018. Les universités et constructeurs sélectionnés (NVIDIA, Cray, Intel, SGI Sandia Labs et 6 universités...) sont financés à hauteur de 76,6 M\$.



4. Conclusion

La communauté concernée par le calcul intensif au CNRS est supérieure à 2 500 chercheurs et enseignants-chercheurs, ce qui constitue sans doute l'une des plus importantes communautés pluri-disciplinaires autour du calcul intensif en Europe et au niveau international.

Les principaux enjeux évoqués par la plupart des instituts concernent :

- les besoins qui ne sont pas encore satisfaits dans un certain nombre de disciplines,
- l'évolution des codes face aux évolutions architecturales et les besoins en matière de formation autour du HPC,
- l'émergence de besoins importants en matière de stockage et d'accès aux données,
- la nécessité de mutualiser les moyens et savoir-faire et de consti-

tuer des communautés autour de codes, d'outils ou d'infrastructures et de poursuivre les efforts en matière d'accès à des moyens de calcul et de stockage puissants permettant aussi de préparer l'avenir grâce à la disponibilité d'architectures innovantes,

- favoriser la formation et la mise en place de projets pluri-disciplinaires,
- valoriser au mieux tout le potentiel du CNRS en particulier avec des centres et des Instituts tels l'IDRIS, le CC IN2P3, la Maison de la Simulation, l'Institut des grilles et du cloud...

Ce rapport sera mis à jour régulièrement (tous les deux ans) avec pour objectif d'incorporer des contributions de l'ensemble des instituts du CNRS.

