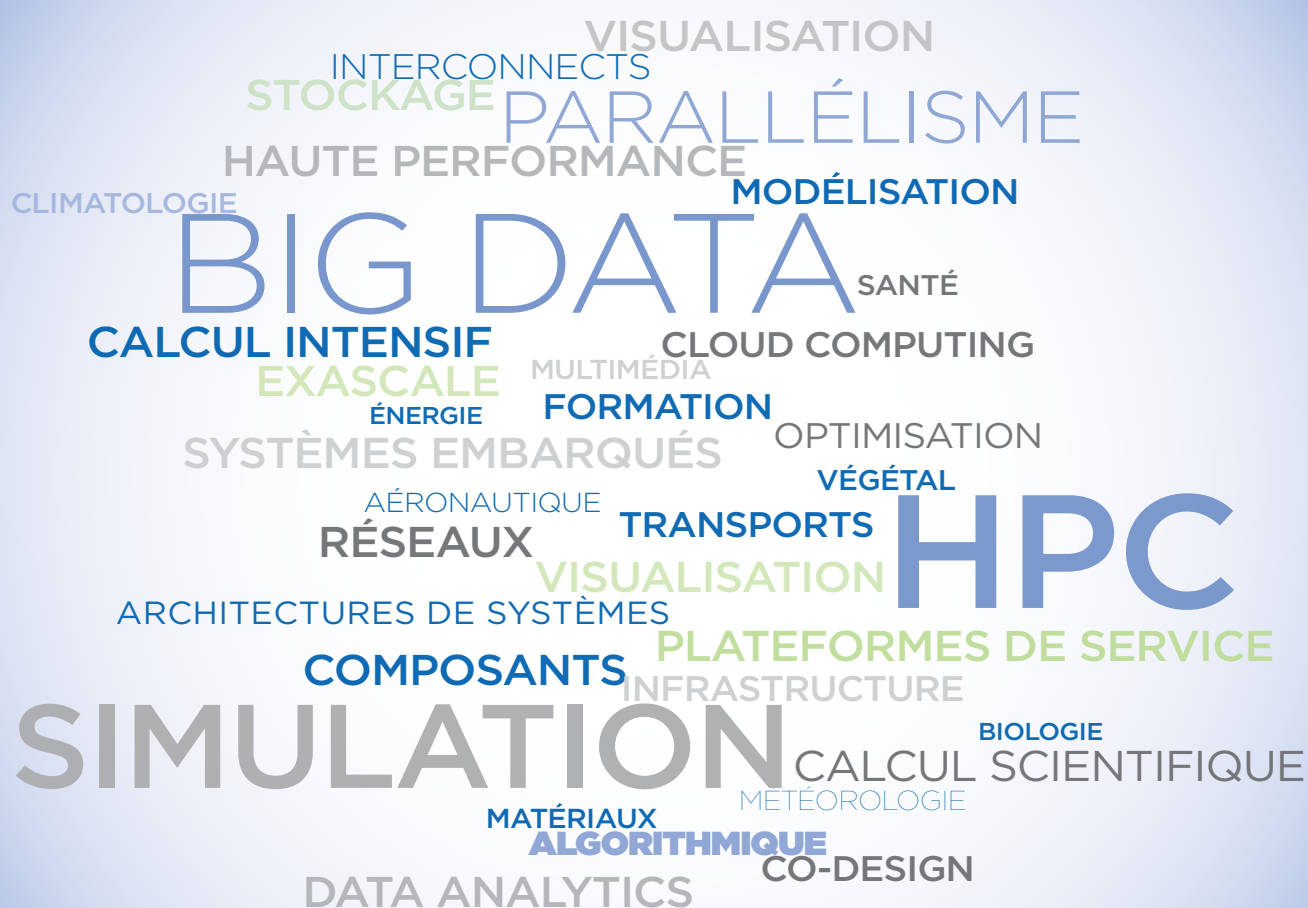


# LES CLÉS DU FUTUR



PUBLIÉ PAR **TERATEC**  
À L'OCCASION DE SON 10<sup>e</sup> ANNIVERSAIRE



# LES CLÉS DU FUTUR

PUBLIÉ PAR **TERATEC**  
À L'OCCASION DE SON 10<sup>e</sup> ANNIVERSAIRE



## INTRODUCTION

- 6 **PRÉFACE**  
Christian Saguez, Teratec
- 8 **LES GRANDES RUPTURES DU  
CALCUL À HAUTE PERFORMANCE  
LE RÔLE DE TERATEC**  
Gérard Roucairol, Teratec

## PERSPECTIVES



- 14 **LES CLÉS DU FUTUR**  
Hervé Mouren, Teratec
- 17 **LA VISION DE L'EUROPE**  
Robert Madelin,  
Commission européenne
- 20 **HPC : DE LA PRÉHISTOIRE  
À L'INTERNET**  
Jean-François Prevéraud
- 25  **Louis Schweitzer,**  
*Commissariat général  
à l'investissement*

## TECHNOLOGIE

- 28 **TRANSITION ET TRANSFORMATION  
DU HPC : LES FORCES  
DU CHANGEMENT**  
Pierre Leca, CEA
- 32 **PROGRAMMATION ET EXPLOITATION  
DES PLATEFORMES HPC :  
DÉFIS ET CHALLENGES**  
François Bodin, Université de Rennes  
et Jean-François Méhaut, Université  
de Grenoble
- 34 **HPC & ÉVOLUTION DES LOGICIELS  
APPLICATIFS**  
Jacques Duysens, Ansys
- 37  **Rajeeb Hazra,**  
*Intel*
- 39 **LE CALCUL INTENSIF,  
UN INSTRUMENT STRATÉGIQUE  
POUR L'AVENIR**  
Thierry Breton, Atos
- 43 **PERSPECTIVES DE RECHERCHE  
EN HPC À L'HORIZON 2025-2050**  
Franck Cappello, Inria
- 46  **Antoine Petit,**  
*Inria*

## USAGES

- 50 **IMPACT DE LA SIMULATION ET DU HPC SUR LES PROCESSUS D'INGÉNIERIE**  
Jacques Duysens, Ansys et  
Bruno Stoufflet, Dassault-Aviation
- 53  **Alain de Rouvray,**  
*ESI Group*
- 55 **LA SIMULATION MULTI-ÉCHELLE DES MATERIAUX**  
Gilles Zerah, CEA
- 57 **SIMULER POUR DÉCIDER**  
Yves Bamberger,  
Académie des technologies
- 59  **Michel Morvan,**  
*CoSMo*
- 60 **CLIMATOLOGIE**  
Olivier Marti, IPSL
- 62 **CALCUL NUMÉRIQUE ET SES PERSPECTIVES DANS L'ENVIRONNEMENT ET L'ÉNERGIE**  
Daniel Clément, Ademe
- 64 **LES GRANDS DÉFIS DE LA BIO-INFORMATIQUE**  
Martin Karplus, Prix Nobel de chimie
- 67 **TECHNOLOGIES NUMÉRIQUES POUR LA FILIÈRE DU VÉGÉTAL**  
Xavier Beulin, Avril  
et Christian Saguez, CybeleTech
- 69 **BIG DATA, BIG SCIENCE, SMART MEDICINE ?**  
François Sigaux, Inca  
et Thierry Damerval, Inserm

- 71  **Bernard Charlès,**  
*Dassault Systèmes*
- 73 **LE CALCUL AU SERVICE DE LA MAÎTRISE DES RISQUES FINANCIERS**  
David Sibai, BNP Paribas
- 75 **LE HPC : RÉPONDRE À L'EXIGENCE DE QUALITÉ POSÉE PAR L'ANIMATION**  
Farchad Bidgolirad, Ubisoft
- 77  **Jim Cashman,**  
*Ansys*
- 80 **LA FUSION CONTROLÉE ET UN MONDE D'ÉNERGIE PROPRE**  
Hervé Guillard, Inria et Philippe Helluy, Université de Strasbourg

## SOCIÉTÉ

- 84 **LA JOURNÉE D'UN INGÉNIEUR EN 2025**  
Didier Courtaud,  
Université Paris Saclay
- 86 **2015, L'ANNÉE DE LA RUPTURE DANS LA CYBERSÉCURITÉ, COMMENT RÉTABLIR LA CONFIANCE DANS LE NUMÉRIQUE ET L'INTERNET**  
Bernard Barbier, Cap Gemini
- 90 **ENSEIGNEMENT DU HPC : ÉTAT DE L'ART ET PROPOSITIONS**  
Brigitte Plateau, Grenoble INP  
et Yves Denneulin, Ensimag

# PRÉFACE

Christian Saguez

Président fondateur, Teratec

Le calcul scientifique et les outils de traitement de l'information numérique ont connu au cours de ces 10 dernières années une évolution et un développement considérables. Ils jouent un rôle de plus en plus majeur pour la compétitivité des entreprises, pour la création d'activités, d'emplois et de valeur et pour la garantie de la souveraineté nationale.

Ces évolutions transforment fondamentalement tous les processus de l'économie :

- Les systèmes d'information sont devenus la colonne vertébrale des entreprises avec notamment la généralisation du PLM qui assure une optimisation globale de l'ensemble des process de l'entreprise ;
- De nouveaux modes de travail se sont rapidement développés tels le travail collaboratif ou le travail nomade ;
- Les entreprises se sont organisées en réseaux et peuvent rapidement avoir une démarche mondiale ;
- De nouvelles offres ont totalement modifié les formes des prestations et de relation clients : tarification dynamique, commerce en ligne, personnalisation des offres, paiement à l'usage, ....

**Les technologies de simulation interviennent à tous les stades de l'activité :** Simuler pour mieux comprendre, Simuler pour mieux concevoir, Simuler pour mieux produire, Simuler pour mieux gérer...

**Ces technologies et méthodes interviennent dans tous les secteurs de l'économie,** des secteurs traditionnels, notamment les industries manufacturières et l'énergie, aux secteurs nouveaux tels que par exemple l'industrie multimédia, le secteur de la santé ou des villes intelligentes et des transports. Elles participent fortement à comprendre et à répondre aux grands défis auxquels notre société est confrontée : environnement et gestion des ressources naturelles, énergies alternatives, changement climatique, usage du végétal et alimentation...

**Des ruptures technologiques et organisationnelles essentielles** sont à la base de ces grandes transformations :

**> Des ruptures technologiques matériel et logiciel :**

- Avec la généralisation des architectures parallèles et hybrides les capacités de traitement de l'information et de calcul numérique sont devenues très importantes. Des puissances de calcul exaflopiques seront disponibles dans quelques années. Les capacités de stockage ont, elles aussi, suivi cette évolution extrêmement rapide ;
- Le développement des technologies cloud associé à la disponibilité des logiciels et des données sous mode SaaS doit permettre un accès à ces outils et ces capacités pour la majorité des acteurs économiques et des personnes privées ;

- Les techniques de modélisation associées à la disponibilité de nouvelles méthodes numériques de simulation et d'algorithmes adaptés à ces nouvelles architectures parallèles et hybrides permettent d'étudier de grands systèmes complexes dans leur globalité ;
- La mise au point de méthodes et d'outils d'aide à la décision reposant sur des techniques d'optimisation et des capacités d'analyse et de visualisation nouvelles modifie totalement la conception et le suivi tout au long de sa vie de produits et de services nouveaux ;
- La disponibilité sous forme numérique de l'ensemble des informations et le développement de techniques de fouilles de données originales grâce à la maîtrise des outils mathématiques de statistique et de probabilité ouvre des voies totalement nouvelles pour aborder les systèmes complexes et introduire de nouveaux types de modélisation.

#### **> Des ruptures organisationnelles et de nouveaux modes d'usage :**

- L'accès pour chacun à de grandes capacités de calcul et de stockage avec l'extension des réseaux informatiques et les technologies Cloud ;
- Le développement de nouveaux modèles économiques de paiement à l'usage tant pour les capacités de calcul (data center) que pour les logiciels ;
- La place de plus en plus importante des modèles logiciel open-source ;
- Le développement des offres de plateformes de services notamment dédiées à des secteurs industriels spécifiques ou à des métiers donnés.

Dans ce contexte en évolution rapide et offreur de grandes opportunités, la France joue un rôle important au niveau mondial et l'initiative Teratec, née voilà maintenant 10 ans, y a contribué de manière essentielle et continue, avec l'ensemble de ces membres et partenaires, à y contribuer fortement. Des projets industriels de grande ampleur ont été lancés et un campus entièrement dédié au calcul haute performance, unique au monde, a été créé. Un plan industriel ambitieux a été initié par les pouvoirs publics pour les années à venir sous la responsabilité de Teratec. La France a par

ailleurs joué un rôle décisif pour la mise en place de la plateforme européenne ETP4HPC. L'ensemble de ces actions permet à la France de répondre à un des enjeux majeurs de nos sociétés dans les années futures :

- En maîtrisant l'ensemble de la chaîne des technologies des composants aux applications les plus innovantes en passant par les nouvelles architectures et les technologies logicielles ;
- En participant au développement des usages dans tous les secteurs économiques et pour l'ensemble des entreprises, des grands groupes aux PME et ETI ;
- En créant de nouvelles entreprises de technologies et de services au très fort potentiel de développement ;
- En assurant la formation des futurs concepteurs, développeurs et utilisateurs de ces technologies et outils.

Bien entendu se maintenir au meilleur niveau mondial nécessite un effort permanent de Recherche et Développement réunissant tous les acteurs académiques et industriels, offreur de technologies et utilisateurs au sein d'organisations transverses.

Cet ouvrage, édité à l'occasion des 10 ans de Teratec, a pour objectif de faire le point sur les grandes orientations technologiques de ce secteur, sur les usages nouveaux et traditionnels et sur les enjeux actuels et futurs associés. Je remercie l'ensemble des spécialistes qui ont accepté d'y contribuer.

**Le calcul haute performance est pour la France, avec ces potentialités exceptionnelles, à la fois une nécessité impérieuse et une formidable opportunité. —**



# LES GRANDES RUPTURES DU CALCUL À HAUTE PERFORMANCE LE RÔLE DE TERATEC

Gérard Roucairol

Président, Teratec  
Président honoraire, Académie des technologies

---

**D**e profondes ruptures sont en cours, tant technologiques qu'économiques ou d'usage qui ont déjà, ou vont avoir, un impact considérable sur l'architecture même des ordinateurs et la manière de s'en servir, sur la structure de l'industrie ainsi que sur les usages de la haute performance. Mais au-delà c'est l'ensemble de l'informatique qui est concerné tant il est vrai, et l'histoire l'a montré, que dans tous les domaines, les applications existantes ont toujours besoin de faire plus et plus vite et que l'augmentation de la puissance de calcul rend possible de nouvelles applications. De ce point de vue, ce qui se passe dans le domaine du calcul intensif préfigure des évolutions profondes de l'ensemble des technologies et des marchés de l'informatique.

Après avoir décrit les ruptures principales qui vont façonner le domaine de la haute performance dans les années qui viennent, nous revenons sur le rôle de Teratec pour anticiper, accompagner ces ruptures, alerter les sphères publiques et industrielles sur leurs impacts, promouvoir et développer l'usage du calcul intensif, structurer l'industrie notamment dans le cadre du plan industriel intitulé « supercalculateurs ».

## LES RUPTURES TECHNOLOGIQUES

La principale de ces ruptures est liée au principe même de l'accroissement de la puissance de traitement informatique. Pendant des décennies et comme effet dérivé de la loi dite de « Moore » ce principe a principalement résidé dans l'accroissement de la fréquence des processeurs. Pour des raisons physiques liées à l'augmentation considérable de la dissipation thermique qui en résulte, ce principe n'est plus applicable. La seule manière d'accroître la vitesse d'un traitement informatique consiste donc à essayer de faire en même temps - « en parallèle » - plusieurs tâches que comporte ce traitement. Pour cela on va pouvoir bénéficier du processus encore soutenu de miniaturisation des transistors pour pouvoir disposer sur un circuit intégré, de plusieurs microprocesseurs et à terme de centaines. Par ailleurs plusieurs de ces circuits peuvent être regroupés au sein d'un même serveur qui forme alors un nœud d'un réseau spécifique qui lui-même peut interconnecter plusieurs dizaines de milliers de ces serveurs au sein d'une même machine, afin d'atteindre des puissances extrêmes comme l'exaflops (le milliard de milliards d'opérations arithmétiques à la seconde).



La mise en œuvre de telles architectures dites « massivement parallèles » pose de nombreux problèmes technologiques pour limiter la consommation énergétique ou encore assurer la résilience de ces architectures, mais un des faits majeurs est lié à l'exploitation par le logiciel de telles architectures. Il va falloir concevoir des algorithmes capables de receler des niveaux très élevés de parallélisme, ainsi qu'écrire et mettre au point des programmes parallèles dont la complexité va croître de manière considérable. En dehors de cette difficulté il faut constater que la très grande majorité des logiciels existants, qui sont séquentiels voire même présentant un faible taux de parallélisme ne peuvent absolument pas tirer parti des futures architectures. Il en résulte notamment que pour un industriel fournisseur de technologie, la taille de sa base installée n'est plus un garant de sa position future. En effet de nouveaux circuits intégrés de traitement vont devoir être inventés, de nouvelles architectures de machines vont être mises en œuvre, de nouveaux logiciels de base ou intergiciels vont devoir être conçus et de nouvelles applications vont devoir être créées de toutes pièces sans qu'a priori des standards existent. On peut même considérer que les standards « de fait » actuels constituent pour ceux qui les ont imposés un frein à l'innovation si la compatibilité avec les bases installées reste pour eux une contrainte incontournable. Compte tenu de la multiplicité des pistes technologiques qui vont conduire à l'élaboration des futurs systèmes informatiques, on peut aussi constater que la traditionnelle indépendance entre le matériel et le logiciel, qui s'est décantée au bout de plusieurs dizaines d'années du développement des marchés de l'informatique, va être remise en cause. De nouveaux paramètres de changement de ce marché vont donc être introduits notamment en ce qui concerne le marché des éditeurs de logiciels mais aussi celui des services.

Dans ce contexte il est clair que des opportunités considérables apparaissent pour modifier en profondeur le jeu d'acteurs qui s'est installé au sein du marché mondial de l'informatique. Notre pays est bien placé

pour tirer parti de ces opportunités. En effet la France est un des rares pays dans le monde à disposer sur son sol d'acteurs industriels qui couvrent une très grande partie de la chaîne de valeur de la simulation numérique et du calcul intensif. Cette chaîne qui va des concepteurs de matériels à des grands utilisateurs pionniers en passant par la conception, la vente d'applications et le service, peut en outre tirer bénéfice d'une recherche technologique publique au meilleur niveau mondial.

## LES RUPTURES D'USAGE

L'usage du calcul intensif est historiquement guidé par la simulation numérique dans quelques domaines d'application : la Défense, la Recherche, la Météo pour ce qui relève du secteur public, l'industrie manufacturière (automobile, aéronautique) et l'énergie pour ce qui relève du secteur privé et dans ce secteur ce sont principalement des grandes entreprises qui ont recours à ces méthodes.

De plus les méthodes de simulation reposent principalement sur une modélisation mathématique aussi exacte que possible de processus physiques ou utilisent des mathématiques discrètes pour décrire par exemple de grands systèmes en réseau comme ceux du chemin de fer ou de l'électricité.

Dans le futur les trois paramètres que nous venons de citer (domaines d'application, méthodes de simulation, caractérisation des utilisateurs) vont évoluer très fortement pour démultiplier très largement les usages du calcul intensif.

En ce qui concerne les méthodes, outre l'emploi d'algorithmes plus classiques de fouilles de données, la capacité de collecter des informations générées sur Internet en très grande quantité favorise l'éclosion de méthodes d'autoapprentissage conduisant à une modélisation statistique des processus à la source des données correspondantes (Big Data).

En matière d'applications les domaines « usuels » vont être très largement étendus à ceux par exemple de

la santé, de l'urbanisation, de l'agroalimentaire, des matériaux, du multimédia, de l'analyse de risque, de l'analyse marketing, de la cosmétique, de la chimie, de la sociologie.

Le déploiement des infrastructures de Cloud, en transformant des coûts d'investissement nécessairement élevés pour des supercalculateurs, en coût de fonctionnement et d'achats de services à la demande va permettre de « démocratiser » l'accès au calcul intensif au bénéfice des PME et des ETI, tout en accélérant la diversification des domaines d'applications.

On le voit donc le marché du calcul à haute performance va être un marché en très forte croissance pouvant entraîner celle de nombreux producteurs de technologie Français et Européens. Par ailleurs la capacité d'un grand nombre d'entreprises à étendre très largement leur potentiel d'innovation en recourant aux techniques du calcul intensif et de la simulation sous toutes ses formes au sein de leur propre activité, va permettre d'accroître singulièrement leur compétitivité et par là même celle du pays.

#### LE RÔLE DE TERATEC

Dans le contexte des bouleversements que nous venons d'évoquer, l'association Teratec a permis depuis 10 ans grâce à son Forum annuel d'anticiper les évolutions en cours et faire dialoguer entre eux les spécialistes, qu'il s'agisse des technologies informatiques ou des applications, et présenter en avance de phase aux utilisateurs, les progrès significatifs. Ces actions d'intermédiation permettent l'identification des acteurs concernés, la structuration de la communauté et notamment la création de projets coopératifs de R&D. Au-delà en créant à Bruyères-le-Châtel en Essonne une technopole entièrement dédiée au calcul intensif Teratec a créé les conditions d'une accélération de la découverte et de la mise au point de technologies nouvelles du calcul intensif, et de ses applications, tout en assurant une visibilité mondiale à ces initiatives.

En faisant intervenir de manière récurrente, des dirigeants d'entreprises françaises ou étrangères ainsi que des responsables de politiques publiques nationaux ou internationaux, le Forum est devenu non seulement un dispositif d'information et de description de politiques exemplaires mais aussi un outil de réflexion stratégique sur le développement du calcul intensif. Sur la base de ces réflexions Teratec a ainsi été amené à élaborer des rapports et proposer des initiatives aux pouvoirs publics tant Français qu'Européens.

On ne peut que se féliciter que le programme de R&D de l'Union Européenne pour les cinq prochaines années (Horizon 2020) comporte un volet substantiel sur le calcul intensif. En France, en créant le « Plan Industriel Supercalculateurs » le gouvernement a pris une mesure sans précédent pour accélérer une prise de position favorable de notre pays dans le concert international de la haute performance informatique. Le fait que le pilotage de ce plan ait été confié à Teratec est certes une reconnaissance de nos capacités, mais aussi elle constitue aussi une exigence de responsabilité et d'efficacité majeure pour notre association.

#### REMERCIEMENTS

Dans le cadre de ce Livre Blanc qui consacre le 10<sup>e</sup> anniversaire de Teratec, je voudrais ici rendre hommage à ses fondateurs Daniel Verwaerde et Christian Saguez pour leur vision en créant cette association. Hervé Mouren, le Directeur de Teratec, assisté de Jean-Pascal Jegu, impriment à l'association le dynamisme, le professionnalisme, l'ampleur nécessaire à toutes les missions qu'elle doit remplir, qu'ils en soient aussi grandement remerciés. Enfin je voudrais exprimer toute ma reconnaissance au conseil d'administration de Teratec, aux membres de son bureau, le vice-président Jean Gonnord et le trésorier Jean-François Lavignon, ainsi qu'à tous les adhérents de Teratec pour leur soutien sans faille et leurs apports au fonctionnement de l'association. ■■■







# PERSPECTIVES



# LES CLÉS DU FUTUR

Hervé Mouren

Directeur, Teratec

---

**L**a combinaison de l'informatique de grande puissance et de la simulation numérique permet de mettre au point des produits ou des services dans des conditions exceptionnelles de rapidité et de précision, ce qui va transformer progressivement la plupart de nos activités. C'est aujourd'hui vrai dans le monde de la recherche, qui s'appuie de plus en plus sur ces technologies, c'est en train de le devenir dans le monde de l'industrie et des services, et ce sera vrai demain pour nos grands enjeux de société, que ce soit la santé, l'énergie, le fonctionnement de nos villes ou l'éducation.

L'informatique de grande puissance combine la pure puissance de calcul (High Performance Computing) qui a progressé d'un facteur 1 000 en une douzaine d'années et le traitement de données massives (Big Data) qui permet d'analyser de très grands volumes de données de toutes origines et de tous types, structurés et non-structurés, pour en ressortir des informations significatives. Les gains en pure puissance de calcul ont permis de réaliser des opérations de grande ampleur dans certains domaines spécifiques comme la mise au point et la garantie des armes nucléaires, la recherche pétrolière, l'aéronautique et les produits financiers. Le niveau de performance atteint aujourd'hui avec cette capacité nouvelle de traiter d'énormes volumes de données en fait un outil utilisable progressivement dans toutes les activités économiques, que ce soient des activités

industrielles, des activités de services, de formation ou de recherche.

Le potentiel de gain est tel que ceux qui en feront le meilleur usage seront les leaders de demain.

### COMMENT S'Y PRÉPARER ?

Quand on regarde les grandes initiatives menées jusqu'à présent, une chose est frappante : elles sont toutes issues d'un travail commun de co-conception (co-design) entre des utilisateurs très avancés et des fournisseurs de technologie également à la pointe. C'est le cas des programmes lancés aux États-Unis par le Département de l'Energie autour des National Labs en charge des programmes d'armes nucléaires, c'est le cas au Japon avec les programmes Earth Simulator il y a vingt ans et Riken aujourd'hui.

En France, à l'initiative du CEA, c'est la même démarche qui a été utilisée. Cela a permis au CEA de réaliser son propre programme de simulation numérique et c'est dans cet esprit que le CEA a lancé il y a dix ans l'initiative Teratec en regroupant les grands industriels de l'aéronautique (Dassault-Aviation, Safran, EADS) et de l'énergie (CEA, EDF, Total) avec les fournisseurs de technologie et les centres de recherche concernés. L'objectif assigné était double : maîtriser ces technologies stratégiques pour ces grands industriels et en assurer la diffusion la plus large dans leurs entreprises

et chez leurs fournisseurs. La génétique de Teratec est bien fondée sur ce principe de co-conception et c'est ce qui a attiré d'autres leaders comme Air Liquide, CGG ou L'Oréal qui ont rejoint Teratec depuis.

### **NOUVEAUX USAGES, NOUVEAUX ACTEURS**

Nous sommes dans cette phase d'élargissement des utilisations à des secteurs nouveaux. Ce livre blanc détaille plus loin certains de ces nouveaux usages dans des domaines aussi variés que les matériaux (conception de nouveaux matériaux, nouvelles méthodes de production y compris la fabrication additive, modélisation et simulation du matériau en fonction et du vieillissement) ou que le monde de l'agriculture (depuis les semences jusqu'à la production et la transformation), sans parler de la santé (médecine personnalisée, mise au point de nouveaux médicaments, traitement des grandes endémies) ou des industries manufacturières. Martin Karplus, prix Nobel de Chimie en 2013, a déclaré en apprenant son prix qu'il était « une reconnaissance de l'importance des simulations numériques ». Il décrit plus loin dans ce livre que sans la simulation, rien n'aurait été possible.

Nous voyons également la création autour de ces technologies d'activités complètement nouvelles : c'est le cas d'entreprises comme Google ou PayPal dont les dirigeants le disent très clairement. En quelques années, ces entreprises sont devenues des leaders mondiaux et on mesure leur importance dans l'économie et dans notre vie de tous les jours.

Le potentiel de création est immense et ne se limite pas à quelques très grands acteurs. Nous allons voir émerger une foule d'intervenants nouveaux de toute taille couvrant tous les secteurs et qui, en mêlant le meilleur savoir-faire dans un domaine donné à la puissance de ces technologies, vont faire apparaître des produits et des services complètement nouveaux qui vont transformer l'activité économique de ce secteur. Regardez la transformation en peu de temps du secteur de la musique ou de la photographie, et regardez ce

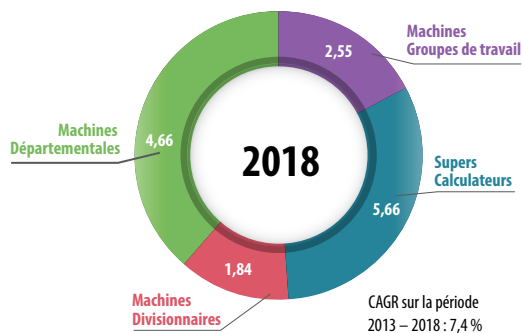
que le GPS permet et ouvre comme possibilités. On assistera dans les années à venir à un foisonnement d'activités nouvelles, et les entreprises se développeront d'ailleurs plus rapidement par ces activités nouvelles que par l'optimisation de leurs activités traditionnelles. Nous n'en sommes qu'au début et c'est là que seront créés les emplois et la valeur ajoutée de demain. L'enjeu est colossal en termes de compétitivité - on voit à quelle vitesse les leaders du secteur de la téléphonie sont remplacés par de nouveaux venus - et de productivité - la maîtrise de ces technologies devient une des clés du développement des entreprises. C'est pour cela que nous pouvons dire avec certitude qu'elles sont les clés du futur.

L'impact sera également structurant sur l'industrie informatique. Au-delà des constructeurs d'ordinateurs qui étaient les grands intervenants, on voit aujourd'hui les grands acteurs des composants comme Intel, Nvidia ou ARM y jouer un rôle grandissant et le grand chantier des prochaines années sera celui du logiciel : les outils de modélisation et les codes de simulation ont été conçus pour des architectures à quelques processeurs et l'arrivée des systèmes regroupant des millions de processeurs et traitant des volumes de données sans commune mesure, oblige à développer de nouvelles générations de logiciel dont une part importante viendra de co-développements réalisés avec les utilisateurs les plus avancés. Toute la chaîne de valeur de l'informatique sera concernée et l'acquisition récente de Bull par Atos en est une preuve très concrète. Atos a décidé que la maîtrise des infrastructures et donc de ces technologies était essentielle pour son développement.

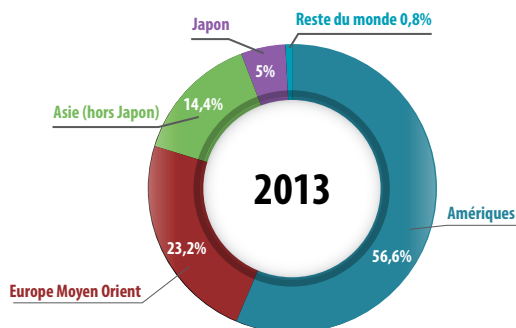
Nous sommes au début d'un processus qui va voir émerger de nouveaux intervenants. Certains l'ont bien compris : au-delà des États-Unis et du Japon, la Chine a lancé un très important programme d'investissements. La France et l'Europe participent à cette course : la compétence technologique existante et la compréhension par les grands leaders des enjeux doivent permettre d'y figurer au meilleur rang. ■

# LE HPC EN QUELQUES CHIFFRES

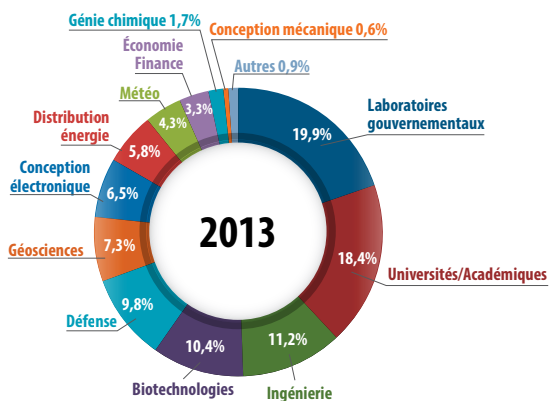
## UN MARCHÉ DE 14,7 MILLIARDS DE DOLLARS EN 2018



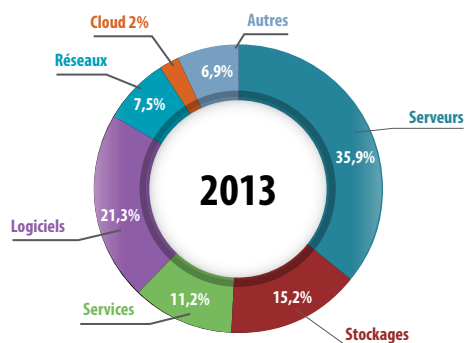
## LES PRINCIPAUX MARCHÉS



## LES PRINCIPAUX SECTEURS UTILISATEURS

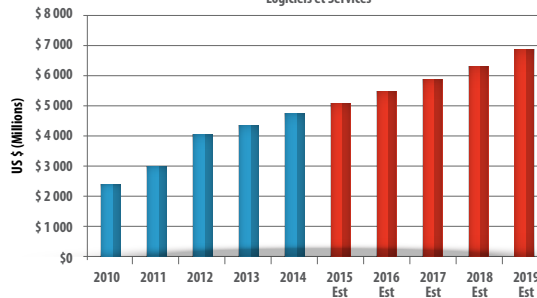


## LES TYPES DE FOURNITURES



Sources : IDC ; Top500.org ; intersec360.com, PAC/CXP.

## DÉPENSES UTILISATEURS EN SIMULATION



CAGR sur la période 2015 – 2019 : 7,7 %

Source CIMdata 2014 Market Analysis



# LA VISION DE L'EUROPE

## Robert Madelin

Directeur général « Réseaux de communication, contenu et technologies »  
Commission européenne

Le calcul à haute performance (HPC) et l'Europe, c'est une longue histoire. Je suis touché sur le plan personnel, en tant que serviteur de l'Union Européenne, et fier au nom des équipes d'experts qui soutiennent la recherche HPC à travers le continent, de me voir attribuer ma part dans la présentation de cette œuvre d'histoire et de prospective. L'histoire qui commence avec le programme de recherche Esprit en 1983, lui-même une réponse à l'initiative japonaise du programme de 5<sup>e</sup> génération... Comme un retour des choses, il est troublant de penser que les questions d'alors autour de l'architecture, des processeurs, des réseaux, et de l'intelligence artificielle – très à la mode au siècle dernier dans les années 80 – sont aujourd'hui à nouveau très présentes. Ce qui est fascinant, c'est que ces questions se posent dans un contexte très différent où tout a changé : la fin de la loi de Moore, la consommation énergétique, la mobilité, l'Internet et le large bande, les réseaux sociaux, l'Internet des objets, le Big Data – réincarnation de l'intelligence artificielle en plein développement, jusqu'à l'interface entre statistique et informatique (apprentissage et reconnaissance des formes). Tout cela nous montre les immenses progrès technologiques accomplis. Dès 1991 le rapport Rubbia insistait sur l'aspect stratégique de la simulation numérique pour la science et l'industrie, et sur la

nécessité de réunir l'Europe autour d'un grand projet sur le calcul à haute performance visant le téraflops (mille milliards d'opérations par seconde) à la fin du millénaire précédent, là où nous visons maintenant l'exaflops (un million de téraflops) vers 2020 après avoir atteint le pétaflops (mille téraflops) vers 2010...

Aligner les intérêts nationaux, les intérêts industriels, les intérêts scientifiques autour de projets communs est toujours un défi pour l'Europe. Même si la suite donnée au rapport Rubbia n'a pas été à la hauteur des enjeux identifiés, il est un domaine où l'Europe peut être fière, c'est celui du développement des réseaux de la recherche qui est devenu GÉANT et qui relie les chercheurs européens entre eux et à ceux du monde entier, offrant aux communautés scientifiques des environnements de travail virtuels s'affranchissant du temps et de l'espace. GÉANT est connu dans le monde entier et le besoin d'une telle infrastructure avait clairement été identifié dans le rapport Rubbia. Le réseau GÉANT connecte ainsi aujourd'hui 40 pays européens entre eux à 100 Gbits/s dans son cœur, reliant 50 millions de chercheurs et étudiants en Europe et 60 pays au-delà de l'Europe. C'est aussi un écosystème qui a permis l'éclosion de la fédération d'accès wifi eduroam (qui connaît une croissance de 100 % annuellement) ainsi que de la

fédération d'identité edugain permettant l'accès aux ressources informatiques par-delà les frontières.

### LE PROGRAMME HORIZON 2020

Après une succession de programmes-cadre de recherche, « technology push » ou « user pool », Horizon 2020 marque une rupture en intégrant recherche et innovation et en mettant en place des partenariats public-privé assurant la pérennité des actions dans la durée et engageant toutes les parties prenantes autour d'objectifs clairement identifiés. Un accord de partenariat a ainsi été signé pour le calcul à haute performance dans le but de stimuler un écosystème européen unissant les différents acteurs, développeurs et utilisateurs de technologies HPC, du monde académique et du monde industriel, grands groupes et PME. Créer un écosystème est complexe mais nous savons par l'exemple que c'est la force des grands pays industrialisés. L'Europe a besoin d'une industrie compétitive et donc innovante. Le calcul à haute performance est source d'innovation pour la conception, la qualité, la distribution des produits et des services. Les applications sont un atout stratégique de l'Europe, depuis les secteurs traditionnels du HPC que sont l'automobile et l'aéronautique jusqu'aux secteurs émergents de la santé, de la pharmacie, de la cosmétique, etc. On estime que l'usage généralisé du HPC dans l'industrie pourrait accroître de 2 à 3 % le PIB européen à l'horizon 2020 en améliorant la qualité des produits et des services.

Le HPC est aussi, bien entendu, un outil essentiel pour la recherche scientifique qui elle-même se transforme par l'apport des technologies de l'information et de la communication. On parle de « data-driven science » répondant au « tsunami des données », de science ouverte : ces transformations sont de réels chocs parfois culturels dans certaines communautés scientifiques. Le rôle des infrastructures de recherche dont PRACE qui fournit les moyens de calcul et l'expertise les plus avancés aux chercheurs européens est essentiel

dans cette transformation. Le projet européen sur le cerveau humain (The Human Brain Project) en est une bonne illustration.

L'importance des données amène aussi des problèmes de confidentialité, d'éthique qui doivent être traités. Réindustrialiser l'Europe, la mettre au cœur de l'innovation scientifique sont nos défis. Il nous faut penser au-delà du confortable, du « business as usual », au-delà des silos disciplinaires ou d'intérêts. Ce que Teratec a accompli est remarquable, autour des grands industriels, des PME, de la promotion de nouveaux outils à l'identification de nouveaux secteurs applicatifs, qui eux-mêmes questionnent la science et les technologies comme le montrent les méthodes d'analyses et de fouilles de données et l'importance croissante des systèmes de mémoire qui influencent fortement les architectures de systèmes HPC.

### UNE APPROCHE COLLABORATIVE

L'approche européenne est collaborative, au niveau des chercheurs comme des décideurs, ce qui est un défi lorsqu'il s'agit d'identifier des objectifs communs et des feuilles de route communes. Le HPC est un problème à l'échelle de l'Europe. Les compétences, les briques technologiques sont dispersées et les moyens à mettre en œuvre sont importants. Il s'agit aussi d'une question de souveraineté, question qui se pose aussi pour les plateformes en nuage (Cloud Computing). Peut-on imaginer aborder les questions climatiques et influencer les politiques sans la maîtrise de la simulation et du calcul à haute performance ? Peut-on imaginer les systèmes complexes de demain comme la ville intelligente sans modélisation ? Peut-on prétendre relever les défis de la compréhension du cerveau, de la médecine de précision sans outils HPC ? Les récents prix Nobel fournissent déjà des réponses. Tous ces éléments rendent l'approche de co-design utilisateurs/développeurs, depuis la maquette jusqu'aux adjudications publiques en passant par le développement de prototypes, indispensable même si cela

s'avère difficile, contrairement aux États Unis, au Japon et en Chine... Il nous faut aussi une approche durable : le marché du HPC est petit, face aux coûts exponentiels de la recherche et du développement, efforts qui doivent être permanents avec des retours sur investissement de 6 à 8 ans. Si le financement public a un rôle à jouer y compris pour l'installation des premières machines, celui-ci restera limité, en particulier en temps de crise. L'arrivée du Big Data offre une opportunité de sortir du calcul intensif au sens strict et d'élargir le marché à celui des serveurs. Exploiter les synergies/convergences entre marchés -HPC/ serveurs/ embarqué- y compris en matière de micro-processeur, de consommation énergétique, devient nécessaire pour amortir les coûts.

### UNE OUVERTURE MONDIALE

Dans tous ces efforts l'Europe ne doit pas se refermer sur elle-même : la recherche est mondiale, le marché est mondial et souvent les enjeux de société sont mondiaux. L'Europe doit être conquérante, et dans un monde de science ouverte, l'avantage est à ceux qui prennent le leadership sur la formation de consensus, que ce soit pour les standards, de fait ou non, pour les logiciels systèmes, les modèles de programmation, les outils, ou encore pour la définition des éléments d'inter-opérabilité comme les métadonnées. Les Européens doivent être présents « là où ça se passe » !

Le partenariat public-privé signé avec la Commission plus de 20 ans après le rapport Rubbia nous commande de réussir dans nos objectifs ambitieux. Il nous faut aussi préparer le monde de l'après-demain, là où la loi de Moore s'arrêtera effectivement, là où les lois de la physique détermineront de nouvelles lois économiques : ce sont les recherches sur le graphène, sur les technologies quantiques où l'Europe investit déjà considérablement, pour ne citer que ces deux options... ■■■



© Atos-Courtesy of KVM/

# HPC : DE LA PRÉHISTOIRE À L'INTERNET

Jean-François Prevéraud

Journaliste

*L'histoire du High Performance Computing se confond avec celle de l'informatique, d'autant plus que l'informatique a toujours été tirée par la performance pour calculer plus et plus vite. Petit retour historique sur quelques siècles d'évolution.*

**D**ifficile de parler de l'histoire des super-calculateurs sans évoquer l'histoire même des calculateurs et du calcul dans son ensemble. Si le mot calcul vient du latin *calculus* (petit caillou), car les romains utilisaient de petites pierres pour effectuer leur comptabilité, il semble que les plus anciens instruments de calcul connus soient les Os d'Ishango découverts au Congo Belge dans les années 50 et qui d'après les archéologues dateraient d'environ 20 000 ans. Pour certains auteurs, ces deux os savamment entaillés seraient les premières règles à calcul de l'histoire.

Plus proche de nous, les sumériens puis les égyptiens ainsi que les chinois ont développé les systèmes de numérotation et le calcul numérique. Cela conduisit au développement des abaqes, instruments mécaniques plans facilitant le calcul. Les plus anciens semblent être les tables à poussière grecques sur lesquelles on dessinait des bâtons à l'aide d'un stylet. Les romains

perfectionnèrent le système en remplaçant le récipient de sable par une plaque de fer dotée de rainures parallèles gravées dans lesquels on déplaçait des cailloux. L'information y est représentée sous forme discrète, c'est-à-dire que l'on saute d'une unité (un caillou) à l'autre. Un système similaire vit le jour en Chine où il est encore largement utilisé, le boulier.

Les croisades firent découvrir aux Occidentaux le calcul algorithmique et décimal, né chez les Babyloniens trois millénaires avant JC et développé par les savants arabes entre le IX<sup>e</sup> et le XII<sup>e</sup> siècle. Il est notamment décrit dans le Liber abaci du mathématicien Leonardo Fibonacci en 1202, qui introduit la notation indo-arabe en Europe, plus puissante et rapide que la notation romaine et les abaques utilisés jusque-là. Pourtant la lutte entre les abacistes et les algoristes ne cessa qu'à la Révolution française.

## LA PASCALINE, ANCÊTRE DE LA CALCULATRICE

En 1614, le mathématicien écossais John Napier (ou Neper en français) invente les logarithmes pour simplifier ses calculs d'astronomie et de trigono-



Les Os d'Ishango



Boulier chinois



La calculatrice à roues dentées de Wilhelm Schickard

métrie. Les mathématiciens britanniques Edmund Gunter, William Oughtred et Edmund Wingate eurent vers 1622 l'idée d'utiliser cette formulation mathématique sur une règle à plusieurs échelles coulissantes, pour effectuer rapidement des multiplications et des divisions. La règle à calcul était née. Elle subsistait jusqu'à la vague des calculatrices électroniques.

Pourtant dès le XVII<sup>e</sup> siècle apparurent les premières machines de calcul mécaniques : 1623 pour la calculatrice à roues dentées de Wilhelm Schickard ; 1642 pour la Pascaline de Blaise Pascal et 1673 pour la calculatrice à cylindres cannelés, chariot mobile et manivelle de Gottfried Wilhelm Leibnitz qui traitait automatiquement les multiplications et les divisions. Ces machines eurent une nombreuse descendance au XVIII<sup>e</sup> siècle, tant en France qu'en Angleterre et en Allemagne. Les mêmes principes mécaniques furent utilisés pour créer les premières machines automatiques de production, tels les métiers à tisser automatiques de Jacques Vaucanson en 1745 et programmables par cartes perforées de Joseph-Marie Jacquard en 1793.

Dès 1821, le mathématicien britannique Charles Babbage proposait une machine à calculer analytique pilotée par des cartes perforées, comme un métier Jacquard, et en 1842 il proposait le principe de la programmation avec son assistante Ada Byron, fille de Lord Byron. Toutes les bases matérielles et logicielles de l'informatique étaient là ! En 1851, après près de 30 années de développement s'inspirant des travaux de Pascal et Leibnitz, l'assureur Charles Xavier Thomas de Colmar, mis sur le marché l'Arithmomètre, qui sera la première et seule machine à calculer fabriquée industriellement pendant près de 40 ans.

En 1854, George Boole propose son algèbre combinatoire, tandis qu'en 1890 l'ingénieur américain Herman Hollerith invente la machine à calculer à cartes perforées pour faciliter le recensement de la population. La mécanographie est née. Il va créer en 1896 la Tabulating Machine Company qui sera l'une des entités à l'origine en 1911 de la Computing Tabulating Recording Company qui deviendra International Business Machine (IBM) en 1924. En Europe, la Compagnie des machines Bull, qui utilise les brevets de l'ingénieur norvégien Frederick Rosing Bull pour une trieuse-enregistreuse, additionneuse combinée à cartes perforées, est fondée en 1933. La mécanographie devient une industrie, mais elle intéresse aussi les militaires.

## DE LA MÉCANOGRAPHIE À L'INFORMATIQUE

Dès 1918, l'allemand Arthur Scherbius met au point Enigma, une machine électromécanique à rotors portable pour le cryptage des messages télégraphiques, qu'il essaiera de commercialiser à partir de 1923. En 1927, il achète les droits d'une machine similaire développée par le hollandais Hugo Kock qui a déposé des brevets en 1919. Dès 1929, les trois armes de la Wehrmacht sont équipées. Enigma sera dès lors largement utilisée par les diplomates et militaires nazis. Heureusement des cryptanalystes polonais, qui ont développé en 1938 une machine électromécanique de décryptage baptisée Bomba Kryptologiczna, et les services de renseignement français fourniront des clés de décodage à leurs homologues britanniques au début de la Seconde Guerre mondiale. Cela servira de base de travail aux spécialistes britanniques qui à leur tour, sous la houlette des mathématiciens Alan Turing et Gordon Welchman, développeront une "Bombe" électromécanique plus puissante. La course aux supers-calculateurs était lancée.



La machine analytique de Charles Babbage



L'arithmomètre de Charles Xavier Thomas de Colmar



La machine de Herman Hollerith

Une véritable course car les Allemands voulant renforcer la sécurité de leurs transmissions feront successivement évoluer Enigma de 2 rotors initiaux pouvant occuper 26 positions, vers des machines à 3 et 4 encoches permettant de placer des rotors choisis parmi 8 modèles présentant des câblages internes différents. Si le principe d'Enigma est simple et connu, ce qui fait sa force c'est le nombre de combinaisons possibles en jouant sur l'arrangement des rotors, l'alphabet des rotors et leur tableau de connexion. Ainsi sur une machine à 3 rotors choisis parmi 5, il avoisine les  $1,59 \times 10^{20}$  combinaisons. Il faut donc disposer d'une très grande puissance de calcul pour décrypter rapidement le message ennemi. D'autant que la clé de codage change toutes les 24 heures.

Pour cela, les Alliés vont regrouper au manoir de Bletchley Park les services du Government Code & Cypher School (GC&CS) qui compteront plus de 9 000 militaires et civils et utiliseront plus de 12 000 employés temporaires durant la guerre. Ils seront logés dans une multitude de huttes préfabriquées disséminées sur les 22 hectares du parc. Leur travail de fourmis permettra à Alan Turing de développer des méthodes mathématiques de traitement de ces informations. Sa première "Bombe" électromécanique pourra abattre le travail quotidien de 10 000 personnes. Il sera aidé par Max Newman et Thomas Flowers qui développeront en 1944 une machine équipée de 2 400 tubes électroniques à vide capable de réaliser 5 000 opérations par seconde. C'est l'ordinateur Colossus. Une dizaine de machines de ce type d'une puissance de 5 kFlops furent utilisées simultanément à Bletchley Park.

Dès 1943, Alan Turing se rend aux USA où il découvre les progrès des Américains en termes d'électronique

et les premières machines électroniques qu'il améliore. Par exemple l'Atanasoff-Berry Computer qui, dès 1942, utilisait trois concepts fondamentaux : utilisation du binaire pour représenter tous les nombres et les données; utilisation de l'électronique; séparation entre la mémoire et l'unité de calcul. Ses travaux permettront de "casser" le Téléscripteur de Fish développé conjointement par Lorenz et Siemens pour assurer la communication chiffrée entre les Etats-Majors allemands.

L'ensemble des informations issues de ces "casseurs de codes" sont fournies aux dirigeants Alliés sous le nom d'Ultra. Ils estimeront après-guerre que cela a permis de raccourcir le conflit de 2 ans.

### LA COURSE À LA PUISSANCE

Mais outre le décryptage, les belligérants eurent l'idée d'utiliser les calculateurs pour d'autres applications. Ainsi l'ingénieur Konrad Zuse développa en 1941 pour l'Institut de recherche aéronautique allemand, le calculateur Z3 utilisé pour des analyses statistiques sur les vibrations des ailes d'avions, avec une puissance de 20 Fops. Il utilisa pour cette machine programmable par ruban perforé 2 000 relais électromagnétiques car les autorités nazies estimèrent qu'il n'était pas indispensable à l'effort de guerre de lui fournir des tubes électroniques. De leur côté, les Américains eurent l'idée dès 1943 d'utiliser des machines avec des tubes électroniques pour faire des calculs répétitifs de balistique. Les travaux de John Presper Eckert et John William Mauchly, qui créèrent en 1951 l'Univac I, et de John Von Neuman, qui eut l'idée de stocker le programme en mémoire, comme les données, sous forme codée plutôt que câblée, donnèrent naissance en 1946 à l'Electronic Numerator Integrator & Computer (Eniac). Cette



La Bombe électromécanique d'Alan Turing et Gordon Welchman



The Atanasoff-Berry Computer



L'Eniac



machine de 30 tonnes et 167 m<sup>2</sup> comportait 17 468 tubes à vides et consommait 150 kW. Elle était capable d'effectuer 5 000 additions et 300 multiplications à la seconde. Sa puissance est estimée à 50 kFlops. De leur côté, les Britanniques développèrent l'Electronic Delay Storage Automatic Calculator (Edsac), premier ordinateur avec mémoire électronique, qui pouvait effectuer 15 000 opérations mathématiques par seconde dont 4 000 multiplications. Ce dernier donna naissance en 1951 au Leo 1, l'un des tout premiers ordinateurs destinés à des applications commerciales.

En 1949, le Binary Automatic Computer (Binac) développé par la Eckert-Mauchly Computer Corp (EMCC), la première société informatique, entra en service chez Northrop Grumman. Ce fut le premier ordinateur commercial. Dans le même temps, chez les Anglais le Manchester Mark I fut le premier ordinateur électronique à programme enregistré en mémoire au monde. Développé à l'Université de Manchester par d'anciens de Bletchley Park, il sera industrialisé par Ferranti, qui en vendra 9 jusqu'en 1957. Les Soviétiques entrèrent aussi dans la danse à cette époque en présentant le MESM en 1950. Utilisant 6 000 tubes à vide, il absorbait 25 kW et avait une puissance informatique de 3 kFlops.

L'Eniac fut remplacé en 1951 par l'Electronic Discrete Variable Automatic Computer (Edvac), une machine de 7,9 tonnes qui disposait de 6 000 tubes et 12 000 diodes et consommait 56 kW. Toujours en 1951, Von Neumann présenta son IAS Machine développé depuis 1945 autour d'une architecture à laquelle il laissa son nom. Enfin, en 1952, IBM lança son premier ordinateur l'IBM 701 destiné à la défense américaine et lançait le développement de l'AN/FSQ7, un géant utilisant

60 000 tubes à vide, pesant 125 tonnes et consommant 1,5 MW. En 1958, une cinquantaine de ces machines entrèrent en service au sein du réseau de surveillance aérienne Sage. Ce furent les plus gros ordinateurs à tubes à vide jamais construits.

En France, la Société d'Electronique et d'Automatisme (SEA) livre son premier Calculateur Universel Binaire de l'Armement (Cuba) en 1951, puis un CAB 1011 en 1954 au service du chiffre militaire (SDECE). Elle deviendra filiale de Schneider-Westinghouse en 1958, puis de CGE, CSF et Intertechnique en 1966 pour créer la Compagnie Internationale pour l'Informatique (CII)

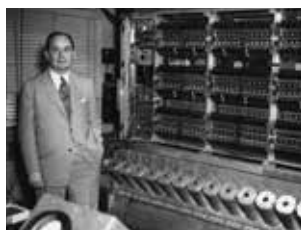
## DES TUBES À VIDE AUX MICRO-PROCESSEURS

L'invention du transistor en 1947 dans les Bell Labs, puis son industrialisation au début des années 50 par Raytheon pour remplacer les tubes à vide, allait faire passer l'informatique dans une nouvelle ère. L'ordinateur allait pouvoir se démocratiser, chaque ordinateur ne serait plus un exemplaire quasi-unique destiné à surpasser son dernier concurrent en date, mis en œuvre par quelques scientifiques, bien souvent pour des usages militaires. L'industrie et les services allaient pouvoir bénéficier de machines standards fabriquées en série. Cela se traduisit par des progrès au niveau des périphériques (disques durs, bandes magnétiques...), des langages de programmation de haut niveau (Fortran, Lisp, Algol, Cobol...) et l'apparition de nouveaux acteurs, tel Digital Equipment Corp (DEC) qui lança le premier mini-ordinateur, le PDP-1, en 1960.

L'histoire allait s'emballer encore plus avec l'invention du circuit intégré en 1958 et l'arrivée des premiers



Le Mesm soviétique



Edvac



IBM 701

ordinateurs l'utilisant en 1963 pour le programme Apollo. Le mini-ordinateur allait venir épauler puis remplacer le "mainframe", super-calculateur avant l'heure et de nouveaux acteurs se faire jour (Hewlett-Packard, Prime Computer, SEMS...). L'informatique devenait distribuée. De plus, le circuit intégré allait faciliter la miniaturisation et le développement des calculateurs embarqués, notamment militaires. L'arrivée du microprocesseur chez Intel en 1971 allait une fois encore changer la donne. Les machines seraient plus rapides, moins chères, moins gourmandes en énergie et plus fiables. Outre leur intégration sur les mini-ordinateurs, ces microprocesseurs allaient populariser deux nouvelles familles d'ordinateurs les micro-ordinateurs, mono-processeur apparus dans les années soixante-dix (R2E Micral, Apple II, Tandy TRS-80, Commodore PET...), et les super-ordinateurs, multi-processeurs.

### DU CDC 6600 AU THIANHE-2

Ces derniers sont ce qui se fait de mieux en termes de technologies au moment où ils sont conçus, pour être les plus performants à la fois en termes de vitesse de calcul et de capacité de traitement. Ils adoptent pour cela des architectures originales, tant au niveau du traitement des données que des interfaces avec la mémoire. Le premier "vrai" super-calculateur fut le CDC 6600 conçu en 1964 chez Control Data par Seymour Cray. Sa puissance était de 4,8 MFlops, soit 4 fois celle de l'IBM 7030, un ordinateur puissant de l'époque.

En 1972, Seymour Cray crée Cray Research et il sortira le Cray-1 d'une puissance de 166 MFlops en 1976. Le Cray X-MP de 1982 aura une puissance de 2x200 MFlops et le Cray X-MP/48 de 1984 aura une puissance de 4x230 MFlops. Enfin le Cray-2 de 1985 aura dans sa version

quadri-processeurs une puissance de 1,7 GFlops. Mais Cray peinera à développer la génération suivante basée sur l'arséniure de gallium et finira par passer dans le giron de Silicon Graphics en 1995. Entre temps, de nombreuses sociétés, étoiles filantes de l'informatique, auront vu le jour et auront disparu (Scientific Computer Systems, American Supercomputer, Supertek, Thinking Machine, Kendall Square Research...). Toutes auront essayé de développer des machines massivement parallèles, c'est-à-dire utilisant des centaines de processeurs avec des bus et une organisation de la mémoire adaptés pour minimiser les temps d'accès. Une tendance qui va se généraliser dans les années quatre-vingt-dix. Les progrès de l'électronique en termes de miniaturisation et de performances vont conduire à l'arrivée des processeurs multi-cœurs, c'est-à-dire intégrant plusieurs processeurs dans la même puce, multipliant les capacités de calcul. Pour aller encore plus loin, on peut faire fonctionner en parallèle de multiples machines communiquant via un réseau. Si les machines sont identiques on parle de grappes de serveurs, si elles sont différentes de grille. Le réseau d'interconnexion peut être spécifique ou utiliser Internet, nous sommes alors dans l'air du Cloud Computing, à la puissance quasiment sans limite.

Mais il existe toujours un marché pour des machines monolithiques, souvent conçues comme des exemplaires uniques par des constructeurs traditionnels (HP, IBM, Cray, SGI, Bull, Dell, Fujitsu...) pour des applications très spécifiques. La plus puissance recensée dans le dernier Top500 paru en novembre 2014, serait le Tianhe-2 du National Super Computer Center (NSCC) de Guangzhou en Chine. Ses 3,1 millions de cœurs Intel Xeon lui donneraient une puissance de calcul de 33,86 PFlops, mais c'est un gouffre énergétique qui consomme 17,8 MW. C'est peut-être ce qui va entraver l'évolution de ces machines. ■



SEA Cuba



DEC PDP-1



Tianhe -2





**Louis Schweitzer**

Commissaire général à l'investissement

---

**Quels sont pour vous les enjeux du calcul intensif ?**

Les enjeux du calcul intensif sont indissociables de ses applications, issues notamment de la simulation numérique ou du Big data. Ces applications concernent bien sûr le secteur public, au travers de la recherche publique et de la défense nationale, mais elles sont également de plus en plus portées par les besoins industriels. La capacité à mener efficacement des calculs complexes et à traiter des données massives ouvre en effet des champs nouveaux dans la conception des systèmes complexes. Pour les industriels, cela permet d'améliorer la performance des produits ou services mais c'est également un outil puissant pour réduire le "time to market" et être plus agile dans l'évolution de ses produits. Certains secteurs, comme l'automobile et l'aéronautique, ont maintenant une bonne expérience de ces techniques mais ils doivent continuellement s'adapter à l'augmentation des puissances de calcul. Au-delà de ces acteurs "traditionnels", le calcul intensif trouve des applications dans des secteurs aussi variés que le multimédia, le végétal ou la santé. Par exemple, le projet « 3D Neuro Secure », que nous soutenons avec le PIA, vise à faire progresser l'innovation thérapeutique en s'appuyant sur la simulation numérique et la modélisation 3D. Les outils développés devraient permettre de concevoir des molécules plus efficaces, notamment contre la maladie d'Alzheimer. Le calcul intensif illustre ainsi parfaitement le caractère diffusant de l'innovation numérique pour la compétitivité de l'ensemble des secteurs économiques.

**Quelle est l'action du PIA dans le domaine du calcul intensif ?**

Les technologies numériques et, en particulier, le calcul intensif font partie des domaines prioritaires

du programme d'investissements d'avenir. Ainsi, une action opérée par le CEA et dotée de 50 millions d'euros est dédiée au financement des développements technologiques nécessaires aux prochaines générations de supercalculateurs. En amont, nous avons financé l'Equipex Equip@meso, qui a permis de mettre en place, sous la coordination de Genci, des moyens de calcul dans une dizaine de grands centres de recherche répartis en réseau sur le territoire. En aval, nous avons lancé deux appels à projets de R&D dédiés au calcul intensif et à la simulation haute performance. L'objectif est de faire émerger des applications innovantes de ces technologies dans des domaines variés. Enfin, nous soutenons des actions de diffusion de ces technologies vers les PME, qui sont souvent moins au fait de ces techniques que les grands groupes alors même que leur accès aux moyens de calcul devient de plus en plus aisé grâce au « cloud computing ». Le PIA intervient ainsi sur l'ensemble de la chaîne de l'innovation, depuis la recherche publique jusqu'aux fournisseurs de technologies et aux grands utilisateurs.

**Quelle est la situation de la France dans ce domaine ?**

La France a des atouts de premier plan dans le domaine du calcul intensif. Elle dispose de fournisseurs de technologies et de laboratoires de recherche reconnus au niveau mondial, ainsi que d'industriels utilisateurs capables de faire émerger les applications nouvelles du calcul intensif. C'est un domaine dans lequel la logique d'écosystème est essentielle. Au-delà de nos frontières, des complémentarités existent avec nos voisins européens. Il faut aller plus loin dans la définition d'une stratégie industrielle commune, nous permettant de rester compétitifs à l'échelle mondiale. ■





# TECHNOLOGIE



# TRANSITION ET TRANSFORMATION DU HPC : LES FORCES DU CHANGEMENT

Pierre Leca

Chef du département sciences de la simulation et de l'information,  
Direction des Applications Militaires, CEA

---

L'arrivée des supercalculateurs CRAY dans les années 70 a marqué l'émergence d'une nouvelle discipline scientifique à la croisée des chemins entre informatique, modélisation physique et mathématiques : la simulation numérique par le calcul intensif. Depuis cette période l'architecture des supercalculateurs a connu une première phase de transformation pour donner naissance aux calculateurs à architecture distribuée (les « clusters »). Pour répondre à la croissance et à l'évolution des besoins, cette architecture, reine de la période 2000-2010, doit à présent se transformer. Le HPC est en effet entré dans une nouvelle phase de transition sous l'effet de forces et de contraintes de trois types :

- les conséquences de son évolution et de ses succès ;
- des limites technologiques, comme la puissance dissipée par composant électronique ;
- des contraintes économiques de divers ordres, notamment dues au coût de fabrication croissant des fonderies de composants pour chaque nouveau palier technologique.

Ce court article est organisé de la façon suivante. Nous examinons tout d'abord quelles leçons tirer de la période qui a vu la puissance de calcul des supercalculateurs multipliée par plus de 20 000, passant des 50 milliards d'opérations par seconde (i.e. 50 Gflops) du dernier Cray vectoriel T90 au premier cluster « pétaflopique ». Mais les dernières générations de clusters portent en elles les signes de l'essoufflement d'une architecture. Nous en énonçons les principales raisons, raisons qui motivent aujourd'hui l'entrée dans une période de transformation et de diversité architecturale. Enfin le secteur du HPC ne peut se suffire à lui-même et on ne peut ignorer le volet économique du sujet. La recherche de volumes aux deux extrémités de la chaîne (composants, systèmes) aura une influence sur les acteurs ou fournisseurs du HPC.

## QUELQUES LEÇONS DE LA PÉRIODE 2000-2010

En 10 ans la puissance des supercalculateurs est passée du teraflops (i.e. 1 000 Gflops) au petaflops (i.e. 1 000 téraflows) permettant l'essor et la diffusion de l'utilisation du calcul intensif. En rupture avec l'architecture dite vectorielle des années 90, repré-

sentée par le constructeur Cray Inc., ces succès ont été obtenus grâce à la combinaison de deux innovations majeures :

- une innovation architecturale : l'architecture en cluster qui a permis d'agréger des milliers de processeurs élémentaires ;
- l'abandon de processeurs spécialisés pour l'architecture X86, plus généraliste et bénéficiant de l'effet de levier du marché des serveurs.

L'exemple de l'évolution des supercalculateurs « Tera » de la Direction des Applications Militaires du CEA est particulièrement significatif. Entre Tera1, cluster de 5 Tflops installé en 2001, et Tera100, installé en 2010, la puissance de calcul a été multipliée par 250, et l'augmentation de la fréquence des processeurs n'y contribue que pour un facteur inférieur à 2,5. La barre du Pflops a été franchie majoritairement par l'augmentation du nombre de processeurs, couplée à une plus forte augmentation encore du nombre de cœurs de calcul au sein de ceux-ci. La mise en œuvre de plusieurs cœurs de calcul au sein d'une seule puce électronique (appelée processeur multi-cœurs) est apparue en 2004, corrélativement avec la stagnation de la fréquence. Cette évolution architecturale marque, à niveau de parallélisme inchangé, la fin de la période d'accroissement sans douleur de la performance des logiciels.

### LA RANÇON DU SUCCÈS

En complément, mentionnons deux autres enseignements importants à tirer de cette période. D'une part la performance des dernières générations de supercalculateurs a transformé le processus de simulation. Des simulations plus précises, de phénomènes multi-physiques tridimensionnels et instationnaires, produisent des volumes de résultats considérables. La problématique du traitement des masses de données et de la régulation des flux est entrée définitivement au cœur de la réflexion des acteurs du HPC. Par ailleurs



© CEA/p. Stroppa

*Le supercalculateur Tera-100  
(CEA DAM Île-de-France).*

l'agrégation de composants élémentaires, permise par l'architecture distribuée, a conduit à une augmentation proportionnelle de la consommation électrique. Les coûts de possession et d'infrastructures ne peuvent plus être ignorés si bien que la contrainte énergétique conditionne maintenant les développements du HPC. Le paragraphe suivant détaille les principales contraintes technologiques auxquelles fait face la microélectronique et en tire les conséquences pour l'évolution du HPC.

### LA MICROÉLECTRONIQUE N'EST PAS TOUTE PUISSANTE – IL FAUT CHANGER LE MOTEUR...

La réduction du nombre de composants conduit inévitablement à chercher à intégrer de plus en plus de fonctions au sein de celui-ci. La fameuse loi, empirique et économique, de Gordon Moore qui prédit le doublement du nombre de transistors par puce tous les deux ans peut encore être mise à contribution jusqu'à 2020. La finesse de gravure des circuits intégrés les plus avancés, aujourd'hui de 14 nm, pourrait encore diminuer pour atteindre quelques nm. Cependant la dissipation thermique et la réduction du voltage ont atteint des limites techniques si bien qu'il ne faut plus espérer une augmentation significative de la fréquence. Dès lors l'évolution de l'architecture des processeurs et la combinaison de paramètres tels que le nombre de cœurs ou le nombre d'instructions par cycle d'horloge

restent la source principale de l'accroissement de la performance des supercalculateurs.

Corrélativement la réduction de la consommation d'énergie proviendra tout particulièrement de la maîtrise des mouvements de données nécessaires à l'alimentation des unités de calcul. Rapprocher la mémoire du processeur et en augmenter le débit via les technologies d'empilement 3D sont devenus indispensables.

Le HPC entre donc dans une ère de diversité architecturale dont les invariants sont la recherche de la localité et la mise en œuvre de toutes les sources et tous les niveaux possibles de traitement parallèles. Sans préjuger du recours plus fréquent à des parties spécialisées au sein des microprocesseurs, les principales architectures en lice sont les suivantes :

- d'une part les architectures multicœurs (par ex. 10 à 20) et many (ou moult) cœurs (par ex. 60 à 100) au sein desquelles des cœurs homogènes tirent leur performance d'une augmentation du nombre d'instructions par cycle (le retour du « vectoriel » au niveau du cœur) ;
- d'autre part les architectures hybrides, aujourd'hui de type accélérateur (généralement une association CPU/GPU), mais qui pourraient préfigurer l'arrivée d'architectures plus ou moins hétérogènes mélangeant des cœurs de même type mais de performances très différentes (architecture de type « Big/Little »)

Il est aujourd'hui très difficile de prédire un horizon de convergence entre ces architectures qui trouveront leur propre écosystème et niche d'utilisation.

### **...ET RETROUVER UN NOUVEL ÉQUILIBRE AU SEIN DU SUPERCALCULATEUR**

L'intégration d'un nouveau moteur de calcul n'est pas sans conséquence sur l'architecture générale du

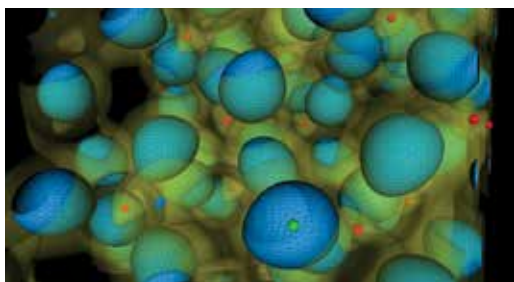
supercalculateur. Pour le réseau d'interconnexion, les caractéristiques habituelles débit/latence, certes importantes, doivent être complétées par la capacité à gérer et agréger un très grand nombre de messages par seconde, en relation avec l'explosion de nombre de cœurs. Le découplage des fonctions calcul et entrées/sorties au sein du supercalculateur paraît indispensable. Les entrées/sorties devront être assurées par des nœuds spécialisés facilitant et régulant les échanges avec les nœuds de calcul sur la base de protocoles de communication adéquats. Plus généralement, une plus profonde hiérarchisation du système de stockage associée à l'utilisation de nouveaux médias et contrôleurs programmables doit permettre la distribution et l'exploitation des résultats en parallèle à leur production.

### **LA RECHERCHE DES VOLUMES**

La technologie ne peut faire abstraction du facteur économique. Malgré l'élargissement de son marché, notamment dans l'industrie, le HPC peut difficilement soutenir à lui seul les investissements nécessaires à son évolution. C'est notamment la raison pour laquelle ce secteur est largement subventionné par les États, que ce soit aux États-Unis, en Chine ou au Japon. Néanmoins le HPC doit trouver de nouveaux leviers de croissance et notamment saisir les opportunités offertes par les marchés émergents du traitement et de l'analyse des masses de données issues, par exemple, des systèmes interconnectés ou des capteurs de toutes catégories qui vont révolutionner les processus de production et de contrôle.

D'autres facteurs peuvent influencer l'évolution du HPC. Comme toute technologie de l'information, ce secteur dépend de la mise en œuvre des progrès de la microélectronique. À chaque nouveau palier technologique la rénovation ou la réalisation de nouvelles fonderies sont nécessaires. Aujourd'hui de tels investissements approchent la dizaine de milliards d'euros. Ils sont annoncés en croissance pour les générations futures. La recherche d'économies d'échelle, entraînant une

course aux volumes pour alimenter les fonderies, est devenue indispensable. Leur durée d'amortissement pourrait ainsi s'allonger, ralentissant la mise en œuvre des progrès technologiques, et la loi de Moore passer par exemple de 24 à 30 mois. Sur le plan industriel cette course produit des mouvements d'intégration/désintégration. Les regroupements, abandon ou vente d'activités au sein de la microélectronique, sont loin d'être terminés.



© CEA/P. Stroppa

*La simulation du comportement des matériaux – un nouveau champ d'utilisation du HPC.*

Simultanément aux deux bouts de la chaîne de conception/fourniture de microprocesseurs de nouveaux acteurs spécialisés se renforcent, d'un côté dans la conception d'architectures et la commercialisation de la propriété intellectuelle associée, de l'autre dans la seule fabrication de semi-conducteurs. Ce mouvement ouvre des perspectives qui pourraient conduire à la fin du monopole d'un seul continent sur la production de microprocesseurs à haute performance.

À l'autre extrémité les nouveaux acteurs des services, les fameux GAFA (Google, Amazon, Facebook, Apple), ont investi dans de gigantesques centres de données (en anglais, les « hyperscale data centers ») qu'ils conçoivent et opèrent. Ceux-ci sont la face cachée, matérielle et industrielle, d'une activité qui paraît essentiellement virtuelle aux yeux du grand public. La rationalisation et la recherche d'économies d'échelle en vue du déploiement et de l'exploitation de ces « usines à données », les plus importantes du monde, les ont

conduits à concevoir et faire fabriquer leurs propres équipements informatiques. Plus encore, le projet Open Compute initié par Facebook, met à disposition de la communauté ses concepts de serveurs, cartes électroniques et autres, afin de créer un standard de fait et d'amplifier l'effet de volume. Bien entendu ces serveurs et infrastructures n'ont pas vocation à se substituer aux supercalculateurs. Néanmoins ils peuvent conduire à diminuer le coût d'entrée du HPC.

## SAISIR LES OPPORTUNITÉS

Récemment un phénomène de transformation de l'industrie s'est amorcé, qui devrait élargir le champ d'utilisation des (super)calculateurs. L'usine va devenir digitale et connectée à l'instar du mouvement « Industrie 4.0 » initié il y a quelques années en Allemagne. Ce mouvement va accroître le besoin d'outils de simulation, de traitement de données ou de contrôle, adaptés à tous les processus de production. Toute période de transition est favorable à l'émergence de nouveaux acteurs. En France, le Plan « supercalculateur » vient à point nommé pour mobiliser et fédérer l'ensemble de la communauté, acteurs industriels ou de la recherche publique, des utilisateurs aux concepteurs et fournisseurs de matériels ou logiciels. Le CEA est particulièrement fier d'être, avec Teratec, au cœur de ce dispositif. Parmi les défis à relever celui du logiciel est tout aussi important que celui du matériel. Ce sujet est traité dans les deux articles qui suivent. ■

# PROGRAMMATION ET EXPLOITATION DES PLATEFORMES HPC : DÉFIS ET CHALLENGES

François Bodin,

Professeur, Université de Rennes 1, IRISA

Jean-François Méhaut,

Professeur, Université de Grenoble Alpes, LIG

---

**L**a majorité des applications HPC repose sur des technologies et pratiques logicielles inventées il y a plusieurs décennies. Les considérations énergétiques, la fin de la loi de Moore et la production d'énormes volumes de données ont initié une mutation profonde du paysage du HPC où les équilibres calcul et stockage sont remis en cause. Face à cette rupture technologique c'est l'ensemble de la pile logicielle (systèmes, supports d'exécution, compilateurs, bibliothèques) et les codes applicatifs qui doivent évoluer.

## DE L'IMPACT DE L'ÉNERGIE SUR LE LOGICIEL

La consommation énergétique est devenue le principal obstacle à la progression des performances. L'augmentation du nombre de cœurs s'est substituée pour fournir une puissance de calcul toujours accrue. Les technologies d'accélération (GPU, Xeon Phi, MPPA) ont aussi permis d'augmenter l'efficacité énergétique. Cette massification du parallélisme, les nouvelles technologies de stockage (mémoires non volatiles, 3D stacking) et d'interconnexions (photonique) vont conduire à des architectures de machines, énergiquement plus efficaces, mais de structures nouvelles et variées qui devront se refléter dans l'ensemble des couches logicielles. De plus, l'augmentation exponentielle du nombre de cœurs des

supercalculateurs impose d'utiliser des schémas de tolérance aux fautes.

Ces points nécessitent d'introduire des API capables de mesurer et de gérer la consommation d'énergie au niveau des applications. Les modifications de la hiérarchie de stockage et les problèmes de fautes matérielles requièrent de nouvelles approches dans la gestion des entrées / sorties et de la mise en œuvre de la résilience. Les nouvelles API devront permettre d'établir un dialogue de gestion des ressources matérielles performants et énergétiquement efficace. Cette profonde évolution devrait conduire à une attribution des ressources utilisateurs, actuellement mesurée en heures.cpu, à une allocation en watt/heure.

## DONNÉES EXTRÊMES ET HPC

La précision des simulations, les approches multiphysiques ainsi que les techniques d'assimilation de données, produisent de grands volumes de données. L'exploitation et la gestion des données sont l'autre pan de l'évolution des logiciels qui va bouleverser les pratiques. Une majorité des applications HPC sont fortement limitées par le traitement des données (incluant la visualisation). Les pratiques traditionnelles de stockage sur disque de l'ensemble des données



produites pour les analyser ne seront possibles que marginalement. L'analyse devra se faire « in-situ », en mémoire du calculateur. Naturellement, cette problématique interroge sur l'introduction de technologies de type « Big-Data ».

Du point de vue des couches basses logicielles, la cohabitation de techniques issues de la fouille de données impose, à terme, de faire cohabiter des technologies HPC traditionnelles avec celles du monde de l'analyse des données dans des Workflows complexes. Les techniques de virtualisation, telle que les Containers, font leur entrée dans les systèmes d'exploitation des supercalculateurs.

### HÉTÉROGÉNÉITÉ, PERFORMANCE ET SCALABILITÉ

Les approches par décomposition de domaine et échanges de messages peinent à prendre en compte les structures de machines fondées sur des processeurs massivement parallèles. L'hétérogénéité des ressources de calcul ajoute un degré de complexité. L'ensemble de la pile logicielle, en particulier les systèmes d'exploitation, les supports d'exécution et les compilateurs, doit permettre une gestion efficace, en supportant des paradigmes de programmation parallèle multi-niveau, scalable, permettant de mélanger des approches par mémoire distribuée et par mémoire partagée. Un point important est la régulation dynamique des charges de calcul qui prennent en compte les considérations énergétiques, tout en respectant les affinités entre les tâches et les accès aux structures de données.

Il s'agit de mélanger des approches par échange de message avec des approches basées sur des graphes de tâches capables de s'exécuter indifféremment sur les cœurs de CPU ou les éventuels accélérateurs (StarPU, OmpSS). Les techniques d'optimisation automatique (auto-tuning) devront se généraliser tant l'espace des possibilités à explorer est grand et multicritères (énergie vs performance, mémorisation vs re-calcul).

### COMPLEXITÉ DE LA PROGRAMMATION

Pour être efficace, la programmation parallèle doit prendre en compte l'hétérogénéité des unités de calcul, la hiérarchie mémoire (mémoire cache et système de stockage) ainsi la hiérarchie du parallélisme matériel (SIMD, SMT, multi-cœurs, clusters). La programmation hybride mixant des API telles que OpenMP, OmpSS pour le parallélisme intra-nœud et MPI ou PGAS entre nœuds ont fortement gagné en popularité ces dernières années. Cependant, l'obtention de code efficace reste un véritable challenge. La complexité croissante des machines nécessite la mise en œuvre de techniques d'optimisation de code élaborées et coûteuses en main-d'œuvre.

Les approches à base de langages et API spécifiques à un domaine (DSL) représentent une piste importante pour la séparation des aspects informatiques des aspects applicatifs. La définition de solution spécifique à un domaine est une recherche de compromis difficile. Les DSL à base de langages dynamiques présentent un intérêt pour construire des environnements de programmation de très haut niveau (typiquement sur la base de méthodes de méta-programmation). Des progrès importants restent à faire pour aider à la mise au point des programmes massivement parallèles.

Les nombreux changements technologiques vont profondément altérer la façon de concevoir les applications. L'ensemble des couches logicielles seront revues pour prendre en compte les problématiques énergétiques, de gestion/exploitation de données et de tolérance aux fautes. Les pratiques de développement feront appel aux techniques de génie logiciel pour obtenir une architecture de code assez robuste pour s'adapter à plusieurs générations de machines. Les approches spécifiques à chaque domaine (DSL) permettront d'offrir des abstractions aux utilisateurs. Il faudra trouver des modèles économiques permettant de servir une communauté donnée tout en assurant la pérennité des solutions. Les défis ne sont pas minces ! ■■■

# HPC & ÉVOLUTION DES LOGICIELS APPLICATIFS

Jacques Duysens

Directeur Business Development EMEA, Ansys Inc.

## INTRODUCTION

Les logiciels applicatifs - tant « éditeurs » que « libres » - avec le développement des technologies HPC, font l'objet d'évolutions algorithmiques et numériques majeures :

- permettant la prise en compte de modèles toujours plus complexes : non-linéarités matérielles, géométriques, aspects multi-phases, multi-physiques, multi-échelles... ;
- permettant d'accroître la performance des maillages (maillage automatique, adaptatif...), des solveurs et des outils de post-traitement.

## ÉVOLUTIONS MAJEURES DES CODES DE CALCUL AU COURS DES 20 DERNIÈRES ANNÉES

Les méthodes de parallélisation ont émergé il y a plus d'une vingtaine d'années pour tirer avantage des machines multiprocesseurs. Les méthodes de décomposition en sous-domaines apparues dans les années 90 en sont un exemple.

Plus récemment, au cours des dix dernières années, on constate d'énormes progrès au niveau des algorithmes. Ceux dédiés à la prise en compte des phénomènes multi-physiques et multi-échelles ont ainsi vu le jour. En parallèle, les codes ont continué à se spécia-

liser dans de multiples disciplines, avec la prise en compte de phénomènes complexes et couplant souvent plusieurs physiques : électromagnétisme, couplages thermo et piézo-électrique, écoulements multiphasiques, dynamique rapide, aéro-acoustique, simulation des procédés de fabrication (soudage, usinage, ...). Les solveurs ont subi de profondes évolutions en termes de performance et de scalabilité sur les machines massivement parallèles, en suivant l'évolution de la puissance des machines.

Cela a permis de considérer des modèles de calcul toujours plus fins et donc plus précis. Les algorithmes de résolution de très grands systèmes linéaires n'ont pas cessé d'évoluer en termes de performance. On a



*PSA Peugeot Citroën et Altair collaborent pour améliorer la précision des simulations de sécurité passive.*

© Altair

vu apparaître, avec l'avènement des machines parallèles, des techniques algorithmiques pour optimiser la répartition des charges sur les machines, ainsi que des algorithmes spécifiques pour le post-traitement de gros volumes de données.

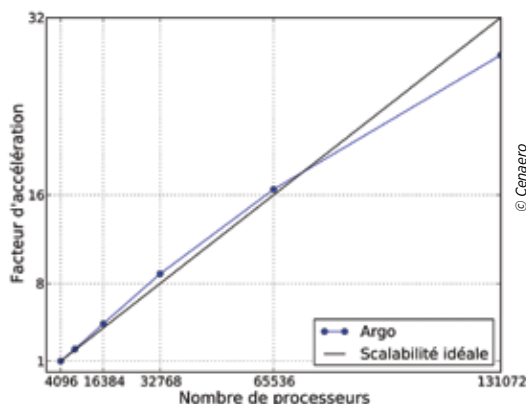
### TENDANCES ACTUELLES ET FUTURES POUR LES LOGICIELS APPLICATIFS

En matière d'applicatifs, on peut constater l'évolution du business model de « logiciels à la demande » avec l'exploitation croissante du « Cloud Computing » pour les progiciels.

S'agissant des technologies, on voit apparaître dans les applicatifs des techniques de réduction de modèles qui accélèrent drastiquement les simulations, des bibliothèques d'algorithmes pour réaliser des optimisations multi-disciplinaires, des plans d'expériences numériques à très grande échelle permettant d'explorer des espaces de conception à grand nombre de paramètres : algorithmes d'optimisation évolutionnaires mono et multi-objectifs, plans d'expériences auto-adaptatifs avec méthodes d'échantillonnage sophistiquées, monitoring interactif des contraintes, analyses de variances, outils de Data Mining pour des prises de décisions multi-critères efficaces, ...

Les logiciels applicatifs permettant de modéliser et simuler des systèmes globaux complexes multi-physiques, multi-domaines et multi-composants sont également en plein essor.

Les logiciels de simulation actuels, généralistes ou spécialisés permettent en outre d'adresser de multiples nouveaux champs d'applications : cosmétique, végétal, finance, santé, ... Dans le domaine de la santé, les applications portent sur des aspects aussi variés que la médecine personnalisée, les nouveaux médicaments, les nouveaux protocoles médicaux, ...



*Efficacité proche de 100 % atteinte dans une large plage par le code développé par CENAERO pour la simulation d'écoulements turbulents.*



*Structures tourbillonnaires résultant d'une simulation aux grandes échelles sur un aube de turbine basse pression.*

### QUELLES TECHNOLOGIES POUR LES ANNÉES À VENIR ?

L'évolution est inéluctable vers des solutions software-hardware en rupture, permettant des simulations en quasi temps réel et en temps réel avec d'immenses impacts associés : introduction de modèles de simulation dans les boucles de contrôle (modèles réduits ou base de modèles réduits embarqués), contrôle et optimisation dynamique des processus par les mesures et les modèles de simulation, simulateurs de plus en plus fidèles aux

comportements physiques réels car basés sur des modèles physiques d'ordre réduit.

Côté hardware, les puissances des calculateurs embarqués seront fortement accrues avec des nouvelles technologies comme le « many-core ». Les technologies « traditionnelles » de simulation (méthodes des éléments-finis, ...) vont continuer à progresser à la fois en termes de précision des simulations, de prise en compte de phénomènes complexes, de performance et d'associativité avec la CAO.

Sur ce dernier point, les technologies d'analyse isogéométrique qui unifient le monde de la CAO et celui de la simulation semblent très prometteuses, même si elles sont encore à un stade de recherche et que certains verrous technologiques au niveau industriel ne sont pas encore levés.

Les codes de calcul seront dotés systématiquement d'outils de management des données de simulation (SLM) et d'outils de « Data Analytics » pour analyser efficacement les « flots de résultats », et on assistera très certainement à une fusion des systèmes de PLM et de SLM (unicité des référentiels de données).

Sont aussi à prévoir de plus fortes interopérabilités entre systèmes de CAO, systèmes de simulation (CAE) et systèmes de réalité virtuelle, allant jusqu'à des fusions-unifications.

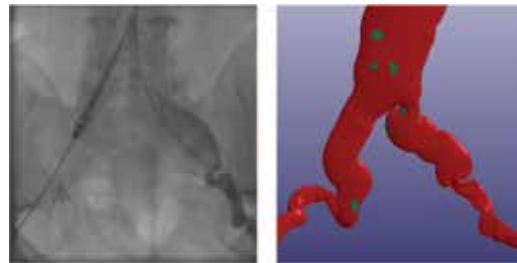
Les logiciels spécialisés dans la modélisation et simulation des systèmes évolueront vers la prise en compte de systèmes cyber physiques, mixant des phénomènes multi-physiques, électriques, électroniques avec les logiciels embarqués au niveau du système et l'émulation des boucles de contrôle. Ils permettront ainsi des analyses de synthèse globale à tous les stades des cycles de conception avec des approches généralisées de type « Model-Based Systems Engineering » (MBSE). Le lien entre modélisations globales systèmes

et modélisations physiques détaillées via l'utilisation de modèles physiques d'ordre réduit, linéaires et non-linéaires, sera à terme généralisé.

Enfin, un des challenges résidera dans l'adaptation des algorithmes et solveurs pour tirer avantage au maximum des supercalculateurs massivement parallèles actuels (machines pétaflopiques) et futures machines « exaflopiques » dont le développement des architectures est lui-même un challenge pour l'horizon 2020.

### CONCLUSION

Au-delà des immenses progrès technologiques en cours et à venir, on voit apparaître un changement de paradigme dans les technologies de simulation et de HPC à travers les logiciels applicatifs : ceux-ci ont tendance à être regroupés dans des plateformes collaboratives pour résoudre les problèmes les plus complexes et les plus stratégiques auxquels ont à faire face les entreprises. ■



© Ansys

*Ansys Inc. Simulation patient spécifique de la chirurgie endovasculaire de l'aorte abdominale.*

• Photo de gauche : prédiction de la déformation de l'artère iliaque par l'introduction des outils endovasculaires.

• Photo de droite : observation per-opératoire.

*Bénéfice pour le patient : la prise en compte précise des déformations en phase de planning sécurise le geste chirurgical.*

*Ce travail a été partiellement mené à l'aide de la plateforme expérimentale TherA-Image (Rennes) supporté par le fonds européen FEDER.*



**Rajeeb Hazra**

Vice President, Data Center Group

General Manager, Enterprise and HPC Platform Group, Intel

### **Quelle est votre définition du calcul intensif (HPC) ?**

En réalité, la définition du calcul intensif évolue et s'adapte à une époque en mutation. Ce que nous appelions les clusters de calcul intensif traditionnels, des grandes plateformes aux supercalculateurs, portait principalement sur des applications informatiques de calcul intensif techniques et scientifiques et reposait essentiellement sur de nouvelles générations de processeurs afin d'améliorer la performance. Les environnements informatiques haut de gamme et à multiples facettes d'aujourd'hui, qu'il s'agisse de recherche scientifique, de modélisation, de simulation ou d'exigences complexes de la part d'entreprises traitant des analyses de données à très grande échelle, requièrent un modèle de parallélisme intensif totalement nouveau, de la souplesse et des configurations adaptées, sous forme de systèmes hautement modulaires, capables d'accueillir aussi bien des charges de travail riches en données que des charges de travail de calcul intensif. Nous entrons dans une nouvelle ère en termes de calcul intensif, dans laquelle des logiciels de systèmes hautement intégrés définiront le nouvel environnement informatique.

Le calcul intensif est en train d'évoluer de l'approche traditionnelle d'optimisation des applications les plus exigeantes du niveau du nœud, à celui du rack et du système, avec la possibilité de tirer parti des blocs constitutifs les plus récents et les plus innovants au fur et à mesure de leurs disponibilités. Le calcul intensif est un moteur de changement absolument indispensable au progrès économique et social.

### **Quel avenir prédisiez-vous pour le calcul intensif ?**

La capacité de l'infrastructure définie par logiciel entraînera la transformation des datacenters. L'équilibre des performances devra être assorti aux composants, à la souplesse de configuration et à la qualité constante du service. La puissance des différentes générations de microprocesseurs sera désormais proposée en parfaite adéquation avec de nouvelles architectures sous-jacentes pour livrer des niveaux d'équilibre général du système, d'efficacité et de capacité encore inconnus.

À l'avenir, nous voyons la convergence du calcul intensif, du Big Data et du Cloud comme un tournant décisif, lorsque l'accès ininterrompu aux infrastructures de stockage, de mise en réseau et de calcul permettra aux chercheurs, aux scientifiques et aux acteurs économiques utilisant le calcul intensif de se concentrer sur leurs missions et non sur la technologie.

Tout comme la médecine personnalisée est l'avenir du secteur de la santé, l'avenir du calcul intensif réside dans la capacité à personnaliser les systèmes en tirant pleinement parti des blocs constitutifs les plus innovants et les plus récents au fur et à mesure de leurs disponibilités. Cela requiert une nouvelle orientation architecturale. Nous pensons que le framework système évolutif d'Intel constituera le fondement de cette orientation, une nouvelle approche moderne pour introduire le calcul intensif dans l'ère de l'Exascale et au-delà.

Nous sommes également conscients que l'avenir du calcul intensif dépend grandement des partenariats stratégiques et collaboratifs. Nos labora-

>>>



## Rajeeb Hazra

Vice President, Data Center Group

General Manager, Enterprise and HPC Platform Group, Intel

>>> toires Exascale européens et notre laboratoire commun, désormais installé au sein du campus Teratec, sont des acteurs actifs de l'écosystème national et européen relatif au calcul intensif très poussé.

### **Comment voyez-vous l'évolution de votre entreprise ? Des segments de clientèle ?**

Tout d'abord, Intel poursuivra sa volonté d'étendre et de développer son portefeuille de blocs constitutifs, des processeurs à l'interconnect, en passant par les composants de mémoire, le stockage et les logiciels, pour rendre le calcul possible à tous les niveaux, aussi bien des stations de travail que des clusters économes en énergie ou des super-calculateurs les plus puissants au monde.

Ensuite, Intel continuera de faire en sorte que notre écosystème puisse faciliter l'accès à ces capacités dans les systèmes que la société développe. Intel permet de trouver des solutions, un ensemble de composants logiciels et matériels et un écosystème de logiciels optimisés pour fonctionner sur ces plateformes. Intel subventionne et collabore avec une communauté d'universités et d'industries, afin de moderniser le code informatique technique pour qu'il puisse bénéficier des innovations architecturales d'Intel.

Enfin, l'évolution de notre entreprise est motivée par celle des marchés mondiaux et des exigences de changements. Notre entreprise évoluera selon les besoins des divers segments de clientèle. Nous pensons que cela va se traduire par une demande d'amélioration permanente des performances, de systèmes économes en énergie et de plateformes configurables et hautement flexibles, indépendamment des systèmes requis pour traiter aussi

bien des charges de travail riches en données que des charges de travail de calcul intensif. Nous continuerons à faire ce qu'Intel fait de mieux, c'est-à-dire optimiser l'intégration des processeurs, la mémoire, le fabric et le stockage, et collaborer avec nos partenaires pour répondre aux demandes d'un monde en mutation. ■

# LE CALCUL INTENSIF, UN INSTRUMENT STRATÉGIQUE POUR L'AVENIR

Thierry Breton

Président directeur général, groupe Atos

**S**i dans les années 1940 les premiers systèmes informatiques étaient dédiés au calcul intensif, le développement de l'informatique d'entreprises et personnelle a relégué jusqu'à récemment les systèmes de *High Performance Computing* (HPC), souvent découplés des systèmes d'information, à un domaine de spécialistes. Cette tendance est en train de s'inverser, conduisant à une multiplication des usages du calcul intensif dans les années à venir. Ce dernier va prendre à la fois une dimension croissante dans les bureaux d'études et les laboratoires de recherche et s'étendre à de nouveaux domaines situés au cœur des futurs systèmes d'information qui supporteront nos activités au 21<sup>e</sup> siècle.

## LE DÉVELOPPEMENT DU CALCUL INTENSIF

Comment expliquer ce regain d'intérêt pour le HPC ? La révolution de la numérisation ou « Big Data » est une première raison. Aujourd'hui nous commençons à disposer de masses impressionnantes de données qui sont générées par de nouveaux capteurs et par des objets connectés nous renseignant sur les phénomènes physiques ou enregistrant notre environnement et nos comportements. Le développement du « Cloud Computing » permet à la fois de stocker et d'accéder à ces données qui se multiplient à une

vitesse pour l'instant exponentielle. L'exploitation de ces données et la valeur qui pourra en être extraite passe par l'utilisation du calcul intensif. Nous assistons à une convergence du « Big Data » et du HPC qui sert à traiter les données. Par exemple, le calcul intensif sera un des moteurs de la mise en place de la médecine personnalisée. Dans le traitement du cancer, nous savons aujourd'hui qu'une adaptation du traitement à chaque patient permettra d'augmenter les chances de guérison. Cela sera possible en traitant d'importantes masses de données génomiques, d'imagerie médicale, de données physiologiques et de retours d'expériences et en déterminant à partir de ces données le traitement le mieux adapté. On voit, dans cet exemple, l'intérêt de disposer de données massives et de la puissance de calcul nécessaire pour en extraire les informations pertinentes.

Une deuxième raison réside dans notre besoin croissant de contrôler des systèmes complexes comme les Smart Grids gérant la production et la distribution de l'électricité ou les systèmes de transports des mégapoles. À nouveau, grâce à la disponibilité de nombreuses données, nous aurons la possibilité d'optimiser le fonctionnement de ces systèmes. Les retombées potentielles sont énormes mais cela ne pourra se faire que grâce à l'utilisation du calcul



intensif. Les supercalculateurs, couplés à ces grands systèmes, seront nécessaires pour traiter les données massives provenant du système et trouver en temps contraint une solution optimisant le fonctionnement de ce dernier. Par exemple dans le cas du réseau routier d'une grande ville, on peut imaginer, à partir d'informations sur l'état du réseau, des expériences passées, de modèles météorologiques et de la pollution, optimiser les flux en diffusant des recommandations aux automobilistes et en pilotant les feux ou autres systèmes de contrôle de la circulation. Une telle optimisation nécessite une puissance de calcul instantanée qui sera disponible grâce aux avancées du HPC.

La troisième raison provient des progrès à venir de ce domaine qui vont permettre une « démocratisation » du calcul intensif et rendront son usage envisageable et rentable dans de multiples secteurs. Lorsque dans quelques années nous aurons, pour les systèmes les plus puissants, atteint l'exascale, cela voudra dire que l'on disposera de systèmes délivrant une puissance d'un pétaflops (millions de milliards d'opérations par seconde) à un coût inférieur à la centaine de milliers d'euros et consommant moins que 20 KW. Cette puissance étant suffisante pour simuler des modèles réalistes dans de nombreux domaines ou pour optimiser des systèmes complexes, on doit s'attendre à une multiplication de l'utilisation de ces systèmes HPC. Des secteurs comme la conception de l'habitat, le choix de matériaux pour la conception de produits,

l'exploitation des ressources agricoles et bien sûr le « Business Analytics » seront parmi les bénéficiaires de cette diffusion du HPC.

### LES ENJEUX

Derrière ce développement du HPC se retrouvent de multiples enjeux qui sont illustrés par certains articles de ce livre blanc. Au plan scientifique, de nombreux domaines s'appuient fortement sur le calcul intensif pour progresser. La simulation est un outil de compréhension indispensable et la croissance des puissances de calcul rendra les résultats de plus en plus précis et porteurs d'avancées scientifiques. De nombreuses communautés utilisatrices du HPC travaillent sur des questions qui façonneront notre société de demain. Par exemple, grâce au développement du HPC, la climatologie pourra mieux comprendre les mécanismes d'évolution du climat et étudier les politiques à mettre en place pour minimiser les impacts négatifs du changement climatique.

Dans l'industrie et les services, les enjeux sont également forts, à la fois pour les secteurs déjà matures dans l'utilisation du HPC et pour ceux où cet instrument va se diffuser. Pour les premiers, comme l'aéronautique ou l'automobile, après une phase où la simulation était un outil complémentaire à l'expérimentation, on arrive, grâce à l'expérience acquise dans l'utilisation de la simulation et à la croissance des



© Atos-Courtesy of CEA-Cadarn, view of Bull/Curie Supercomputer



puissances de calcul, à mettre en place un processus de conception essentiellement basé sur la simulation en réduisant au minimum le recours aux prototypes physiques. La maturité des secteurs peut légèrement varier de l'un à l'autre, mais cette tendance vers une conception correcte et valide du premier coup grâce à la simulation est un enjeu de compétitivité considérable. Un autre enjeu pour ces secteurs ayant accumulé une expérience de la simulation depuis plusieurs années est de s'attaquer à des « concepts » plus innovants qui pourraient apporter des ruptures dans leur marché. À nouveau, l'expérience acquise dans la simulation et la puissance des futures machines permettent d'envisager de travailler sur des concepts plus éloignés des produits actuels et d'espérer des améliorations significatives. C'est le cas, par exemple, dans la conception de moteurs d'avion où, aujourd'hui, il est envisageable d'étudier de nouveaux « concepts » qui pourraient réduire fortement la consommation énergétique. Pour les secteurs moins expérimentés dans la simulation, les enjeux sont également forts. Ils pourront bénéficier de l'expérience acquise par les plus matures pour progresser rapidement si les bonnes synergies sont mises en place. À nouveau la compétitivité de ces secteurs est en jeu grâce à une réduction de leur cycle de conception ou à la mise en œuvre de nouvelles innovations rendues possibles par le recours au calcul intensif.

De façon plus générale et également pour revenir au « Big Data », on s'aperçoit que le contrôle des grandes infrastructures de traitement de l'information (dont les supercalculateurs font partie) est un enjeu considérable. La maîtrise de ces infrastructures permet de proposer les services de demain, de contrôler leur qualité et de s'assurer de la sécurité des informations sensibles. Au moment où l'Europe réalise l'importance d'avoir un tissu industriel fort, ne faisons pas l'erreur de croire que la maîtrise des usines numériques que sont aujourd'hui ces grandes infrastructures de traitement de l'information ne représente pas un enjeu important pour notre continent.

Les enjeux du développement du HPC sont donc multiples. Certains d'entre eux, comme l'élaboration de notre vision environnementale, la dissuasion nucléaire, la compétitivité de secteurs clés de l'économie européenne, impactent la place que l'Europe aura dans le monde de demain. Cela fait de cette technologie du HPC un enjeu de souveraineté où l'Europe se doit d'être au meilleur niveau.

### L'AMBITION D'ATOS

Atos, en faisant l'acquisition de Bull en 2014, visait à renforcer sa maîtrise des grandes infrastructures informatiques qui constituent un maillon essentiel dans la création des services informatiques de demain. Notre volonté est de continuer à développer des solutions de calcul intensif au meilleur niveau mondial tout en jouant sur notre position parmi les leaders de l'informatique mondiale pour en favoriser la diffusion.

La convergence du « Big Data » et du HPC renforce l'intérêt de notre investissement dans les technologies du HPC. Pour être au meilleur niveau dans ce domaine, il faut s'attaquer à plusieurs défis techniques comme l'efficacité énergétique, la maîtrise du parallélisme massif, le management des données ou la résilience d'une grande infrastructure informatique. Nous avons une forte activité de R&D dans ces domaines pour progresser vers des solutions qui offriront dans quelques années la puissance de l'exascale. L'expertise technique que nous construisons nous permet d'être au meilleur niveau mondial. Elle correspond également à des problématiques qui seront de plus en plus prégnantes dans les systèmes informatiques (parallélisme, faible consommation, fiabilité) et nous espérons des retombées plus larges sur l'ensemble des savoir-faire technologiques d'Atos.

Outre cet effort de R&D, nous souhaitons développer nos liens avec les grands utilisateurs du calcul intensif. Aujourd'hui une relation étroite entre le fournisseur de systèmes HPC et l'utilisateur de ces systèmes est



© Atos-TERA100 allée, courtesy of CEA-Philippe-Stroopa

mutuellement bénéfique. Les supercalculateurs sont des systèmes complexes comportant de nombreux paramètres sur lesquels il est possible de jouer. Grâce à un dialogue étroit avec l'utilisateur, on est capable d'en optimiser l'architecture et de s'assurer que l'exploitation apportera une complète satisfaction au client. De son côté, l'utilisateur, pour guider son approche du calcul intensif, a besoin de plus en plus d'avoir une vision de l'évolution technologique des supercalculateurs. L'expertise technique du fournisseur de solutions HPC est donc primordiale pour élaborer la stratégie la plus pertinente dans l'usage de ces systèmes et la mise en place des applications. Atos a déjà établi plusieurs partenariats qui s'avèrent extrêmement bénéfiques pour les deux parties et est prêt à continuer dans cette voie avec de nouveaux partenaires pour lesquels le HPC est un enjeu stratégique.

Plus largement, notre volonté est de créer un écosystème HPC<sup>(1)</sup> européen dynamique, incluant fournisseurs de technologie et grands utilisateurs, qui positionnera notre continent à la pointe du calcul intensif. On doit noter que, dans des secteurs où la compétition est mondiale, ce modèle ne peut être que bénéfique. L'aéronautique européenne a fortement bénéficié de l'émergence d'un leader de stature mondiale comme Airbus qui a tiré l'ensemble de la filière et créé une dynamique économique dont l'Europe tire les fruits aujourd'hui. Une telle approche est possible dans le HPC et Atos est prêt à relever ce défi.

Au vu des enjeux stratégiques du calcul intensif, il est primordial de mener une politique ambitieuse. Les acteurs publics, aussi bien au niveau français qu'au niveau européen, ont bien analysé et compris ces enjeux. Les supercalculateurs constituent l'une des priorités des 34 plans de la nouvelle politique industrielle de la France. Ils constituent un plan industriel à part entière qui est maintenant regroupé avec le plan Cloud et le plan Big Data au sein d'un grand programme « Économie de la donnée ». Par ailleurs, dans le cadre de son programme de recherche Horizon 2020, la Commission européenne a également fait de ce secteur une de ses priorités en mettant en place un « Contractual Public Private Partnership ». Il reste à utiliser pleinement ces instruments pour renforcer notre potentiel technologique, structurer le secteur et ainsi maximiser l'impact de cette ambition publique. Nous espérons que cette opportunité sera saisie et que l'Europe se positionnera au meilleur niveau mondial. Atos entend jouer un rôle de catalyseur et de leader dans l'émergence de cette vision ambitieuse, nécessaire pour tirer pleinement parti du potentiel du calcul intensif et maîtriser les systèmes d'information qui seront au cœur de la société de demain. ■

(1) Atos anime et préside la plateforme européenne de technologies ETP4HPC qui vise à développer cet écosystème.

# PERSPECTIVES DE RECHERCHE EN HPC À L'HORIZON 2025-2050

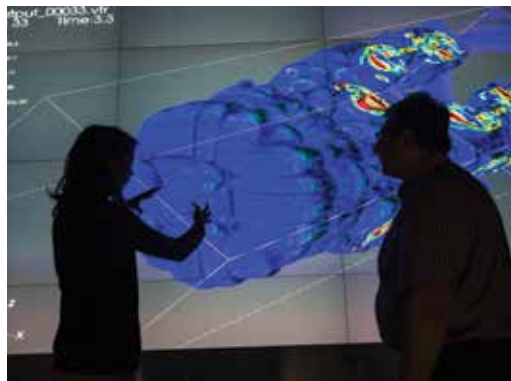
Franck Cappello

Inria, Argonne National Laboratory, Directeur du laboratoire commun  
Inria-Illinois-ANL-BSC-JSC-Riken sur le calcul à échelle extrême

La simulation numérique et l'analyse de données sont devenues en quelques décennies indispensables à la recherche scientifique et à l'industrie. Les besoins en calcul et transformation de données continuent de croître poussés par la nécessité d'accroître les connaissances scientifiques et d'optimiser les produits industriels. Pour progresser, une compréhension toujours plus fine des phénomènes observés est nécessaire. C'est pourquoi les utilisateurs scientifiques et industriels conçoivent et utilisent des modèles plus complexes dits multi-physiques, augmentent la résolution de ces modèles et collectent des données expérimentales dont le volume augmente considérablement avec le temps. Cette tendance repose sur des éléments fondamentaux de nos sociétés modernes : mieux connaître et comprendre notre environnement, apporter des réponses aux problèmes sociétaux importants, soutenir la croissance économique. Il y a donc des raisons fortes pour que cette tendance reste valable à moyen terme, c'est-à-dire dans les 20 à 30 prochaines années.

Les systèmes Exascale aux États-Unis, en Europe et au Japon devraient être mis en production entre 2020 et 2025. La Chine aura probablement démarré son premier calculateur Exascale avant 2020. En 2007, lorsque les premières études prospectives ont commencé, deux voies étaient imaginées : révolutionnaire et évolutionnaire. En 2015, de nombreux éléments indiquent que les architectures Exascale seront des évolutions des systèmes que l'on connaît. Des améliorations technologiques importantes sont attendues comme l'intégration de cœurs hétérogènes, de mémoire 3D à très forte bande passante et d'interfaces de communication photoniques sur silicium dans les processeurs, ainsi que la disponibilité de grande capacité de mémoire non-volatile sur chaque nœud, mais on ne peut pas parler de révolution. Les informations sur les systèmes AURORA, SUMMIT, SIERRA, CORI et le projet Japonais Post-K computer qui seront installés entre 2017 et 2020 confortent cette direction : il n'y aura pas assez de temps entre ces systèmes et les systèmes Exascale pour une refonte importante des applications qui serait rendue nécessaire par une approche révolutionnaire.

Cependant l'évolution technologique, des architectures et les conditions d'exécution des applications va nécessiter certaines adaptations des applications, des bibliothèques numériques, des compilateurs, des environnements d'exécution et des systèmes d'exploitation. Au moins trois éléments rendent ces adaptations nécessaires : les performances potentiellement hétérogènes des nœuds et cœurs impliqués dans l'exécution, l'accroissement de la profondeur de la hiérarchie mémoire (avec les mémoires sur circuit et les mémoires non volatiles), la faible croissance (voire la stagnation) de la bande passante vers les systèmes de stockage. Alors que la tendance il y a plusieurs années était de lutter contre les divergences de performance entre les nœuds et cœurs lors de l'exécution, l'orientation pour les systèmes Exascale est de considérer qu'il y a trop de sources locales (bruit système, différents accès mémoire, ordonnancement dynamique de threads et tâches, gestion de la consommation d'énergie, correction des erreurs, interférences de communications) pour espérer réduire cette divergence à un niveau négligeable. Au contraire, il s'agit d'utiliser des modèles d'exécution réactifs capables dynamiquement de s'adapter aux conditions d'exécution locales et globales. Le modèle de programmation à partir de tâches qui naturellement possède des capacités d'adaptation fortes devient attractif. Il reste cependant beaucoup de questions à résoudre avant l'adoption de ce modèle dans sa forme pure. L'évolution d'applications vers les modèles hybrides associant passage de messages et tâches locales semblent plus réalistes dans la prochaine décennie. L'accroissement de la profondeur de la hiérarchie mémoire avec l'intégration d'une partie de la mémoire et des cœurs sur le même circuit, le partage de cette mémoire par les cœurs et l'ajout sur chaque nœud de mémoires non volatiles adressables devrait compliquer l'optimisation de performance des applications. Le faible accroissement, voir la stagnation, de la performance des entrées/sorties va inévitablement introduire un niveau supplémentaire de complication pour les applications : comment



continuer à faire progresser les performances avec le temps si les entrées/sorties ne progressent plus ou pas assez vite ? De nombreux travaux de recherche sont en cours sur l'analyse, la compression et le filtrage de données sur site (*in-situ data analytics*), avant leur stockage.

Une évolution qui pourrait avoir des conséquences importantes sur les usages est la double convergence HPC – Big Data et HPC – Cloud. La convergence HPC – Big Data est motivée par deux éléments. Depuis plusieurs années on assiste à naissance d'associations fortes entre centres de calcul et instruments scientifiques devenues nécessaires par le volume très important de données générées par les instruments scientifiques. Les systèmes HPC connectés à des instruments scientifiques doivent évoluer pour devenir de très bons systèmes de traitement de données. À l'inverse des opérations de plus en plus complexes sont réalisées sur les données et les centres de données doivent évoluer en accroissant leur capacité de traitement. Le traitement de données sur site dans les applications HPC est une deuxième motivation pour cette convergence. La convergence HPC – Cloud est rendue possible par la proximité technologique des composants utilisés dans les deux types de systèmes. Cette convergence est motivée par l'évolution des usages des centres de calcul vers plus de flexibilité, notamment pour les traitements de type Big Data. Plusieurs projets de recherche étudient la

notion de Cloud HPC capable de supporter une très large majorité d'exécutions actuellement réalisées dans les centres HPC. La recherche est ici principalement sur l'élasticité des systèmes d'allocation, exploitation et partage de ressources, les environnements d'exécution, les mécanismes de communication rapides, les systèmes de stockage et la sécurité.

### FOCUS 1 : LA LIMITE DU CMOS

Au-delà de l'Exascale (2020-2025) et vers 2050, c'est avant tout la fin de la progression exponentielle de la technologie CMOS (vers 5-7 nm) qui influencera la recherche. Cette époque, appelée post-Moore, n'est pas sans rappeler la transition de la technologie bipolaire au CMOS. Du point de vue physique, à partir d'une certaine taille, les courants de fuite et les effets quantiques domineront et le comportement que l'on attend des transistors ne sera plus respecté. Du point de vue économique la rentabilité sera compromise par les gigantesques coûts de fabrication. Plusieurs directions sont évoquées pour continuer d'accroître les performances, en changeant de technologie (transistors en nanotubes de carbone, en graphène, variations du transistors à effet tunnel, spintronique, jonction Josephson, etc.), en exploitant davantage l'organisation en couches (troisième dimension) des circuits, en adaptant la précision du calcul à une qualité attendue (calcul approximé, imprécis), en adoptant de nouveaux paradigmes de calcul (calcul quantique, calcul neurosynaptique), en développant des architectures et des calculateurs dédiés, soit encore en combinant plusieurs de ces directions. Quoi qu'il en soit, il y a bien un risque que la progression exponentielle qui déterminait largement l'accroissement en performance des processeurs et des calculateurs se termine. On peut percevoir un côté positif : si la technologie ne progresse plus exponentiellement, la recherche en algorithmique deviendra une source déterminante d'accroissement des performances. Mais il est improbable que cela produise une progression exponentielle.

### FOCUS 2 : LA CONFIANCE DANS LES RÉSULTATS

À mesure que les systèmes, les logiciels et les exécutions se complexifient, l'interrogation sur la correction des résultats de simulation et d'analyse de données se fait plus pressante. Les résultats d'une exécution peuvent être potentiellement affectés par des corruptions provenant de nombreuses sources : erreurs de conception (modélisation, discrétisation, paramétrage), erreurs systématiques (bugs matériels et logiciels, attaques, erreurs d'arrondi) et erreurs non systématiques (corruptions induites par radiations, bruit des données d'entrées). La communauté a développé de nombreux mécanismes pour augmenter la confiance dans les résultats d'exécution (validation et vérification, assimilation de données, quantification des incertitudes, détection et correction d'erreurs silencieuses). Les utilisateurs scientifiques suivent aussi une méthode progressive parfois fastidieuse de validation de résultats préliminaires selon leur expertise. Toutefois, de nombreux exemples de détection de corruptions après coup montrent que des décisions peuvent être prises à partir de résultats erronés avec des conséquences parfois catastrophiques (naufrage de la plateforme Sleipner A). Même dans les cas moins graves, les corruptions de données silencieuses ont un impact sur la productivité puisqu'il faut passer du temps à découvrir leur origine et à les corriger. Augmenter la confiance dans les résultats devient donc un objectif important et plusieurs groupes de travail se sont déjà réunis à ce sujet. L'amélioration des techniques de vérification formelle pour la simulation numérique et le développement de la vérification en ligne sont des pistes potentielles. Il s'agit là d'un problème complexe et qui nécessitera de nombreuses recherches. ■



**Antoine Petit,**  
Président directeur général, Inria

### **Quel futur pour le HPC ?**

Le calcul à hautes performances est en constante évolution. Cependant, il semble acquis que la loi de Moore arrive à ses limites et que des changements architecturaux importants seront nécessaires pour conserver une croissance effective de la puissance de calcul. En particulier, quelques ruptures technologiques importantes vont avoir un impact à la fois sur les architectures, les compilateurs, les systèmes d'exploitation, les supports d'exécution et même certainement les algorithmes et les applications. Parmi ces avancées technologiques, on peut citer les NVRAM (RAM non volatile) qui offriront une forte densité d'intégration, des temps d'accès très faibles, une plus grande capacité, une conservation des données sans alimentation et donc une plus faible consommation énergétique et une amélioration vis-à-vis de la tolérance aux pannes. Les capacités de communications seront aussi améliorées avec l'arrivée des communications optiques au sein même des processeurs (silicon photonics). Enfin les processeurs eux-mêmes seront conçus en trois dimensions avec des gains à la fois en vitesse et en intégration. On aura aussi des architectures hybrides et fortement hétérogènes (cores génériques ou spécialisés exploitant tous les niveaux de granularité dans les calculs).

Du côté des applications elles-mêmes, on va constater une augmentation du nombre (et du type d'applications) ayant accès au calcul à haute performance. En particulier les applications manipulant des grandes masses de données arrivent déjà dans de nombreux domaines, notamment autour de l'environnement et du climat, de l'énergie, des sciences du vivant, des matériaux et nanotechnolo-

gies, de la défense et de la sécurité, ... Ces changements de types d'applications auront des impacts sur la conception des architectures et des logiciels (évolution du modèle « Compute-Centric » vers le modèle « Data-Centric », importance du stockage, de la maîtrise des coûts de transferts, « Memory Wall », acquisition sur sites distants - capteurs et utilisation de clouds scientifiques).

### **Quelles sont les attentes et les ruptures ?**

Un challenge important posé par ces nouvelles architectures va être la maîtrise de l'hétérogénéité et de la grande échelle. Des modèles de programmation pour les nouvelles architectures et les nouvelles applications devront être adaptés (ou inventés) et les compilateurs et supports d'exécution qui les accompagneront devront être conçus et développés. La portabilité des performances en fonction des architectures est un enjeu important. La taille des machines du futur va nécessiter la conception de nouveaux algorithmes fortement parallèles et remettre en cause des méthodes traditionnelles de résolution des problèmes (méthodes et schémas de calcul adaptatifs implicites-explicites, multi-résolution, couplages, ...). La réduction des communications assurant une bonne extensibilité des algorithmes est un enjeu important vu les échelles envisagées. La tolérance aux pannes et aux fautes reste un problème qu'il faudra résoudre au mieux, que ce soit du côté des systèmes et supports d'exécution ou du côté des algorithmes eux-mêmes. Concernant la consommation énergétique des futures plateformes, des améliorations devront être apportées en termes d'architectures pour permettre de poursuivre l'augmentation de leur performance en conservant une consommation « raisonnable ». Ce

problème de consommation électrique concerne les processeurs en premier lieu mais aussi les réseaux et les unités de stockage.

**Quels sont les principaux enjeux du HPC en termes de recherche et en termes d'utilisation pour la recherche ?**

En termes de recherche, les travaux devront répondre aux challenges et enjeux mentionnés précédemment. Des relations plus fortes entre les différents logiciels permettant d'avoir une application parallèle sur une architecture donnée devront être développées (« intelligence » dans l'architecture, compilateurs, supports d'exécution, environnements logiciels, bibliothèques). Un travail important de transfert des résultats de la recherche dans les logiciels utilisés en production devra être conduit.

En ce qui concerne l'utilisation de cette recherche dans les domaines d'applications du calcul à haute performance, il conviendra de simplifier l'accès aux plateformes (approche Cloud) et d'améliorer la formation avancée des chercheurs et des ingénieurs (algorithmique parallèle/concurrente comme formation de base, mise en œuvre du parallélisme sous toutes ses formes). Enfin vu l'échelle des plateformes du futur et leur complexité, il faudra avoir des outils permettant d'avoir une compréhension du comportement d'une application sur une architecture donnée et sur ses éventuelles pertes de performances (simulation avancée, analyse de performances, debugging, ...)

**Quelles sont vos recommandations pour la maîtrise et l'utilisation du HPC ?**

La maîtrise de ces nouvelles plateformes par les chercheurs et les ingénieurs va être nécessairement pluridisciplinaire. Une expertise de plus en plus large sera nécessaire pour à la fois comprendre les applications complexes et leur fonctionnement, ainsi que les caractéristiques architecturales et logicielles des supercalculateurs d'aujourd'hui et du futur. Il s'agira d'avoir un ensemble de compétences sur l'algorithmique, les architectures, les compilateurs et leurs optimisations, et les supports d'exécution. On verra de plus en plus des chercheurs et ingénieurs aux doubles compétences, comprenant la modélisation des phénomènes et la traduction des modèles en codes informatiques hautes performances. Du côté des plateformes cibles de ces nouvelles applications, il faudra bien sûr avoir des plateformes de production mais aussi des plateformes expérimentales à haute disponibilité permettant la mise au point des environnements logiciels et des applications. Des simulateurs performants et réalistes devront être développés et validés sur des applications en vraie grandeur. Enfin il est important d'avoir des industries françaises et européennes fortes dans le domaine pour conserver la maîtrise du sujet, mais sans négliger une vraie collaboration internationale. ■







# USAGES



# IMPACT DE LA SIMULATION ET DU HPC SUR LES PROCESSUS D'INGÉNIERIE

Jacques Duysens

Directeur Business Development EMEA - Ansys Inc.

Bruno Stoufflet

Directeur de la prospective et de la stratégie scientifique, Dassault-Aviation

---

## INTRODUCTION

La simulation et le HPC sont sans conteste devenus des outils incontournables dans le développement de systèmes complexes dans beaucoup de secteurs industriels : aéronautique, spatial, défense, automobile, ...

Au cours des 20 dernières années, les technologies de simulation et de HPC ont subi des évolutions extraordinaires ayant un impact direct sur les processus d'ingénierie.

La simulation, autrefois utilisée pour vérifier quelques points critiques de fonctionnement en conception détaillée, exige un recours croissant aux techniques de HPC. Le besoin d'explorer des espaces de conception à grand nombre de paramètres, de réaliser des plans d'expériences numériques et des optimisations multi-disciplinaires a permis l'émergence de nouvelles technologies de simulation telles que :

- l'utilisation de méta-modèles ou de surfaces de réponses,
- le recours à des algorithmes sophistiqués pour les

optimisations multi-physiques et multi-disciplinaires ;

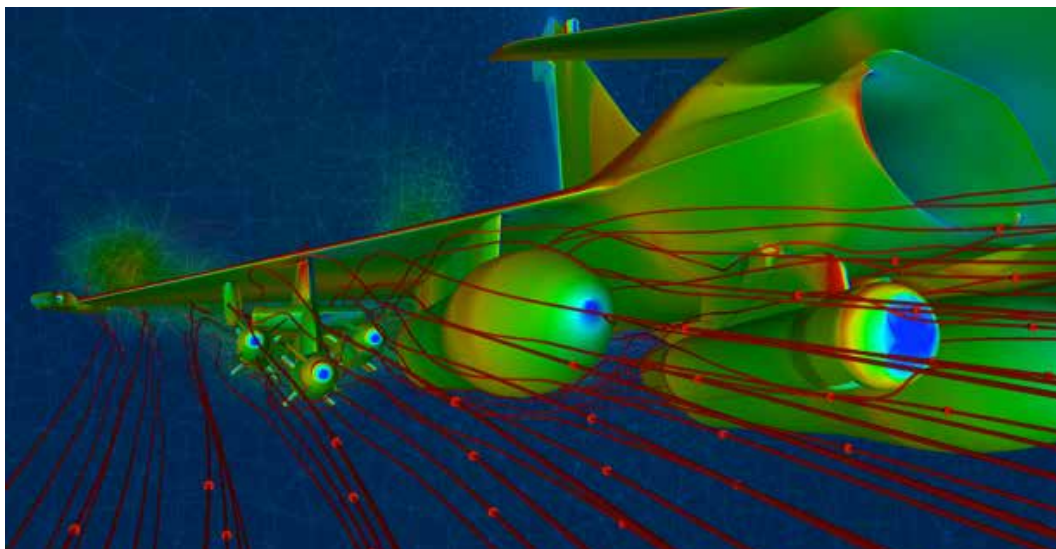
- la génération et l'exploitation de modèles d'ordre réduit permettant de simuler des plages entières de fonctionnement et de réaliser des plans d'expériences numériques et d'optimisation à grande échelle au sein des espaces de conception.

En cela, le HPC permet de réduire les risques dans la phase de conception en ciblant les essais physiques par construction de l'ensemble de la matrice des cas par simulation. De même, les variantes et les dérivées de conception sont simulées.

La simulation et les technologies HPC sont aussi de plus en plus utilisées pour simuler les procédés de fabrication avec des physiques en jeu souvent couplées et complexes.

## ÉVOLUTION DE L'UTILISATION DE LA SIMULATION DANS LES PROCESSUS D'INGÉNIERIE

Dans le secteur de l'automobile, les simulations ne se limitent plus aux seuls calculs de crash et d'aérodynamique, mais concernent désormais l'ensemble des composants du véhicule automobile (carrosserie, groupe motopropulseur, habitacle...) et tout son cycle



Dassault-Aviation  
Le HPC est une clé pour disposer d'un processus efficace d'évaluation aérodynamique pour les différents points de vols de toutes les configurations d'emports d'un avion de combat.

© Dassault Aviation

de vie, en impliquant également la supply chain. Des simulations multi-physiques et multi-échelles complexes ont été progressivement intégrées dans les processus de conception.

« Le monde automobile est en progrès permanent sur les prestations, consommation et performance, mais aussi sur les coûts. Par ailleurs, la complexité des groupes motopropulseurs ne cesse de croître et leur électrification est sans doute la « cerise sur le gâteau » qui nous amène à accroître l'utilisation des simulations de dernière génération pour procéder à une optimisation plus globale des groupes motopropulseurs. » Alain Raposo, Alliance Renault-Nissan – Alliance Powertrain & EV Engineering Global Vice-President

Il en est de même de l'aéronautique et de la conception des aéronefs.

Au-delà, le développement fulgurant des nouvelles techniques d'Additive Manufacturing aura un impact sur l'utilisation de la simulation et du HPC. « Elles vont nécessiter de mener des simulations et des optimisations topologiques très en amont dans le processus de

conception, ceci afin de garantir l'intégrité et d'optimiser les composants produits par impression 3D. Ceci, même si la simulation sert encore beaucoup à réduire le nombre de prototypes physiques générés via des procédés classiques. » Emeric D'Arcimoles, Conseiller du Président de SAFRAN, Président de la Commission Internationale du GIFAS.

## TENDANCES POUR LES ANNÉES À VENIR

Quelques thématiques déjà amorcées vont prendre une importance croissante dans le futur :

- **Le « Cloud Computing »** qui démultiplie la puissance de calcul disponible et facilite le travail collaboratif. La plupart des grands éditeurs de logiciels, récalcitrants auparavant sur l'utilisation du Cloud, proposent aujourd'hui des offres à la demande sur des Clouds. Parmi les verrous technologiques encore à lever, résident les aspects sécurité, qui peuvent expliquer que les industries aéronautiques et de défense n'ont pas encore franchi complètement le pas du Cloud, sauf à recourir à des clouds privés.

- **La génération de gros volumes de données**, liées à l'augmentation de la puissance de calcul et la performance accrue des logiciels, nécessite la mise en œuvre de systèmes performants de management des données de simulation et de l'information avec un impact non négligeable sur la formation des « ingénieurs calculs ». Les industries ont aussi de plus en plus recours aux techniques de « Data Analytics » et de « Visual Analytics » qui s'avèrent indispensables pour analyser efficacement les flots de résultats issus des simulations et faciliter les prises de décision. Les processus d'ingénierie numérique sont profondément transformés via l'utilisation de ces outils de management de données, de capitalisation et d'analyse.

- **La simulation des systèmes cyber physiques**, au-delà du multi-physique et multi-échelle, est désormais stratégique pour les entreprises de haute technologie. Les leviers de son développement sont multiples : mise en place de plateformes de co-simulation performantes, passage à l'échelle dans la prise en compte de composants systèmes, lien avec les simulations physiques (via les modèles d'ordre réduit) et avec les logiciels embarqués au niveau des boucles de contrôle de ces systèmes. Plus largement, on assiste à une véritable « démocratisation » du HPC qui ne se cantonne plus aux seules simulations numériques lourdes.

- **Les processus de vérification et de validation** (V&V) des codes et des modèles de simulation vont continuer à prendre une importance croissante et cela d'autant plus que la simulation et le HPC sont devenus un élément essentiel pour les prises de décision dans les processus d'ingénierie. Ils joueront un rôle majeur dans le cadre des futures certifications pilotées par les modèles de simulation.

### CONCLUSION

Tous les progrès évoqués au niveau des technologies de simulation et de HPC ont un impact massif sur les processus d'ingénierie, permettant une accélération drastique des cycles de conception de cyber systèmes toujours plus sophistiqués et complexes. Ils auront aussi une incidence sur les organisations industrielles et le travail collaboratif des ingénieurs. ■



© Ansys, Inc.

*Ingénierie Automobile : les simulations concernent désormais l'ensemble des composants du véhicule automobile et leurs interactions.*



**Alain de Rouvray**

Président directeur général, ESI Group

### **Quelle est votre définition du HPC ?**

Le HPC, c'est le Massive number crunching où l'on utilise le meilleur de l'informatique disponible à un moment T pour résoudre par exemple des problèmes scientifiques complexes. Mais c'est aussi une manifestation industrielle et économique de la loi de Moore. Ainsi en 1973, notre premier crash pour la Volkswagen Polo a demandé 10 heures de calcul sur Cray XMP avec un modèle de 5 555 éléments, aujourd'hui nous traitons avec Renault des modèles de 20 millions d'éléments dans la nuit.

Mais attention, le HPC c'est quelque chose qui vous submerge. On ne sait plus où donner de la tête, il va donc falloir changer d'approche. Nos clients chinois l'ont d'ailleurs bien compris en disant : « L'océan de l'information noie le poisson de la connaissance ».

### **Quels sont les principaux enjeux du HPC aujourd'hui dans votre domaine ?**

Le HPC va nous permettre d'apporter à nos clients encore plus de réalisme dans leur approche de prototypage virtuel, voire même de l'immersif temps réel pour qu'ils soient "dans l'expérience". Cela va nous permettre aussi aller beaucoup plus loin dans la simulation multi-échelles, du macro au nano, pour traiter des problèmes dont la représentation n'est plus compatible avec la mécanique des milieux continus. Nous pourrions ainsi par exemple, aller beaucoup plus loin dans l'ingénierie des nouveaux matériaux ou la biomécanique.

Pour éviter d'être submergé par le Big Data et des corrélations sans rime ni raison, il faut que chacun, en fonction de ses objectifs d'entreprise, trouve le point d'équilibre entre plus de détails et plus d'immersion.

Il faut disposer en France de réseaux à la hauteur

des challenges et des performances des machines et logiciels, pour ne plus freiner le développement du HPC dans notre domaine.

### **Quel futur pour le HPC ?**

Le passé est déjà difficile à expliquer, alors le futur... On peut juste dire qu'il sera très lié à l'innovation. Mais qu'est-ce qu'on va faire de mieux avec toute cette puissance, car l'innovation ça fait peur ? De la théorie de la destruction créatrice de Schumpeter en 1939 à celle de destructive innovation devenu disruptive innovation chez Christensen en 1985, l'innovation est devenue destructive. Et l'on en est au Big Bang de l'innovation dévastatrice car on n'a plus le temps de voir arriver les choses. Conséquence tout le monde à la trouille, ce qui ralentit l'innovation, dont l'illustration est le principe de précaution.

Est-ce que grâce au HPC on ne pourrait pas avoir des modèles plus prédictifs qui expliqueraient les conséquences de ce qui nous fait peur ? Et ainsi transformer les anxiétés en problèmes concrets et en voir les conséquences pour se rassurer en prenant les bonnes mesures correctives. Le futur du HPC, c'est de nous donner un espoir de résoudre nos problèmes de société.

### **Quel est l'impact du HPC sur votre métier ?**

C'est l'occasion d'introduire des comportements de rupture transformationnels dans les industries manufacturières. Les quelques dizaines d'essais physiques que l'on pouvait faire pour valider un concept seront remplacées grâce au HPC par des milliers d'essais virtuels, couvrant beaucoup plus de cas de charge et de variantes de conception, afin d'affiner plus rapidement les produits. Il faudra aussi faire évoluer les normes et les réglementations qui sont un frein à l'innovation et à la transformation, >>>



**Alain de Rouvray**

Président directeur général, ESI Group

>>> notamment dans des secteurs tels l'aéronautique ou la santé.

Il nous faudra donc donner à nos clients les moyens de créer facilement des modèles prédictifs fiables, sans oublier que : « Tous les modèles sont faux, mais certains sont utiles à condition d'avoir identifié les circonstances et les limites où les simplifications restent valables ». On va donc aller grâce au HPC vers des modèles multi-physiques de plus en plus précis et réalistes, dont l'exploitation va demander des moyens de visualisation immersifs, gros consommateurs de calcul, pour convaincre les décideurs et clients et faire les bons choix de conception. Mais au-delà, on va aussi aller vers des "modèles comportementaux des systèmes" permettant d'étudier la sensibilité de leurs multiples paramètres pour déterminer les importants.

Le HPC va aussi permettre de traiter le Big Data, mais il ne faut pas oublier que celui-ci traduit l'expérience du passé sur des choses que l'on savait regarder et mesurer. Si l'on veut en conclure ce qu'il faudrait faire pour que ça aille mieux, il faut à la fois trouver des corrélations nouvelles et développer des modèles prédictifs. On verra ainsi par exemple ce qu'il faut renforcer dans un produit, et où vont se reporter les efforts et l'usure. Le Big Data apportera ainsi de l'intelligence à la conception.

Si dans un premier temps les industriels vont basculer d'une informatique traditionnelle vers le Cloud et le SAS pour le traitement de leurs modèles, dans un futur pas si éloigné tout se passera à travers le Cloud. L'ingénieur construira son modèle de manière intuitive, comme dans un jeu, la qualité de celui-ci, sa résolution puis son post-traitement seront réalisés à travers le Cloud, de manière quasi-instantanée. Charge à lui de le modifier et de le relancer pour arriver au résultat qu'il souhaite.

**Quelles sont les attentes et les ruptures vis-à-vis du HPC ?**

Tout, tout de suite, simple et gratuit, si possible fiable et socialement utile. Plus sérieusement, on se dirige de plus en plus vers une prééminence d'un monde virtuel chaque jour plus complexe, ce qui va nous obliger à faire de plus en plus confiance aux machines, en espérant qu'elles réussissent le test de Turing !

**Quelles sont vos recommandations pour la maîtrise et l'utilisation du HPC ?**

Le futur du HPC, c'est le futur d'une innovation sociale où l'on remplacera les anxiétés et la propagande par des modèles prédictifs qui soient discutables. Cela permettra plus de sérénité dans les discussions pour arriver plus facilement à des compromis en analysant des relations de cause à effet.

Une évolution qui ne sera possible que si les directions générales des entreprises, ainsi que les pouvoirs publics et les organisations réglementaires initient et soutiennent fortement le mouvement.

**Évolution de la profession ?**

On va aller de plus en plus avec nos logiciels vers du "Nintendo pour ingénieur", ludique mais avec du réel derrière. La complexité du monde moderne est croissante et effrayante. Il faut donc être de plus en plus prédictif, pour éviter de sombrer dans l'anxiété et là le HPC peut largement fonctionner s'il est intégré, tant au niveau des logiciels, que des outils de collaboration, de conduite de la transformation, etc. ■

# LA SIMULATION MULTI-ÉCHELLE DES MATÉRIAUX

Gilles Zerah

Conseiller scientifique, CEA-DAM Ile-de-France

**L**es matériaux ont largement guidé les évolutions technologiques au cours des siècles, et il est peu de domaines industriels qui ne reposent sur quelques matériaux clés. Nombre de matériaux ont été utilisés bien avant que l'on comprenne les raisons de leurs propriétés particulières : la recherche sur les matériaux, en particulier la recherche industrielle, visant à innover et optimiser leurs propriétés reste fortement empirique.

Cependant, en partie grâce à l'explosion des puissances de calcul, en partie grâce aux avancées de la modélisation et de l'algorithmique, les spécialistes du domaine ont acquis une compréhension et une capacité prédictive des propriétés des matériaux à l'échelle microscopique au travers de la simulation numérique.

Il est ainsi maintenant possible de calculer, sans paramètre ajusté sur l'expérience qu'il s'agit de reproduire, les structures cristallines, les structures d'alliages, les propriétés optiques, les propriétés catalytiques, les propriétés de fragmentation sous choc... de nombreux matériaux.

## LES SIMULATIONS AB-INITIO

La première brique de base et une des principales prouesses technologiques ayant permis ces avancées, est le développement de codes décrivant, à l'aide de la

mécanique quantique, les interactions entre les atomes et les molécules constituant les matériaux. Il s'agit de savoir résoudre l'équation de Schrödinger, et déterminer la fonction d'onde d'une configuration donnée d'atomes. Les méthodes les plus robustes développent la fonction d'ondes sur une base d'ondes planes bien adaptée aux systèmes étendus. D'autres bases, plus localisées (comme par exemple les bases d'ondelettes) sont aussi utilisées. En tout état de cause, la course à la taille de simulation exige de savoir « localiser » les propriétés à l'échelle atomique. Le développement de ces outils s'est fait principalement en Europe, en raison sans doute de l'excellente organisation des chercheurs du domaine au travers de réseaux pérennes (en particulier le CECAM), permettant l'échange rapide des dernières avancées, tout particulièrement en matière algorithmique et d'adaptation aux dernières générations de calculateurs.

## LA DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE

Une seconde brique est constituée par les techniques dites de dynamique moléculaire permettant de simuler un nombre considérable d'atomes (jusqu'à un milliard) en utilisant des forces d'interaction simplifiées, déterminées via les simulations quantiques.

Le couplage de ces deux techniques a permis d'obtenir les résultats les plus saisissants en matière de simulation

prédictive des matériaux: prédiction des fusions/solidifications, plasticité des solides, propagation de fissures. Du point de vue technique, le recours à un potentiel d'interaction permet de réduire la simulation à l'intégration des équations de Newton. C'est cette simplicité qui permet de simuler des systèmes de grande taille, dans des géométries et des charge-ments quelconques.

### LES DÉFIS DU MULTI-ÉCHELLE

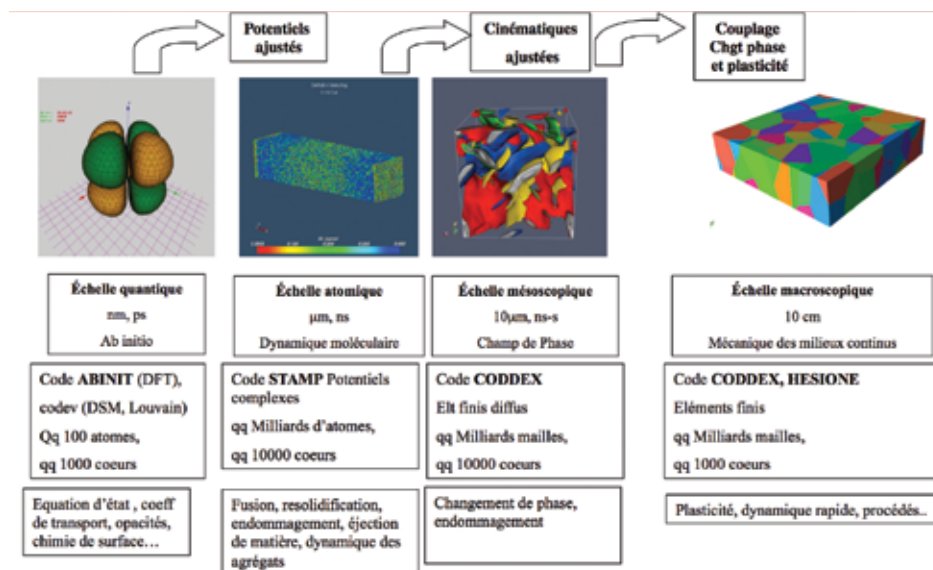
Cependant, malgré ces remarquables succès, la simulation des matériaux n'a pas encore remplacé l'approche empirique dans la recherche et la modélisation des matériaux, à l'instar de ce qui s'est passé lors de l'introduction des méthodes de CAO et de couplage aux codes de mécanique des solides ou de mécanique des fluides.

Ceci tient au caractère intrinsèquement multi-échelle des matériaux, dont les propriétés sont le résultat de l'interaction de plusieurs niveaux de complexité, nécessitant de développer des descriptions adaptées à chaque échelle, mais aussi de développer les outils de couplage d'échelles. Il est en effet apparu que pour

pratiquement tous les phénomènes intéressants, il était nécessaire de développer des outils de simulation permettant de prendre en compte une échelle « mésos-copique » intermédiaire, qui ne possède pas le même caractère d'universalité que les échelles inférieures : il faut développer des modèles spécifiques pour la plasticité, la rupture, les fluides complexes, les surfaces, les polymères chargés, les matériaux tissés... : bref, mettre autant d'ingéniosité dans la simulation que dans la réalisation des matériaux eux-mêmes.

### LA COURSE AUX DEGRÉS DE LIBERTÉ ET LE HPC

Les matériaux sont caractérisés par un très grand nombre de degrés de liberté et une forte structu-ration interne : c'est *in fine* la raison pour laquelle toute augmentation des puissances de calcul a directement profité à notre compréhension des matériaux, mais aussi ce qui impose le recours aux descriptions multi-échelles. C'est pourquoi, dans toutes les approches précédentes, le calcul exaflopique, associés à de nouveaux progrès algorithmiques devrait permettre de mettre en place des méthodologies de simulation multi-échelle, intégrant l'ensemble des échelles de description nécessaires. ■



Exemple d'approche multi-échelle dans le cas de la plasticité.



# SIMULER POUR DÉCIDER

Yves Bamberger

Ancien Directeur d'EDF R&D, membre de l'Académie des technologies

Il y a maintenant un peu plus de 50 ans qu'EDF a commencé à développer des « codes » de thermo hydraulique, de mécanique des fluides et de réseaux. En 1969 fut mis en place à la R&D un service consacré à l'informatique scientifique et aux mathématiques appliquées. C'est là que fut installé au début des années 80, le premier ordinateur vectoriel Cray en France. C'est là que Paul Caseau, Directeur-adjoint puis Directeur des Etudes et recherches d'EDF, et plus tard Président du Conseil scientifique d'ORAP, donna une impulsion décisive au développement de la simulation à EDF, mettant EDF en pointe dans ce domaine, contribuant à sa réputation bien au-delà de nos frontières.

EDF ne fabrique pas de produits mais fait vivre une grande partie du système électrique. À ce titre, on peut distinguer grosso modo :

- La simulation dans les « métiers », la production – notamment hydraulique et nucléaire –, la commercialisation, l'optimisation (qui assure l'égalité entre production et consommation des clients d'EDF), l'ingénierie, et, si l'on considère ErDF et RTE, les réseaux et le système électrique. Il s'agit principalement de l'utilisation opérationnelle de codes existants. On peut dire qu'il s'agit de simuler pour décider (et non pour concevoir) ;
- La simulation dans les activités de recherche et développement correspond à des développements

de méthodes et de logiciels - sans exclure l'acquisition chaque fois que préférable - pour les besoins propres de la R&D et surtout comme réponse aux besoins des métiers opérationnels. Ceci ne signifie pas que la R&D ne fasse pas des études. On peut dire qu'il s'agit principalement de simuler pour comprendre et comprendre pour simuler !

La situation réelle est évidemment plus complexe : certaines entités métiers développent ou acquièrent parfois des logiciels. Surtout, une proportion importante des développements et travaux de la R&D, qui correspondent à des simulations-frontières au moment où ils sont faits, deviennent ensuite standards et sont ensuite inclus dans les outils des métiers, avec toutes les joies et les difficultés que peut comporter ce type de transferts de compétences, d'outils voire de personnes. Ainsi, historiquement, la chaîne d'outils d'optimisation et de la sûreté du fonctionnement du système électrique aux différentes échelles de temps et d'espace a été développée à la R&D à partir de 1965 pour le service opérationnel des « Mouvements d'énergie », ancêtre de RTE<sup>1</sup>. Ainsi le code de mécanique Aster a-t-il été développé à la R&D pour devenir progressivement le code d'études mécaniques d'EDF, notamment à l'ingénierie.

Plutôt que de développer ici les travaux réalisés par EDF et sa R&D actuellement, le classement de son ordinateur au TOP500, ses travaux du côté des

*(1) Il faut noter que cette chaîne a été transformée à la naissance de RTE par parthénogénèse en deux chaînes, qui ont évolué indépendamment, l'une pour l'optimisation production/consommation des clients d'EDF, l'autre pour l'optimisation nationale du système électrique de l'ensemble des producteurs et consommateurs par RTE.*

équations aux dérivées partielles des diverses disciplines physiques tout comme du côté du multi-échelles, des simulations par agents, de l'exploration des données, ..., je me permets de présenter quelques-unes des actions que j'ai impulsées avec mon équipe à partir de 2002 (et jusqu'en 2010), lorsque je suis devenu un des successeurs de Paul Caseau. Je pense, peut-être à tort, que cela pourrait intéresser des lecteurs de ce fascicule anniversaire.

Face à un essoufflement de la dynamique d'extension du rôle de la simulation, tant à la R&D que du côté des métiers, il a fallu identifier les freins pour les surmonter.

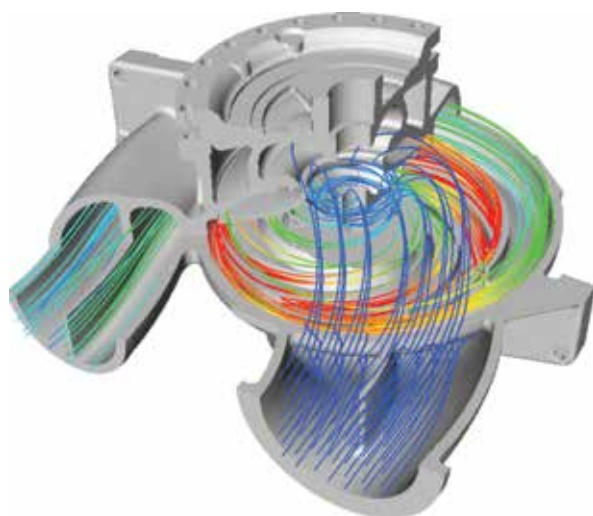
Du côté des chercheurs d'abord. Un jeune chercheur à qui je demandais pourquoi il ne faisait pas de 3D me répondit que son client n'en voulait pas. Et moi de lui dire que si ma génération avait réagi ainsi, nous serions encore au 1D ! Qu'il fallait donc qu'il y aille, et que la Direction pousseurait côté client ! Et donc, un encouragement permanent des équipes pour les pousser à aller plus loin de manière utile, à regarder ce que faisaient d'autres équipes dans le monde sur ces sujets, à coopérer entre elles et à l'externe. En même temps, malgré un contexte budgétaire tendu, la Direction a progressivement amplifié les ressources informa-

tiques allouées aux équipes et au niveau central avec un puis un autre supercalculateur Blue Gene d'IBM.

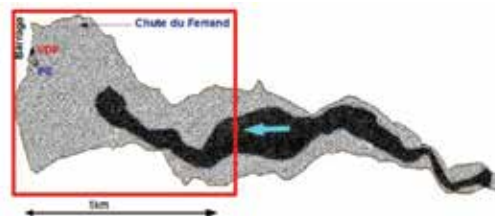
Cette politique a été rendue visible non seulement en interne à la R&D mais aussi de la Direction Générale et des métiers par sa transformation en un axe stratégique de la R&D appelé en 2003 « oser la simulation 2010 », puis en 2007 « simuler pour décider ».

Convaincre les métiers d'utiliser de nouveaux outils a été une entreprise collective : des discussions entre ingénieurs des métiers et chercheurs, des discussions entre les « chefs », des tests, des évaluations des apports potentiels, des analyses, des évolutions à 5 ou 10 ans ! J'ai poussé aussi la valorisation en euros du basculement vers de nouveaux outils dans de nombreux cas, valorisation discutée entre la R&D et son « client ». Ceci a aidé la Direction générale à soutenir la démarche, non pas tant parce que la simulation est généralement moins coûteuse que l'expérimentation, mais parce que la simulation contribue à la performance de l'entreprise.

Autre argument, essentiel car stratégique : en matière de sûreté hydraulique et de sûreté nucléaire, EDF se doit de disposer des meilleurs outils possibles pour



© EDF Direction Recherche & Développement.



La simulation reproduit un épisode d'abaissement de la cote de retenue. En 25 heures, la cote est abaissée de 5 mètres. Le but est de reproduire l'érosion dans la retenue en particulier dans la zone proche du barrage modélisée en 3D pour représenter les stratifications (voir les coupes en travers) et les effets des organes de vidange.

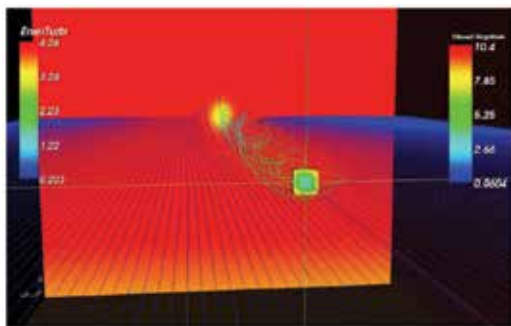
Le temps de simulation est de 17 h sur Ivarhol (192 cœurs) pour une simulation temps physique de 25 h.

Le pas de temps est de 0.2 s.

© EDF Direction Recherche & Développement.

assurer pleinement sa responsabilité industrielle et sociétale, pour pouvoir dialoguer avec les autorités françaises et étrangères ; et ceci suppose une bonne maîtrise des outils de simulation, dont l'avancée est permanente ! Ce n'est pas aux membres et amis d'ORAP, qui y contribuent et le voient tous les jours qu'il faut l'expliquer !

La morale de cette histoire, si l'on peut dire, c'est que le développement de la simulation et, encore plus, de la simulation haute performance, n'est pas seulement affaire de compétences scientifiques et techniques et d'outils informatiques ! Elle est largement autant une dynamique humaine collective qui concerne tous les niveaux de l'entreprise car elle transforme les rôles, les métiers et les performances. Son développement est donc encore plus passionnant à conduire ! ■



© EDF Direction Recherche & Développement.

*Calculs aérodynamiques d'effets de sillage et de déficit de production (Code Saturne – EDF).*

“

**Michel Morvan**

Co-fondateur de CoSMo

### **Quels sont les principaux enjeux du HPC aujourd'hui dans votre domaine ?**

CoSMo crée des applications basées sur une technologie propre permettant de prédire l'évolution de systèmes très complexes, telles les infrastructures des grands réseaux (électricité, gaz, eau). Pour maîtriser et optimiser leur planification stratégique ou opérationnelle, nos clients ont besoin d'explorer un grand nombre de configurations.

L'enjeu principal du HPC pour notre domaine est donc de fournir des environnements de calculs compatibles avec les systèmes d'information d'entreprises, à des coûts maîtrisés, pouvant héberger des applications nécessitant des besoins de calculs importants.

### **Quel futur pour le HPC ?**

L'opportunité pour le HPC est de faire bénéficier l'écosystème du data analytics (data intensive), dont le déploiement dans les applications d'entreprises est en forte progression, de composants logiciels et méthodologiques provenant du monde de la simulation (computing intensive). Ce sont deux mondes assez disjoints aujourd'hui, mais nous voyons des passerelles se créer.

### **Quelles sont les attentes et les ruptures ?**

Le HPC a une longueur d'avance pour la gestion de flux de calculs complexes (performance brute, latence, scheduling...) et sur les composants de calculs prédictifs (simulation...). D'un autre côté, le monde du data analytique a réussi à percer de façon significative dans les systèmes d'information, comme "outil de production" pour le pilotage des entreprises et le support d'applications à forte valeur ajoutée, ouvrant de nouvelles perspectives très intéressantes au monde du calcul distribué. Des acteurs tels que **Hortonworks** ou **Cloudera** deviennent très populaires dans les entreprises.

Pour nos clients, certaines problématiques complexes nécessiteront une combinaison de l'approche par le traitement de données massives et du calcul intensif haute performance. Cela ouvrira un champ d'applications nouvelles, où les calculs seront recalibrés en temps réel sur des larges flux de données hétérogènes, et où l'utilisateur pourra identifier comment piloter son système de façon optimale en calculant l'impact d'un grand nombre de scénarios de façon automatique. ■

## CLIMATOLOGIE

Olivier Marti

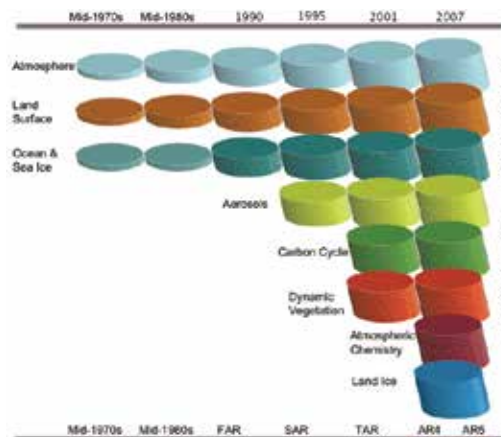
Ingénieur-Chercheur, IPSL.

Les modèles numériques utilisés par les climatologues sont proches de ceux de la prévision météorologique. Tous calculent sur un maillage plus ou moins serré la température de l'air et de la mer, les vents, les météores (nuages, précipitations), le rayonnement solaire, etc ... Mais l'échéance d'une prévision météorologique est au maximum d'une dizaine de jours, pendant lesquels l'évolution de certains paramètres est négligée. Les modèles de climat doivent intégrer les courants océaniques, la végétation, le cycle du carbone (dans la végétation et la biologie marine) et parfois la chimie de l'atmosphère et les calottes polaires. On les désigne comme des « Modèles système Terre ». Ils sont utilisés pour les prévisions saisonnières, décennales et séculaires. Ces dernières sont à la base des négociations internationales (par exemple la Conférence des Parties de la Convention-cadre des Nations Unies sur les changements climatiques).

Lorsque l'on cherche à prévoir l'évolution séculaire du climat, l'incertitude majeure est celle sur les scénarios économiques et démographiques. Quelles quantités de gaz à effet de serre l'humanité va-t-elle rejeter dans l'atmosphère ? Quid des pratiques agricoles, des sources d'énergies, etc... Plusieurs scénarios sont proposés par le GIECC (Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat). Mais d'autres sources d'incertitudes existent, que l'augmentation de puissance des calculateurs nous permet peu à peu de lever.

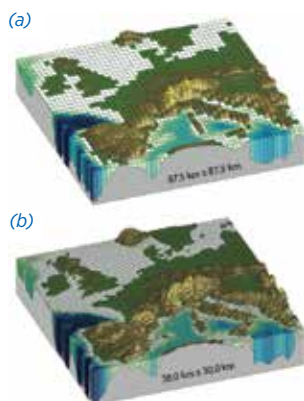
## LA COURSE À LA PUISSANCE

Certaines composantes du système climatique sont aujourd'hui encore imprécisément connues et modélisées. La Figure 1 montre comment nous intégrons progressivement dans les modèles de nouvelles composantes physiques. Chaque composante ajoute des degrés de liberté, et il faut multiplier les simulations pour les explorer, et déterminer toute la gamme d'incertitude.



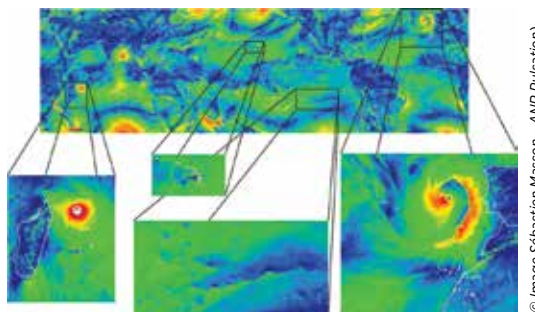
**Figure 1.** Intégration progressive des différentes composantes dans les modèles systèmes Terre. Dans chaque élément, la complexité des processus physiques représentés a augmenté avec le temps (illustré par la taille des cylindres). Pendant cette même période, la résolution a augmenté considérablement, passant dans l'atmosphère de 500 km et 9 niveaux verticaux, à environ 100 km et 95 niveaux. (5<sup>e</sup> rapport d'évaluation du GIEC - AR5 - Climate Change 2013: The Physical Science Basis, Figure 1.3).

Une autre évolution est celle de la résolution. La Figure 2 montre l'Europe vue par un modèle à 87,5 km de résolution (a), et dans un modèle à 30 km de résolution (b). Une description fine du relief permet de mieux représenter le climat local. L'effet de la Vallée du Rhône sur le mistral par exemple, est bien mieux représenté à fine résolution. Mais l'effet sur le climat global est aussi déterminant. L'Himalaya joue un rôle majeur sur la mousson indienne. Les Montagnes Rocheuses en Amérique du nord modulent les trains de dépressions qui traversent l'Atlantique et arrivent sur l'Europe.



**Figure 2.** Résolution horizontale et relief. (a) L'Europe à la résolution de 87,5 x 87,5 km, qui est aujourd'hui l'état de l'art pour les modèles système Terre. (b) L'Europe à 30x30 km. La topographie est bien mieux représentée, et les modèles à cette résolution permettent de raffiner les effets du relief sur le climat local comme global. (5<sup>e</sup> rapport d'évaluation du GIEC – AR5 – Climate Change 2013: The Physical Science Basis, Figure 1.4).

La Figure 3 est issue d'une simulation à la résolution de 9 km sur la ceinture tropicale. Une telle résolution n'est pas possible aujourd'hui à l'échelle globale pour une simulation séculaire. Mais elle permet d'explorer l'effet de la représentation explicite des petites échelles sur le climat, qui sera mise en œuvre dans les modèles du futur. En particulier, il devient possible d'étudier l'évolution des événements extrêmes, des tempêtes aux sécheresses. À moyen terme l'objectif est d'atteindre une résolution d'environ 1 km pour résoudre les échelles de la convection atmosphérique et de celles de la formation des nuages.



**Figure 3.** Modélisation à haute résolution de la région tropicale (9 x 9 km). L'image montre le vent à 10 m d'altitude : cyclones, trainées des îles, méso-échelle et structures frontales.

Ces modèles sont aujourd'hui des outils majeurs pour comprendre la physique du climat, pour détecter l'apparition des changements climatiques et comprendre leurs causes, pour étudier l'impact de différents scénarios économiques sur le climat du futur. Le changement climatique est aujourd'hui largement considéré comme inévitable. Les modèles permettent d'étudier son impact sur les écosystèmes, l'hydrologie, les événements météorologiques extrêmes, etc... et les moyens de s'adapter. D'un point de vue politique et sociétal, deux perspectives sont importantes : les prochaines décennies où les vulnérabilités peuvent être évaluées et des mesures d'adaptation prévues, et l'échelle du siècle pour lequel nous cherchons à comprendre comment des stratégies globales pourraient atténuer le changement climatique.

L'évolution de la complexité et de la résolution conduit à des calculs de plus en plus lourds, permis par la course à la puissance des supercalculateurs. Les progrès des prochaines décennies s'appuieront sur notre capacité à calculer vite et bien. Cela repose sur des centres capables de mettre en œuvre des calculateurs de plus en plus performants, sur des ingénieurs capables de les exploiter à leur maximum, et sur des physiciens à même d'analyser les énormes volumes de données produits par un modèle système Terre. ■

# CALCUL NUMÉRIQUE ET SES PERSPECTIVES DANS L'ENVIRONNEMENT ET L'ÉNERGIE

Daniel Clément

Directeur scientifique adjoint, Ademe

---

Comme dans la plupart des domaines mobilisant les sciences et les techniques, les outils numériques ont été étroitement associés, depuis plus de quarante ans maintenant, à la recherche, au développement et à l'innovation énergétique et environnementale, ceci afin d'accompagner la description de phénomènes et la compréhension de leur évolution, d'optimiser des technologies de production comme d'utilisation de l'énergie et d'en apprécier leurs impacts ou encore de concevoir de nouveaux services et les interfaces avec les utilisateurs ou les clients.

Les travaux de ces dernières années sur les évolutions climatiques nécessitant de décrire des couplages atmosphère – océan à l'échelle planétaire sur des durées de l'ordre du siècle sont emblématiques des besoins en puissance de calcul. Très tôt la simulation des échanges thermiques entre les bâtiments leur environnement ou l'apport potentiel des énergies renouvelables, qui dépendent de données météorologiques, ont fait appel aux moyens les plus puissants dont disposaient les centres de calcul.

Au-delà de la satisfaction pour les physiciens et les numériciens de développer et de valider de nouveaux outils, la recherche dans le domaine de la « thermique du bâtiment » présente la particularité d'avoir été associée à la mise en œuvre de la politique publique et de la réglementation en matière de performance énergétique des constructions. C'est ainsi qu'a émergé l'objectif qu'à partir de 2020 toutes les constructions neuves soient des bâtiments à énergie positive (comprendre que le bâtiment, ou îlot, doit « produire » autant d'énergie qu'il en consomme dans l'année pour le chauffage, l'eau chaude sanitaire, la ventilation, l'éclairage, le froid...). Ceci conduit à intégrer aux bâtiments une fonction de production d'énergie, chauffe-eau solaire et électricité photovoltaïque notamment. On préfigure ainsi le passage d'un système énergétique « centralisé » (les centrales nucléaires qui assurent 75 % de l'électricité sont regroupées sur un peu plus de vingt sites) à une production très décentralisée. À terme, plusieurs centaines de milliers de sites producteurs.



## CONVERGENCE MONDE NUMÉRIQUE- MONDE DE L'ÉNERGIE

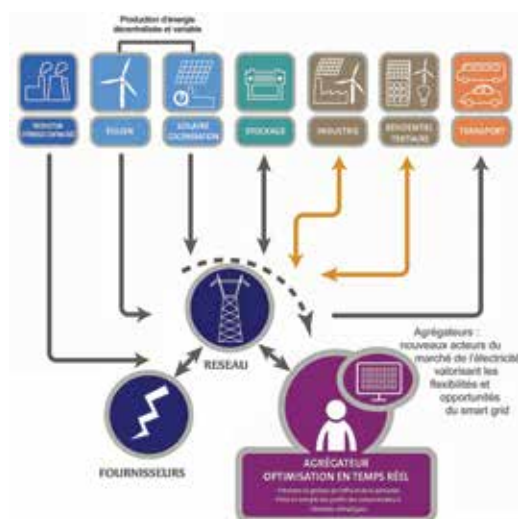
Cela ne rappellerait-il pas la pénétration de l'ordinateur individuel dans un monde numérique où régnaient, sans partage, les mainframes ? De fait, la convergence entre le « monde numérique » et le « monde de l'énergie » va au-delà de cette analogie. Comme on peut mobiliser la capacité de calcul de milliers de PC pour résoudre un calcul, on peut envisager de piloter des milliers de sources (panneaux photovoltaïques, éoliennes, cogénération à partir de biomasse, géothermie, mais aussi stockage ou effacement...) pour obtenir un service équivalent à celui d'une centrale. Ainsi, la notion de réseau électrique intelligent, ou Smart Grid, s'est développée depuis quelques années. La nécessité d'intégrer dans une architecture de réseau, conçu pour transporter et distribuer de l'électricité produite à partir de quelques sites, une production beaucoup plus diffuse a porté ce développement. Il a également permis de tirer parti des possibilités qui s'ouvraient avec l'introduction des compteurs intelligents, qui intègrent une couche de communication en plus de leur fonction de comptage. Cette possibilité ouvrant par exemple à des services de pilotage des équipements en aval du compteur, en fonction d'informations sur la disponibilité et le coût de la puissance et du MWh disponibles en amont du compteur, mais aussi de la possibilité d'une autoproduction. L'hybridation entre réseau énergétique et réseau d'information est en marche.

Au-delà du Smart Grid, la Smart City est en marche. Le système appréhendé n'est plus seulement énergétique, il rassemble tous les flux de la ville : énergie ; fluides ; communications ; transports ; alimentation... Sans oublier une dimension essentielle, non technologique, la citoyenneté qui se (re) dessine à travers les nouveaux moyens proposés pour échanger, intervenir, choisir... Des pondérations sociales, écono-

miques, énergétiques, environnementales, culturelles, artistiques... sont ainsi ouvertes ou en voie de l'être.

Chacun de ces points est un sujet en lui-même et ouvre des perspectives de modes de vie, d'activités et d'emplois. Associée à la transition énergétique et écologique, la transformation numérique va façonner une nouvelle économie. Les enjeux sont énormes, les risques de louper ce virage également. Les premiers signaux seront donnés par la façon dont les données que les opérateurs de tous ordres emmagasinent aujourd'hui, et qui sont indispensables pour imaginer de nouveaux services et de nouveaux modèles d'affaires, seront considérés comme un bien commun et partagés ou conservés par quelques détenteurs qui ne pourront, seuls, que tirer une infime partie de leur valeur.

Il reste au monde de l'énergie à construire un nouvel équilibre, adapté à la diversité des besoins de puissance, entre « super-centrales » et « production diffuse », comme cela se passe dans le monde du numérique. ■



# LES GRANDS DÉFIS DE LA BIO-INFORMATIQUE

Martin Karplus

Prix Nobel de chimie,  
Département de chimie et de biologie chimique  
Université Harvard, Cambridge  
Laboratoire de Chimie Biophysique, ISIS Université de Strasbourg

---

**L**es grands défis sont, selon ma propre définition, des problèmes très importants et très difficiles, auxquels on peut cependant trouver des solutions en se basant sur les découvertes fondamentales et l'accès à la puissance de calcul nécessaire pour les résoudre. Une telle définition « pratique » d'un « grand défi » découle de ma conviction que pour réussir dans la recherche en biologie vous devez choisir parmi toutes les questions passionnantes qui existent, celles qui peuvent être résolues par des méthodes que vous maîtrisez. Dans ce court essai, je m'intéresserai principalement aux grands défis de la bio-informatique relatifs à mes propres domaines de recherche.

Un de ces grands défis concerne le cerveau. Chez les humains, il y a environ 100 milliards de neurones et 100 000 milliards de connexions. La façon dont cet organe complexe est capable de procurer les sensations qui pimentent nos vies et entraînent des actions appropriées (et parfois inappropriées) fascine l'humanité depuis au moins 500 avant J.-C., à l'époque des philosophes grecs. Jusqu'à récemment, les informations sur la manière dont fonctionne notre cerveau devaient être obtenues en étudiant les changements de comportement résultant de lésions cérébrales chez les humains, ou en provoquant ces mêmes lésions dans les cerveaux de souris ou autres animaux de laboratoire. Au-delà de la question éthique posée par

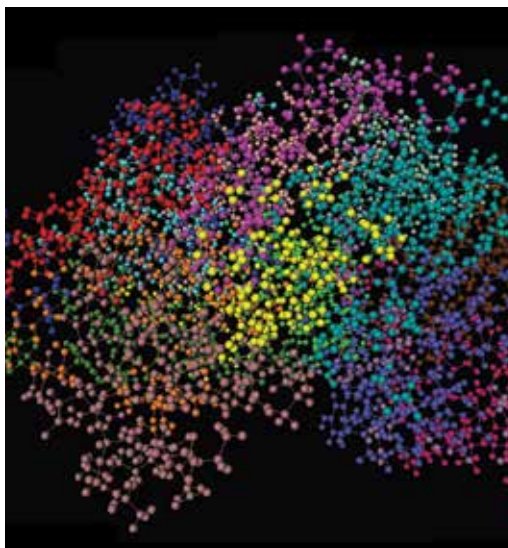
la souffrance des animaux, ces expériences étaient fastidieuses et généraient des ensembles de données relativement restreints. Différentes techniques sont actuellement développées qui permettent de déterminer quels groupes de neurones réagissent, ainsi que les conséquences comportementales, quand certains groupes sont stimulés. Il sera possible sous peu d'effectuer de telles études au niveau d'un seul neurone. Une de ces approches, appelée « optogénétique »<sup>1</sup> est basée sur l'introduction génétique de molécules sensibles à la lumière, liées aux molécules d'opsine présentes dans notre rétine, dans des neurones ou groupes de neurones spécifiques. Les méthodes de ce type pouvant être automatisées, on s'attend à ce qu'on appelle des « mégadonnées » (*Big Data*), des ensembles de données si vastes que leur analyse constitue en elle-même un grand défi problématique, deviennent disponibles. Par exemple, pour la larve du poisson zèbre, les enregistrements spatio-temporels de presque toute l'activité cérébrale engendreront des données au rythme d'un téraoctet (ou téraoctet) /heure<sup>2</sup>. Les mesures de ce type ont été analysées avec des méthodes conventionnelles, telles que l'analyse en composante principale, mais ces approches négligent l'information dynamique fournie par les ensembles de données, c'est-à-dire l'ordre dans le temps des résultats. De nouvelles méthodes, y compris celles qui sont appliquées dans mon laboratoire



aux trajectoires de repliement des protéines<sup>3</sup> aideront à développer l'approche optimale de ce grand défi problématique. De façon plus générale, la recherche biomédicale appliquée aux traitements individuels de patients malades génère des mégadonnées, dont l'analyse optimale constitue également un grand défi.<sup>4,5</sup>

### SIMULATIONS DE DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE

Bien que le paradigme classique concernant la fonction des protéines soit que celle-ci dépend de la structure native, il est désormais établi qu'environ 33 % des protéines eucaryotes sont intrinsèquement désordonnées; c'est dire qu'elles fonctionnent avec au moins une partie de la protéine dépliée. Une des conséquences est que la caractérisation complète de la protéine nécessite d'échantillonner un très grand nombre de conformations, parfois au-delà de ce qu'il est possible de faire avec les ordinateurs actuels. Il s'agit donc bien d'un grand défi, dont l'importance découle du rôle essentiel des protéines intrinsèquement désordonnées dans de nombreuses maladies, y compris la maladie d'Alzheimer. Il n'y a pas de méthode expérimentale pour déterminer l'ensemble structural, même pour les peptides courts (42 acides aminés) impliqués dans l'apparition des plaques associées à la maladie d'Alzheimer. Des méthodes approximatives utilisent la statistique bayésienne pour combiner les simulations de dynamique moléculaire avec les données expérimentales afin de caractériser l'ensemble des conformations<sup>6</sup>. Le grand défi est d'effectuer des simulations de dynamique moléculaire pour obtenir une description précise de l'ensemble déplié sur lequel l'ordre de  $10^{14}$  conformations différentes apporte une contribution non-négligeable. Même sur l'ordinateur Anton, élaboré par D. W. Shaw Research, ce calcul informatisé nécessiterait  $10^4$  jours<sup>7</sup>. En supposant que la loi de Moore sur les simulations de dynamique biomoléculaire soit applicable (la loi empirique affirmant qu'il y a un doublement de la puissance chaque année.<sup>8</sup>), ce grand défi serait accessible seulement en 2025 environ.



© Inria / Projet SCALAPLIX

*Calcul scientifique haute performance appliqué à la chimie moléculaire.*



© Inria / ASCLÉPIOS / Photo Kalkonen

*Cube immersif : déplacement virtuel au sein du cerveau.*

Bien que les simulations de dynamique moléculaire soient capables de fournir une description précise des constituants cellulaires et de leurs interactions, il est peu probable que les mêmes techniques puissent être étendues pour modéliser une cellule, même celle de la plus petite bactérie avec seulement 525 gènes, par rapport à *E. coli*, qui compte 4 377 gènes. Les simulations à gros grains<sup>9</sup> cependant, peuvent réduire ce problème à un grand défi, particulièrement si elles sont utilisées pour compléter les modèles d'équations différentielles basés sur des données expérimentales.<sup>10</sup>

Par contre, une simulation de dynamique moléculaire du modèle de protocellule proposé par Szostak *et al.*<sup>11</sup> présente véritablement un grand défi. Cette protocellule est une vésicule lipidique contenant un génome ARN capable de s'auto-reproduire, qui encode une information transmissible. Elle se trouve dans un environnement complexe consistant en des nucléotides devant être incorporés dans le génome, des lipides pour augmenter la membrane de la vésicule et diverses sources d'énergie. Il serait intéressant de modéliser ce système à travers le cycle de croissance d'une vésicule de la cellule, comprenant la duplication du génome et la reproduction pour former deux vésicules filles. Le système d'expérimentation minimal est d' $1\mu\text{m}$  en dimension et composé de  $10^9$  acides gras formant la membrane de la vésicule,  $10^8$  nucléotides ARN et  $10^{10}$  atomes formant l'eau et d'autres petites molécules, y compris les sources d'énergie et les réactifs osmotiques. Les expériences indiquent qu'il serait nécessaire de simuler une minute réelle par cycle. Selon la loi biologique de Moore, on atteindrait la puissance informatique pour effectuer la simulation de ce grand défi en 2050 environ.

### CONCLUSION

En résumé, j'espère que ces exemples donneront au lecteur une idée des grands défis de la bio-informatique. Bien sûr, il en existe beaucoup d'autres, comme ceux posés par les « mégadonnées » découlant du

séquençage génomique d'un échantillon de population d'un pays donné et les informations nécessaires pour modéliser des organes, tels que le cœur humain. Les défis constants ont été reconnus par les *National Institutes of Health* (États-Unis), qui ont créé douze centres financés par le programme *Big Data to Knowledge Initiative*. Il est clair que les progrès dans ce domaine dépendent pour une large part de la puissance informatique disponible pour la recherche. Est-ce trop d'espérer que les limites posées par la loi de Moore puissent être supplantées ? ■

### Références :

- 1. K. Deisseroth, Controlling the brain with light, *Scientific American* 303, 48-55 (2010).
- 2. N. Vladimirov *et al.*, Light-sheet functional imaging of infectivity behaving zebra fish, *Nature Methods* 11, 883-884 (2014).
- 3. S. V. Krivov and M. Karplus, Diffusive Reaction Dynamics on Invariant Free Energy Profiles, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 105, 13841-13846 (2008).
- 4. Voir par exemple les articles dans *Biomedical Computational Review* 11, issue 1, (2014/2015).
- 5. A. J. Butte, Translational Bioinformatics: Coming of Age, *JAMIA* 15, 709-714 (2008).
- 6. C.K. Fischer, A. Huang, and C.M. Stultz, *J. Am. Chem. Soc.* 132, 14919-14927 (2010).
- 7. D. E. Shaw *et al.*, Anton, A Special Purpose Machine for Molecular Dynamics Simulations, *Comm. of the ACM* 51, 91-97 (2007).
- 8. M. Vendruscolo and C. M. Dobson, Moore's Law, *Molecular Biology* 21, R68-R70 (2010).
- 9. J. R. Karr *et al.*, A whole-cell computational model predicts phenotype from genotype, *Cell*, 150, 389-401 (2012).
- 10. S. R. McGuffee and A.H. Elcock, Diffusion, Crowding and Protein Stability in a Dynamic Molecular Model of the Bacterial Cytoplasm, *PLoS Comp. Biol.* 6, 1000694 (2010).
- 11. S.S. Mansy *et al.*, Template-directed synthesis of a genetic polymer in a model protocell, *Nature* 454, 122-126 (2008).

# TECHNOLOGIES NUMÉRIQUES POUR LA FILIÈRE DU VÉGÉTAL

## Xavier Beulin

Président, groupe Avril  
Président de la Vallée numérique du végétal

## Christian Saguez

Président, CybeleTech

La filière du végétal est aujourd'hui confrontée à des défis majeurs qui vont profondément modifier à la fois les pratiques et le rôle de tous les acteurs :

- La nécessité d'accroître en quantité (de 50 % à l'horizon 2050) et en qualité la production pour satisfaire aux besoins de la population mondiale mais aussi aux besoins en matières premières pour l'industrie de la transformation et pour exploiter les nouveaux usages ;
- La prise en compte de l'ensemble des contraintes environnementales essentielles pour assurer compétitivité et durabilité :
  - Changement climatique
  - Réduction de l'usage des différents intrants
  - Gestion adéquate des ressources naturelles notamment de l'eau ;
- La compétitivité et la pérennisation des exploitations agricoles.

Face à ces challenges, les technologies numériques apportent un ensemble d'outils et de méthodes capables de fournir des solutions innovantes et efficaces :

- Les outils de mesure, capteurs, imagerie (satellites, drones..) permettent de disposer d'une masse considérable de données et d'informations associées aux nouvelles méthodes d'analyse et de fouilles de données ;
- La disponibilité de modèles prédictifs pour tout le cycle de la plante qui, associés à des méthodes numériques de simulation et d'optimisation, apportent des outils efficaces de prévision et d'aide à la décision ;
- Les capacités considérables de calcul avec la généralisation du parallélisme associé aux réseaux de communication permettant un accès de plus en plus aisé et global notamment via les technologies du « Cloud Computing ».

Par analogie avec la révolution qu'a connue l'industrie manufacturière avec l'usage de ces outils tout au long du cycle de vie des produits, la réunion de ces deux points, challenges et technologies, donne naissance aux concepts d'agriculture numérique et de PLM du végétal permettant dans une approche systémique globale et cohérente d'apporter des solutions adéquates pour l'ensemble des espèces et des secteurs. Cette approche peut être schématisée par la figure 1.

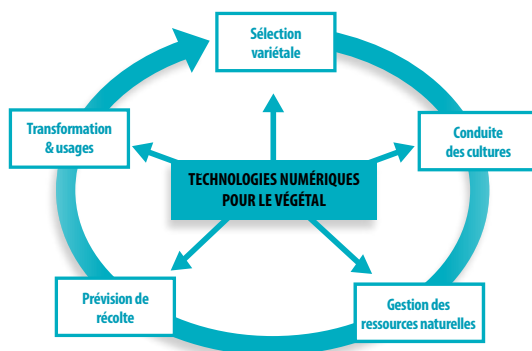


Figure 1. Technologies numériques et cycle de vie du végétal.

### UNE INITIATIVE FÉDÉRATRICE « LA VALLÉE NUMÉRIQUE DU VÉGÉTAL »

Réunir l'ensemble des acteurs (filrière du végétal, fournisseurs de technologies, recherche académique) afin de développer et maîtriser les technologies numériques nécessaires, de promouvoir leurs usages, d'offrir les outils et services et d'assurer la formation, en étant la vitrine française des technologies numériques pour le végétal. Tel est l'objectif de cette initiative. Installée sur l'agglomération d'Orléans au cœur de la première région agricole de France sur un campus de 10 ha, elle réunira industriels, laboratoires et stations expérimentales autour d'une ambitieuse roadmap technologique couvrant l'ensemble des cultures avec de grands projets collaboratifs. Ces technologies seront développées en partenariat avec Teratec pour l'accès aux grandes puissances de calcul.

Dès 2014, deux projets importants ont été lancés :

- Le projet **Smart Agriculture System** FUI 17, co-labelisé par les pôles de compétitivité Végépolys, Céréales Vallée et DREAM. L'objet est la conception et le développement d'un système de prévision de rendement et d'aide à la décision par modélisation dynamique au niveau parcellaire, avec application à la culture du blé.

- Le projet **PALM-Product of Agriculture Life-cycle Management** AAP « Calcul intensif et simulation numérique » du PIA et du plan industriel « Supercalculateurs ». L'objectif du projet est la mise en place des premières phases du PLM sur trois cultures blé, maïs et colza.

### CONCLUSION

Les technologies numériques sont amenées à jouer un rôle central face aux défis de la filière du végétal. La maîtrise de ces technologies est au cœur d'enjeux économiques majeurs en France en termes de développement économique, de création d'emplois et de valeur, mais aussi de pérennité de la filière. Quelques chiffres illustrent ces points :

L'agriculture représente 750 000 emplois soit 3,3 % de la population active et l'agro-alimentaire 690 000 emplois soit 2,3 % de la population active.

L'ensemble « agriculture et industries agro-alimentaires » représente 3,5 % du PIB avec 231 milliards d'euros et une deuxième place au niveau européen derrière l'Allemagne. L'agriculture française est le deuxième secteur excédentaire avec une balance commerciale positive de 12 milliards d'euros.

Cependant cette position est actuellement très fragile. Or la France réunit l'ensemble des compétences et des acteurs pour relever ces défis et rester un des tout premiers acteurs mondiaux. Soyons certains qu'elle saura saisir cette opportunité. ■



# BIG DATA, BIG SCIENCE, SMART MEDICINE ?

## François Sigaux

Directeur de l'institut thématique multiorganismes "Cancer" d'Aviesan et directeur de la recherche et de l'innovation de l'Inca (Institut national du cancer)

## Thierry Damerval

Directeur général délégué de l'Inserm

La biologie du XXI<sup>e</sup> siècle connaît aujourd'hui une évolution méthodologique et conceptuelle peut-être de même ampleur que celle que la physique a connue au début du XXI<sup>e</sup> siècle. L'essor de la biologie moléculaire au cours des quarante dernières années a bouleversé les approches et les capacités d'analyse et de compréhension du vivant. Depuis une vingtaine d'années, le développement des méthodes d'acquisition globales et rapides (séquençage de génomes, génomique, protéomique ou OMICs) a conduit à une production considérable de données, dont la majeure partie reste à analyser. L'EBI (European Bioinformatics Institute), l'une des principales banques de données contient aujourd'hui plus de 20 petabytes de données de séquences de gènes, de génomes et de protéines. La quantité de données génomiques y fait plus que doubler chaque année.

Ce développement des technologies de stockage, de partage des données et de leur structuration et analyse, est susceptible de modifier profondément la médecine et le domaine de la santé et du bien-être. Ainsi, en médecine diagnostique et thérapeutique, s'ajoutent à présent, aux acteurs classiques que sont le médecin et le patient, deux avatars numériques

que l'on pourrait appeler médecin et patient digitaux. Ils interagissent en extrayant des bases de connaissances des aides à la décision partagée tant pour le diagnostic que pour la prise en charge thérapeutique. Dans le domaine de la santé publique et du bien-être, les informations fournies par les objets connectés et les traces laissées *via* le web dans les forums contribuent à créer une partie spécialisée de l'être digital. Ces avatars sont tout à la fois des sources inestimables d'information pour la santé publique et individuelle et des sources de questionnements légitimes éthiques et réglementaires. Dans cette perspective, nous discuterons certains des points qui devraient façonner le futur dans ce contexte.

### UNE DIVERSIFICATION CROISSANTE DES SOURCES DE DONNÉES DU DOSSIER DIGITAL DE SANTÉ

Actuellement le dossier digital de santé, mis en place par certains établissements de soins, ne comporte généralement que quelques informations structurées administratives et parfois diagnostiques, des données de biologie et d'imagerie, et des listes d'actes diagnostiques et thérapeutiques. La Caisse Nationale de l'Assurance Maladie a mis en place des

bases de données dont le SNIIRAM (Système national d'information inter-régimes de l'Assurance maladie) qui à l'échelon individuel (données nominatives) ou collectives (données anonymes) ne comporte aussi que quelques éléments et exclue notamment les résultats des examens cliniques et paracliniques. Les démarches actuelles de soins, et notamment celles qui touchent à la médecine personnalisée (ou de précision), ont démontré l'importance de la construction de bases de données collectives anonymes d'informations numériques. On peut ainsi y projeter le contenu du dossier digital d'un patient donné afin d'appliquer des algorithmes d'aide à la décision. Avec son accord, on peut aussi intégrer ce dossier dans ces mêmes bases, enrichissant ainsi la connaissance et la qualité des algorithmes. Dans ce concept, les données du plus grand nombre sont utiles pour la prise en charge individuelle. Il apparaît critique d'harmoniser, d'amplifier et de diversifier les données du patient digital. Les données de la génomique et des autres approches qui en dérivent (OMICs) constituent une source majeure d'information dont le coût de réalisation est rendu accessible par des évolutions technologiques majeures. Dans certaines disciplines médicales, comme la cancérologie, la production des OMICs est considérable et pourrait constituer dans les années proches plusieurs centaines de péta-octets par an. La diffusion en population générale, des objets connectés de monitoring des paramètres de santé pourrait également constituer des sources majeures d'information notamment si leur enregistrement continu était mis en place. Cette diversification croissante des données pose la question de leur recueil et de la définition d'ontologies nécessaires à l'interopérabilité. Ce glissement progressif de la maladie vers la santé induit donc des changements d'échelle et de complexité des Big Data.

### **UNE IMPORTANCE CROISSANTE DE LA BIG SCIENCE ET DU MAINTIEN DE LA RELATION MÉDECIN MALADE POUR UNE MÉDECINE INTELLIGENTE, PERSONNALISÉE ET ÉTHIQUE**

La vision défendue par certains acteurs du marché selon laquelle la simple « lecture » des données

digitales, (et ce éventuellement par le patient lui-même), pourrait apporter des informations utilisables dans les situations complexes que sont les maladies, apparaît illusoire et difficile à tenir sur le plan éthique. La valorisation médicale de ces données ne peut se faire sans une profonde compréhension de leur signification. Elle demande le développement des sciences computationnelles afin d'établir des algorithmes d'aide à la décision médicale partagée entre le médecin et le malade, constituant une sorte de Big Science en santé. Ces algorithmes, issus notamment de la biologie des systèmes, tireront parti de la globalisation des bases de données, chaque patient étant vu comme une perturbation du système par une expérience malheureuse de la nature, sa maladie. La validation de ces algorithmes nécessite un aller-retour avec des modèles biologiques et la confrontation avec l'histoire naturelle clinique d'un grand nombre de patients. Elle tire parti aussi de la confrontation des données du patient digital avec la modélisation multi-échelle du vivant qui offre la possibilité théorique de prédire *in silico* les conséquences des perturbations du modèle par des thérapeutiques. C'est par exemple un des objectifs du programme européen Human Brain Project.

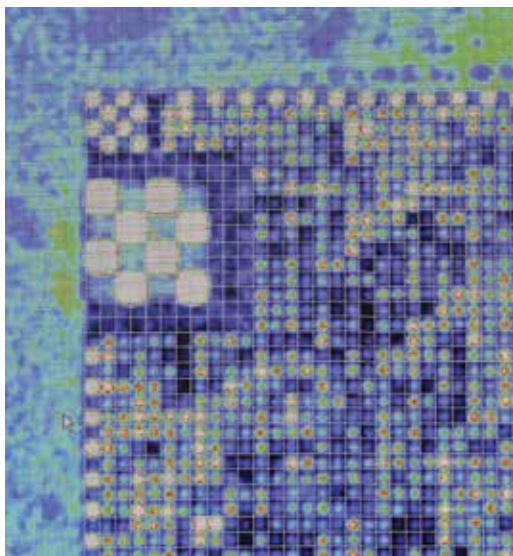
### **UN RENFORCEMENT DES LIENS ENTRE L'IMAGERIE, LA PATHOLOGIE ET LA THÉRAPEUTIQUE À L'OCCASION DU CHANGEMENT D'ÉCHELLE VERS LES NANOTECHNOLOGIES**

L'échelle à laquelle sont vues les données est critique pour « de-pixeler » le portrait de certaines maladies. Ainsi, lorsque les anomalies sont topographiquement limitées (comme dans une tumeur ou une plaque d'athérome), l'échelle d'analyse est critique pour la capture de l'information. L'analyse non invasive des lésions est un objectif crucial tant pour des raisons éthiques que médicales. À ce jour les techniques d'imagerie *in vivo* (au sens large) sont de l'ordre du millimètre. Le caractère hétérogène des lésions, dont l'influence est critique sur le diagnostic et la thérapeutique, demande des analyses à l'échelle micro-métrique. Elle ne peut être abordée actuel-



lement que par l'anatomopathologie pratiquée sur des prélèvements et donc ex-vivo. Le développement des nano-technologies devrait ouvrir une voie à une imagerie multimodale à cette échelle. Le couplage à des thérapeutiques, également multimodales et ciblées, pourrait se faire via les nano-objets. Cette nouvelle approche, que l'on pourrait appeler, la nano-pathologie interventionnelle pourrait être le socle d'une nouvelle discipline médicale à la frontière de l'imagerie, de l'anatomo-pathologie, de la clinique et des sciences computationnelles. Sa mise en œuvre, au-delà des verrous techniques, demandera un profond changement des filières médicales dans une vision pluridisciplinaire.

La conjonction des Big Data et de la Big Science en santé a très probablement le potentiel d'induire une rupture dans la pratique médicale et la santé publique. Ceci ne sera possible que si les enjeux techniques, sociétaux, économiques et éthiques sont abordés d'une façon intégrée et sont remis dans le contexte de la dimension internationale qui leur convient. ■



*Scan d'une puce à ADN mise sous fluorescence pour identifier le génotype de tous les marqueurs*  
© Inserm/P. Delapierref.



**Bernard Charlès,**  
**Administrateur-directeur général,**  
**Dassault Systèmes**

### **Quels sont les principaux enjeux du HPC aujourd'hui dans votre domaine ?**

Le calcul haute performance est une ressource précieuse et durablement nécessaire pour nous et pour nos clients. En effet notre mission est de rendre possible l'innovation durable, au travers des univers 3D. Mais l'idée même d'innovation a été complètement transformée parce que le monde est entré dans l'économie de l'expérience : l'expérience que l'on vit avec un produit a plus de valeur économique que le produit lui-même !

Chacun s'en rend compte tous les jours avec nos téléphones intelligents ou quand nous disposons à domicile ou au bureau d'un café express que nous n'avions jadis que dans des lieux spécialisés. Cette démocratisation des produits, leur accessibilité au plus grand nombre, engendre une dynamique formidable d'innovation. Nos clients qui imaginent et réalisent ces produits et services (qui s'inscrivent progressivement dans une logique plus durable) embrassent désormais l'idée de modéliser, évaluer et simuler un avion, une voiture ou un train, au sein d'univers virtuels, avant de passer dans le réel. La 3D leur apporte une réelle valeur ajoutée de qualité, de sûreté, de coûts et d'esthétique pour leurs propres clients ou consommateurs. Faire bien du premier coup dans le réel n'est possible qu'en réalisant un prototype virtuel, un "jumeau numérique", qui ouvre la voie à l'expérience virtuelle. On est en train de constituer ainsi un véritable patrimoine numérique, dont le calcul haute performance nous permet d'avoir une approche englobante – "panoptique" en quelque sorte. L'imaginaire des possibles s'en trouve décuplé.

>>>



**Bernard Charlès,**

**Administrateur-directeur général, Dassault Systèmes**

---

>>> Le calcul haute performance est un catalyseur dans la conception et la simulation de systèmes complexes, manufacturés ou vivants. Et si nous sommes devenus le numéro un mondial de la 3D pour les sciences de la vie, c'est qu'il y a là un avenir extraordinaire pour la compréhension des phénomènes biologiques et la mise au point de traitements ciblés et personnalisés. Le calcul haute performance est essentiel pour réaliser des simulations multi-échelle, depuis la macro jusqu'au nano – l'échelle moléculaire. Le propre de l'être humain est de vouloir comprendre, transmettre, imaginer et réaliser. Décoder les phénomènes et les représenter devient possible à une nouvelle échelle de compréhension grâce à ces évaluations.

#### **Quel futur pour le HPC ?**

L'expérience 3D, c'est le design, la modélisation, la visualisation, l'intelligence des données, l'innovation collaborative... Nous avons besoin de haute performance sur l'ensemble de cette chaîne, pas seulement sur le calcul et l'exécution, mais aussi les algorithmes, les applications, le stockage, le réseau... Il faut automatiser et industrialiser le traitement de la boucle entre la conception et le calcul. Le calcul haute performance doit prendre la mesure de la révolution qui se passe dans les technologies, la science et les usages. Il doit prendre la dimension holistique de l'expérience.

#### **Quelles sont les attentes et les ruptures ?**

Cela veut dire que le calcul haute performance doit devenir aussi une expérience et penser à l'utilisateur

final. Son avenir d'usage est de devenir transparent. C'est la science qui sous-tend le monde, mais l'utilisateur n'a pas besoin de la connaître. Celui qui fait une commande sur Amazon ne connaît pas les formules des calculs qui vont permettre sa livraison. C'est ce qui permettra la démocratisation. Les PME pensent métier, elles achètent de l'expertise, pas du calcul. C'est pour cela que le calcul haute performance doit s'intégrer aux architectures Cloud.

#### **Quel est l'impact du HPC sur votre métier ?**

Réduire les temps de calcul, accroître la précision des simulations et optimiser techniquement et économiquement les produits. En tant qu'éditeur, nous attendons un langage de haut niveau pour des développements rapides et fiables. On imbriquera de plus en plus le développement de l'application et l'architecture informatique.

Permettre au plus grand nombre d'entreprises, d'entrepreneurs et d'inventeurs d'accéder au calcul haute performance est un levier économique essentiel pour aborder l'innovation dans des territoires où les principes de sécurité peuvent être rompus. Quand l'innovation se fonde sur ces "jumeaux numériques", le monde virtuel améliore le monde réel. C'est donc un facteur stratégique de croissance. ■



# LE CALCUL AU SERVICE DE LA MAÎTRISE DES RISQUES FINANCIERS

David Sibai

Ingénieur financier  
Recherche Quantitative Global Markets, BNP Paribas

L'essor de la finance de marché ces 30 dernières années s'est accompagné d'un développement rapide des mathématiques financières, et plus généralement d'outils quantitatifs et informatiques sophistiqués permettant de valoriser des produits financiers complexes, à des horizons de temps les plus courts possibles. Dans ces conditions, la concurrence importante entre les acteurs des marchés financiers, les montants en jeu, ainsi que la nécessaire gestion des risques ont logiquement fait de la finance un des secteurs d'applications privilégiés du *High Performance Computing* (HPC). Mais qu'entendent donc les financiers lorsqu'ils parlent de HPC, et qu'en font-ils ?

Le problème le plus consommateur en calcul, et qui a motivé dans une large mesure le développement du HPC en finance est celui de la valorisation et la couverture des produits dérivés. Un produit dérivé est un produit dont la valeur dépend d'un autre actif, appelé le sous-jacent. Par exemple, un contrat dans lequel un vendeur – disons un vendeur de blé – s'engage

auprès d'un acheteur à lui vendre son blé à une date fixée à l'avance mais à un prix déterminé aujourd'hui, est un produit dérivé appelé un future. Le produit est dit dérivé sur le blé, et il se pose alors deux questions assez naturelles : à combien doit-on vendre ou acheter un tel produit ? Quel est le risque associé ? Si le future est un produit très simple, obtenir la réponse à ces deux questions pour des dérivés complexes peut devenir rapidement difficile, et nécessiter des développements mathématiques et informatiques importants.

Pour les produits les plus complexes, c'est la méthode de Monte-Carlo qui est la plus fréquemment utilisée : on simule les trajectoires des sous-jacents (actions, taux, etc.) jusqu'à la maturité du produit – la date fixée à l'avance dans l'exemple précédent. En effectuant un grand nombre de simulations, on obtient alors une bonne estimation de la valeur du produit. Afin de gérer les risques au mieux, on va ensuite estimer les « grecques », la sensibilité de la valeur du contrat par rapport aux paramètres de marché, et simuler des conditions des marchés extrêmes afin de déterminer

le niveau de risque auquel est exposée la banque. La méthode de Monte-Carlo se parallélisant parfaitement et offrant une grande souplesse, les banques se sont dotées de fermes de calcul disposant de plusieurs dizaines de milliers de cores.

Le HPC en finance ne se limite évidemment pas au Monte-Carlo pour la valorisation de produits complexes : une importante classe de problèmes, pour des produits souvent plus simples, est celle de la résolution d'équations aux dérivées partielles du même type que l'équation de la chaleur. Bien évidemment, si la méthode mathématique est différente, la finalité est la même : le grand nombre de contrats et la gestion des risques nécessitent de résoudre des millions d'équations. En pratique, le nombre d'équations à résoudre est trop important pour être calculable sur un seul ordinateur, et les financiers distribuent donc les calculs sur une grille.

L'infrastructure de calcul, généralement des serveurs classiques dans des Data Centers, a bien évidemment un coût, et afin de lutter contre leur inflation et éventuellement contourner certains problèmes de performance, les acteurs des marchés se sont plus récemment tournés vers les GPU (Graphics Processing Unit). BNP Paribas a par exemple été le précurseur sur le sujet, en les utilisant en production dès 2009. Les GPUs, qui ne sont autres que les puces graphiques utilisées par les jeux vidéo, sont également de formidables machines à calculer, pour un coût matériel bien moindre, même si le coût humain de développement et maintenance tend à limiter ce gain.

Au côté des produits dérivés, on trouve également le domaine du trading algorithmique où ce sont des programmes, et non plus des opérateurs humains qui achètent et vendent. La nécessité d'obtenir et traiter l'information rapidement des bourses, pour pouvoir réagir plus vite que ses concurrents conduit à la très large utilisation de matériel très performant : matériel spécialisé

(FPGA /ASIC) pour traiter les flux d'information en provenance des bourses, ou encore fibres optiques sur des géodésiques – le plus court chemin entre deux points sur une sphère. Plus récemment, l'usage des tours à micro-ondes à la place de la fibre optique pour transmettre les données de marché s'est répandu afin de se rapprocher de la vitesse de la lumière et de gagner de précieuses micro-secondes.

La finance est un terrain propice au HPC : les problèmes sont variés, le besoin en calcul important, et les acteurs sont innovants et enclins à essayer de nouvelles technologies. Un partenariat récent entre BNP Paribas et une startup française illustre bien cette recherche constante d'innovation : en installant des radiateurs cachant des serveurs dans des bâtiments d'habitations, on peut utiliser la chaleur produite par les serveurs pour chauffer le bâtiment, et du coup ne pas gaspiller d'énergie à climatiser un Data Center classique, tout en réduisant ses émissions carbone. Le HPC devient donc *green HPC*. ■



*Traders dans une salle de marché.*

© Oil Industry News

# LE HPC : RÉPONDRE À L'EXIGENCE DE QUALITÉ POSÉE PAR L'ANIMATION

Farchad Bidgolirad

Responsable R&D CGI, UBISOFT

Ubisoft figure parmi les leaders mondiaux de la création, édition et distribution de jeux vidéo et de services interactifs. Le groupe possède un riche portefeuille de marques de renommée internationale telles que Assassin's Creed, Just Dance, Rayman, Far Cry, Watch Dogs ... En 2011, Ubisoft Motion Pictures est créé, pour adapter au cinéma et à la télévision des histoires comme celle des Lapins Crétins. Issus à l'origine du jeu « Rayman contre les Lapins Crétins » publié en 2006, ceux-ci évoluent rapidement en une franchise à part entière.

La saison 1 de « Lapins Crétins Invasion » a été créée en collaboration avec TeamTO, studio d'animation indépendant. Cette première expérience en termes de série pour Ubisoft a été un succès mondial de plus de 5 millions de vues, grâce à une très large diffusion sur France Télévision et Nickelodeon à l'international. Entièrement « made in France », la série est aujourd'hui le numéro un des émissions de jeunesse en France et aux États-Unis.

Sur la saison 2, nous avons internalisé la quasi-totalité de la fabrication, seule la phase d'animation étant réalisée par TeamTO. Nous avons ainsi développé notre propre moteur de rendu, un « Path Tracer » qui permet de calculer les images de la série. La qualité des images calculées nécessite non seulement des données 3D et des textures de grande qualité, mais aussi l'utilisation d'algorithmes de rendu très poussés, preuve d'un véritable changement d'échelle dans les volumes de données et la complexité des calculs. L'utilisation des algorithmes de simulation pour des effets comme la fumée ou la simulation des vêtements est un autre facteur de complexité qui vient encore ajouter à la puissance de calcul requise.

Cette complexité était réservée jusqu'au à au cinéma. Mais avec l'arrivée des écrans HD et bientôt Ultra HD, ce niveau de qualité est également requis pour les séries d'animation. Il faut dire que les téléspectateurs, qui prennent pour référence les films d'animation, ont des exigences de qualité de plus en plus élevées.

La série « Lapins Crétins Invasion » est composée de 78 épisodes de 7 minutes par saison ; par épisode il faut donc compter 7 minutes X 60 secondes X 24 frames par seconde, soit 10 000 frames par épisode. Sachant qu'en moyenne chaque frame nécessite 30 minutes de calcul sur un nœud de rendu 20 VCPU, ce simple calcul montre que sur une station de travail classique, il faudrait plus de 44 années pour calculer la série une fois ! Aujourd'hui, il nous faut 3 jours pour réaliser le rendu d'un seul épisode.

Par ailleurs nous avons une grosse base de données de fichiers. Sur la saison II nous avons créé 18 décors avec jusqu'à 100 millions de triangles et 200 GB de textures par décors. À ceci s'ajoutent les personnages et les objets... Les besoins en espace disque se comptent donc en plusieurs dizaines de Térabits. Sollicités par les nœuds de calcul pendant le rendu d'images, les serveurs de disques doivent être à très haute performance.

Dans ce contexte, les fermes de calcul ne suffisent plus, mais le Cloud Computing apporte véritablement des solutions. En effet, comment gérer des pics d'activité sans être obligé d'investir dans de l'équipement pour une courte durée ? Comment ajouter de la puissance supplémentaire alors que la salle des machines est pleine ? Ou que la puissance n'est pas suffisante ? Comment stocker les Térabits de fichiers insérés dans les épisodes ?

C'est pour répondre à ces besoins qu'Ubisoft possède des infrastructures adaptées, qui sont mutualisées entre les projets de séries et de jeux. Ce Cloud privé de plusieurs milliers de CPU repose sur la technologie OpenStack, qui est la base d'un grand nombre d'initiatives de Cloud dans l'industrie. Grâce au Cloud, les ressources – aussi bien la puissance de calcul que l'espace de stockage – peuvent être gérées à distance et partagées entre les différents projets d'Ubisoft. Sur la série des Lapins, nous pouvons donc exploiter



© Ubisoft

une puissance de calcul bien supérieure à ce que nous aurions à notre disposition si chaque projet se voyait attribuer son propre matériel, en s'organisant avec d'autres projets pour utiliser les machines dans leur temps d'inactivité et vice-versa.

Par ailleurs, nous continuons à travailler sur nos outils, notamment notre moteur de rendu. Nous voulons proposer encore plus de fonctionnalités et faire en sorte que nos outils puissent être utilisés sur d'autres projets (films et jeux) au sein d'Ubisoft. Nous voulons également travailler sur l'optimisation du calcul distribué de rendu et de la bande passante au sein du Cloud. Le calcul d'images est un processus qui a toujours existé avec l'industrie de l'animation – Toy Story fête ses 20 ans cette année ! – et qui ne cessera de croître en termes de puissance requise, afin de satisfaire des exigences de qualité toujours plus élevées. ■■



**Jim Cashman**

President & CEO, Ansys

#### Quelle est votre définition du HPC ?

Le HPC peut être défini chez Ansys comme un effort continu pour repousser les limitations de l'informatique et des sciences de la simulation pour les ingénieurs, et pour leur fournir de réelles expériences numériques haute performance traitant de bout en bout leurs problématiques, internes sur site ou sur le cloud et avec un degré de parallélisme et de scalabilité toujours croissant.

Le HPC est un élément déterminant pour le présent et le futur de la simulation pour l'ingénierie. Il permet à nos clients les plus avancés de prédire de manière très fidèle le comportement de leurs produits, ce qui ne pourrait être obtenu sans des modèles de simulation détaillés – incluant plus de détails géométriques, des systèmes plus importants, et des physiques plus complexes. Lorsqu'il est utilisé pour explorer comment le design d'un produit va se comporter dans un éventail de conditions de fonctionnement réelles, le HPC peut aider à concevoir un produit plus robuste, avec des coûts de garantie et de maintenance réduits.

#### Quels sont les principaux défis du HPC d'aujourd'hui dans votre domaine ?

Bien que les constantes améliorations matérielles et logicielles aient déjà permis au HPC d'offrir des gains significatifs aux utilisateurs de simulation, d'importants défis demeurent pour s'assurer que chaque entreprise déploie correctement le HPC pour obtenir le plus fort retour sur investissement. >>>



**Jim Cashman**

President & CEO, Ansys

>>> Pour les petites entreprises, spécifier, acquérir et gérer des ressources HPC peut représenter un apprentissage important et nécessiter l'embauche de nouvelles compétences. Ansys les aide à relever ces défis de deux façons :

- Développement d'un écosystème de partenaires d'hébergement Cloud qui fournissent l'infrastructure HPC et des services pour accroître rapidement les capacités de calcul de l'entreprise.

- Développement avec des partenaires (Fujitsu, Lenovo et HP), de clusters HPC prêts à l'emploi, optimisés et pré-configurés pour les logiciels d'Ansys.

Dans les entreprises plus importantes, les ressources HPC centralisées sont souvent partagées par les utilisateurs géographiquement distants - créant une foule de questions telles que le transfert de fichiers, l'accès à distance et la visualisation, la gestion des données, la collaboration et la sécurité.

#### **Quel avenir pour le HPC ?**

L'avenir du HPC sera brillant ! De plus en plus de clients recherchent des moyens pour intensifier leurs capacités HPC afin de réaliser des simulations plus rapides, plus importantes et plus nombreuses.

Tout d'abord, l'industrie informatique continue d'offrir d'énormes augmentations de vitesse de calcul et de puissance à des coûts toujours plus bas. Le poste de travail moyen que vous pouvez utiliser aujourd'hui est équivalent en termes de puissance au cluster HPC d'entrée de gamme d'il y a quelques années. Bien que la capacité de calcul ait augmenté d'un millier de fois au cours de la dernière décennie,

l'informatique haute performance est maintenant à la portée de plus en plus d'équipes d'ingénierie, notamment via le Cloud Computing qui en rend l'accès encore plus facile. Aujourd'hui, des simulations parallèles utilisant 128/256 cœurs sont de plus en plus communes et il y a une demande croissante pour utiliser des milliers de cœurs. Des entreprises telles la NASA ou Airbus expriment leurs exigences "d'extrême scalabilité" pour traiter leurs énormes modèles de simulation de moteurs d'avions complets, ou de mécanique des fluides basés sur l'acquisition en temps réel de paramètres lors d'un vol. De son côté, le fabricant d'emballage Tetra Pak veut être en mesure de résoudre des problèmes avancés de stérilisation avec des modèles de simulation des grandes échelles (Large Eddy Scale Simulation) fonctionnant sur 10 000 à 100 000 cœurs !

Comme nous nous sommes engagés à offrir des performances et des capacités HPC afin d'amener nos clients à des niveaux plus élevés de fidélité de simulation et d'innovation, nous continuerons à nous concentrer sur les développements de logiciels pour le HPC et des partenariats adressant les thématiques suivantes :

- Optimisation continue de notre logiciel. Pour cela, nous travaillons en étroite collaboration avec les fournisseurs de processeurs tels Intel et NVidia pour l'adéquation des charges de simulation avec les ressources informatiques.

- Extension du parallélisme et de l'utilisation des performances du HPC dans tous les aspects du processus de simulation - du maillage et de la configuration de la gestion des fichiers, à la visualisation et aux techniques d'optimisation automatisées.



---

- Partenariats en Supercomputing. Nous travaillons en étroite collaboration avec les centres de HPC pour tester notre logiciel dans des conditions "extrêmes".

#### **Quelles sont les attentes et les menaces vis-à-vis du HPC ?**

Les attentes vis-à-vis du HPC sont importantes, car le HPC est aujourd'hui sans aucun doute un facteur clé pour l'innovation scientifique et industrielle. Le HPC permet des simulations « haute-fidélité » (simulations sur des modèles plus importants, simulations plus détaillées, plus précises, plus complètes et au niveau du système global), ce qui est essentiel pour les entreprises qui comptent sur la simulation pour accélérer leur innovation produit. Le HPC facilite aussi l'exploration de multiples concepts, conduisant à l'identification plus rapide des conceptions optimisées et plus robustes, rendant ainsi le processus d'ingénierie plus productif. Il est clair que les multinationales qui investissent dans le HPC sont celles qui, au fil du temps, ont le plus grand avantage concurrentiel et les meilleurs résultats économiques. D'où la ruée actuelle pour investir dans les systèmes HPC de pointe dans le monde entier.

Il est évident que les États-Unis et l'Europe sont "menacés" par des concurrents mondiaux faisant d'énormes investissements. Parmi ces nouvelles puissances économiques, la Chine et l'Inde ont des programmes de HPC très ambitieux, et investissent d'énormes sommes d'argent public sur ces infrastructures. À mon avis, les États-Unis et l'Europe doivent saisir ces défis comme une occasion d'investir pour leur avenir en développant de nouvelles technologies HPC, en exploitant les synergies avec d'autres

domaines, en développant des installations de pointe, en formant des spécialistes, et en faisant la promotion d'applications innovantes du HPC.

Comme le paysage HPC est en pleine évolution, les économies qui s'adapteront le plus vite seront celles susceptibles d'en retirer les plus grands avantages.

#### **Quelles sont vos recommandations pour la maîtrise et l'utilisation du HPC ?**

Gérer et utiliser du HPC n'est pas simple. Dimensionner, construire, intégrer, gérer et supporter une infrastructure de cluster requiert une expertise informatique spécialisée qui fait souvent défaut aux utilisateurs de logiciels de simulation. C'est pourquoi nous proposons avec des partenaires stratégiques (tels Intel, Fujitsu, HP et Lenovo) de rendre la spécification et le déploiement des systèmes HPC plus facile pour nos clients.

#### **Évolution de la profession ?**

Le HPC est si dynamique et le paysage informatique change si rapidement qu'il est essentiel que les éditeurs de logiciels de simulation évoluent au même rythme afin que les industriels puissent profiter des technologies HPC et élargir le spectre de ce qu'ils peuvent accomplir avec la simulation.

Maintenant plus que jamais, nos clients sont capables de s'attaquer à des challenges uniques et des simulations complexes. Plus que jamais, Ansys est déterminé à toujours accroître les performances du HPC pour maximiser les retours sur investissement de nos clients dans la simulation. ■

# LA FUSION CONTRÔLÉE ET UN MONDE D'ÉNERGIE PROPRE

**Hervé Guillard**

Directeur de Recherche Inria Sophia Antipolis – Méditerranée, Univ. Nice Sophia Antipolis, LJAD, CNRS UMR 7351

**Philippe Helluy**

Professeur, équipe-projet TONUS

Univ. de Strasbourg, Inria Nancy – Grand Est, IRMA, CNRS UMR 7501

L'utilisation des énergies fossiles conduit à des changements climatiques dont les conséquences économiques et environnementales ne peuvent plus être ignorées. La recherche de sources d'énergies alternatives revêt donc une importance capitale. La fusion contrôlée, dans laquelle l'énergie est produite par la fusion de deux isotopes d'hydrogène au sein d'un plasma porté à une température de l'ordre de la centaine de millions de degrés, est une de ces alternatives les plus prometteuses. Les principes du confinement magnétique pour réaliser un réacteur à fusion remontent aux travaux d'Andrei Sakharov et d'Igor Tam dans les années 1950 qui ont conduit au concept de tokamak, une machine torique dans lequel des champs magnétiques intenses confinent le plasma le long de lignes de champ hélicoïdales. ITER, le réacteur expérimental en cours de construction à Cadarache, est une étape cruciale pour la maîtrise de la fusion contrôlée. Ce projet de grande ampleur financé par sept partenaires internationaux (Chine, Europe, Inde, Japon,

Corée, Russie et États-Unis) vise à démontrer la possibilité de réaliser un réacteur à fusion.

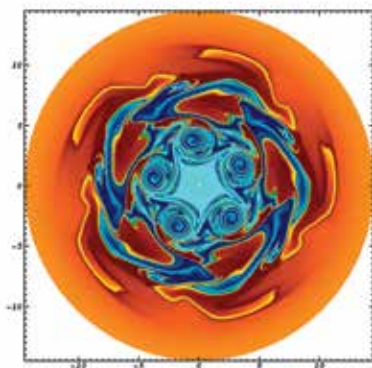
Les tokamaks actuels ainsi qu'ITER ont principalement été conçus à partir de lois d'échelle extrapolant les performances des tokamaks précédents. Aujourd'hui, les simulations numériques reposent sur de nombreuses approximations à cause du manque de puissance des supercalculateurs actuels. Cette situation est en train de changer de façon drastique grâce aux machines parallèles péta et bientôt exaflopiques. Les calculs que l'on appelle « premiers principes », car ils reposent sur les principes fondamentaux de la physique, ne sont en effet plus hors de portée de ces calculateurs. Ils permettent d'envisager en parallèle à la construction d'ITER, la réalisation d'un véritable tokamak numérique.

## LES SIMULATIONS CINÉTIQUES

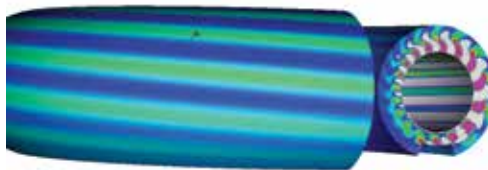
À ces très hautes températures, l'hydrogène se présente sous forme d'un plasma, constitué d'ions et d'élec-



trons. Pour décrire le mouvement, on utilise la fonction de distribution des ions. Cette fonction dépend de l'espace, du temps et aussi d'une variable de vitesse. À chaque instant, elle compte le nombre d'ions qui ont une position et une vitesse données. Cette fonction est solution d'une équation de transport posée dans un espace à six dimensions plus le temps : l'équation de Vlasov. Bien que relativement simple, l'équation de Vlasov vit dans un espace à grande dimension et sa résolution est très coûteuse. Une simplification courante dans les tokamaks repose sur l'hypothèse que les ions ont des trajectoires qui s'enroulent très rapidement autour des lignes de champ magnétique. L'équation de transport simplifiée est appelée équation gyrocinétique. Plusieurs types de méthodes numériques existent pour réaliser des simulations gyrocinétiques. Historiquement, la méthode « Particle-In-Cell » est la plus utilisée. Plus récemment ont été développées de nouvelles méthodes « eulériennes » ou « semi-lagrangiennes ». Le calcul est plus coûteux, mais plus précis. Malgré les simplifications des modèles physiques et l'amélioration constante des méthodes d'approximation, la simulation d'un tokamak requiert une puissance de calcul considérable. L'IRFM du CEA Cadarache développe ainsi le code de calcul gyrocinétique semi-lagrangien GYSELA. Le calcul GYSELA réalisé dans le cadre du challenge CINES 2010 a ainsi utilisé un maillage de 272 milliards de nœuds et généré 6,5 Tbytes de données.



**Figure 1 :** *Turbulence dans un plasma dans une coupe de tokamak (simulation cinétique réalisée avec le logiciel Selalib - Inria, Univ. de Strasbourg, C. Steiner, M. Mehrenberger - sur 1024 cœurs du supercalculateur Helios (Japon)).*



**Figure 2 :** *Développement d'une instabilité plasma-paroi dans un tokamak.*

Dans l'avenir, les codes gyrocinétiques devront inclure la cinétique rapide des électrons. À cause de la différence de masse entre ions et électrons, la taille des maillages nécessaires sera multipliée par un facteur de l'ordre de 60 et les pas de temps de temps divisés par 60. Seules les machines exaflopiques seront capables de conduire des calculs de cette ampleur. Réussir à adapter les algorithmes à ces nouvelles architectures est un défi majeur. Tolérance aux pannes et points de reprise, optimisation des communications et des I/O, distribution des tâches sur des millions de cœurs, passage à l'échelle des solveurs sont des problèmes critiques devant être maîtrisés pour tirer le meilleur parti de ces nouvelles architectures.

## LES SIMULATIONS MAGNÉTOHYDRODYNAMIQUES

Les modèles cinétiques peuvent dans certains cas être remplacés par des modélisations utilisant l'approximation fluide de la magnétohydrodynamique (MHD). L'objectif principal des études MHD dans les tokamaks est de déterminer le domaine des paramètres pour lequel le fonctionnement du réacteur se fera de façon stable. À l'heure actuelle, si la théorie MHD de stabilité linéaire est relativement bien comprise, la description du comportement non-linéaire est très loin d'être complète. Il s'agit d'un domaine où les apports des machines exaflopiques seront primordiaux. La figure 2 présente, par exemple, le développement d'une instabilité due à l'interaction entre le plasma et la paroi pour un tokamak de type Tore-Supra dont le volume est 30 fois inférieur à celui d'ITER. Ce calcul a nécessité plusieurs milliers d'heures sur 1024 processeurs et pour le Tokamak ITER, un tel calcul n'est pas aujourd'hui envisageable. Les nouvelles architectures hautement parallèles le mettront à la portée des physiciens dans un avenir proche. ■





# SOCIÉTÉ



# LA JOURNÉE D'UN INGÉNIEUR EN 2025

Didier Courtaud

Professeur, Université Paris-Saclay

« Réveille-toi : tu as une conférence avec John dans une heure et la simulation que j'ai lancée pour toi est presque terminée » susurra d'une voix douce l'oreiller à Romain.

Celui-ci se leva, prit son petit-déjeuner et connecta sa tablette. La simulation de l'avion qu'il avait programmée hier soir se déroulait bien et générait des quantités astronomiques de données. Il salua ses enfants et son épouse qui portaient quand sa montre sonna pour lui signaler qu'on cherchait à le joindre : c'était John son collègue américain qui voulait discuter avec lui de la simulation. Aussitôt une image holographique jaillit de sa tablette :

« Cherche des ressources disponibles dans le Cloud »

« Bonjour Romain. La modification que nous avons apportée aux moteurs améliore-t-elle la maniabilité de l'appareil ?

- Je crois que oui ! Regarde ! »

Romain dit à son boîtier posé sur la table : « Montre-moi le profil d'écoulement autour de l'aile droite ». L'image en 3D apparut, pilotée en temps réel par la simulation, et Romain la partagea avec John. John la fit tourner de 180 degrés et dit :

« Ce n'est pas mal mais il reste encore une traînée bizarre : peux-tu regarder d'où cela provient ?

- D'accord ! je te recontacte. »

Romain localisa la centaine de pétaoctets générés par le code de simulation et dit à son boîtier :

« Extrais-moi les données de l'aile droite et montre-moi l'aile et son moteur »

Une image détaillée de la géométrie de l'aile et toutes les grandeurs associées que Romain pouvait désigner à volonté lui montra la traînée anormale et, après quelques minutes, avec l'aide de l'inspecteur numérique, il en localisa l'origine sur une mauvaise géométrie du moteur. Romain arrêta la simulation, modifia la géométrie du moteur et relança la simulation en disant à son boîtier :

« Cherche des ressources disponibles dans le Cloud



Moteur d'avion imprimé.

© Jake Sturmer (ABC) Pr Ian Smith (Monash University)

immédiatement et relance la simulation avec ma nouvelle géométrie de moteur ».

Pendant que la simulation se déroulait, il se mit à chercher une destination de vacances pour sa famille pour les prochains congés. Il avait pour cela un espace dans son propre Cloud où il stockait toutes ses données d'ordre privé. Il avait de même, sur des Clouds publics, des espaces partagés avec ses collègues et avec d'autres équipes dans le monde. Il faisait très attention de ne pas mélanger les données entre tous ces espaces en gérant les permissions accordées à chacun des contributeurs et en cryptant les données en fonction de leur confidentialité.

Alors qu'il surfait sur le Web, l'image de John apparut dans un coin de son navigateur :

« L'écoulement d'air est parfait désormais. Quand la simulation sera terminée, il faudrait imprimer ce moteur pour le faire voir aux concepteurs de l'avion à la réunion de demain.

- Je le ferai à Paris. Je surveille la simulation et si tout est bon, je l'imprime »

Romain prit son smartphone et son manteau et alla prendre un train. Pendant le trajet, il suivit l'avancée de la simulation sur son smartphone puis visualisa l'écoulement d'air sur le revers de son manteau. Il arriva dans l'immeuble où se trouvaient des dizaines de bureaux de passage standard : il en ouvrit un en posant son doigt sur le lecteur. Sur le grand écran du bureau, après s'être identifié, il surveilla la simulation jusqu'à son terme et demanda oralement de lui montrer l'écoulement de l'aile droite.

Satisfait par les résultats, il demanda à l'imprimante 3D de lui imprimer le moteur en métaux légers ce qu'elle fit en quelques minutes.

Il emporta le moteur et alla rejoindre ses collègues dans son laboratoire à qui il présenta le moteur en vraie grandeur. Une discussion s'ensuivit pendant laquelle Romain leur présenta la simulation réalisée avec John en zoomant sur les parties qui les intéressaient ; de leur côté, ses collègues lui indiquèrent où trouver les données générées par les milliers de capteurs de l'expérimentation qu'ils avaient réalisée et Romain demanda aux ordinateurs de comparer



© Monolm Inc.

*Boîtier intelligent*

les deux sources de données de plusieurs centaines de pétaoctets et de visualiser la comparaison en 3D. C'est là que Romain comprit et expliqua l'origine du défaut dans la géométrie du moteur qu'il avait dû corriger.

« C'est l'heure d'aller chercher les enfants » lui dit sa montre et elle lui montra le chemin le plus rapide pour y aller, les conditions de circulation sur son trajet et les horaires des transports en commun. Romain prit le train, alla chercher ses enfants à l'école et les ramena à la maison.

Les enfants allumèrent Aristote, le petit robot qui allait les aider à réviser leurs leçons et Romain rappela John : ils conçurent ensemble la présentation du lendemain en y incorporant des « vidéos live » autrement dit des vidéos qui se créaient automatiquement à partir des données de la simulation de cette nuit.

« Il demanda à l'imprimante de lui imprimer le moteur »

Avant de se coucher, Romain visualisa les progrès de ses enfants sur Aristote et demanda à son boîtier de démarrer la nouvelle simulation dans les deux heures qui suivraient en fonction des ressources disponibles dans le Cloud. Il dit à son oreiller numérique :

« Réveille-moi dès que la simulation sera terminée et au plus tard à 7 heures !

- Bonne nuit, compte sur moi » lui répondit l'oreiller. ■

# 2015, L'ANNÉE DE LA RUPTURE DANS LA CYBER SÉCURITÉ, COMMENT RÉTABLIR LA CONFIANCE DANS LE NUMÉRIQUE ET L'INTERNET

Bernard Barbier

Cyber security officer, Capgemini Group

---

La transformation numérique de l'entreprise et des États est une évolution fondamentale pour que l'économie d'un pays trouve ou retrouve sa compétitivité : numériser le fonctionnement de l'entreprise et de l'État, fournir de nouveaux services, et utiliser efficacement les nouveaux outils : Cloud Computing, Big Data, mobilité, les objets « intelligents ». Ces évolutions sont freinées et se trouvent confrontées à un danger mortel : la cyber insécurité, la cyber criminalité et la cyber surveillance. Le cyber espionnage peut provenir de concurrents peu scrupuleux mais aussi d'États disposant de moyens très puissants (Chine, Russie, USA SNOWDEN). La cyber réputation est difficile à mesurer mais elle peut entraîner un préjudice très important sur l'image de l'entreprise ou/et de ses dirigeants (ex TARGET). Les banques et les institutions financières sont très menacées (JP Morgan) et le président américain s'inquiète fortement de ces attaques qui pourraient toucher à la crédibilité du système financier international.

Il faut recréer la confiance dans le numérique et dans les technologies de l'information, et reconquérir notre sécurité en mettant en place de façon volontariste une organisation adaptée, des processus et des règles,

et les moyens techniques et humains appropriés. L'investissement cyber sécurité va devenir fondamental et les entreprises et l'État devront définir un niveau de cyber résilience indispensable et mesurer leur cyber maturité. La donnée est le bien vital de l'entreprise et des États modernes, la protéger, la surveiller et détecter son vol, cela doit être le cœur de la stratégie cyber défense et cyber sécurité. Le risque cyber sécurité doit être pris en compte par l'entreprise ou l'État comme un risque critique, un risque très probable au même titre que les autres risques techniques.

Pour une fois les États réagissent avant les entreprises, et commencent à imposer des règles, des règlements, des lois, des standards qui sont indispensables pour le futur. Mais la cyber sécurité est aussi devenue un élément stratégique de la défense des États qui utilisent des cyber armes pour espionner et détruire les capacités d'autres États. À l'opposé des armes de dissuasion, l'aspect anonyme et non létal des cyber armes rend leur utilisation fréquente en cas de tension entre pays (Ukraine, Iran, Corée du Nord....). C'est la première fois dans l'histoire de l'évolution des pays qu'une technologie soit totalement duale et qu'une « arme » soit accessible par tous et

partout (le cyber espace est global et quasiment 80 % de la population mondiale y est connectée).

## QUELQUES DÉFINITIONS

- **La cyber sécurité** c'est l'état recherché pour un système d'information lui permettant de résister à des événements issus du cyber espace susceptibles de compromettre la disponibilité, l'intégrité ou la confidentialité des données stockées, traitées ou transmises et des services connexes que ces systèmes offrent ou qu'ils rendent accessibles. La cyber sécurité fait appel à des techniques de sécurité des systèmes d'information et s'appuie sur la lutte contre la cyber criminalité et sur la mise en place d'une cyber défense.

- **La cyber défense**, quant à elle, est l'ensemble des mesures techniques et non-techniques permettant à un État ou une entreprise de défendre, dans le cyber espace, les systèmes d'information jugés essentiels.

- **Cyber espace** : c'est l'ensemble des données numérisées constituant un univers d'information et un milieu de communication, lié à l'interconnexion mondiale des ordinateurs.

## CYBER SÉCURITÉ : DE L'OMBRE VERS LA LUMIÈRE

Les attaques contre les systèmes informatiques ont commencé vers les années 85-90 lorsque les réseaux des entreprises se sont ouverts vers l'Internet. Ce sont essentiellement des virus qui ont infectés les entreprises, virus conçus par des « hackers individuels » dans un objectif de reconnaissance personnelle : en 2000 le fameux virus I Love You.

À partir de 2000-2005, certains États en ont compris l'importance comme outil offensif, et ils se sont organisés pour créer des capacités de cyber attaque. En 1999, les colonels chinois Qiao Liang et

Wang Xiangsui imaginaient dans « La Guerre hors limites » que l'informatique pourrait devenir l'une des armes du XXI<sup>e</sup> siècle. Cette arme est parfaitement adaptée aux conflits « asymétriques ». Les premières actions étatiques visibles ont démarré avec les Russes contre la Lituanie, Israël contre l'Iran (STUXNET) et l'espionnage massif chinois. En 2014 la cyber guerre est devenue un concept, une doctrine, et de nombreux pays investissent massivement pour développer des cyber armes très sophistiquées.

Mais la cyber criminalité est aussi devenue une menace mortelle pour les pays, les entreprises et les personnes. Le montant financier de la cyber criminalité dépasse les 300 milliards de dollars, montant plus important que celui généré par le trafic de drogue.

Face à ces dangers, les États s'organisent. La France est assez pionnière dans le domaine et la loi va imposer aux Opérateurs d'Importance Vital, OIV, de mettre en œuvre des systèmes d'information, dans le respect des règles de sécurité édictées par l'ANSSI. La répression s'accroît fortement et des États commencent à lancer des mandats internationaux pour faire arrêter les cybers criminels : coup de filet mondial contre les « BlackShades » en juin 2014, mandat international lancé par le FBI américain contre les cyber espions chinois en juin 2014, mandat international contre un chef de la mafia russe pour avoir attaqué des banques américaines. Les mafias sont en train de créer des armées privées de « cyber attaquant » pour pirater les banques, les entreprises : le risque d'arrestation est actuellement très faible car certains pays refusent de répondre aux demandes d'entraide judiciaire des autres états (identification de l'adresse IP...).

## LA MAJORITÉ DES MENACES SONT CONNUES ET PEUVENT ÊTRE ÉLIMINÉES

En faisant le bilan de la plupart des attaques « réussies » (du moins celles qui sont découvertes) on s'aperçoit

que le niveau technique de ces attaques est faible et que c'est la très grande faiblesse des défenses qui est en cause. Actuellement les États et les entreprises sont « mal » défendus, les dangers principaux sont :

- vol et perte des données ;
- infection et prise de contrôle d'ordinateurs de membre du personnel qui cliquent sur des liens ou des pièces jointes « piégés » en réponse à des mails comportant des virus ou malware (phishing utilisant les réseaux sociaux) ;
- mauvais paramétrage des équipements informatiques : mise à jour des logiciels, ports ouverts, services ouverts sans mot de passe, faiblesse des mots de passe ;
- pas de cloisonnement des réseaux, pas de protection des données, pas de chiffrement.

### LES ÉLÉMENTS CLÉS DE LA CYBER SÉCURITÉ

La cyber sécurité, c'est d'abord un problème de gouvernance. Les entreprises et les États doivent mettre en place une gouvernance forte pour lutter contre les cyber attaques. La gestion du risque numérique est un des enjeux majeurs de l'entreprise du XXI<sup>e</sup> siècle. La direction générale doit être totalement mobilisée et elle doit nommer à un niveau élevé, un Group Cyber Security Officer, proche des métiers de l'entreprise et qui ne reste pas confiné au fond de la DSI, mais qui conduit une vraie transformation de l'entreprise. Les entreprises doivent prévoir une réaction rapide pour contrer immédiatement les attaques réussies et une communication de crise doit être préparée.

Les entreprises doivent « durcir » leur SI en utilisant des technologies persuasives : protection/chiffrement des données, authentification forte, gestion des identités, mise à jour des logiciels, sensibilisation du personnel. Une politique volontariste de gestion et

de protection des données doit être mise en place : définition des données critiques, des niveaux de protection, gestion des droits d'accès, contrôle des données, chiffrement des données. Pour les données critiques, l'entreprise doit mettre en place des silos sécurisés, des vrais « coffres-forts virtuels ». Actuellement on peut estimer qu'aucun système technique durci ne permet de se protéger à 100 %. Il est donc indispensable de mettre en place des outils de surveillance (monitoring), temps réel, capable de détecter 24h/24 les attaques « réussies ». Des outils sophistiqués existent qui stockent et analysent tous les événements touchant les équipements de sécurité. Mais ces outils, pour être efficace, nécessitent des capacités humaines très spécialisées. Ce domaine de Security Analytics devient un élément clé pour le futur. C'est un domaine technique complexe et chaque entreprise ne pourra pas se doter de sa propre capacité de Security Analysis. Il faudra donc mutualiser ces capacités au sein d'entreprises de services, spécialisées dans ce domaine. Le domaine de la fraude est aussi très proche de la cyber sécurité car pour limiter la fraude, les entreprises vont devoir déployer des outils de Big Data Security Analysis, très semblables aux outils de cyber sécurité. L'approche par métier est fondamentale car des attaques très sophistiquées ont réussi au sein de banques, en utilisant une combinaison de faiblesses informatiques et de faiblesses des contrôles des processus métier.

L'un des points très important du futur, c'est de penser la sécurité dès la conception des outils et des logiciels : la sécurité par la conception qui est la règle d'or dans les industries dangereuses comme le nucléaire. Actuellement la sécurité n'intervient qu'après la conception et souvent trop tard.

### MOBILITÉ, CLOUD COMPUTING, BIG DATA, INTERNET DES OBJETS : UNE RUPTURE INDISPENSABLE

Le futur des technologies et des usages de l'informatique se dessine : la mobilité, l'accès permanent



à ses données, aux données de l'entreprise, l'accès à des gigantesques quantités de données et de capacités de calcul, les objets « intelligents » qui communiquent et qui vont se transformer en robots avec des capacités d'autonomie et de décisions proches des humains avec l'arrivée des puces neuro-synaptiques qui reproduisent le cerveau humain et les neurones. Ces mélanges de ruptures technologiques et de ruptures dans les usages sont en train de devenir des réalités commerciales et des produits commencent à arriver sur le marché. Mais un danger mortel peut freiner et pourquoi pas bloquer ces ruptures : l'insécurité de ces nouveaux systèmes. Sous la pression des citoyens, les États sont en train d'imposer des normes drastiques de protection des données individuelles. Les grandes entreprises considèrent que le risque de cyber réputation devient critique, les actionnaires sont inquiets sur la perte potentielle de valorisation d'une entreprise qui serait mal protégée. Les consommateurs commencent à demander des dédommagements importants suite à des fraudes.

Les risques futurs, les exigences des consommateurs et des citoyens, l'évolution rapide des technologies et des usages, l'action croissante des cyber criminels, tous ces éléments convergent vers l'obligation d'une rupture majeure : la cyber sécurité devient un élément clé du futur de l'informatique mais aussi de nos civilisations modernes.

## **LE BESOIN CRITIQUE D'UNE ORGANISATION INTERNATIONALE**

Je suis persuadé que nous allons vers une cyber crise majeure qui pourrait provenir de plusieurs causes : une attaque de cyber djihadistes, une action de cyber représailles d'un État vers d'autres dans un conflit asymétrique (Corée du Nord, Iran), une contamination non contrôlée qui se propage suite à une cyber attaque d'un État : le virus STUXNET a contaminé plusieurs systèmes industriels non iraniens. C'est la première fois dans l'évolution

humaine que la même technologie est au cœur du fonctionnement d'une très grande partie de l'activité humaine et que cette technologie est très fragile. La même technologie commence à être utilisée comme une arme, par des États, par des individus, par des groupes organisés (mafia). Le risque de prolifération devient critique et le risque de contamination non contrôlée devient aussi critique. Les États vont devoir rapidement s'organiser au niveau mondial : traité de non cyber prolifération comme dans le nucléaire, organisation mondiale de cyber défense : Cyber OTAN, Cyber ONU...

Les capacités de recherche scientifiques et techniques des États devront être orientées vers le domaine de la cyber sécurité afin d'inventer des nouvelles technologies « durcies ». Le cyber espace devient un espace essentiel de la domination des États. Les USA considèrent que la domination de l'Internet, la « cyber domination », est le fondement de leur stratégie future et que l'État et les entreprises y sont totalement associés : le récent discours du président Obama qui associe l'État américain et les grandes entreprises de l'Internet, les GAFA (Google, Amazon, Facebook, Apple) est clé pour comprendre la stratégie des USA pour les années futures. L'Europe doit absolument réagir face aux USA et à la Chine. L'Europe de la cyber sécurité doit se créer autour du couple Franco-Allemand. Les intérêts en jeux sont énormes : indépendance de l'état, des entreprises et protection des citoyens français : c'est la première fois qu'une évolution technique impacte aussi fortement toutes les composantes d'une nation. ■

# ENSEIGNEMENT DU HPC : ÉTAT DE L'ART ET PROPOSITIONS

Brigitte Plateau

Administrateur général, Grenoble INP

Yves Denneulin

Directeur, Ensimag

Le calcul hautes performances étant un des éléments clé de la compétitivité d'un pays, y former ses étudiants de l'enseignement supérieur est fondamental. Dans cet article nous allons étudier les différents niveaux d'expertise proposés dans le cadre des formations actuelles et nous projeter sur les évolutions souhaitables à y apporter dans les années futures.

## LE SOCLE DE CONNAISSANCE

Au cœur de l'exploitation des architectures de calcul hautes performance se trouvent fondamentalement trois éléments : la modélisation d'un problème à résoudre en termes d'objets mathématiques, la programmation de ces objets en langage informatique et l'exploitation optimale des ressources matérielles sur lesquelles ces programmes s'exécutent. Dans ces trois éléments figurent des aspects fondamentaux qui resteront stables pendant très longtemps et d'autres plus technologiques qui évolueront avec les solutions matérielles et logicielles dont on sait qu'elles sont très éphémères dans un domaine aussi en pointe.

Un expert dans le domaine du HPC maîtrisera ces trois éléments que nous allons maintenant détailler.

Pour bien modéliser un problème il est nécessaire de l'avoir compris et analysé ainsi que de disposer d'un solide spectre de compétences mathématiques afin de connaître les outils de base utilisés pour représenter le réel. Citons notamment la décomposition de domaines, les éléments finis ou encore les volumes finis. Au-delà de leur connaissance, savoir utiliser le plus pertinent en fonction du problème ainsi que des types de données que ce problème utilisera principalement est une compétence qui s'acquiert avec des études de cas et de l'expérience.

En particulier, se développent ces dernières années des méthodes qui permettent de décomposer un (gros) problème en sous-problèmes qui peuvent se résoudre (presque) indépendamment ; ces méthodes sont particulièrement adaptées à une algorithmique parallèle et donc à l'exploitation des architectures idoines.

La programmation de ces modèles va mettre en œuvre un ensemble de compétences hétérogènes : la connaissance des modèles de programmation parallèle, calcul vectoriel, parallélisme de données, parallélisme d'instructions, la maîtrise de la mesure de la complexité des algorithmes parallèles et des

modèles associés, BSP, PRAM, etc. ainsi bien entendu que la connaissance des standards de programmation tels que Open MP et MPI actuellement.

Atteindre l'exploitation optimale des ressources matérielles est une compétence au cœur du HPC. Il nécessite une profonde connaissance des architectures, pipeline, GPU, etc., des connaissances en optimisation des codes, de solides connaissances théoriques notamment la problématique centrale de l'ordonnancement et aussi, avec l'explosion de la taille des problèmes, l'optimisation des mouvements de données. Enfin, il est évident que des compétences en évaluation de performances sont indispensables pour identifier et analyser les facteurs limitants. Il est à noter que durant très longtemps cette dimension d'optimalité a été une préoccupation exclusivement de la communauté HPC mais, avec l'importance croissante de la consommation électrique des appareils, elle est devenue une dimension transverse à toute l'informatique.

Cette compétence est bien au cœur de la définition d'un expert en HPC. De nombreuses formations la proposent à des niveaux plus ou moins avancés ; quelques centaines de spécialistes sont formées chaque année à ces problématiques dans l'enseignement supérieur français, essentiellement au niveau du M2. Nous pouvons bien entendu citer à titre d'exemple le master informatique haute performance de l'UVSQ en collaboration avec Teratec.

### LES FORMATIONS ET LEUR MARGE DE PROGRESSION

Les éléments modélisation et programmation se retrouvent à des niveaux plus ou moins avancés dans l'ensemble des formations scientifiques de l'enseignement supérieur actuellement mais jamais dans un cadre où l'optimisation des ressources est considérée comme pertinent. Il y a un déficit important de compétences dans ce domaine qui a toujours été



*Pharmaceutical machinery manufacturer Bausch and Stroebel use ESI's IC.IDO for engineering reviews*



*Pre-Assembly simulation with ESI's IC.IDO*

négligé dans les formations de base, notamment car il nécessite des connaissances avancées dans différents domaines : architecture, algorithmique, etc.

Nous identifions deux enjeux majeurs à ce sujet :

- la mise à disposition d'offres les intégrant et s'adressant à un public de type formation continue sur un format stage de courte durée ou MOOC afin de réaliser cette montée en compétences ;

- l'intégration d'éléments de base sur la performance et l'optimisation dans la totalité des cursus des scientifiques que ce soit aux niveaux L3 ou M2.

L'évolution des architectures HPC vers des modèles de type Cloud, avec puissance obtenue à la demande et le développement de la virtualisation, vont incontestablement avoir des impacts sur les compétences en matière d'optimisation, il est donc important de faire évoluer les cursus pour mieux les prendre en compte. Cela ne concerne cependant majoritairement que les cursus de spécialistes qui sont déjà en forte évolution de manière continue.

L'autre tendance lourde et pérenne en matière d'usage du HPC, l'analyse et l'exploitation de grandes quantités de données, aura, elle, des répercussions importantes et pérennes sur l'ensemble des cursus avec notamment :

- l'introduction indispensable d'éléments de Machine Learning dans l'ensemble des cursus scientifiques ;
- la prise en compte des mouvements de données dans la dimension optimisation ainsi que son impact sur les consommations énergétiques.

### CONCLUSION ET RECOMMANDATION

En conclusion, l'introduction d'éléments relevant du HPC dans l'ensemble des cursus scientifiques de l'enseignement supérieur est un enjeu qui doit être relevé par l'ensemble de la communauté. Elle nécessite tant la construction d'éléments pédagogiques nouveaux largement diffusables que ce soit sous forme de supports pédagogiques traditionnels, transparents, tutoriels ou encore MOOC que des centres d'expérimentations impliquant la mise à disposition au plus grand nombre d'architectures matérielles significatives. ■



## MENTIONS LÉGALES :

« Les Clés du futur » est édité par :

TERATEC  
Campus Teratec - 2, rue de la Piquetterie  
91680 BRUYERES-LE-CHATEL - France  
infos@teratec.fr - www.teratec.eu

Publicité et relations extérieures :  
jean-pascal.jegu@teratec.fr - Tél : +33 (0)9 70 65 02 10

Directeur de la publication : Christian SAGUEZ, président fondateur de TERATEC

Comité de rédaction : Guillaume COLIN DE VERDIÈRE, CEA - Brigitte DUÊME, INRIA -  
Jacques DUYSENS, ANSYS - Hervé MOUREN, TERATEC - Jean-Pascal JEGU, TERATEC -  
Jean-François PREVÈRAUD, Journaliste - Marie-Christine SAWLEY, INTEL

Imprimé en juin 2015 par Abelia Imprimerie - Beaucouzé - France

Création : www.eden-studio.com

Dépôt légal : juin 2015





# LES CLÉS DU FUTUR

---

La combinaison de l'informatique de grande puissance et de la simulation numérique permet de mettre au point des produits ou des services dans des conditions exceptionnelles de rapidité et de précision.

**Le potentiel de gain est tel que ceux qui en feront le meilleur usage seront les leaders de demain.**

Nous allons voir émerger une foule d'intervenants nouveaux qui, en mêlant le meilleur savoir-faire dans un domaine donné à la puissance de ces technologies, vont faire apparaître des produits et des services complètement nouveaux et vont transformer radicalement l'activité économique de ce secteur. C'est là que seront créés les emplois et la valeur ajoutée de demain.

**L'enjeu est colossal en termes de compétitivité et de productivité, la maîtrise de ces technologies devient une des clés du développement des entreprises.**

**Hervé Mouren**  
**Directeur, Teratec.**

