

# La RECHERCHE

Juillet - août 2009 - N° 432 Ne peut être vendu séparément

# Calcul haute performance

AUX frontières des savoirs  
et des technologies

En partenariat avec :



Vous comptez sur l'innovation technologique et ses nouveaux outils pour faire progresser le rythme et la portée de vos découvertes scientifiques ? ITT vous présente la dernière génération logicielle qui révolutionne la manière de traiter les données : IDL 7.0. Reconnu comme un outil de référence pour l'analyse et la visualisation de données complexes, IDL est maintenant intégré à un nouvel environnement de développement construit sur la plateforme Eclipse. Depuis une approche moderne pour l'édition et le débogage de codes, jusqu'à une interface de programmation multi plate-forme, ces nouvelles possibilités vous ouvrent les portes pour de nouvelles découvertes scientifiques. Vous en saurez plus sur [ittvis.com/IDL](http://ittvis.com/IDL).

## Un logiciel révolutionnaire – Les découvertes de demain se préparent aujourd'hui.



*Engineered for life*

ITT, the Engineered Blocks, and "Engineered for life" are registered trademarks of ITT Manufacturing Enterprises, Inc., and are used under license. ©2009, ITT Visual Information Solutions



Communications • Télédétection et Sécurité • Espace • Ingénierie avancée et Services intégrés



# LE CALCUL HAUTE PERFORMANCE va sauver la recherche !

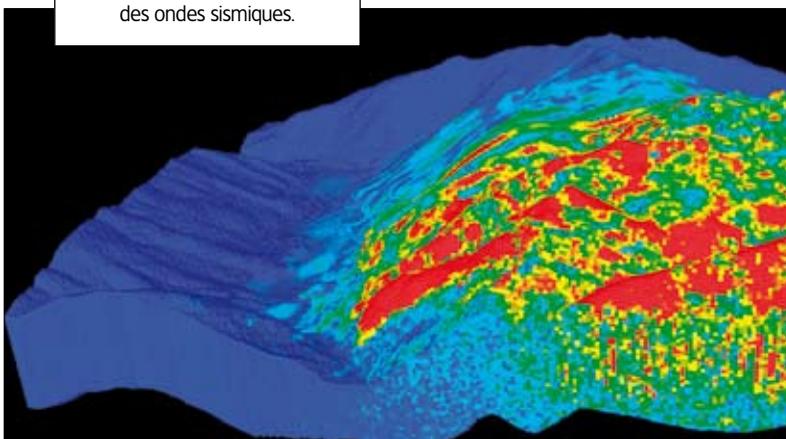
**L**e chercheur d'aujourd'hui est un "ultraspécialiste". Quel parcours entre les savants universalistes (voire encyclopédistes) du siècle des lumières et le chercheur de 2009 !

Tout concourt à cette spécialisation à outrance : très haute technicité de la recherche, formidable croissance du nombre de chercheurs depuis 1950, croissance exponentielle du nombre de publications... La recherche dans l'industrie n'est pas en reste : elle aussi a connu une formidable croissance au point d'être désormais stratégique pour bon nombre de secteurs.

Signe de bonne santé, direz-vous ? Non ! Cette spécialisation extrême fait que les chercheurs ont du mal à échanger dès qu'ils ne sont pas de la même sous-sous-discipline. Or, la recherche progresse à deux vitesses. Régulièrement, au fil des améliorations, mais aussi brusquement par sauts technologiques, souvent par transferts d'un domaine à un autre. Ce n'est pas en améliorant la bougie que l'on invente la lampe à incandescence !

La simulation haute performance, cette toute nouvelle méthodologie qui consiste à reproduire *in silico* des phénomènes complexes tridimensionnels et dépendants du temps, est une aubaine pour notre communauté. Non seulement elle produit des résultats qui semblaient hors d'atteinte il y a une trentaine d'années – ce numéro spécial en décrit quelques-uns – mais elle conduit à mettre autour de la même table des spécialistes de divers domaines. C'est de ce fait un formidable outil de rapprochement entre la recherche industrielle et la recherche universitaire. Une véritable fertilisation croisée est enfin en train de s'opérer : d'un côté, le calcul haute performance s'appuie sur la recherche fondamentale de pointe, la plus récente qui soit, et de l'autre, la recherche industrielle pousse les besoins à l'extrême limite. La simulation demande une mise en équation (dite "modélisation") du phénomène sous investigation dans toute sa complexité et donc sa pluridisciplinarité.

Simulation numérique réalisée sur le supercalculateur Tera 10 du CEA. Propagation des ondes sismiques.



La modélisation de l'irradiation thérapeutique d'un patient, par exemple, convoque presque toutes les disciplines scientifiques. Au-delà du bénéfice pour le patient, c'est la recherche que l'on soigne.

Par **Jean-Michel Ghidaglia**,  
Professeur à l'École  
normale supérieure de Cachan,  
Directeur scientifique  
de La Recherche



**La RECHERCHE**

Le cahier 2 de *La Recherche* ne peut être vendu séparément du cahier 1 (LR N° 432). Le cahier spécial du magazine *La Recherche* a été élaboré avec le concours de Bull, du CEA, de Gencl, d'Intel, de l'Inria, de Prace et de Total.

**Sophia Publications**  
74, avenue du Maine - 75014 Paris  
Tél. : 01 44 10 10 10  
e-mail rédaction : [courrier@larecherche.fr](mailto:courrier@larecherche.fr)

Pour joindre directement par téléphone un membre de la rédaction, composez le 01 44 10, suivi des quatre chiffres placés après son nom.

**ABONNEMENTS/ANCIENS NUMÉROS/RELIURES**

**Adresse e-mail :** [abo.recherche@groupe-gli.com](mailto:abo.recherche@groupe-gli.com)  
La Recherche Service Abonnement  
22, rue René Boulanger, 75 472 Paris cedex 10  
**Tarif France :** 1 an 11 n°s, 59,00 €,  
1 an 11 n°s + 4 hors-série, 79,50 €  
**Tarif international :** nous contacter

**Suisse :** Edigroup, (0041) 22 860 84 01  
**Belgique :** Edigroup, (0032) 70 233 304  
**Canada :** Express Mag, 8155, rue Larrey,  
Anjou Québec H1J 2L5.

**Directrice de la rédaction :** Aline Richard  
**Directeur scientifique :** Jean-Michel Ghidaglia  
**Rédactrice en chef adjointe du cahier 2 :** Isabelle Bellin  
**Secrétaire générale de la rédaction du cahier 2 :**  
Sylvie Richardin (Infokom)  
**Directeur artistique du cahier 2 :**  
Pascal Brachet (Infokom)  
**Maquette du cahier 2 :** Guylaine Vautier (Infokom)  
**Fabrication :** Christophe Perrusson (13 78)  
**Chef de projet partenariats :** Stéphanie Jullien (54 55)  
**Assistant commercial :** Antoine Faure (54 53)

**Directeur administratif et financier :** Dounia Ammor  
Marketing direct et abonnements  
**Directrice :** Virginie Marliac (54 49)  
**Chargée du marketing :** Estelle Castillo (54 51)  
Diffusion (diffuseurs/dépôtaires)  
Evelyne Miont (13 80)  
**Responsable gestion :** Isabelle Parez (13 60)  
**Comptabilité :** Marie-Françoise Chotard (13 43)  
**Responsable Internet :** Jean-Brice Ouvrier (54 52)

**PUBLICITÉ : Le Point Communication**  
**Chef de publicité :** Marie Amiel (12 57)  
Assistante commerciale et secteur culture : Françoise Hullot ([fhullot@interdeco.fr](mailto:fhullot@interdeco.fr))

*La Recherche* est publiée par Sophia Publications, filiale de Financière Tallandier Président-directeur général et directeur de la publication : Philippe Clerget.

Les titres, les intertitres, les textes de présentation et les légendes sont établis par la rédaction. La loi du 11 mars 1957 interdit les copies ou reproductions destinées à une utilisation collective. Toute représentation ou reproduction intégrale ou partielle faite sans le consentement de l'auteur ou de ses ayants droit ou ayants cause, est illicite (article L122-4 du Code de propriété intellectuelle). Toute copie doit avoir l'accord du Centre français du droit de copie (CFC, 20, rue des Grands-Augustins, 75006 Paris. Tél. : 01 44 07 47 70. Fax : 01 46 34 67 19). L'éditeur s'autorise à refuser toute insertion qui semblerait contraire aux intérêts moraux ou matériels de la publication.

Cahier 2 de *La Recherche* - Commission paritaire : 0909 K85863 ISSN 0029-5671  
Imprimerie Canale, Via Liguria 24, 10071 Borgaro, Torino (Italie). Dépôt légal à parution.  
© 2009 SOPHIA PUBLICATIONS. IMPRIMÉ EN ITALIE.  
PRINTED IN ITALY

# SOMMAIRE

## Le calcul haute performance

**EDITORIAL** 3

Jean-Michel Ghidaglia

### EUROPE 6

**CALCUL INTENSIF** 6

Le calcul haute performance est une technologie clé pour l'Europe

Interview croisée de Bernard Bigot et Achim Bachem  
par **Isabelle Bellin**

**TECHNOLOGIES** 9

L'Europe doit financer des partenariats "public-privé"

Interview de Jean Gonnord  
par **Isabelle Bellin**

**CLASSEMENT** 10

L'Europe revient dans la course  
**Isabelle Bellin**

### SOLUTION 13

**SANTÉ** 13

Le calcul intensif au service du cancer  
**Renaud Persiaux**

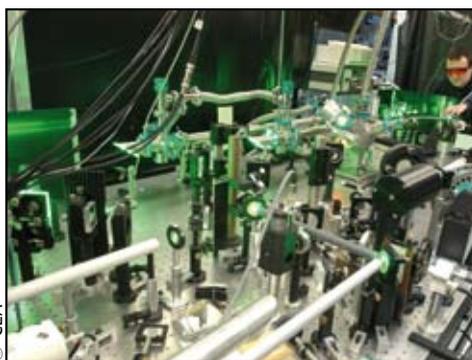
La solution viendra-t-elle des simulations ?  
**Renaud Persiaux**

Cerveau : de la structure à la fonction  
**Dominique Chouhan**

Modéliser un homme en entier  
**Renaud Persiaux**

**RISQUE SISMIQUE** 18

Simulation sismique : une nouvelle approche  
**Marie Schall**



© CEA

# AIRE

## AUTOMOBILE

Les voitures en modèles  
Marie Schal

## INSOLITE

La modélisation là où on ne l'attend pas  
Dominique Chouhan

## MATÉRIAUX

Le laser mégajoule, un colosse aux pieds de verre  
Xavier Muller

## ENVIRONNEMENT

La qualité de l'air sous surveillance  
Dominique Chouhan

## PHYSIQUE DES PLASMAS

Simuler la fusion nucléaire  
Dominique Chouhan

## CLIMAT

Réduire les incertitudes  
du changement climatique  
Renaud Persiaux

## DÉPOLLUTION

Traiter l'eau par le calcul  
Renaud Persiaux

## OCÉANOGRAPHIE

Circulation océanique à la loupe  
Dominique Chouhan

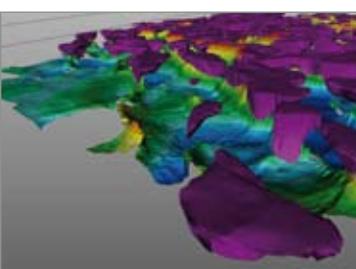
## TRIBUNE

Un tremplin pour la croissance de demain  
Didier Lamouche

## PORTFOLIO 36

### EXPLORATION DU SOUS-SOL 36

Xavier Muller  
Pétrole, des "supercalculs" à tous les étages



- Rechercher l'or noir 38
- Rendre plus fiable l'échographie sismique 39
- Améliorer le raffinage 40
- Transformer le pétrole 41

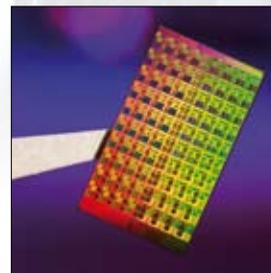
## TECHNOLOGIES 42

### INFORMATIQUE VERTE 42

Le calcul scientifique se met au "vert"  
Léo Gerat

### GRILLE 46

Les ordinateurs jouent collectif  
Léo Gerat



### MULTICŒUR 48

Des puces avec toujours plus de cœurs  
Léo Gerat

### HYBRIDE 52

Calcul intensif : un jeu d'enfant ?  
Isabelle Bellin

26

27

28

32

33

35

### FUTUR 53

Terrasser le pétaflops : un partenariat public-privé unique en Europe  
Sophie Houssiaux et Pierre Leca

En route pour l'exaflops  
Léo Gerat

### INFRASTRUCTURES 56



La recherche européenne en première ligne  
Jane Nicholson

# Le Calcul haute performance : une technologie clé



© CEA

**Bernard Bigot**, administrateur général du Commissariat à l'énergie atomique (CEA)

Dans cette interview croisée, Bernard Bigot, administrateur général du Commissariat à l'énergie atomique, acteur majeur en France en matière de recherche, développement et innovation, et Achim Bachem, coordinateur du projet PRACE<sup>(1)</sup> et pré-

**Téraflops, pétaflops, exaflops<sup>(2)</sup>... La capacité des supercalculateurs ne cesse de croître. Jusqu'où ira cette compétition internationale ? La simulation est-elle vraiment indispensable ?**

**Achim Bachem :** Il ne s'agit

correspondants. Comme le souligne Achim Bachem, l'expérimentation est parfois impossible. J'ajouterai que dans d'autres cas, comme les recherches sur les médicaments, la science des matériaux ou la chimie, elle est envisageable, mais avec un ensemble de combinaisons hors de portée. Sachant que la complexité des phénomènes considérés va croissant, le besoin en calcul intensif ne cessera d'augmenter.

pas seulement de capacité, mais de la possibilité de résoudre les problèmes actuels les plus complexes : changement climatique, énergie, matériaux, biologie, médicaments... Aux côtés de la théorie et de l'expérimentation, la simulation est le troisième pilier de la science. Grâce aux générations présentes et futures de supercalculateurs, nous entrons dans une nouvelle ère. Dans de nombreux domaines où l'expérimentation est impossible, comme le changement climatique ou l'astronomie, la simulation est souvent la seule solution. Dans d'autres, comme les crashes d'avion ou les essais de combustion, les expérimentations sont limitées. La simulation apporte une réponse réaliste à ces problèmes complexes. Et cette complexité va croissant à

l'instar de la modélisation climatique : même les calculateurs les plus récents doivent tourner des années pour prédire le réchauffement climatique du siècle prochain alors que nous avons besoin d'une réponse rapide. Seules les prochaines générations de supercalculateurs, 100 à 1 000 fois plus puissants, seront à la hauteur.

**Bernard Bigot :** Cette représentation correcte des phénomènes est le résultat d'années de recherche, qui ont permis de comprendre ces phénomènes physiques complexes, de l'échelle nanométrique à celle de l'univers, et de concevoir les modèles physiques

**L'industrie est-elle concernée ?**

**B. B. :** Oui et parfois au plus haut point à l'instar de l'énergie nucléaire : construire une nouvelle centrale suppose des modélisations pointues de transferts de chaleur, de neutronique, de matériaux... De même, la simulation est indispensable pour gérer des réseaux de milliers d'éoliennes. La sécurité, les performances économiques, l'économie de matières premières conduisent inéluctablement l'industrie vers la modélisation.

**A. B. :** Citons aussi l'industrie aéronautique et EADS, dont la compétitivité dépend en partie de ces technologies. Son dernier avion de ligne, l'A380, n'aurait jamais pu être conçu si rapide-

ment, sans les compétences européennes en calcul intensif. Il n'y a aucun intérêt à mener de tels développements à une échelle nationale.

**L'Europe serait-elle la seule échelle pour le calcul haute performance (HPC) ?**

**A. B. :** Oui. Entre autres pour des industries européennes comme l'aéronautique ou l'aérospatiale. Nous devons tirer profit de nos développements technologiques, associer nos compétences et nos connaissances en Europe et donner à nos industriels accès à

« Grâce aux générations présentes et futures de supercalculateurs, nous entrons dans une nouvelle ère »

(1) Partnership for Advanced Computing in Europe.

(2) Un téraflopp, un pétaflopp, un exaflopp correspondent respectivement à des capacités de traitement de  $10^{12}$ ,  $10^{15}$ ,  $10^{18}$  opérations par seconde.

# Performance est le pour l'Europe

sident du Forschungszentrum Jülich, le plus grand centre de recherche interdisciplinaire allemand, nous livrent leur vision de la situation européenne en matière de calcul haute performance. Ils tracent le chemin à suivre.

Propos recueillis par  
Isabelle Bellin

ces moyens de calcul. Ces outils sont trop coûteux à l'échelle nationale.

**B. B. :** Je définirai trois niveaux d'infrastructures. Un premier à l'échelle européenne avec des machines de classe mondiale, que nos industriels et nos chercheurs puissent tester à l'état de prototype et utiliser à bon escient dès leur commercialisation. Construire de tels calculateurs suppose une étroite collaboration entre recherche et industrie tant pour le matériel que pour le logiciel. Le deuxième niveau concerne les nombreuses infrastructures, certes puissantes, mais à base de technologies éprouvées qui peuvent être gérées à l'échelle nationale. Enfin, au troisième niveau, celui d'un institut ou d'une entreprise, des calculateurs standard, moins chers et moins puissants, suffisent.

## Sur quelles bases faut-il concevoir les machines de classe mondiale ?

**B. B. :** Celles du projet PRACE, dont l'objectif est de réunir, en Europe, quelques infrastructures pétaflopiques et l'expertise correspondante (voir article p. 56). Nous réfléchissons à la meilleure organisation européenne dans ce sens pour nous donner les mêmes armes que les Américains, les Japonais et bientôt les Chinois.

**A. B. :** C'est une question stratégique. Ces supercalculateurs financés par PRACE – l'un d'eux pourrait être le prototype que nous proposons avec le CEA, fourni par le constructeur français Bull et équipé de la dernière puce d'Intel (Xeon Nehalem) – apporteront un énorme avantage technologique mondial, comparés aux calculateurs sur le marché. Pour être dans la course, l'Europe doit développer ces technologies clés. C'est le sens de l'accord de coopération que nous avons signé l'an dernier avec

le CEA. Il est crucial que des laboratoires d'envergure comme les nôtres unissent leurs forces et montrent le potentiel européen. En marge des aspects technologiques, nous devons aussi former les futurs ingénieurs en science de la simulation.

## Comment se traduit cette vision franco-allemande du calcul intensif en termes de simulation ?

**A. B. :** L'exemple le plus éloquent est celui de la fusion nucléaire, où le CEA et le FZJ travaillent main dans la main sur les technologies du futur supercalculateur européen dédié, en construction à Jülich. La bonne nouvelle est que cette machine est conçue en Europe avec le français Bull, Intel, l'allemand ParTec et l'israélien Melanox. Preuve s'il en faut que nous avons les compétences.

**B. B. :** Jülich a l'envergure pour accueillir cette infrastructure dont les responsables ont choisi les caractéristiques techniques après un débat nourri sur la base de notre expérience du calculateur Tera 10, installé au CCRT<sup>(3)</sup> de Bruyères-le-Châtel. Nous coopérons sur bien d'autres sujets scientifiques : images de synthèse, nanosciences, nouvelles technologies pour l'énergie comme les piles à combustible, stockage de l'énergie, sciences des matériaux, technologies quantiques, biophysique, sciences de la terre et de l'atmosphère... Quel que soit le sujet, nous avons besoin des plus puissants calculateurs. Pour chaque application, ce sont les chercheurs qui définissent les outils les plus adaptés. Dans le cadre de PRACE, ils pourront collaborer aisément.

« Il faut une variété de stratégies »



Achim Bachem,  
président du  
Forschungszentrum  
Jülich (FZJ) et  
coordinateur du  
projet PRACE.

© Forschungszentrum Jülich

(3) Centre de calcul, recherche et technologie.

### Quelle est justement, selon vous, la meilleure infrastructure ?



**B. B. :** Il n'y a pas de solution idéale, valable pour toutes les applications. Certains ont besoin de beaucoup de mémoire, d'autres d'une vitesse élevée de transmission de données, ou encore de beaucoup de puissance. Il faut une variété de stratégies.

Cela passera par le parallélisme, mais plusieurs voies sont possibles. L'Europe peut assurément proposer des solutions technologiques inédites pour concevoir des machines spécifiques adaptées à des applications dédiées. Nous pouvons, en particulier, guider ces choix selon nos sévères préoccupations en matière d'économie d'énergie.



**A. B. :** Réduire la consommation d'énergie est le principal verrou technologique à résoudre, sinon il faudra construire une centrale électrique pour chaque machine exaflopique ! L'autre défi est de concevoir des algorithmes et des logiciels adaptés aux machines massivement parallèles, pour chaque application. Dans ce but,

nous avons choisi de proposer dans PRACE une variété de technologies adaptées à différentes applications et disséminées dans toute l'Europe.

### L'année dernière, le président Nicolas Sarkozy a proposé à la chancelière Angela Merkel d'unir leurs efforts en matière de calcul intensif. Où en est-on ?

**A. B. :** Nous sommes tous convaincus qu'il faut développer les compétences européennes dans ce domaine. Le sujet fait l'objet de nombreuses discussions en Allemagne et en France. Nous devons mettre nos efforts en commun pour promouvoir nos activités tant dans le logiciel que dans le matériel. Nous avons des entreprises comme Bull en France et SAP en Allemagne, l'un des trois premiers éditeurs de logiciels dans le monde. De plus petits pays, comme la Finlande, la Suède ou de nouveaux Etats membres, soutiennent aussi le HPC. L'un de nos objectifs est de convaincre des entreprises mondialement reconnues d'installer leurs laboratoires de R&D en Europe.

**B. B. :** On ne peut tout simplement pas se permettre, pour des technologies aussi stratégiques, de confier ces développements à d'autres et d'acheter ces machines hors d'Europe comme n'importe quelle autre infrastructure. Nous devons avoir un certain nombre de sociétés durablement implantées en Europe, disposant des compétences et de l'expertise tant sur le logiciel que sur le matériel. Nous devons convaincre des entreprises de produire et d'investir en Europe, que ce soit sur la conception, la

production ou la maintenance de ces outils. Le président de la République m'a confié la mission de réfléchir aux meilleurs moyens d'y parvenir. Je lui ai remis mon rapport, il y a quelques mois. Je suis sûr que nous aurons une réponse sous peu. L'Allemagne et la France sont force de propositions sur ces sujets, mais nous devons y associer plus largement d'autres pays comme l'Espagne, la Grande-Bretagne, les Pays-Bas, l'Italie... Nous y travaillons et je suis convaincu que cela portera ses fruits. C'est néanmoins une décision stratégique d'envergure qui nécessite une analyse approfondie.

### Les Etats-Unis soutiennent largement leur industrie du HPC depuis les années 1990. Le Japon fait de même. Qu'en est-il en Europe ? L'effort est-il suffisant ?

**A. B. :** L'Europe, par le biais de PRACE, mais aussi la France et l'Allemagne soutiennent financièrement leurs industries pour concevoir les supercalculateurs d'aujourd'hui et de demain. Grâce à cela, nous avons beaucoup progressé ces deux à trois dernières années. La course continue et nous devons en être. Nous avons les moyens d'être parmi les meilleurs mondiaux tant en termes de calculateurs que de recherches à base de simulation.

**B. B. :** J'insiste toutefois : nos Etats doivent investir plus dans le HPC, comme le font les Etats-Unis ou le Japon. L'industrie ne peut, seule, financer la R&D de ces technologies. A l'instar des Etats-Unis, nous devons aider nos organismes publics de recherche pour qu'ils travaillent main dans la main avec l'industrie et qu'ils aient les moyens de lui acheter les prototypes développés, cela selon les règles de la concurrence que doit se donner l'Europe, dans ce domaine. Cela me semble essentiel, compte tenu du rôle stratégique de ces technologies. L'Europe peut même à coup sûr y parvenir à moindre coût. L'objectif n'est pas de dépenser autant d'argent que les autres, mais de disposer de ce qui est nécessaire. La prochaine génération de calculateurs pétaflopiques devrait être au point en 2012. Nous la préparons, mais il faut poursuivre nos efforts, tirer parti des investissements consentis pour être dans la course pour la génération suivante et ainsi de suite.



Simulation du trafic aérien pour la conception des futurs postes de contrôle.

# L'Europe doit financer des partenariats "public-privé"

Entretien avec Jean Gonnord, chef du projet simulation numérique et informatique au CEA.

Propos recueillis par  
Isabelle Bellin

**Depuis 2005, année, selon vous, de la prise de conscience en France et en Europe de l'importance du calcul haute performance hors du secteur de la défense, où en est-on ?**

**Jean Gonnord :** Un très gros effort a été accompli en France et en Europe, qui a permis de ramener nos moyens de calcul intensif à un "niveau normal", compatible avec notre puissance industrielle et de recherche. L'Europe est désormais dans la course, avec 37 % de la puissance mondiale de calcul disponible dans le dernier Top 500 des plus gros calculateurs du monde (novembre 2008). Le CEA y participe largement : avec le supercalculateur Tera 10 qui figurait au 5<sup>e</sup> rang mondial en 2006, puis avec le supercalculateur installé en 2007 au CCRT<sup>(1)</sup> de Bruyères-le-Châtel. Plus récemment, c'est la mise en place de Genci<sup>(2)</sup> en France, qui coordonne les investissements de supercalculateurs, et du projet PRACE<sup>(3)</sup> en Europe, qui prépare l'installation pour 2010 de 3 à 5 calculateurs de classe mondiale, qui a changé la donne (voir article p. 56). Le milieu politique accorde désormais au calcul intensif la place qu'il mérite. C'est une excellente nouvelle. Mais cela ne suffit pas.

**Que demandez-vous de plus ?**

Plus personne ne conteste l'intérêt et le caractère stratégique du calcul intensif. Pour le secteur de la défense et la dissuasion nucléaire, bien sûr. Pour la recherche scientifique, également, pour laquelle les simulations sont désormais un pilier fondamental. Mais, on l'oublie encore trop souvent, le calcul intensif est aussi stratégique pour la compétitivité de nos entreprises et, d'une manière générale, pour notre société. C'est le seul moyen de réduire le cycle conception-production, que ce soit la conception d'un produit industriel ou celle d'un médicament. En la matière, la puissance se traduit en vitesse de développement, le nerf de la guerre. Or, il faut savoir que les grands calculateurs arrivent sur le marché deux à trois ans après le premier prototype. Autant de gagné pour ceux qui peuvent en bénéficier au moment de leur conception.

**Vous suggérez que, pour être compétitif, il faut développer les calculateurs au plus près des industriels qui en ont besoin en Europe ?**

Absolument. Et nous sommes de plus en plus nombreux à en être convaincus en Europe. Il faut sans tarder mettre en place un modèle européen pérenne de financement de la R&D du calcul intensif pour soutenir nos propres entreprises du domaine et faire bénéficier nos industriels des derniers-nés des calculateurs. Ni plus ni moins que ce que font les Américains, les Japonais et désormais les Chinois. L'Etat américain, par exemple, finance tous les ans ses entreprises, IBM, Cray et les autres, à hauteur de 300 millions de dollars pour la R&D, et leur garantit l'achat de leurs prototypes pour plus d'un milliard de dollars par an.

**Comment imaginez-vous ce financement en Europe ?**

Il suffirait que l'Europe finance 50 millions d'euros par an de R&D et investisse 100 millions d'euros par an dans une machine prototype. Pour cela, nous proposons des partenariats public-privé à 50/50. C'est ce que nous faisons avec Bull pour la R&D de notre futur calculateur, Tera 100 (voir article p. 53). Nous avons créé un laboratoire commun de plus de 60 personnes, sur le site de Ter@tec près du CEA de Bruyères-le-Châtel, première technopole européenne du HPC. D'ici à un an, il devrait réunir 200 personnes pour travailler sur l'architecture de futures machines. Sur le même modèle, nous avons signé avec Genciet l'Université de Versailles-Saint-Quentin un accord avec Intel prévoyant la mise en place, avant la fin de l'année, d'un laboratoire commun de 60 ingénieurs sur le même site. Baptisé Ex@tec, il aura pour tâche de concevoir les logiciels adaptés aux architectures matérielles permettant d'atteindre l'exaflops<sup>(4)</sup>. C'est la reconnaissance, par le plus grand fabricant mondial de processeurs, de l'expertise des équipes de recherche française dans le domaine du HPC. D'ici à fin 2010, nous espérons réunir à Ter@tec plus de 1 000 ingénieurs du public et du privé.



Jean Gonnord,  
chef du projet  
simulation  
numérique et  
informatique au  
CEA.

(1) Centre de calcul, recherche et technologie.

(2) Grand équipement national de calcul intensif.

(3) Partnership for Advanced Computing in Europe.

(4) Un exaflops correspond à une capacité de traitement de 10<sup>18</sup> opérations par seconde.

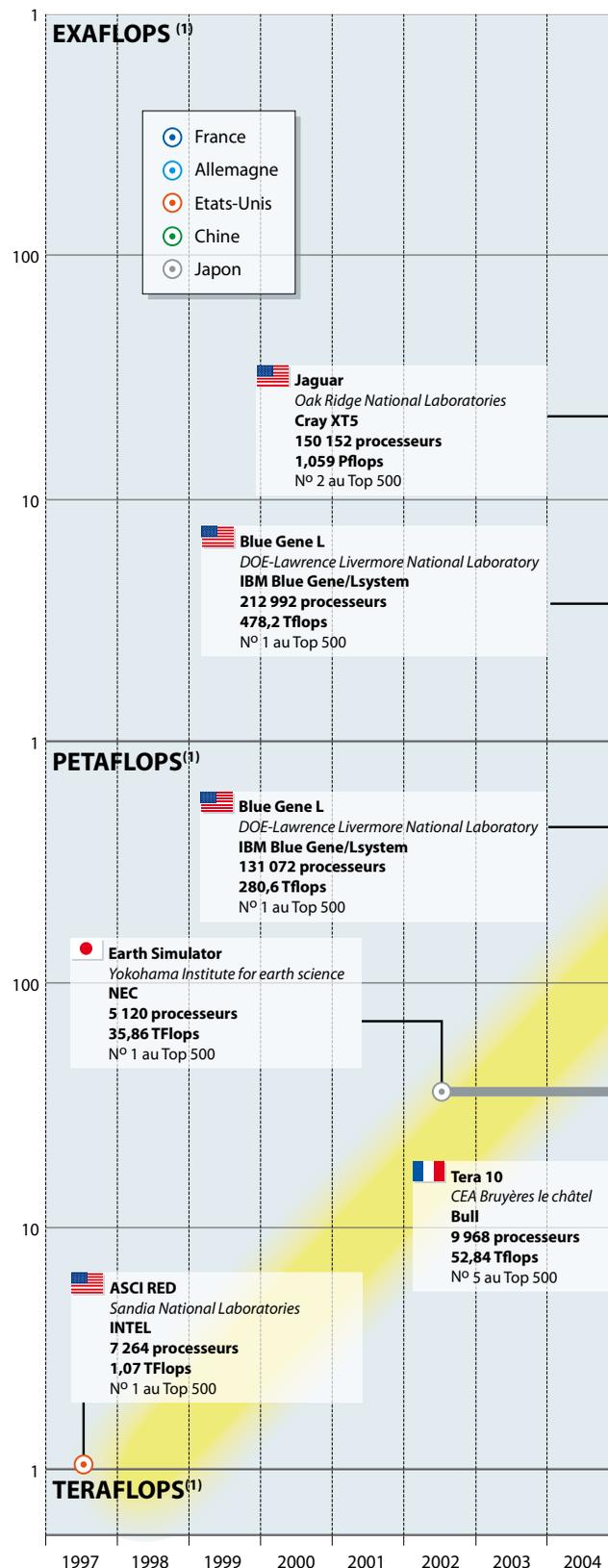
# L'Europe revient dans la

## Une course sans fin ?

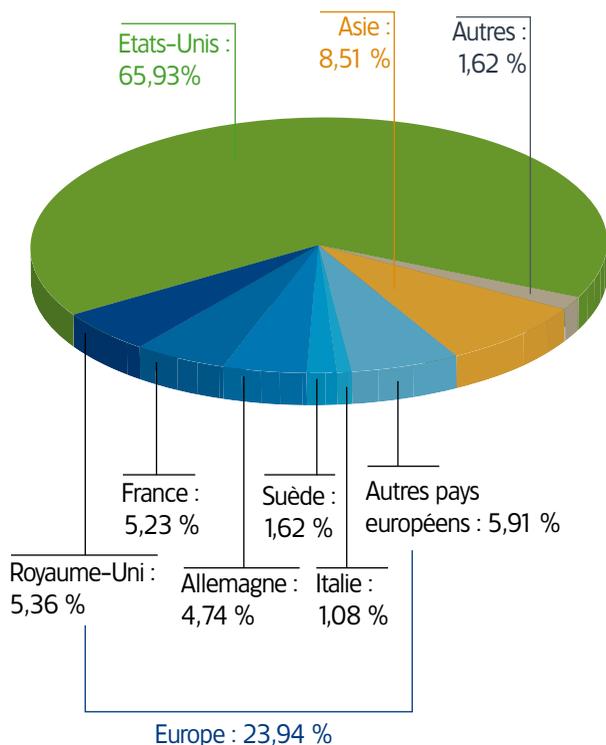
Deux fois par an, en juin et en novembre, un palmarès des 500 calculateurs les plus puissants du monde est établi sur la base de l'exécution d'un programme étalon, baptisé Linpack, par des chercheurs de l'université de Mannheim (Allemagne), ainsi que du *Lawrence Berkeley National Laboratory* et de l'université du Tennessee (Etats-Unis). Au palmarès de novembre 2008, deux machines ont franchi la barre du pétaflops (10<sup>15</sup> opérations par seconde) : Roadrunner (IBM) et Jaguar (Cray). Comme cinq autres machines du Top 10, elles sont installées dans des laboratoires nationaux américains, soutenus par le ministère de l'Energie (DOE).

La "courbe" jaune ci-contre reflète l'évolution des machines les plus puissantes au monde au moment de leur installation. Certaines sont restées numéro 1 au palmarès pendant plusieurs mois, à l'instar d'Earth Simulator et de Blue Gene L. Les Etats-Unis dominent toujours largement le classement. La "courbe" bleue représente l'évolution de la puissance installée en Europe. Certaines machines européennes se classent dans le Top 10 à 15 au moment de leur installation. D'ici à 2010, des machines encore plus puissantes sont prévues ; l'exaflops pourrait être atteint vers 2020, si l'on en croit IBM, Cray ou Bull.

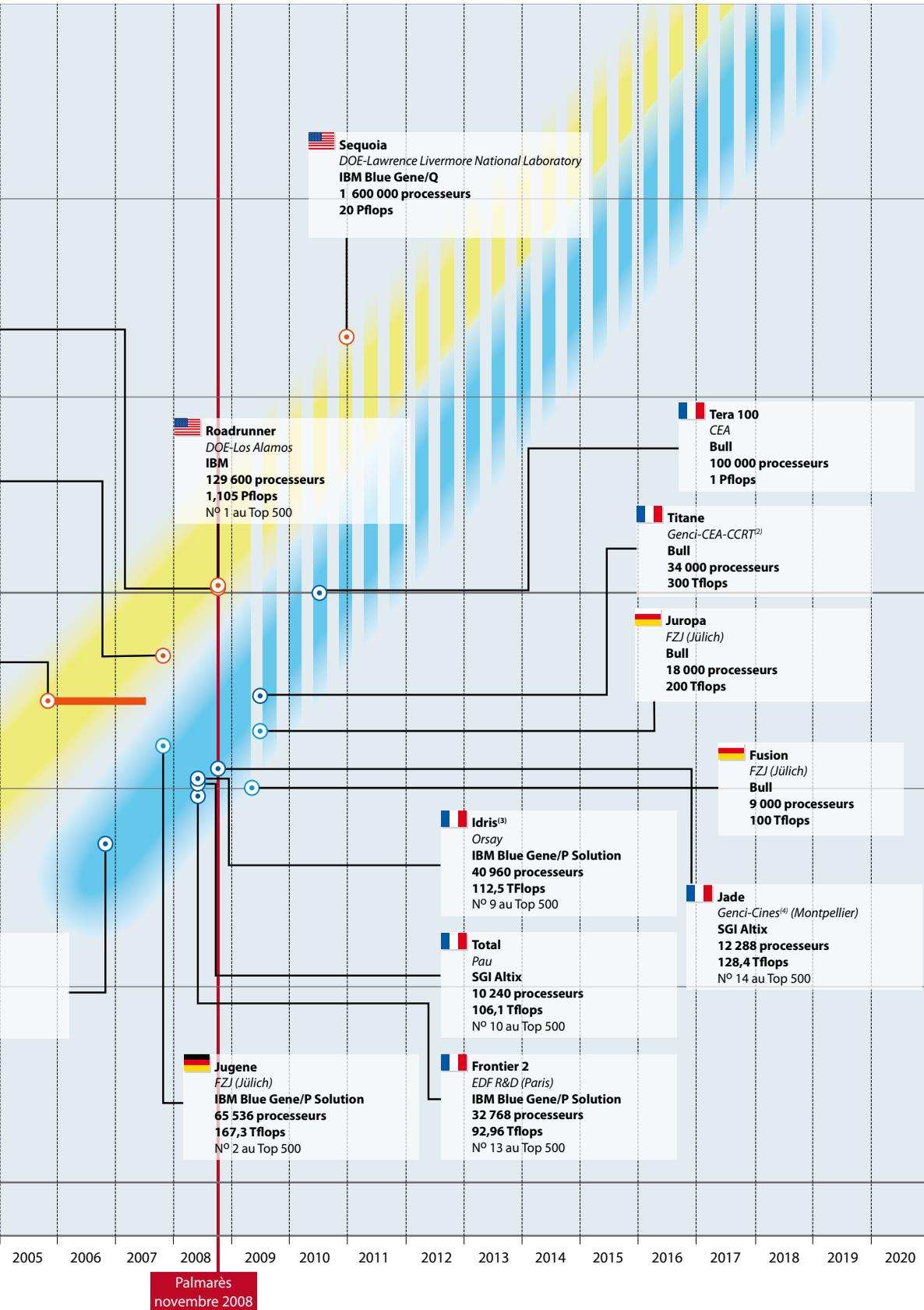
Nombre d'opérations par seconde



## Puissance de calcul installée par pays



Isabelle Bellin,  
journaliste scientifique



(1) Un téraflops, un pétaflops, un exaflops correspondent respectivement à des capacités de traitement de  $10^{12}$ ,  $10^{15}$ ,  $10^{18}$  opérations par seconde.

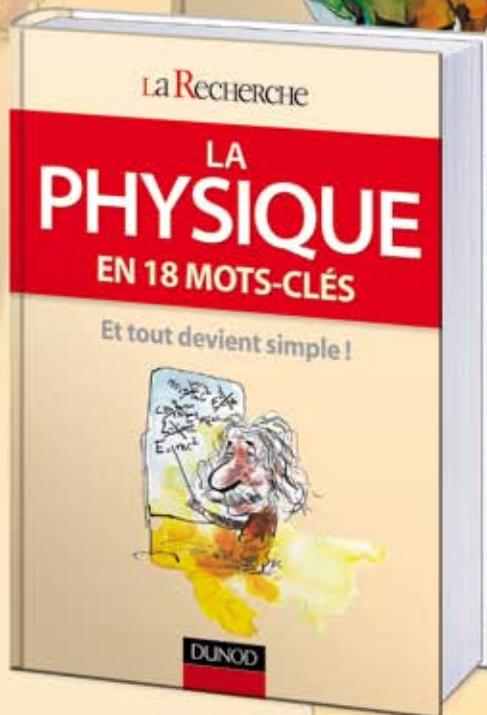
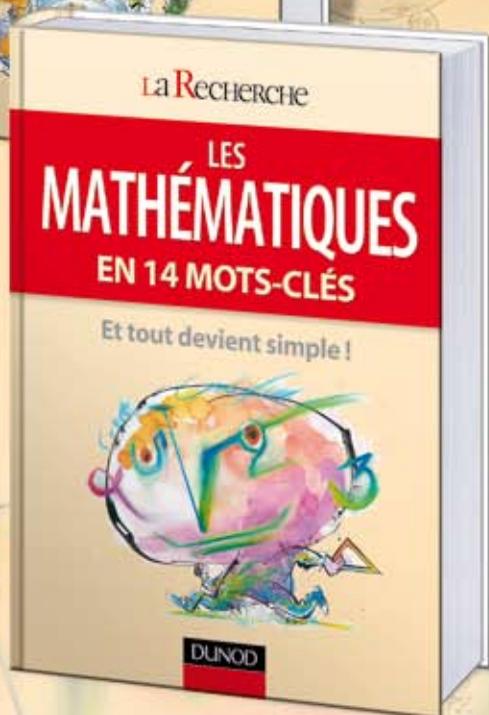
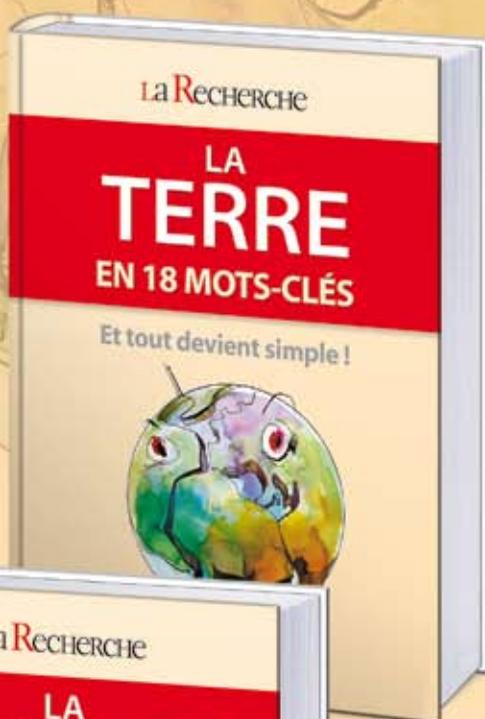
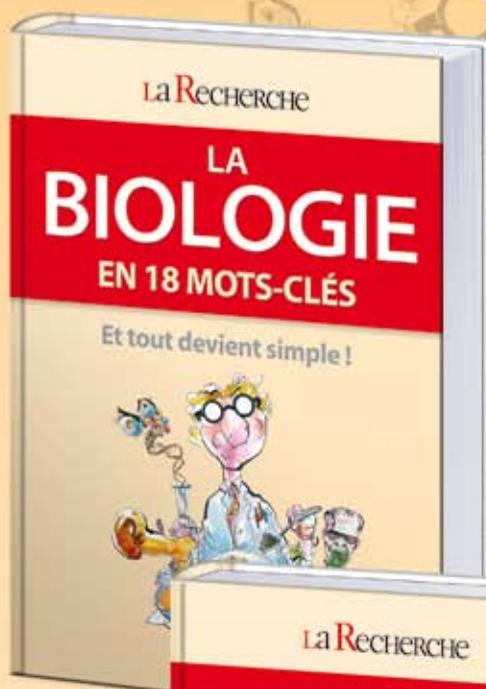
(2) Centre de calcul, recherche et technologie.

(3) Institut du développement et des ressources en informatique scientifique.

(4) Centre informatique national de l'enseignement supérieur.

© RICHARDPALMERGRAPHICS.COM

# Des notions clés en toute simplicité... pour ne plus jamais caler !



Tous nos ouvrages sont disponibles en librairie

Catalogue complet  [dunod.com](http://dunod.com)

La Recherche

  
DUNOD  
ÉDITEUR DE SAVOIRS

# Le calcul intensif au service du cancer

Calculer très précisément, lors des radiothérapies, la dose de rayonnements ionisants à “déposer” à partir des images du corps du patient a longtemps relevé du rêve impossible à réaliser. Le calcul haute performance a pourtant changé la donne.

Renaud Persiaux,  
journaliste scientifique

Comment optimiser les calculs de doses radiothérapeutiques, auxquelles plus de la moitié des patients atteints d'un cancer sont soumis, pour améliorer le traitement des tumeurs, tout en épargnant les tissus sains avoisinants ? L'exercice relève de la haute voltige : il s'agit d'élaborer une simulation complexe du positionnement des faisceaux de photons ou électrons en question, convergeant vers les cellules tumorales, le tout à partir des images scanner du patient.

Calculer ces doses est une activité quotidienne au service de physique médicale du département de radiothérapie de l'Institut Gustave-Roussy où Aurélie Isambert est “physicienne médicale”.

« Les caractéristiques des faisceaux utilisés (forme, nature des particules) dépendent à la fois de la taille et de la localisation de la tumeur ciblée. Les méthodes analytiques utilisées actuellement pour réaliser ces calculs sont rapides, mais parfois moins satisfaisantes dans certaines configurations, par exemple, en présence de milieux hétérogènes comme les poumons ou les os. Une autre méthode de calcul plus exacte, fondée sur une méthode statistique dite de Monte-Carlo, est connue depuis des années mais impossible à utiliser au quotidien, car trop gourmande en temps de calcul. » Elle consiste à simuler des tirages aléatoires pour étudier les interactions entre les particules et les régions du corps humain traversées.

« Plus on simule de particules, plus le calcul de la dose est précis, mais plus la puissance de calcul nécessaire est importante : avec un ordinateur “grand public”, le calcul de dose pour un ensemble de faisceaux d'irradiation peut prendre plusieurs jours. Alors que nous avons besoin d'un système très rapide (moins de

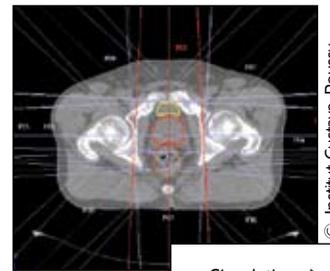
dix minutes) pour éviter les embouteillages dans les services », explique Aurélie Isambert. Développer l'utilisation de la méthode de Monte-Carlo, en routine et à distance, pour obtenir une incertitude statistique de seulement 2 % sur les doses en dix minutes maximum, tel était l'objectif du projet Télédos, coordonné par Bull, qui a regroupé des spécialistes dans le domaine des rayonnements ionisants et de l'informatique. Financé par l'Agence nationale de la recherche, il s'est achevé en février dernier avec succès.

## Une première mondiale

« C'est le premier projet de ce type dans le monde, après quelques tentatives, américaines notamment, mais qui n'ont jamais dépassé le stade expérimental en raison de la lourdeur et du coût des dispositifs », précise Mehdi Benkebil, directeur R & D chez Dosisoft, une spin-off de l'Institut Gustave-Roussy et de l'Institut Curie, partenaire industriel du projet. Spécialisée dans les logiciels pour radiothérapie, elle héberge le supercalculateur dédié construit par Bull.

C'est une architecture à taille humaine : un gros pavé de 60 cm de largeur sur 90 cm de hauteur, abritant un grand nombre de microprocesseurs classiques, jusqu'à 99 cœurs de calcul en réseau. Le tout pour seulement 20 000 euros.

« Nous avons parallélisé le code de calcul, en collaboration avec le CEA de Saclay, pour l'utiliser sur plusieurs processeurs et accélérer le calcul de la dose sans perdre en efficacité », souligne Mehdi Benkebil. Prochaine étape : contacter les centres anticancéreux potentiellement intéressés par ce nouveau service de télé-médecine.



© Institut Gustave-Roussy

Simulation, à l'aide du logiciel ISOgray™ (Dosisoft), du positionnement des faisceaux qui seront réalisés lors du traitement.



Calcul de dose en moins de 10 minutes.

© Dosisoft

**Une prédiction dosimétrique plus juste et plus précise**



© Institut Gustave-Roussy

Appareil de radiothérapie : accélérateur linéaire Oncor (Siemens OCS).

# La solution viendra-t-

Transformer un instrument de physique fondamentale en un outil à vocation thérapeutique. En clair, concevoir des lasers capables de produire les protons pour traiter des tumeurs cancéreuses : tel est l'objectif du projet Saphir.

**Renaud Persiaux,**  
journaliste scientifique

La protonthérapie est une technique de traitement des tumeurs cancéreuses plus précise et plus sûre que la radiothérapie classique à rayons X : elle fait appel à des protons (noyaux d'hydrogène) beaucoup plus difficiles à produire que les rayons X mais très précis d'un point de vue "balistique". Particulièrement adaptée, notamment chez l'enfant, à des cancers très localisés dans des zones sensibles comme l'œil ou le cerveau, elle limite les risques d'apparition de tumeurs secondaires en évitant de toucher aux tissus sains. Malgré ces atouts, elle est peu diffusée (en France, à Orsay et Nice), en raison d'une contrainte de poids : la production de protons nécessite d'importants accélérateurs de particules.

Plusieurs équipes de recherche dans le monde tentent depuis quelques années de produire ces protons au moyen de petits lasers à impulsions ultra-brèves. Parmi eux, Erik Lefebvre, physicien au CEA, Victor Malka et Jérôme Faure, du Laboratoire d'optique appliquée (ENSTA - Ecole polytechnique), tous trois récompensés par le prix La Recherche 2008.

**L'accélération du proton fait intervenir une physique complexe**

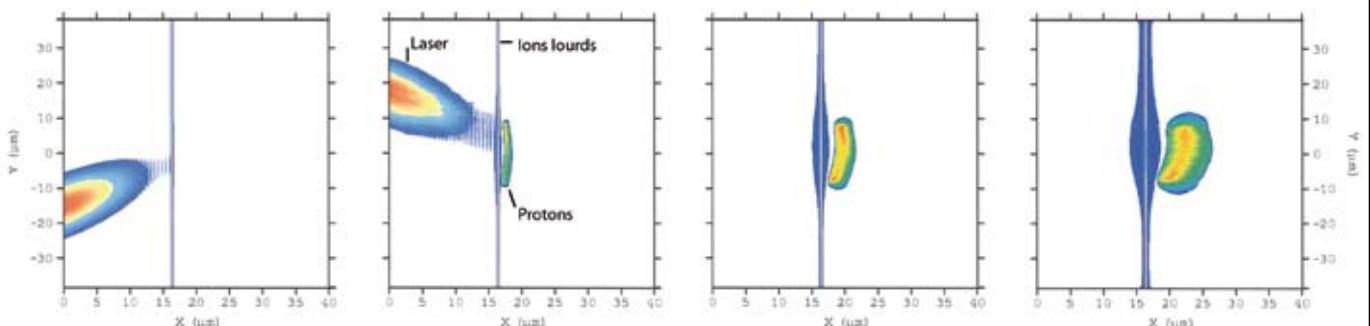
L'idée d'utiliser des petits lasers est apparue fortuitement, en 2000, au laboratoire Lawrence Livermore (Californie) quand l'équipe de Tom Cowan réussit à accélérer des protons à l'aide de lasers à impulsions ultra-brèves, de l'ordre de quelques centaines de femtosecondes ( $10^{-15}$  secondes) : des outils de recherche de physique fondamentale, malheureusement bien loin de toute vocation thérapeutique.

En effet, pour détruire la tumeur et seulement elle, les protons doivent être accélérés à un niveau d'énergie bien précis : 70 MeV (millions d'électronvolts) pour les yeux, 200 MeV pour le cerveau, par exemple. Or, « pour l'instant, même en mettant en œuvre une puissance lumineuse "colossale", les lasers à impulsions ultra-brèves accélèrent les protons à des niveaux bien plus faibles et trop variables, entre 1 et 10 MeV », explique Erik Lefebvre.

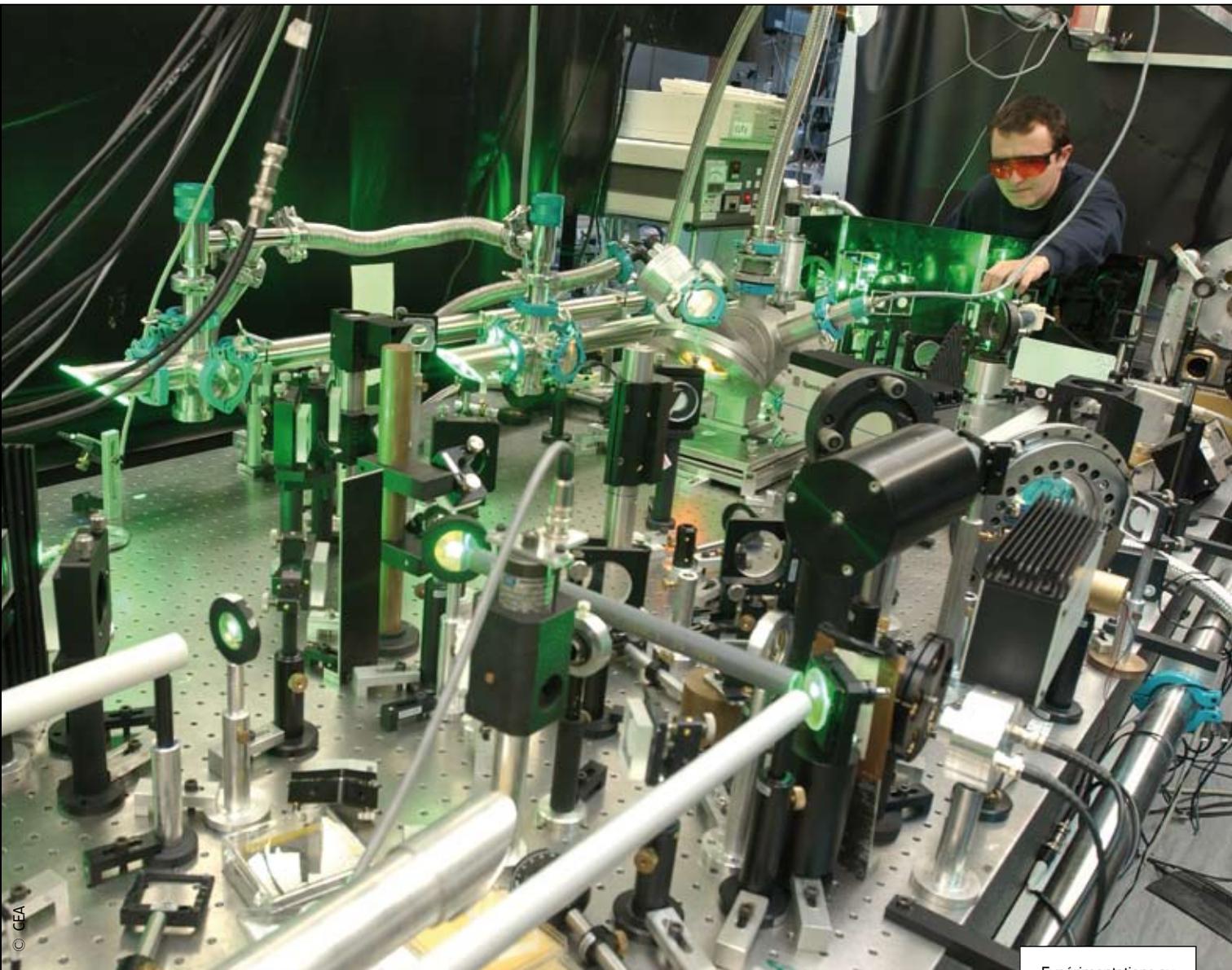
Quelles modifications effectuer sur les lasers de laboratoire pour gagner en énergie et en précision du faisceau sans faire exploser la puissance électrique nécessaire ? On est encore loin de le savoir. Car l'accélération du proton fait intervenir une physique complexe. Les lasers accélèrent d'abord des électrons, dont les niveaux d'énergie sont tels qu'ils autorisent le déclenchement de nombreux phénomènes physiques, potentiellement néfastes ou sources de

### Simulation de l'accélération de protons

Une fine couche de protons est déposée au centre de la face de droite d'une cible solide mince. Une impulsion laser courte et intense frappe la cible du côté opposé au dépôt de protons, accélérant des électrons de la cible à haute énergie (image 1). Une partie de l'impulsion est réfléchiée par la cible (image 2). Le champ électrique créé par les électrons énergétiques sur la face opposée à l'impact laser accélère les protons qui s'y trouvent, qui se détachent progressivement de la cible (images 3 et 4).



# elle des simulations ?



fluctuations expérimentales. Ces électrons forment ensuite un plasma, sorte de nuage diffus chargé négativement, en état d'équilibre. Ce plasma entoure une cible pourvue d'une couche chargée positivement avec des protons, et accélère ces derniers selon un faisceau très étroit. Voilà à peu près l'état des connaissances. C'est là qu'entre en jeu le calcul haute performance. Pour guider le travail des chercheurs, des simulations très réalistes des interactions laser-matière sont nécessaires.

Or, « ces phénomènes ne relèvent pas d'une description linéaire, explique Erik Lefebvre. Pour résoudre les équations, on arrive donc rapidement à simuler un système de milliards de particules se déplaçant dans un volume de centaines de millions

de mailles, pendant des milliers de pas de temps. Une quantité d'opérations colossales, qui n'est à la portée que des gros calculateurs scientifiques massivement parallèles. »

Réussir cette modélisation sera l'un des volets du projet Saphir, qui doit démontrer expérimentalement l'accélération de protons jusqu'à des énergies de 150 MeV. Saphir implique le CEA, le Laboratoire d'optique appliquée, l'Institut Curie, l'Institut Gustave-Roussy, mais aussi la PME Amplitude Technologie, qui fournit les lasers aux laboratoires de recherche, Imagine Optic et Dosisoft, engagés respectivement dans les applications laser et radiothérapeutiques. Résultats prévus pour 2015, avant d'espérer entamer les premiers essais cliniques.

Expérimentations au Laboratoire d'optique appliquée (de l'Ensta et de l'Ecole polytechnique) de petits lasers pour produire des protons et traiter le cancer.

# Cerveau : de la structure à la fonction

Les performances de l'imagerie cérébrale couplées à celles des ordinateurs ont ouvert la voie à une vraie révolution dans les neurosciences.

Dominique Chouchan,  
journaliste scientifique

Quelle est la zone du cerveau impliquée dans la lecture ou dans le calcul ? Peut-on diagnostiquer de manière précoce des pathologies telles que la maladie d'Alzheimer, de Parkinson... ? Autant de questions qui supposent de décrire les liens entre structure et fonction de chaque aire cérébrale. Pour ce faire, l'imagerie par résonance magnétique<sup>(1)</sup> fonctionnelle (IRMf) constitue un outil de choix. Des champs magnétiques élevés comme ceux produits sur la plate-forme NeuroSpin<sup>(2)</sup> du CEA à Saclay offrent de nouvelles perspectives en termes de résolution spatio-temporelle des images. Mais des images à leur compréhension, il reste le plus important : les traiter et les interpréter.

Née au début des années 1990, l'IRMf est une technique non invasive fondée sur l'observation des variations d'oxygénation du sang. Même si sa résolution temporelle (quelques secondes) est moins bonne que celle obtenue par magnétoencéphalographie (MEG), sa résolution spatiale est classiquement de l'ordre du millimètre... et elle sera de 300 micromètres avec le futur système IRM de 11,7 teslas de NeuroSpin. « Pour faire une cartographie fonctionnelle, l'IRMf est aujourd'hui la meilleure modalité possible », souligne Bertrand Thirion, responsable de l'équipe Parietal de l'Inria.

## Un véritable atlas fonctionnel du cerveau

L'un des enjeux est de mettre à la disposition des neurobiologistes des systèmes de repérage géométrique sur lesquels s'appuyer pour l'étude de l'activité cérébrale. Mais quel repérage choisir ? Les cartographies standard du cerveau sont insuffisantes car la forme du cerveau varie d'un individu à l'autre.

L'idée mise en œuvre par l'équipe Parietal de l'Inria est de se référer aux quelques dizaines de sillons séparant les aires cérébrales, qui correspondraient, selon les neurobiologistes, à des frontières entre zones fonctionnelles. Le problème est donc, à partir d'une image, d'identifier ces sillons, ce qui a été expérimenté avec succès grâce à des méthodes stochastiques (probabilistes) : « Nous sommes l'une des rares équipes dans le monde à avoir mis en rapport l'information géométrique donnée par les sillons et l'information fonctionnelle donnée par les cartes d'activité sur la surface du cerveau », indique Bertrand Thirion. A terme, ce type de travail pourrait contribuer à la réalisation d'un "atlas fonctionnel" du cerveau.

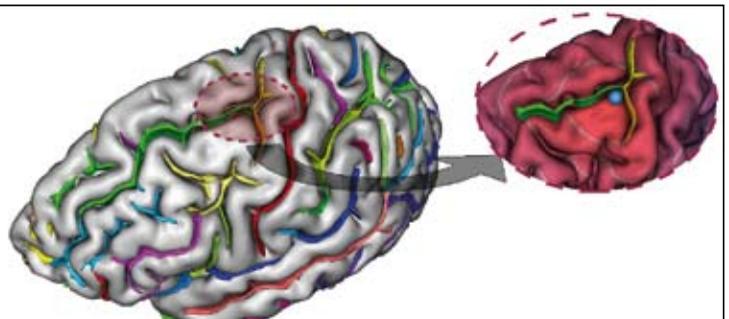
Autre question : comment le cerveau répond-il à tel ou tel stimulus ? Un aspect sur lequel l'équipe Parietal travaille avec le laboratoire Unicog (Inserm-CEA) que dirige Stanislas Dehaene. Par exemple, si l'on présente à un individu des nuages de points comprenant une quantité variable de points, son cerveau va réagir différemment selon cette quantité. « Nous avons réussi, par la seule observation de la zone activée, à prédire la quantité effectivement perçue par le cerveau », ajoute Bertrand Thirion. Au-delà de l'aspect fondamental, ce type de connaissances permettra de mieux comprendre certaines déficiences, en particulier dans le domaine du calcul ou du langage et, à terme, d'établir des critères de diagnostic. Cela suppose de mettre au point des méthodes de classification capables de discriminer entre fonctionnements normal et pathologique : « Trouver la zone qui différencie deux populations est un peu comme chercher une aiguille dans une botte de foin ! », commente le chercheur.

« L'IRM fonctionnelle est aujourd'hui la meilleure modalité possible »

(1) L'imagerie par résonance magnétique exploite, au sein d'un champ magnétique intense, le phénomène de résonance magnétique des noyaux d'atomes tels que les atomes d'hydrogène.

(2) Inaugurée fin 2006, la plate-forme NeuroSpin comprend, pour l'étude du cerveau humain, des systèmes IRM à 3 et 7 teslas et bientôt 11,7 teslas.

Sur cette représentation, on observe, à gauche, une carte anatomique des sillons et, à droite, la localisation d'une zone activée : le point bleu à proximité du croisement de trois sillons. Ce système de coordonnées locales (position par rapport aux sillons) permet une localisation plus précise qu'un système de coordonnées standard.



# Modéliser un homme en entier

Cap sur l'humain physiologique virtuel. Un projet européen vise à développer un cadre de travail global et unifié pour les chercheurs et les médecins. Avec à la clé de très nombreuses applications.

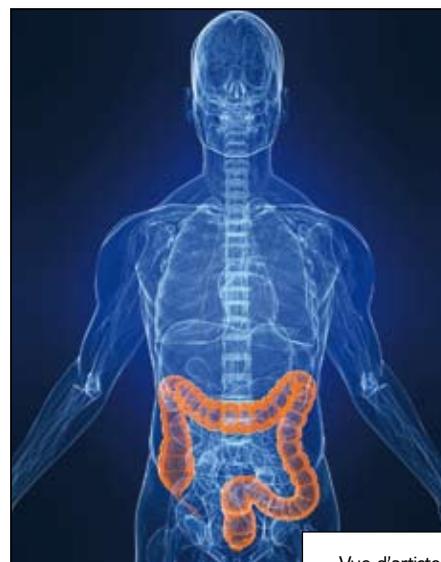
Renaud Persiaux,  
journaliste scientifique

**M**odéliser un corps humain en entier, ou plus précisément l'ensemble de ses mécanismes physiologiques, fantasme d'un auteur de science-fiction ? Non, c'est là le but ambitieux, mais très sérieux, d'un projet cadre européen baptisé *Virtual Physiological Human* (VPH) ou Humain physiologique virtuel en français. Pour le mener à bien, en juin 2008, a été lancée la mise en place, sur quatre ans et demi, d'un réseau d'excellence impliquant

ne concevant plus le corps comme une collection d'organes à traiter séparément, mais comme un tout constitué de plusieurs organes ; enfin le développement de concepts de prévention et de qualité de vie.

« Construire cet homme physiologique virtuel, c'est un peu comme essayer d'assembler un tableau unique à partir des pièces de plusieurs puzzles différents », explique Peter Coveney, directeur du Centre for Computational Science (University College

London) et l'un des deux responsables du projet. La plupart des modélisations impliquent le calcul haute performance, mais leur intégration demandera un travail complexe. « L'un des enjeux sera d'intégrer les différents modèles et de leur permettre de communiquer à travers un langage informatique commun (sans doute l'XML). » Autre enjeu crucial : l'utilisation d'algorithmes très particuliers, autorisant l'allocation rapide des différentes ressources de calculs aux urgences médicales. Première étape vers un calcul médical "à la demande", où les médecins emprunteront du temps de calcul sur les infrastructures de supercalculateurs pour optimiser leurs décisions.



© Fotolia

Vue d'artiste d'une anatomie humaine en 3D. En rouge, le colon.

## Cerveau : vers une chirurgie plus fine

Le projet Genius (*Grid-enabled neurosurgical imaging simulation*) vise notamment à optimiser le processus de décision médicale grâce à des images 3D du système vasculaire cérébral du patient.

Sur la base de programmes conçus par Peter Coveney et Marco Mazzeo (University College London), le système calcule une représentation des paramètres clés. Générés juste avant une opération, ils permettraient aux médecins de tester son résultat avant de la réaliser.

nombre d'universités, d'organismes de recherche et d'hôpitaux en Europe et en Nouvelle-Zélande.

Le projet est ambitieux : proposer, à terme, un cadre de travail global permettant à tous les chercheurs (académiques, cliniques et industriels) dans le monde entier de collaborer en même temps sur un modèle unique et intégré de corps humain. Objectif : mieux décrire et comprendre notre physiopathologie, faire des hypothèses prédictives et des simulations, développer et tester de nouvelles thérapies.

## Des soins personnalisés

Des cancers au virus du sida, de la conception de médicaments à la chirurgie fine : les applications devraient couvrir tout le champ de santé humaine. A la clé ? Des solutions de soins personnalisées calculées à partir des données individuelles du patient ; un besoin réduit en expérimentation animale et plus de tests *in silico* ; de nouvelles approches globales de la médecine,

## Virus du sida : du nouveau pour les profils de résistance

Actuellement, pour trouver les antirétroviraux les plus adaptés au profil de résistance du virus et au profil génétique du patient, les médecins doivent souvent tâtonner et utiliser des tests de génotypage assez compliqués et longs à faire. En 2008, en utilisant des simulations tournant sur les supercalculateurs, Peter Coveney et son équipe (University College London) sont parvenus à prédire le niveau auquel un traitement donné peut inhiber les enzymes virales présentant des résistances.

# Simulation sismique : U

Prédire l'impact d'un séisme. Rêve ou réalité ? Grâce à un logiciel de simulation développé par le département analyse, surveillance, environnement du CEA, une nouvelle méthode de modélisation permet aujourd'hui d'estimer la propagation des ondes sismiques et leurs effets sur les bâtiments. Retour sur une expérience qui apportera peut-être de nouveaux outils de prédiction.

Marie Schal,  
journaliste scientifique

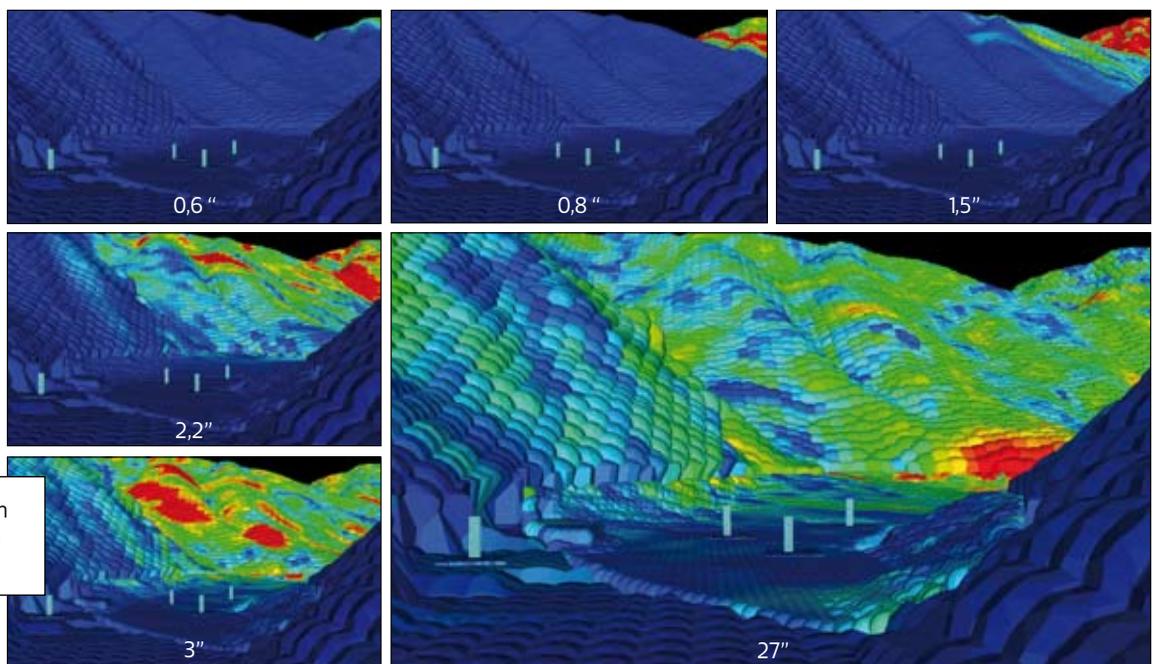
D'une magnitude de 5,5 sur l'échelle de Richter, le séisme s'est rapidement propagé dans la petite ville, située au creux d'une vallée alpine. Bien que construits sur un bassin sédimentaire, dont le sous-sol meuble piège l'énergie et amplifie fortement les ondes sismiques, les immeubles ont bien résisté. La secousse n'a provoqué qu'un éboulement de blocs rocheux, sur l'un des versants de la montagne.

L'événement est fictif : il est le résultat d'une simulation inédite réalisée, fin 2007, sur le supercalculateur Tera 10 du CEA. L'opération a mobilisé 500 processeurs pendant 40 heures, soit un total de 20 000 heures de calcul. Et permis de modéliser le séisme sur une zone de 11 x 11 km et sur 2 kilomètres de profondeur, pendant un laps de temps d'une minute, suffisant pour estimer les conséquences de la secousse.

« La nouveauté est que nous avons intégré, dans un seul et même calcul, la propagation des ondes sismiques au sol et leurs effets sur la structure des bâtiments », explique Christian Mariotti,

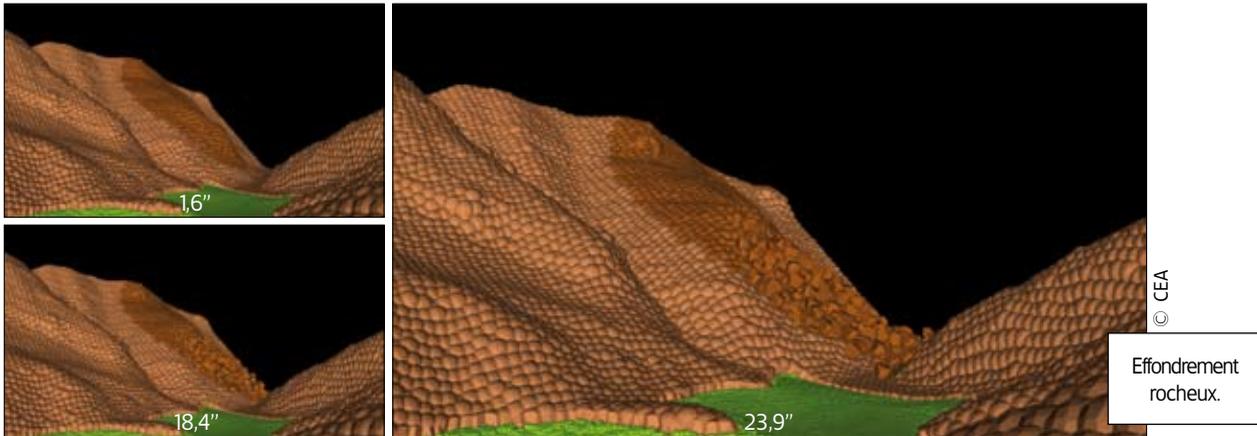
du département analyse, surveillance, environnement (Dase) du CEA. Dix ans de travail ont été nécessaires pour développer le logiciel de simulation, baptisé Mka3D. Son originalité réside dans l'approche choisie pour bâtir le modèle. Classiquement, les séismes sont souvent modélisés par la méthode des éléments finis, en découpant le terrain en mailles virtuelles, puis en simulant la propagation des ondes dans les couches géologiques au sein de ce maillage. Mais ce type d'approche permet difficilement de traiter les fracturations et les effondrements, lorsqu'il y a perte de contact entre les constituants du milieu, qui devient discontinu. Les chercheurs du CEA, qui s'intéressaient au départ à la simulation des explosions, ont préféré une méthode dite particulière, développée, dès les années 1970, par Peter Cundall à l'Imperial College de Londres, mais longtemps restée marginale.

Le principe est de découper les structures non pas en mailles virtuelles, mais en particules solides et indéformables, qui interagissent avec leurs voisins selon les



© CEA

# une nouvelle approche



lois de la mécanique générale de Newton<sup>(1)</sup>. « On est ainsi très proche de la physique de la nature », précise Christian Mariotti, « les liens entre particules sont représentés par de petites poutres lorsque le milieu est encore cohésif, puis par des forces de contact et de frottement lorsqu'il est fragmenté. » La structure portante des immeubles – planchers, coques, poteaux – est décomposée de la même manière, même si les particules sont dans ce cas 100 fois plus petites (1 mètre de diamètre pour les bâtiments contre 100 m pour le sol). La méthode est très lourde en calcul : modéliser le séisme alpin a nécessité de prendre en compte 3 millions de particules polyédriques, dotées chacune de 6 degrés de liberté (translations et rotations) et en relation avec dix voisines. Soit une soixantaine d'équations à résoudre par particule à chaque pas du calcul, sachant que ce dernier a dû être itéré 100 000 fois pour simuler une minute de secousse. Sans compter les algorithmes spécifiques pour traiter les contacts lors des effondrements.

« Il y a dix ans, il était impensable de faire de telles simulations, on se battait avec quelques particules sur nos ordinateurs, rappelle le chercheur. Ces méthodes numériques étaient pénalisées du fait de leur coût en calcul et nous ne parvenions à traiter que des cas très réduits. Aujourd'hui, les progrès informatiques ont réduit les temps de calcul et nous nous préparons déjà pour le passage au futur supercalculateur Tera 100 du CEA, qui représentera courant 2010 un gain de vitesse d'un facteur 10. »

## De la fiction à la réalité

La simulation lancée en 2007 avait pour but de démontrer la faisabilité de l'approche, avec l'idée ultime de pouvoir un jour l'appliquer à une ville réelle, pour prédire l'impact d'un séisme probable. Et de la proposer comme outil pour tester les modes d'urbanisation ou de conception des bâtiments. « Les codes de structure utilisés dans les simulations classiques permettent en général de prédire la rupture

d'un bâtiment, mais ils ne vont pas plus loin : tel immeuble va-t-il entièrement s'effondrer ou simplement se fissurer ? Les conséquences en termes de vies humaines et de sécurité civile seront bien sûr différentes », insiste le chercheur. Un deuxième avantage est la possibilité d'analyser les mouvements sismiques aux abords immédiats des failles, où la non-linéarité des phénomènes en jeu (avec des accélérations supérieures à la gravité) défie les approches de modélisation classique. Hors du domaine sismique, un autre champ de recherche est la modélisation des conséquences des explosions accidentelles, d'une usine ou d'un entrepôt de produits chimiques par exemple, pour mieux dimensionner les périmètres de protection.

## Banc d'essai international

La prochaine étape consiste à valider les résultats obtenus par le logiciel Mka3D en les comparant avec ceux provenant d'autres méthodes de modélisation sismique

déjà éprouvées. En plus de la confrontation avec les données issues de vrais séismes, la concordance des résultats de diverses simulations est en effet

un argument clé en faveur de leur fiabilité. L'équipe du CEA participe ainsi actuellement au banc d'essai numérique ou "benchmark" international Euroseistest, organisé par le CEA, le Laboratoire de géophysique interne et tectonophysique de Grenoble, et l'université Aristote de Thessalonique, en Grèce. L'objectif est de modéliser un séisme fictif dans la région du lac Volvi, en Macédoine. Quatorze laboratoires français, italiens, allemands, slovaques, américains et japonais participent à l'exercice, qui a commencé en septembre 2008. Chacun réalise ses simulations en aveugle, à partir des mêmes données d'entrée (relief, couches géologiques, source et caractéristiques du séisme), puis doit restituer les signaux sismiques en des points précis du modèle. Les résultats sont prévus pour fin 2009.

**Un calcul itéré 100 000 fois pour une minute de secousse**

© CEA

Effondrement rocheux.

(1) C. Mariotti, *Geophys. J. Int.*, 171, 857, 2007.

# Les voitures en modèl

Simuler tout ou partie d'un véhicule est désormais la règle pour la plupart des constructeurs, jusqu'à l'échelle microscopique pour certaines pièces.

Marie Schal,  
journaliste scientifique

L'association des mots "simulation" et "automobile" ou "aéronautique" évoque souvent les logiciels de conduite virtuelle et les études d'aérodynamisme. Il est pourtant un autre domaine des transports devenu avide de calcul haute performance : celui des composants élémentaires des véhicules, depuis les pièces mécaniques jusqu'aux joints de portières ou aux supports moteur. Avec un leitmotiv : économiser du poids, au gramme près, pour limiter les coûts et la consommation de carburant. « *La modélisation est devenue incontournable. Elle joue un rôle essentiel pour optimiser nos produits en raccourcissant de manière considérable nos délais de conception* », insiste Daniel Benoualid, directeur du centre de recherche d'Hutchinson, filiale du groupe Total, spécialiste de la transformation des caoutchoucs et fournisseur de composants automobiles et aéronautiques.

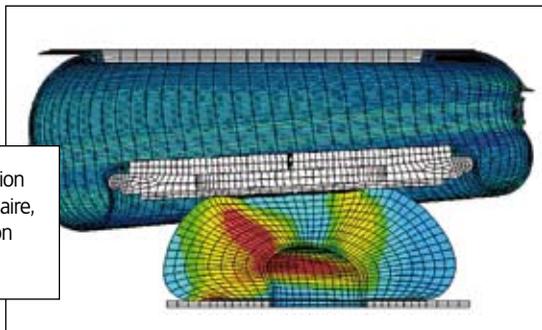
L'équipementier, qui a mis en œuvre, dès 1997, des techniques de calcul parallèle développées en collaboration avec l'Onera, vient d'accroître sa puissance de calcul par l'intégration d'un cluster d'environ 5 téraflops<sup>(1)</sup>. Les simulations font appel à des domaines variés de la physique : mécanique des structures pour l'analyse des déformations et des contraintes, mécanique des fluides couplée aux calculs thermiques pour dimensionner les outillages d'injection ou d'extrusion des pièces, vibro-acoustique pour prédire le bruit dans les habitacles, ou même électromagnétisme pour tenir compte de l'essor de la mécatronique, autrement dit de l'introduction de composants électroniques dans les pièces mécaniques.

(1) Un téraflops correspond à une capacité de traitement de 10<sup>12</sup> opérations par seconde.

« Mieux prédire la durée de vie des pièces »

Aujourd'hui, l'enjeu n'est plus seulement de modéliser un composant isolé, mais d'en simuler le comportement dans le véhicule entier, ou au moins dans son environnement proche. Ce qui revient à travailler sur des systèmes complexes comme une suspension complète ou la fermeture d'une portière pour analyser le comportement de ses joints. Il faut aussi construire des

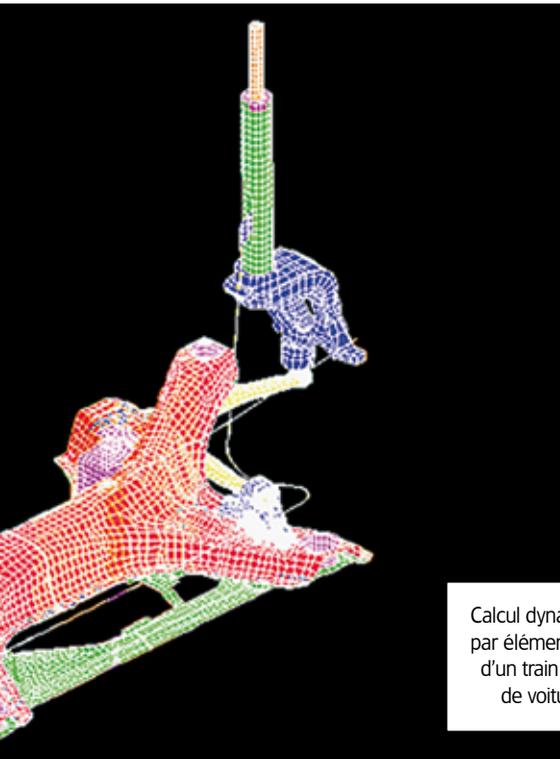
modèles multi-échelles. Depuis une vingtaine d'années, l'étude fine de matériaux comme les plastiques, les élastomères et les métaux a en effet révélé leur hétérogénéité : ils sont formés d'agrégats et ces microstructures ont une incidence sur l'endommagement ou l'amorçage de fissures. D'où l'importance de la prise en compte de cette échelle microscopique de la matière dans les modélisations. « *Nous venons de nous équiper d'un nanotomographe qui nous permet d'analyser nos matériaux de manière non destructive à l'échelle de la centaine de nanomètres. L'idée est de modéliser ces microstructures pour mieux prédire la durée de vie des pièces* », indique Daniel Benoualid. Cela permettra ainsi de disposer d'une alternative fiable aux tests réels sur les machines de fatigue. « *Il nous faut pour cela mettre en place de nouveaux outils de calculs*, poursuit le chercheur. Bien sûr, au début, les simulations seront longues, comme pouvaient l'être les premières modélisations tridimensionnelles il y a vingt ans. Mais c'est l'avenir. » Dans le même ordre d'idée, le projet national Optiforge, auquel participe PSA Peugeot Citroën, vise à intégrer la microstructure



Même type de simulation pour le transport ferroviaire, ici, sur une suspension secondaire de TGV.

© Hutchinson

es



Calcul dynamique par éléments finis d'un train avant de voiture.

dans la modélisation des procédés de fabrication des pièces industrielles forgées, pour mieux prédire leur tenue mécanique à l'usage. Lancé en 2006 pour une durée de trois ans et financé par l'Agence nationale de la recherche, il regroupe le Centre de mise en forme des matériaux de l'École des mines de Paris, l'Institut national des sciences appliquées de Lyon et l'École nationale supérieure d'arts et métiers d'Angers, ainsi que des industriels de la métallurgie.

### Mieux calculer le comportement des matériaux

L'augmentation des puissances de calcul permet enfin de s'attaquer à une autre question essentielle : celle des marges dans la géométrie des pièces et le comportement des matériaux. En sortie d'usine, un morceau de tôle de voiture n'est jamais exactement identique au suivant : les industriels travaillent avec des tolérances de fabrication, même si elles sont minimes. Idem pour la déformabilité d'un joint, par exemple. Prendre en compte ces dispersions statistiques pour chaque constituant du véhicule permet de prédire avec davantage de fiabilité le comportement d'une pièce au sein du système. « Nous commençons tout juste à le faire, à l'aide d'algorithmes spécifiques nécessitant, bien sûr, beaucoup plus de calculs, poursuit Daniel Benoualid. Les modélisations donneront alors non pas des valeurs uniques, mais des plages de réponse plus proches de la réalité. De telles approches devraient, à moyen terme, se généraliser. »

## « Trois questions à »

**Philippe Thierry**, spécialiste du calcul haute performance (HPC) chez Intel.

Propos recueillis par  
**Isabelle Bellin**

Intel travaille étroitement avec les éditeurs de logiciels scientifiques utilisés dans les secteurs automobile et aéronautique pour tirer au mieux parti des supercalculateurs.

### En quoi cela consiste-t-il ?

Nous les aidons à développer leurs codes et faire un diagnostic de leurs applications comme les modélisations de crash, de mécanique des fluides, de structure ou de forge dans l'automobile. Le parallélisme des calculateurs HPC (voir article p. 48) est de tous les discours, mais n'oublions pas que les calculs ne peuvent être menés en parallèle que si le code de l'application en question est complètement distribué entre les différents cœurs (ou unités de calcul) de chaque processeur, ce qui est rarement le cas.

### Est-ce le cas des applications automobiles ?

Non, de par la nature même de la physique utilisée et des schémas numériques, ces applications ne peuvent guère utiliser plus de 256 à 512 cœurs, voire pour certaines quelques dizaines, seulement. Le premier objectif est donc d'optimiser le déroulement du code séquentiel qui utilise rarement plus de 20 % des capacités théoriques des processeurs. La clé est d'augmenter le nombre d'opérations par cycle d'horloge, de limiter le temps où les processeurs attendent pour exécuter des instructions en jouant par exemple sur les accès mémoire. Selon l'état de départ du code, on peut obtenir des facteurs d'accélération de 1,5 à 5.

### Peut-on aussi optimiser le parallélisme ?

Oui, nous tentons d'abord de réorganiser le code pour augmenter sa part de calcul parallèle. Ensuite, pour limiter les attentes entre calculs, nous cherchons à mieux synchroniser les cœurs, en équilibrant autant que possible les charges de calcul des uns et des autres. Nous cherchons aussi à limiter la taille des messages et à organiser au mieux les communications en fonction de l'architecture du réseau de communication du calculateur. Enfin, avec les architectures actuelles, les calculs peuvent à la fois être distribués sur les différents nœuds de calculs et partagés au sein des cœurs d'un même nœud de calcul, contenant en général huit cœurs. C'est un parallélisme à double niveau (ou plus) dont il faut aussi tirer parti.

# La modélisation là o

## Du laboratoire à l'amphithéâtre

Dominique Chouhan,  
journaliste scientifique

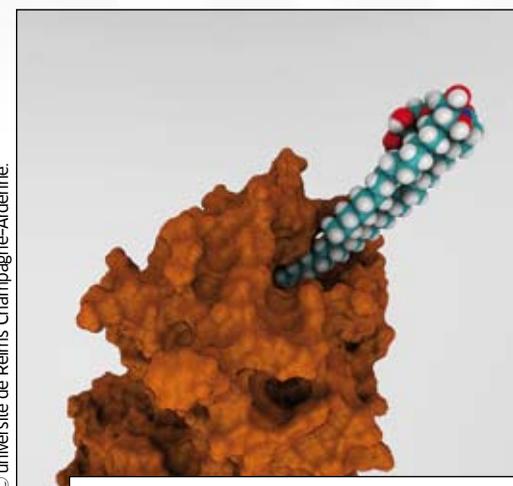
Depuis 2008, des étudiants en chimie de l'université de Reims Champagne-Ardenne et même des lycéens bénéficient d'enseignements dont le contenu puise directement dans les résultats récents de modélisation moléculaire. Explications. « *En tant que modélisateurs, nous publions régulièrement, mais rares sont les occasions de faire profiter les étudiants ou élèves de nos avancées* », regrette Eric Hénon, enseignant-chercheur à l'université de Reims Champagne-Ardenne. D'où son projet : utiliser les méthodes et outils numériques tridimensionnels issus de ses travaux pour enseigner les réactions chimiques. L'idée est de sortir d'un carcan purement symbolique avec des visualisations moléculaires dégradées (en deux dimensions). Ce projet, qui a démarré en 2007 et s'appuie sur les ressources de calcul du supercalculateur ROMEO 2<sup>(1)</sup>, commence à porter ses fruits. « *En chimie, l'appréhension tridimensionnelle des objets est difficile mais indispensable, notamment dans le domaine de la stéréochimie, qui étudie l'arrangement*

*spatial des atomes au sein d'une molécule* », ajoute Eric Hénon. Pour faire le pont entre les connaissances accumulées en recherche et un contenu pédagogique, il manquait juste des compétences en ingénierie des images. Le cofinancement du projet par la Région a permis le recrutement nécessaire.

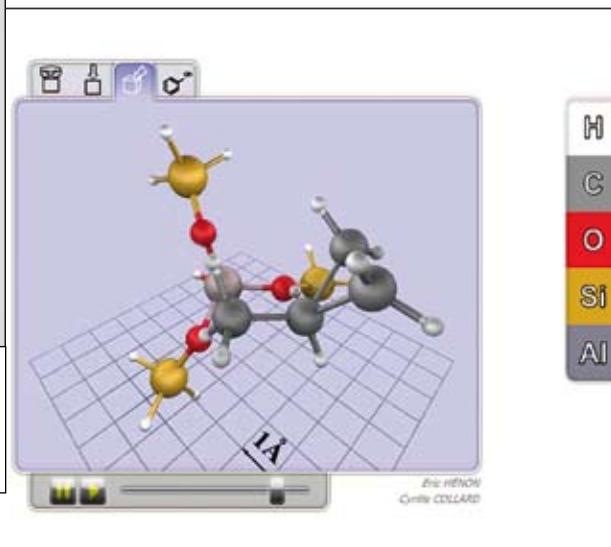
### Les lycées au cœur de l'expérience

Résultat : des animations élaborées sur la base de publications scientifiques<sup>(2)</sup>. A l'université, celles-ci peuvent être utilisées comme supports de cours ou être consultées par chacun, notamment *via* le "bureau virtuel" de l'établissement, un support numérique disponible pour enseignants et étudiants. Dans l'enseignement secondaire, c'est au lycée Libergier qu'ont eu lieu les tests. « *Le partenariat avec des établissements d'enseignement secondaire a été envisagé dès le départ, ne serait-ce que parce qu'une part des lycéens sont nos futurs étudiants* », souligne Eric Hénon. Le projet intéresse de plus en plus d'enseignants de chimie de la Région. Preuve s'il en est que la complémentarité enseignement-recherche portée par les enseignants universitaires n'est pas une vue de l'esprit.

Faire profiter les étudiants  
des modélisations des  
chercheurs



Ces clichés sont extraits d'animations de réactions entre molécules : réaction entre une protéine et un ligand (un médicament) sur l'une (à gauche), processus de catalyse sur l'autre (à droite).



(1) Le supercalculateur régional de Champagne-Ardenne (ROMEO 2, architecture Bull), doté de 104 cœurs, a une puissance de 600 Gflops (milliards d'opérations par seconde).

(2) voir le site <http://sead.univ-reims.fr/courses/3D-CHEMISTRY>.

# À ON NE L'attend pas

## Jeu de go



En 2009, le joueur professionnel taïwanais Zhou Junxun a perdu une partie à handicap 7 contre le programme MoGo, une première.

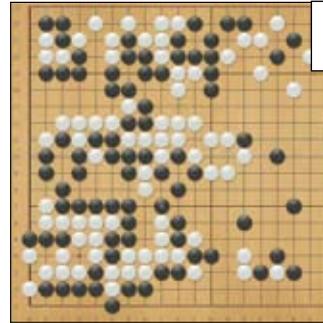
L'ordinateur bat des champions au jeu d'échecs, est-il aussi bon au jeu de go ? Pas encore, les humains lui tiennent encore tête, mais pour combien de temps ? « Au début de cette année à Taïwan, il a battu un champion dans une forme réduite du jeu », souligne Olivier Teytaud, chercheur dans l'équipe TAO de l'Inria : sur un goban<sup>(3)</sup> 19 x 19 avec un handicap de 7 (7 pierres, ou pions, posées sur le goban en début de partie) et sur un goban 9 x 9 sans aucun handicap. Nom du gagnant : le programme MoGo, développé

par des chercheurs français (de l'Inria et du CNRS notamment). Pour faire mieux, il faut à la fois rendre les algorithmes plus "intelligents" et augmenter la puissance de calcul. L'une des difficultés tient au nombre astronomique de combinaisons possibles

pour le placement de chaque pierre :

« Le nombre total de parties différentes est d'environ  $10^{600}$  et, à chaque coup, le joueur a de l'ordre de

360 possibilités pour placer une pierre, un nombre qui décroît évidemment au fil du jeu », précise Olivier Teytaud. Les algorithmes mis au point consistent à simuler un très grand nombre de parties au hasard, chaque simulation tenant toutefois compte de la simulation précédente. Au bout de 30 secondes, soit au terme de plusieurs millions de simulations sur un supercalculateur, celui-ci détermine l'emplacement de son pion sur la base de la partie qui offre le plus de chance de succès. Les améliorations en cours se fondent sur des techniques d'apprentissage, par l'utilisation de bases de données historiques en particulier (l'archivage de matchs du passé). Mais au-delà du jeu, les méthodes ainsi développées peuvent s'appliquer à d'autres problèmes très coûteux en calcul : gestion de stocks, optimisation non linéaire, gestion de l'énergie...



Jeu de go.

© Université de Tainan (Taïwan)

(3) Le goban est le plan de jeu quadrillé sur lequel sont posées les pierres : il est composé de 19 x 19 cases. Les débutants s'exercent sur un quadrillage plus petit (9 x 9).

## Bulles de champagne

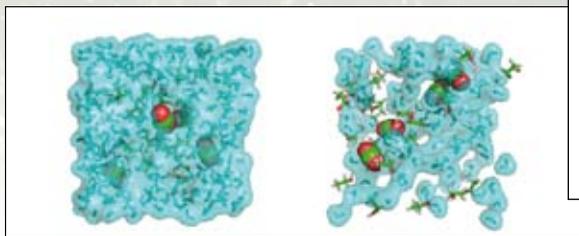
À l'origine, quelques coupes de champagne partagées : « Le projet de modéliser les bulles de champagne a germé au cours d'échanges professionnels et amicaux entre Gérard Liger-Belair et moi-même », indique en effet Nicolas Floquet, chercheur CNRS à l'institut des biomolécules Max Mousseron (Faculté de pharmacie de Montpellier). Nicolas Floquet travaille aux interfaces entre physique, chimie, biologie et modélisation. Quant à Gérard Liger-Belair, il est physicien expérimentateur et professeur à l'université de Reims Champagne-Ardenne, mais aussi passionné de ce vin champenois<sup>(4)</sup>. Associant leurs compétences respectives, ils se sont lancés dans la modélisation des bulles de champagne.

« J'ai utilisé un modèle de dynamique moléculaire similaire à ceux que je mets en œuvre pour étudier les biomolécules », explique Nicolas Floquet. Ces simulations du comportement du mélange eau-éthanol-CO<sub>2</sub> (les constituants principaux du champagne) nécessitent parfois plusieurs semaines sur un supercalculateur à architecture parallèle,

comme celui de la Région Reims Champagne-Ardenne (ROMEO 2<sup>(1)</sup>). Premiers résultats : les coefficients de diffusion du CO<sub>2</sub> calculés semblent cohérents avec ceux observés expérimentalement. L'étape suivante va consister à simplifier les modèles, afin de réduire les temps de calcul et de simuler des systèmes plus gros, jusqu'à la taille d'une bulle. L'idée est ensuite de caractériser les protéines auxquelles le champagne doit sa saveur particulière, mais aussi certaines propriétés physico-chimiques, ce qui pourrait permettre à terme, pourquoi pas, d'optimiser la qualité du champagne.

(4) Gérard Liger-Belair, *Effervescence ! La science du champagne*, Odile Jacob, 2006.

© Nicolas Floquet - Inria



Simulation de la migration de molécules de dioxyde de carbone (CO<sub>2</sub>) dans un "champagne simplifié" : un mélange d'eau (en bleu), d'éthanol (les bâtonnets) et de CO<sub>2</sub> dissous (carbone en vert, oxygène en rouge).

# Le laser mégajoule, un colosse aux pieds

Les composants optiques risquaient d'être le point faible du futur géant construit en Gironde. Pendant son développement, les bonnes fées informaticiennes du CEA et de l'Inria se sont penchées sur son berceau pour appréhender ce mauvais sort.

Xavier Muller,  
journaliste scientifique

N'importe quel amateur de Superman vous le dira : tout super-héros a un point faible. Au début de son développement, le point faible du laser mégajoule (LMJ), le monstre de lumière et d'énergie, élément clé du programme français de dissuasion nucléaire prévu pour être construit en Gironde en 2014, risquait bien d'être ses composants optiques. La nature du mal : d'étranges fissures qui finissent par apparaître aux fenêtres et aux lentilles de tout laser de puissance et qui exigent de coûteuses et régulières réparations. Si aujourd'hui les ingénieurs du CEA savent empiriquement comment protéger le LMJ de ces lézardes, ils se sont néanmoins interrogés sur leur nature profonde : en 2004, le CEA lançait une collaboration avec l'Inria pour plonger dans l'intimité du verre au moment où il se déchire. Retour sur un exemple de calcul intensif appliqué aux sciences des matériaux qui a permis de lever un voile sur les mystérieuses fissures.

Lorsqu'il y a cinq ans Gilles Zérah, de la Direction des applications militaires, au CEA, tente de reproduire sur ordinateur l'avancée des fissures, il aperçoit rapidement les limites de ses simulations, qui reposent sur une méthode de "dynamique moléculaire". Idéale pour observer le comportement de la matière à petite échelle, la méthode est trop scrupuleuse pour décrire un phénomène qui se déroule à l'échelle d'une fissure. Résultat : un mois est nécessaire pour chaque round de simulation et ses dix millions d'atomes mis en jeu. Afin d'accélérer les calculs, le chercheur s'adresse alors à deux spécialistes du calcul

intensif : Jean Roman et Olivier Coulaud, de l'équipe Scalapplix de l'Inria de Bordeaux. Le premier est un expert en algorithmique et en calcul parallèle, le second a une solide culture en mathématiques appliquées et en dynamique moléculaire.

La solution retenue par les trois scientifiques, mise en œuvre dans le cadre d'une thèse, fut d'utiliser conjointement un modèle grossier et un autre plus fin. « *Nous*

*avons travaillé avec un modèle multi-échelles* », indique Guillaume Anciaux, l'ancien thésard du laboratoire. Autrement dit, deux modélisations du matériau cohabitent à présent dans la même simulation :

l'environnement immédiat de la fissure continue d'être décrit à l'aide de la dynamique moléculaire, tandis que la banlieue lointaine fait appel à une méthode d'approche plus globale, dite des milieux continus. Utilisée dans beaucoup d'autres domaines comme la mécanique des fluides ou la mécanique des structures, cette technique est plus économe en calcul.

Si l'idée semble facile sur le papier, elle se révèle délicate à appliquer. « *Une grande partie du travail de la thèse a été d'améliorer le passage cohérent d'information entre des grandeurs décrites à ces échelles très différentes* », se souvient Olivier Coulaud. Mis bout à bout, les deux modèles n'autorisaient pas la traversée d'ondes de hautes fréquences émises par la pointe de la fissure. Or ces ondes sont capitales dans le phénomène de fissuration : analogues à des ondes sismiques, elles concourent à la propagation de la fissure en déplaçant les tensions à l'intérieur du matériau. Pour remédier au problème, les chercheurs ont introduit une zone tampon entre l'environnement de la fissure et sa banlieue : à l'intérieur de cette région, les deux modèles – dynamique moléculaire et milieu continu – coexistent. L'ajout porte ses fruits : les complications liées aux ondes de haute fréquence sont en grande partie éliminées.

## Modélisation et parallélisation

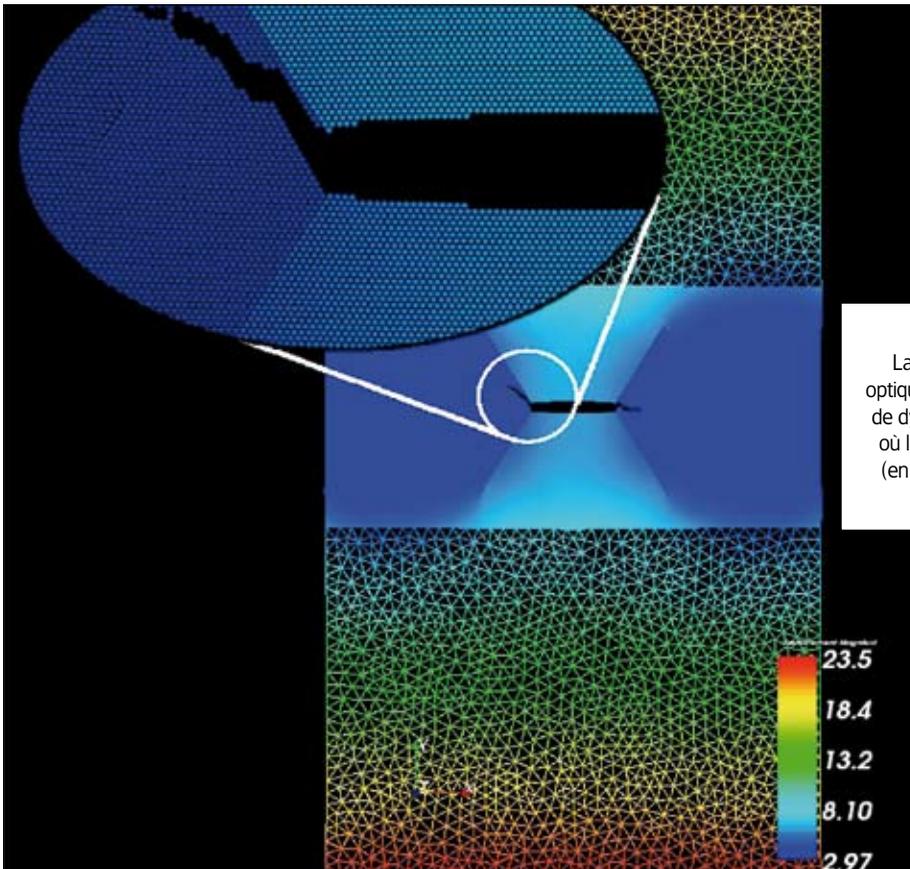
Mais après l'étape de modélisation pure, il restait aux chercheurs à affronter la question de la "parallélisation" efficace des calculs, passage obligé pour que la simulation gourmande en calculs bénéficie de toute la puissance d'un

### Lever le voile sur de mystérieuses fissures

## Un monstre d'énergie

Le laser mégajoule, construit sur la commune du Barp, en Gironde, concentrera la lumière émise par 240 faisceaux laser sur une bille remplie de deutérium et tritium (deux isotopes de l'hydrogène). L'énergie apportée, 1,8 mégajoule, sera telle qu'elle chauffera suffisamment les isotopes pour provoquer leur fusion. Avec cet outil, les ingénieurs du CEA connaîtront mieux les réactions en jeu lors d'une explosion nucléaire. L'instrument, ouvert à la communauté scientifique, servira également pour des applications en astronomie et planétologie.

## de verre

**Comment se déchire le verre ?**

La modélisation des fissures des composants optiques du laser mégajoule fait appel à un modèle de dynamique moléculaire près de la fissure, zone où la matière est traitée de façon microscopique (en bleu). Ailleurs, le verre est considéré avec la méthode des "milieux continus".

supercalculateur parallèle. Jean Roman et ses collègues ont opté pour l'utilisation de deux codes de calcul (un par type de modélisation) qui, pris individuellement, sont déjà "parallélisés". Leur tâche a donc consisté à coupler ces codes, en veillant notamment à répartir la puissance de calcul disponible entre les deux. Ils ont naturellement accordé la priorité à la partie dynamique moléculaire, beaucoup plus lente que celle des milieux continus, car calculant à une échelle beaucoup plus précise.

En 2008, la réussite est au rendez-vous : la nouvelle simulation se révèle quatre fois plus rapide que celle établie exclusivement sur la dynamique moléculaire. Grâce à ces performances, les équipes du CEA peuvent maintenant étudier la propagation de fissures de façon plus exhaustive. Ce faisant, elles réussissent pour la première fois à reproduire qualitativement les observations expérimentales : l'avancée par "bonds" de la fissure, sa vitesse de progression et surtout la présence de lignes de dislocation (un désordre dans l'arrangement atomique) dans le prolongement de la fissure. L'objectif de ces recherches exploratoires – améliorer

la compréhension du mécanisme de fissuration – est donc atteint. Quant à l'origine exacte des fissures, elle reste énigmatique. Seule piste évoquée : le polissage des surfaces de verre et les minuscules défauts qu'il induit.

Et le code développé par l'Inria ? La fin de la collaboration entre le CEA et l'Inria en 2008 n'a pas signé sa mise au placard. « *On avait développé un "coupleur" (le programme réunissant les modèles) générique, car on tenait à le réutiliser plus tard* », explique Olivier Coulaud. Guillaume Anciaux l'utilise, dans le cadre de son post-doctorat en Suisse, pour étudier les contacts entre deux surfaces à l'échelle nanométrique. Pour faire bénéficier la communauté scientifique de leur travail, les chercheurs de l'Inria distribuent aujourd'hui le "coupleur" en libre téléchargement selon le modèle de l'*open source*. Des équipes d'informaticiens et de physiciens du monde entier l'ont déjà téléchargé. Si les fissures mystérieuses se restreignent aux composants optiques, les prolongements de ces travaux continuent donc de se propager.

# La qualité de l'air sous surveillance

Des centaines de polluants, gaz et aérosols réagissant entre eux et avec l'atmosphère, prévoir au jour le jour leur concentration est un vrai casse-tête.

**Dominique Chouhan,**  
journaliste scientifique

(1) Le système PREV'AIR, créé en 2003 à l'initiative du ministère chargé de l'Ecologie, est mis en œuvre par l'Institut national de l'environnement et des risques.

(2) La couche limite atmosphérique est la zone de l'atmosphère directement influencée par la surface de la Terre (terres et océans). Son épaisseur varie entre quelques centaines de mètres et quelques kilomètres.

Tous les jours, le système de Prédiction de la qualité de l'air en France et en Europe (PREV'AIR<sup>(1)</sup>) établit des cartes de prévision des principaux polluants dans l'atmosphère : ozone, dioxyde d'azote, particules fines. En raison de la multiplicité des paramètres et mécanismes à prendre en compte, à la fois chimiques et météorologiques, mais aussi du caractère non linéaire de certains processus, ces simulations sont toutefois entachées d'incertitudes parfois importantes. Pour les réduire, la stratégie adoptée par l'équipe Clime de l'Inria consiste à se fonder sur une combinaison astucieuse d'un ensemble de modèles.

## Simulations à l'échelle européenne

Du fait des différences entre les durées de vie des polluants, donc de la diversité des échelles spatiales de dispersion concernées (globales, continentales, locales), les simulations de leur concentration doivent au minimum s'effectuer à l'échelle européenne, même si l'on ne s'intéresse qu'à la France. En outre, précise Vivien Mallet, chercheur Inria au sein de l'équipe Clime : « Il faut modéliser la qualité de l'air sur l'intégralité de la couche limite atmosphérique<sup>(2)</sup>, car la pollution au niveau du sol (quelques mètres) dépend pour une grande part de ce qui se passe dans les premiers kilomètres de l'atmosphère. » L'objectif visé est de proposer des prévisions fiables à l'échelle de deux à trois jours.

Il s'agit donc d'élaborer des modèles couplant les mécanismes météorologiques, chimiques et physico-chimiques. D'où viennent les incertitudes ? Elles sont d'origines multiples. Les processus physico-chimiques ne sont qu'imparfaitement connus. On ne sait pas très bien, par exemple, comment se créent les aérosols (particules fines liquides ou solides). Les mécanismes turbulents sont difficiles à prendre en compte. En outre, les modèles numériques doivent être légèrement simplifiés pour limiter les temps de calcul. Quant aux données, elles souffrent d'une grande imprécision, qu'il s'agisse des données météorologiques, d'émission de polluants, de leur dépôt sur les sols... « C'est même étonnant que l'on parvienne malgré tout à des prévisions correctes ! », note le chercheur.

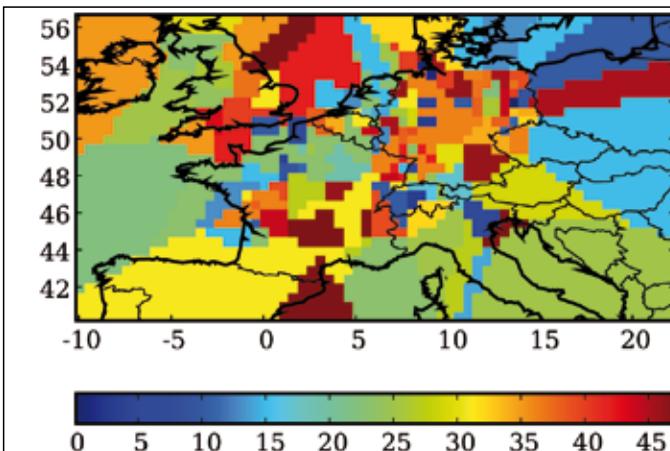
D'où l'idée de s'appuyer sur un grand nombre de simulations, chacune se démarquant par la manière dont sont paramétrés les divers mécanismes : « D'un modèle à l'autre, on peut utiliser différentes descriptions du cycle de l'ozone, et/ou différentes représentations de la turbulence, ou encore un jeu d'émission d'espèces chimiques différent... », explique-t-il. Au final, c'est une centaine de modèles qui sont ainsi générés, à partir de la même plate-forme

**L'objectif visé est de proposer des prévisions fiables à l'échelle de deux à trois jours**

numérique. L'étape suivante consiste à affecter un poids à chacun d'entre eux. Un nouveau modèle est alors calculé comme somme pondérée de la centaine de modèles précédents. Tout l'art est donc de choisir des poids pertinents : ils sont évalués au moyen d'algorithmes d'apprentissage statistique à partir de prévisions faites dans le passé et de leur confrontation avec des observations, et ce, tous les jours. Résultat : « Non seulement nous aboutissons à de meilleures prévisions qu'avec le meilleur des modèles, mais elles sont également meilleures que celles données par la meilleure combinaison linéaire de modèles mais avec des poids constants dans le temps », souligne Vivien Mallet. Un prototype de ce système, qui calcule une combinaison linéaire pondérée de quelques modèles, est d'ores et déjà implanté sur la plate-forme PREV'AIR.

## Quel est le meilleur modèle ?

Sur cette carte sont visualisés les écarts entre prédiction et réalité pour quelques dizaines de modèles. Chaque couleur représente le meilleur modèle, par rapport aux mesures du 7 mai 2001 à la station la plus proche de chaque zone concernée. Ainsi, le modèle 42 (en rouge) semble le meilleur dans une partie de l'Europe du Nord et de l'Angleterre.



# Simuler

## La fusion nucléaire

L'un des enjeux des recherches sur la fusion nucléaire est de réussir à entretenir cette réaction, donc de contrôler les mécanismes en œuvre au sein du réacteur.

**Dominique Chouhan,**  
journaliste scientifique

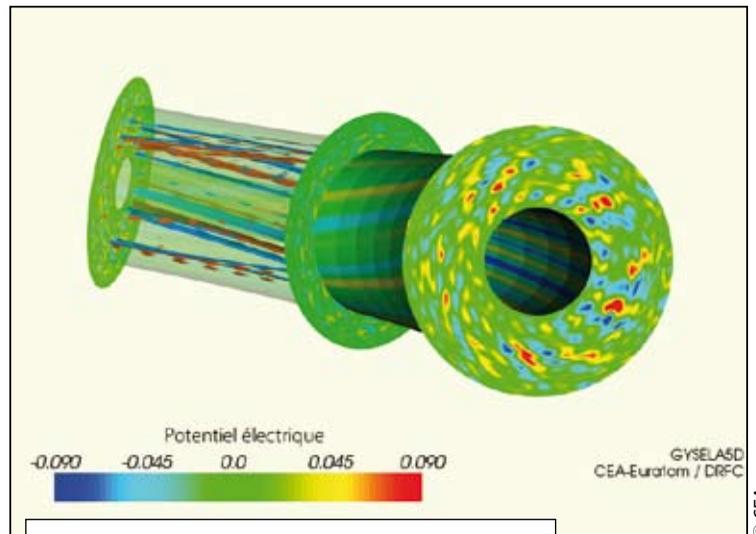
L'énergie libérée par la fusion entre des noyaux d'atomes est considérable. Sur le papier, cette source d'énergie apparaît alors comme l'une des alternatives du futur aux combustibles fossiles. Reste à en démontrer la faisabilité. L'énergie nécessaire pour entretenir la réaction de fusion, même de noyaux d'atomes légers tels que le deutérium ou le tritium, deux isotopes de l'hydrogène, est en effet considérable : il faut porter le combustible à des températures de plusieurs dizaines de millions de degrés et, bien sûr, éviter les pertes d'énergie. La simulation numérique est indispensable pour préparer et exploiter les expériences et, plus généralement, pour optimiser le fonctionnement des réacteurs.

### Des approches complémentaires

La production d'un maximum de réactions thermonucléaires impose que le plasma<sup>(1)</sup> soit confiné et à distance des parois de la chambre de confinement. Pour un réacteur tel que ITER, en construction à Cadarache (France), ce confinement est assuré par des champs magnétiques intenses. Parmi les mécanismes à modéliser : équilibre du plasma, stabilité, effets de la turbulence, chauffage du plasma, interactions entre plasma et parois, matériaux...

La modélisation s'appuie sur deux approches complémentaires, explique Xavier Garbet, directeur de recherche à l'Institut de recherche sur la fusion par confinement magnétique (IRFM) du CEA à Cadarache, celle dite de premiers principes et l'approche intégrée : « La première consiste à résoudre les équations de la physique décrivant les phénomènes étudiés. Mais la simulation d'une expérience dans sa globalité par cette seule méthode serait beaucoup trop coûteuse... pas moins d'un an de calcul sur un supercalculateur ! La seconde utilise des modèles simplifiés, et les simulations premiers principes pour les contraindre. »

D'où viennent les pertes d'énergie ? Elles sont surtout liées à la turbulence, qui contrôle les transports de particules et de chaleur. On cherche à l'éviter dans les zones les plus chaudes du plasma, ajoute Xavier Garbet : « A proximité des parois, en revanche, elle permet de répartir la chaleur. » Les modélisations ont nettement progressé depuis une vingtaine d'années. Mais si les coefficients de transport thermique sont aujourd'hui estimés avec une précision de 20 à 30 %, les scientifiques



Turbulence dans un plasma de tokamak. Les coupes transversales de ces surfaces (comme au premier plan) visualisent les tourbillons.

**Étudier la turbulence dans les plasmas : l'un des grands défis de la physique nucléaire**

visent moins de 10 %, et ce quelles que soient les conditions du plasma.

Autres instabilités, celles d'origine magnétohydrodynamique. D'échelle plus grande que la turbulence (la dizaine de centimètres contre quelques millimètres), elles sont susceptibles d'arrêter brutalement le réacteur. « Elles résultent en particulier des différences de pression et de courant entre centre et parois, explique Sibylle Günter, directrice à l'Institut Max Planck de physique des plasmas (Garching, Allemagne) : Leur modélisation exige d'énormes puissances de calcul, des algorithmes très efficaces et la parallélisation des calculs sur un grand nombre de processeurs, jusqu'à une centaine de milliers. »

On comprend l'intérêt du supercalculateur installé en mai 2009 au centre de calcul de Jülich (Allemagne). Conçu par Bull, le HPC-FF (pour *High Performance Computing For Fusion*) est destiné à valider les simulations numériques dans le cadre du projet Fusion de l'Union européenne. Sa puissance : 100 téraflops, soit la capacité d'effectuer 100 000 milliards d'opérations par seconde !

(1) Le plasma est le mélange globalement neutre des constituants des atomes (noyau, électrons) qui se séparent sous l'effet de très hautes températures.

# Réduire Les incertitudes du

Le point de non-retour est-il déjà atteint ? Pour le savoir, le recours au calcul haute performance sera indispensable. Car nos prédictions actuelles sont limitées par l'imprécision de notre description de la façon dont l'homme affecte le climat. Le prochain rapport du GIEC<sup>(1)</sup> intégrera les résultats obtenus grâce aux supercalculateurs les plus récents. Un enjeu crucial pour des choix politiques plus adaptés.

Renaud Persiaux,  
journaliste scientifique

(1) Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat.

(2) *European Network for Earth System Modelling* est un réseau européen incluant les principaux centres de modélisation du climat. Le projet IS-ENES

(Infrastructure for ENES) vise à renforcer l'organisation de la communauté ENES au niveau européen.

(3) *Scientific Case for European Petascale Computing* (2006), pp. 35-36.

(4) Calcul intensif pour le climat et l'environnement (mené de janvier 2008 à juin 2009).

« Dans le domaine de la modélisation climatique, nous travaillons toujours en limite des puissances de nos supercalculateurs », souligne Sylvie Joussaume, coordinatrice du réseau européen ENES<sup>(2)</sup> et chercheuse CNRS à l'Institut Pierre Simon Laplace (IPSL) à Paris, dont l'équipe de 80 personnes a développé l'un des 23 modèles utilisés dans les rapports du GIEC. « Cela fait plus de trente ans que l'on travaille à la modélisation du climat, poursuit-elle. Avec des modèles d'abord limités à l'atmosphère, en raison des faibles capacités de calcul, puis de plus en plus performants. L'évolution des calculateurs a repoussé les limites de ce que l'on peut étudier : les modèles utilisés pour le 4<sup>e</sup> rapport du GIEC étaient ainsi tous des modèles couplés atmosphère-océan. »

La modélisation climatique est l'un des domaines les plus gourmands en temps de calcul. Et de fait, la précision des résultats sur le réchauffement climatique est en grande partie limitée par les ressources de calcul

disponibles. Les doutes ne pourront être levés qu'en augmentant le réalisme et la complexité d'un modèle. Cette précision a un coût qui s'exprime d'abord en temps de calcul.

En 2006, un rapport<sup>(3)</sup> identifiait quatre défis nécessitant le calcul haute performance dans le domaine du changement climatique : atteindre une très haute résolution pour quantifier les prédictions d'événements extrêmes et évaluer au niveau régional les impacts sociaux et économiques ; aller vers des modèles plus complets du système Terre ; quantifier les incertitudes ; et, enfin, investiguer la possibilité de surprises climatiques.

Des besoins reliés aux quatre facteurs qui mènent à l'explosion du nombre de calculs, comme l'explique Sylvie Joussaume : « la complexité du modèle, sa résolution, la durée du phénomène à modéliser et le nombre de simulations nécessaires. »

**Les doutes ne pourront être levés qu'en augmentant le réalisme et la complexité d'un modèle**

## S'adapter au massivement parallèle

Depuis plusieurs années, la communauté climatique fait un gros travail pour adapter les codes de programmation aux machines massivement parallèles.

« Nos modèles actuels sont à la base conçus pour tourner sur des machines faiblement parallèles », explique Olivier Marti, chercheur à l'IPSL. Grâce au projet CICLE<sup>(4)</sup> qu'il a dirigé, « le modèle "Système Terre" de l'IPSL existe désormais en version massivement parallèle. Il a fallu faire un gros travail sur le coupleur, qui fonctionnait sur un processeur unique et qui constituait un goulot d'étranglement ».

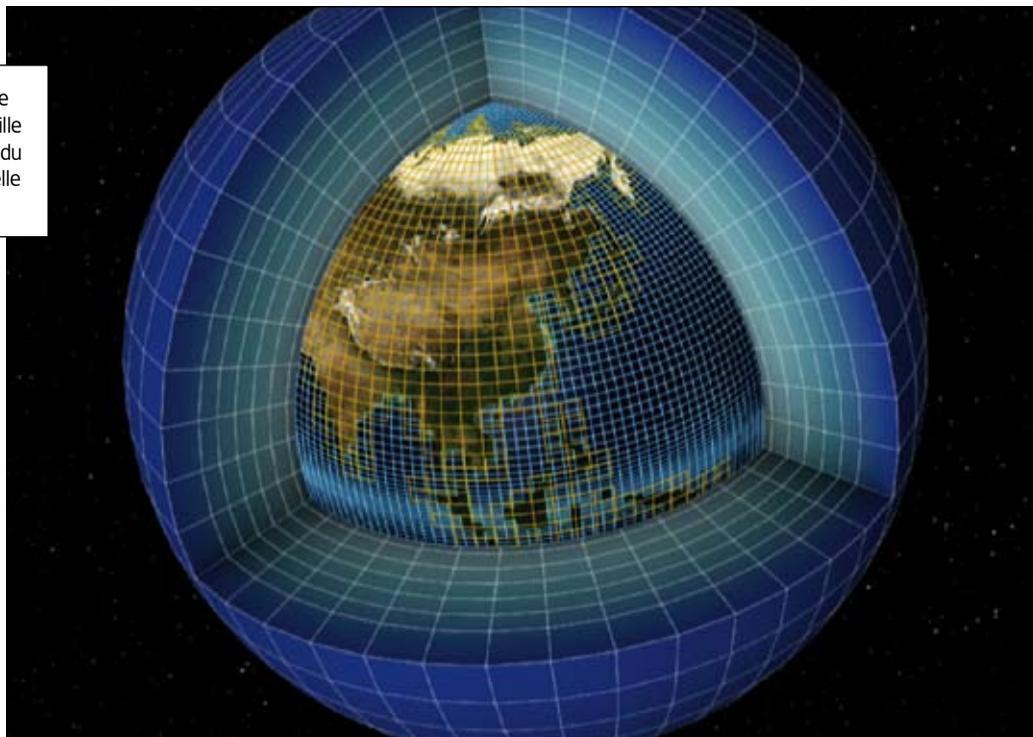
Une fois toutes les difficultés surmontées, la climatologie sera alors capable d'utiliser toutes les machines de haute performance, et de s'adapter aux profondes mutations du matériel auxquelles il faut s'attendre.



Premier au Top 500 de 2001 à 2004, le Earth Simulator est une machine vectorielle massivement parallèle en partie dédiée aux modélisations climatiques. Bien que maintenant dépassée, cette machine a permis une première mondiale de simulation climatique à une résolution inégalée de 3 km.

# changement climatique

Ecorché du modèle de climat, montrant la grille atmosphérique, celle du modèle d'océan et celle du modèle de sol.



© IPSL

Premier facteur, la complexité du modèle, c'est-à-dire le nombre de processus qu'il intègre. Si les modèles utilisés pour le 4<sup>e</sup> rapport du GIEC étaient tous des modèles couplés atmosphère-océan, les chercheurs conviennent qu'il faut se diriger vers une modélisation globale du "système Terre". C'est-à-dire des modélisations

prenant en compte tous les processus connus pouvant jouer sur le climat. Depuis trente ans, les modèles ont donc progressivement pris en compte : l'évolution du vent, les températures, les rayonnements, les nuages, la topographie, l'humidité des sols, les océans et les courants marins, la glace de mer, les cycles biogéochimiques et, notamment, la végétation, les polluants atmosphériques, et bien d'autres, dont les modifications induites par les activités humaines. Or, réunis, tout cela donne une énorme quantité de calculs à résoudre sur la grille des modèles. Exemple : l'intégration des cycles biogéochimiques augmente le nombre de calculs d'un facteur 5 à 10.

Il faut également affiner la représentation des processus et des interactions entre les sous-systèmes (comme, par exemple, les flux d'eau et de chaleur à l'interface atmosphère-océan). En effet, la façon dont ils sont modélisés influe sur la sensibilité du modèle, ce que les chercheurs ont baptisé le facteur de sensibilité climatique : « Les différents modèles, soumis à un doublement du CO<sub>2</sub>, simulent un réchauffement global qui va de 1,5 °C à 4,5 °C, ces différentes réponses provenant principalement de la modélisation des nuages »,

**« Au niveau international, les équipes les mieux dotées en moyens de calcul travailleront à 100 km dans l'atmosphère ! »**

ajoute Sylvie Joussaume. Pis, on sait maintenant que l'augmentation de température modifie la capacité d'absorption des puits de carbone que sont la végétation et les océans. En clair, plus il fait chaud et moins le CO<sub>2</sub> est susceptible d'être absorbé. Ce mécanisme est à l'origine d'un phénomène d'emballement plutôt complexe à modéliser, et dont l'ampleur reste à évaluer. La réponse de la végétation en particulier est encore mal connue et très peu prise en compte par les modèles climatiques.

## Optimiser la résolution spatiale

Deuxième facteur, la résolution. Le globe terrestre est découpé selon une grille, avec des mailles plus ou moins larges. A chaque point de grille et à chaque pas de temps, il faut résoudre plusieurs dizaines à une centaine d'équations, suivant la complexité du modèle. « Pour le dernier rapport du GIEC, la grille atmosphérique comportait plus de 130 000 points<sup>(5)</sup>, pour une maille de l'ordre de 300 km. Aujourd'hui, la grille comporte presque 400 000 points<sup>(6)</sup>, pour une maille de l'ordre de 200 km environ, ce qui augmente le nombre de calculs d'un facteur six environ. Au niveau international, les

(5) Exactement 131 328 points : 96 points en longitude x 72 points en latitude x 19 niveaux d'altitude.

(6) Exactement 393 984 points : 144 x 144 x 19.

équipes les mieux dotées en moyens de calcul travailleront à 100 km dans l'atmosphère ! Nous étudions également l'intérêt d'une augmentation du nombre de niveaux verticaux », précise Olivier Marti, chercheur à l'IPSL. Augmenter plus encore la résolution spatiale est crucial pour améliorer la représentation des processus, dont certains ont lieu à très petite échelle, comme l'humidité des sols, les nuages, la végétation, les concentrations en polluants dans l'atmosphère, comme cela a pu être montré dans les modèles régionaux de l'ordre de 10 à 20 km (voir "Trois questions à José Baldasano", p. 31) « Augmenter la résolution à moins d'un kilomètre pour les modèles régionaux et à moins de 20 km pour les modèles à l'échelle de la planète accroîtrait d'un facteur mille les puissances de calculs nécessaires par rapport à aujourd'hui », remarque Olivier Marti.

### Précision pour le système Terre

Troisième et quatrième facteurs, la longueur et le nombre de simulations. « Les calculs étant faits avec un pas de temps de trois minutes, cela donne plus de 175 000 pas de temps pour une année, et on simule plusieurs siècles », explique Sylvie Joussaume. Et une seule expérience de simulation ne suffit pas, en raison de la dépendance aux conditions initiales ou aux valeurs des paramètres entrés dans le modèle, qui influent sur les résultats des modélisations : notamment sur la possibilité d'événements



(7) *Geophysical Research letters*, vol. 35, 2008.

(8) **Ensemble Simulations of Extreme Weather Events under Nonlinear Climate Change.**

**« 175 000 pas de temps pour une année, et on simule plusieurs siècles... »**

extrêmes (lire encadré ci-dessous) ou les risques de ruptures entraînant de véritables catastrophes climatiques

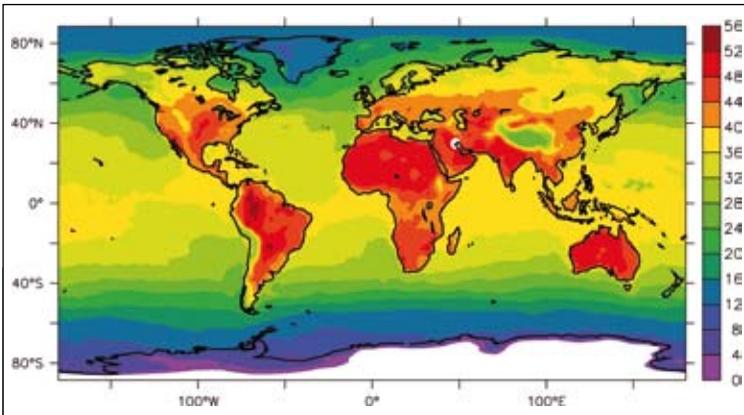
comme un changement brutal d'équilibre (par exemple, arrêt de la circulation atlantique Gulf Stream) ou le dépassement d'un point de non-retour, au-delà duquel se mettrait en place un

effet d'emballement irréversible. Il faut par ailleurs simuler les différents scénarios envisagés (une quarantaine dans le GIEC, en fonction des politiques de réduction des émissions, plus ou moins volontaristes). C'est que les incertitudes sont grandes sur les niveaux de gaz à effet de serre et des aérosols, et peut-être encore plus sur l'amplitude du réchauffement et ses impacts.

Combinés, tous ces facteurs entraînent une explosion combinatoire : de l'ordre de  $10^6$  au moins. Chaque augmentation de puissance permet d'avancer sur

Simulation de températures extrêmes (en °C) prévues par l'équipe d'Henk Dijkstra (Université d'Utrecht) au cours de la décennie 2090-2100.

© Université Utrecht/Royal Netherlands Meteorological Institute



## Événements extrêmes : multiplier les modélisations pour affiner les prédictions

Les pics de températures vont augmenter deux fois plus vite que les températures moyennes, et causeront des vagues de chaleur de plus en plus fréquentes. Avec, à la fin du siècle, des températures extrêmes excédant les 40 °C et même les 50 °C dans de très nombreuses régions. Publiés l'an dernier<sup>(7)</sup>, ces résultats ont fait l'effet d'une bombe. Pour estimer ces événements extrêmes, Henk Dijkstra (Université d'Utrecht, Pays-Bas) et ses collègues ont fait tourner les 17 modèles du projet ESSENCE<sup>(8)</sup>, élaborés par le *Max Planck Institute* et utilisés pour le

4<sup>e</sup> rapport du GIEC. « Pour vérifier la solidité du résultat, nous avons introduit des perturbations dans les conditions initiales, puis fait la moyenne. Avec 17 modèles différents mais tous aussi vraisemblables les uns que les autres, on est plus susceptible de voir survenir des événements extrêmes », explique Henk Dijkstra. Mais qui dit 17 modèles dit 17 simulations et donc 17 fois plus de temps de calculs. D'où l'intérêt d'avoir des supercalculateurs très puissants. « Sans le calcul haute performance, nous n'aurions rien pu faire », souligne-t-il.



### Une atmosphère plus ou moins nette

Nuages simulés pour deux résolutions du modèle de climat de l'IPSL. À gauche : 96 points en longitude x 72 points en latitude x 19 niveaux verticaux, et à droite, 360 x 180 x 55. La plus haute résolution est encore difficile à utiliser en standard avec les calculateurs disponibles.

© IPSL & Animea, Frédéric Durillon

l'un des trois facteurs. « Pour le 4<sup>e</sup> rapport du GIEC, il a fallu au total 80 000 heures de calculs (l'équivalent d'un peu plus de neuf ans si l'on avait utilisé un seul processeur), réalisés entre 2003 et 2004, qui ont produit 40 téraoctets ( $10^{12}$  octets) de données. On a mobilisé à l'époque six processeurs de NEC SX6s », rappelle Sylvie Joussaume. Pour le 5<sup>e</sup> rapport du GIEC, dont la parution est prévue en 2013 et dont les simulations doivent être terminées en 2010, les climatologues vont disposer de 48 processeurs SX9, six fois plus rapides, soit cinquante fois plus de puissance que lors de l'élaboration du dernier rapport du GIEC. Grâce à l'accroissement des capacités de calculs disponibles, l'augmentation de la résolution et la modélisation du système Terre seront intégrées au 5<sup>e</sup> rapport du GIEC. Aujourd'hui, le modèle couplé de l'IPSL, par exemple, inclut cinq composantes du climat du système Terre (atmosphère, océan et biogéochimie océanique, glace de mer, surfaces continentales et végétation, chimie atmosphérique) interagissant grâce à un « coupleur ». « Disponible en différentes configurations et différentes résolutions suivant le niveau de complexité traité, il est en perpétuelle évolution, reflétant ainsi l'état de l'art international. Nos équipes font les derniers tests avant de lancer les simulations destinées au GIEC », conclut Sylvie Joussaume.

On le voit, répondre aux questions posées par la société sur le réchauffement climatique est entièrement dépendant de l'accès à des moyens de calcul intensif. Réduire les incertitudes, quantifier la probabilité d'événements extrêmes, dénombrer les puits de carbone et leur possible évolution à la suite du changement du climat, étudier les impacts sur les écosystèmes... Tout cela nécessitera une augmentation de la puissance de calcul d'un facteur de 10 à  $10^6$  par rapport aux moyens actuels. La communauté climatique mondiale se prépare déjà au changement d'échelle et adapte ses modèles, non plus au téra calcul<sup>(9)</sup>, mais au péta calcul et même à l'exa calcul.

## « Trois questions à »

**José Baldasano**, directeur du département des sciences de la Terre au Centre de supercalcul de Barcelone

### Sur quoi travaillez-vous précisément ?

Nous étudions les liens entre le climat, la circulation des polluants atmosphériques et les tentatives de contrôle par la réglementation. L'atmosphère est un réacteur complexe, dont les nombreux composés réagissent dynamiquement aux conditions physiques. Mais les réglementations n'ont pas encore pris en compte l'impact à long terme du changement climatique sur la qualité de l'air. Le problème, c'est que la faible résolution des actuelles simulations globales entre le climat et les produits chimiques n'autorise pas encore les estimations régionales.

### Comment avez-vous procédé ?

Nous avons utilisé des modèles régionaux de très haute résolution de la zone méditerranéenne (5 000 sur 2 500 km), avec une résolution de 20 km, et une résolution verticale de 31 couches de la troposphère, installée sur notre supercalculateur Mare Nostrum. Nous avons étudié les réponses au changement climatique des concentrations en ozone et en particules, en comparant des simulations des mois d'août 1960, 1980 et 2000, et deux conditions pour 2030, selon des scénarios de maintien ou de réduction des émissions.

### Quels sont les principaux résultats ?

La topographie complexe de la région méditerranéenne engendre des particularités régionales prononcées, et des comportements des polluants différenciés à travers les bassins de l'ouest, du centre et de l'est. L'évolution de la concentration d'ozone est très variable selon les endroits, de  $-20$  à  $+70 \mu\text{g}/\text{m}^3$ .

Si l'on réduit les émissions, les pics baisseront pour le domaine entier, notamment autour de la Sicile, où ils étaient très élevés en 2000. Si nous ne faisons rien, la concentration en polluants croîtra dans la plupart des régions, avec des mécanismes d'auto-amplification.

(9) En référence aux capacités de traitement des supercalculateurs respectivement de  $10^{12}$ ,  $10^{15}$ ,  $10^{18}$  opérations par seconde.

# Traiter l'eau par le calcul

Un cinquième de l'humanité n'a toujours pas accès à l'eau potable. Une équipe de chercheurs finlandais utilise le calcul intensif pour optimiser la coagulation des polluants dans l'eau et faciliter leur élimination.

Renaud Persiaux,  
journaliste scientifique

L'accès à l'eau potable sera l'un des grands défis du XXI<sup>e</sup> siècle. Cadmium, mercure, plomb : de nombreux métaux lourds, des polluants fortement toxiques, sont fréquemment utilisés ou produits dans l'industrie, comme la pétrochimie, l'industrie textile ou celle du papier, par des procédés par ailleurs très gourmands en eau. Or, les méthodes actuelles pour traiter cette eau avant de la rejeter dans la nature sont souvent encore trop lourdes, trop chères et énergivores.

« Il est essentiel d'être en mesure de purifier l'eau de la façon la plus économe possible en énergie », souligne le Finlandais Kari Laasonen. Ce professeur de chimie de l'Université d'Oulou est convaincu depuis longtemps que ce ne sera possible qu'en modélisant ce qui se passe dans l'eau au niveau moléculaire, notamment pour mieux mettre à profit les extraordinaires propriétés de solvant de l'eau. « On utilise empiriquement de nombreux composés chimiques pour éliminer les polluants dissous dans l'eau, mais on ne connaît quasiment rien de leur structure au niveau atomique ni des mécanismes mis en œuvre. »

Quelles seraient les voies optimales de dépollution ? « Impossible de répondre à cette question avec de simples éprouvettes », explique-t-il. Tant en raison de l'échelle, de la

complexité et de la rapidité des mécanismes... que du nombre de molécules à tester !

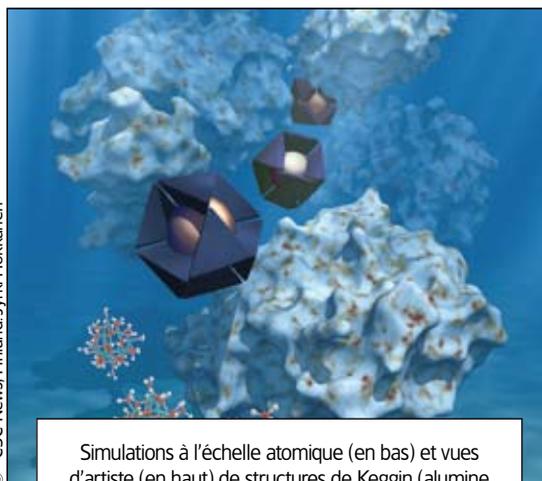
Avec son équipe, il travaille *in silico* : il introduit les caractéristiques connues de composés chimiques dépolluants existants et potentiels, notamment à partir des données de la Base cristallographique de Cambridge, dans des modélisations très réalistes des propriétés physico-chimiques de l'eau (COSMO - *Conductor-like screening model*). « Pour trouver les relations exactes entre les propriétés de l'eau, la composition des matériaux dépolluants ou potentiellement dépolluants et leurs

conditions d'emploi, il faut passer par des analyses à de multiples échelles toutes reliées les unes aux autres. Nos modèles sont très gourmands en calculs », poursuit Kari Laasonen, dont l'équipe est l'un des plus gros utilisateurs des supercalculateurs du *Center for Science* finlandais.

« Purifier l'eau  
de la façon la  
plus économe  
possible  
en énergie »

Après dix ans d'études, l'équipe, qui travaille en collaboration avec la multinationale Kemira, leader mondial du secteur des coagulants, est à la pointe. « Grâce à la modélisation, nous pouvons maintenant étudier presque tous les complexes métal-ligand<sup>(1)</sup> qui nous intéressent. Nous pouvons donc tester les prototypes de molécules avant leur production. Cela aide les développeurs à mieux comprendre leurs produits, et les guide pour en développer de nouveaux. »

(1) Un ligand est une molécule capable de se fixer à des atomes ou des ions.



Simulations à l'échelle atomique (en bas) et vues d'artiste (en haut) de structures de Keggin (alumine activée), au milieu de particules sales (en bleu clair).

## Favoriser la dépollution

L'équipe de Kari Laasonen (Université d'Oulou, Finlande) s'est penchée sur la façon dont se comporte l'alumine activée, un composé utilisé pour dépolluer l'eau. Parmi les formes qu'elle peut adopter, la "structure de Keggin" : un assemblage sphérique hautement symétrique, chargé positivement, qui a la propriété d'attirer les impuretés chargées négativement et de former ainsi des agrégats faciles à filtrer. Mais ce n'est qu'un des nombreux exemples de ses conformations possibles dans l'eau (voir photo) : « les spectromètres révèlent l'existence de dizaines, voire de centaines de structures d'alumine relativement stables », explique Kari Laasonen. Pour identifier toutes les structures intéressantes pour la dépollution, comprendre et favoriser leur formation, l'équipe utilise le calcul haute performance. Pour le moment, il est encore impossible de toutes les modéliser, « mais avec beaucoup de travail et en augmentant la puissance de calcul, nous y parviendrons peut-être », espère-t-il.

# Circulation océanique à la loupe

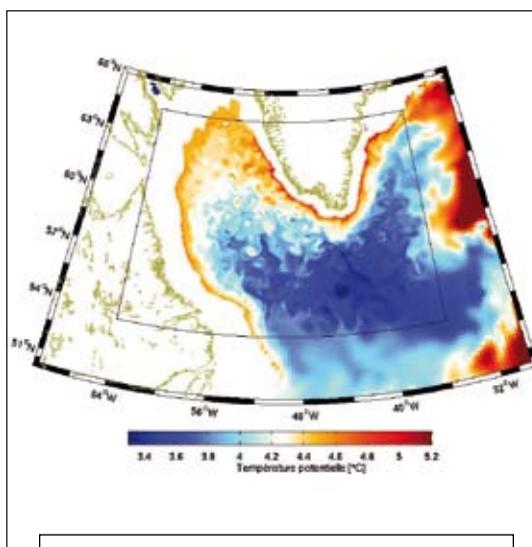
La prévision climatique exige une connaissance fine des processus océaniques. A puissance de calcul égale, des algorithmes astucieux permettent de visualiser des détails invisibles avec un modèle à grande échelle.

Dominique Chouhan,  
journaliste scientifique

Comment simuler avec suffisamment de précision le comportement de l'océan global, et notamment sa réponse aux interactions avec l'atmosphère (forçages atmosphériques) ? C'est le défi que doivent relever les modèles de circulation générale tels que le modèle européen NEMO<sup>(1)</sup>. Ce défi exige une modélisation à de multiples échelles, car la circulation est fortement influencée par des processus turbulents de caractère local et de petite taille (de l'ordre de la dizaine de kilomètres, voire moins) mais très énergétiques. Une collaboration entre océanographes et mathématiciens a conduit à la conception de techniques permettant de "zoomer" sur certaines zones sans imposer de modéliser l'intégralité de l'océan à une échelle fine.

Parmi les processus d'impact déterminant sur la circulation générale, il y a les échanges interbassins, explique Bernard Barnier, responsable de l'équipe de modélisation de l'océan du Laboratoire des écoulements géophysiques et industriels (LEGI, Grenoble) : « C'est typiquement le cas des échanges entre l'océan Arctique et l'Atlantique nord par le détroit du Danemark. Si on n'y modélise pas finement la dynamique, on ne pourra pas représenter avec une grande précision la circulation thermohaline<sup>(2)</sup> ni sa sensibilité éventuelle aux changements climatiques. » D'autres processus locaux se produisent dans les zones de connexion entre eaux de surface et eaux profondes, par exemple, en mer du Groenland ou en mer du Labrador (voir la figure).

Ces situations incitent à résoudre les équations de la dynamique à très petite échelle, en adaptant la paramétrisation des modèles. C'est là qu'intervient le mathématicien : « La puissance des ordinateurs est insuffisante pour modéliser tout un océan au niveau de détails requis en certaines zones », explique Eric Blayo, responsable d'un projet Inria de mathématiques appliquées à l'environnement (MOISE, Grenoble). Or, pas question d'isoler une zone, car chacune est entièrement dépendante de son environnement : « Il faut être capable de "brancher" un modèle local de très haute résolution sur un modèle de l'océan mondial », ajoute-t-il. C'est cette méthodologie et le logiciel associé qui ont été mis au point par son équipe. De



Sur cette simulation de la température océanique instantanée en mer du Labrador, à 182 m de profondeur, la résolution locale (4 km) est cinq fois plus fine que celle du reste de l'Atlantique pour un modèle tel que NEMO.

© Jérôme Chanut/Mercator Océan

**La puissance de calcul n'est mise à profit que là où elle est absolument nécessaire**

quoi s'agit-il ? La stratégie s'appuie sur des méthodes localement multigrilles, appelées aussi algorithmes multirésolution. Elles permettent de résoudre les équations de la dynamique océanique sur des grilles de plus

en plus fines (plusieurs niveaux de discrétisation) en assurant la continuité des flux aux interfaces entre grilles et en maîtrisant les incertitudes. « Les résultats à petite échelle nous permettent alors de déterminer les paramé-

trisations indispensables aux modèles de plus basse résolution », souligne Bernard Barnier. Désormais utilisé dans la plupart des grands modèles océanographiques, ce logiciel fait même aujourd'hui partie intégrante de NEMO. Mais ses champs d'application potentiels dépassent ce seul cadre, du fait de son caractère générique. Une application possible est bien sûr l'étude de l'atmosphère. Des astrophysiciens s'y intéressent également, précise Eric Blayo, pour augmenter la résolution de leurs modèles dans certaines zones de l'espace.

(1) NEMO, pour *Nucleus for European Modelling of the Ocean*, fournit un cadre de modélisation numérique de l'océan. Il permet de simuler la dynamique océanique, les glaces de mer et les processus biogéochimiques. Géré par l'Institut national des sciences de l'univers (INSU), son développement se fait aujourd'hui au sein d'un consortium réunissant divers centres de recherche européens.

(2) La circulation thermohaline désigne la circulation à grande échelle des masses d'eau océaniques sous l'effet des variations de température et de salinité.



# Un tremplin pour la croissance de demain

par **Didier Lamouche**,  
Président-Directeur  
Général du Groupe Bull

**L**ignes de fracture aujourd'hui, la globalisation, les révolutions du numérique, des nanotechnologies, des biotechnologies et le défi environnemental seront, demain, les lignes de force du monde qui émergera de la crise. L'innovation sera la clé pour réussir dans ce monde nouveau. En permettant la résolution des équations les plus complexes ou l'étude des modèles les plus sophistiqués, le calcul haute performance (HPC) ouvre de nouveaux territoires pour les entreprises, irriguant tous les secteurs, de la santé à l'énergie, de l'agronomie à la finance, du transport au bâtiment. Le calcul haute performance s'impose ainsi comme un outil indispensable... à condition que les trois freins majeurs à son développement soient levés.

Le challenge est d'abord technologique et industriel. Dans le monde HPC, l'appétit en puissance n'est pas satisfait par la progression des architectures. Les exigences des industriels évoluent et les fournisseurs de technologies sont en permanence en mode rattrapage.

## Créer un écosystème européen

Le constat est simple : aujourd'hui, la puissance des supercalculateurs est encore insuffisante, alors que le besoin de performances est en croissance constante et le marché avec lui. Mais dans le domaine du calcul haute performance, stratégique pour la croissance, pour l'innovation, pour la souveraineté des Etats, le "composant" Europe du système mondial ne doit pas seulement s'appuyer sur le savoir-faire externe mais imposer lui-même sa maîtrise technologique et ses solutions de rupture : il est temps de créer un véritable écosystème européen, associant fournisseurs de technologies de calcul, clients et utilisateurs. La révolution du calcul haute performance doit être un défi partagé, qui plus est dans une économie mondiale "systématisée".

Le challenge est ensuite financier et politique. L'une des grandes différences entre les Etats-Unis et l'Europe

réside dans le fait que, si les financements européens sont suffisants pour équiper des centres de calcul, ils restent insatisfaisants pour financer le développement des technologies. L'approche européenne diffère en cela de l'approche américaine, dans la mesure où les programmes de l'Union ne visent pas à financer la recherche et le développement des industriels au niveau

« Trois freins  
majeurs à lever »

européen, mais simplement à doter les chercheurs de la capacité de calcul dont ils ont besoin. C'est un état de fait grave, pouvant déséquilibrer à terme l'équilibre concurrentiel.

Le challenge est enfin celui de l'accessibilité. Accessible aux grands groupes, le formidable potentiel des supercalculateurs doit être aussi mis à la disposition des PME / PMI, avec des solutions clés en main, pré-intégrées et performantes. Cette révolution technologique doit se faire avec elles, de sorte que l'ensemble des secteurs d'activité soit irrigué.

Le calcul haute performance est au final un formidable outil d'anticipation, dont les applications multiples et spectaculaires auront demain un impact concret sur la vie de nos concitoyens. En soutenant la démocratisation et la généralisation du calcul haute performance, les puissances publiques européennes pourront créer un élan collectif de recherche et d'innovation. Nous sommes prêts à relever le défi, pour permettre à la France et à l'Europe de franchir une étape technologique majeure, garante de notre compétitivité industrielle.

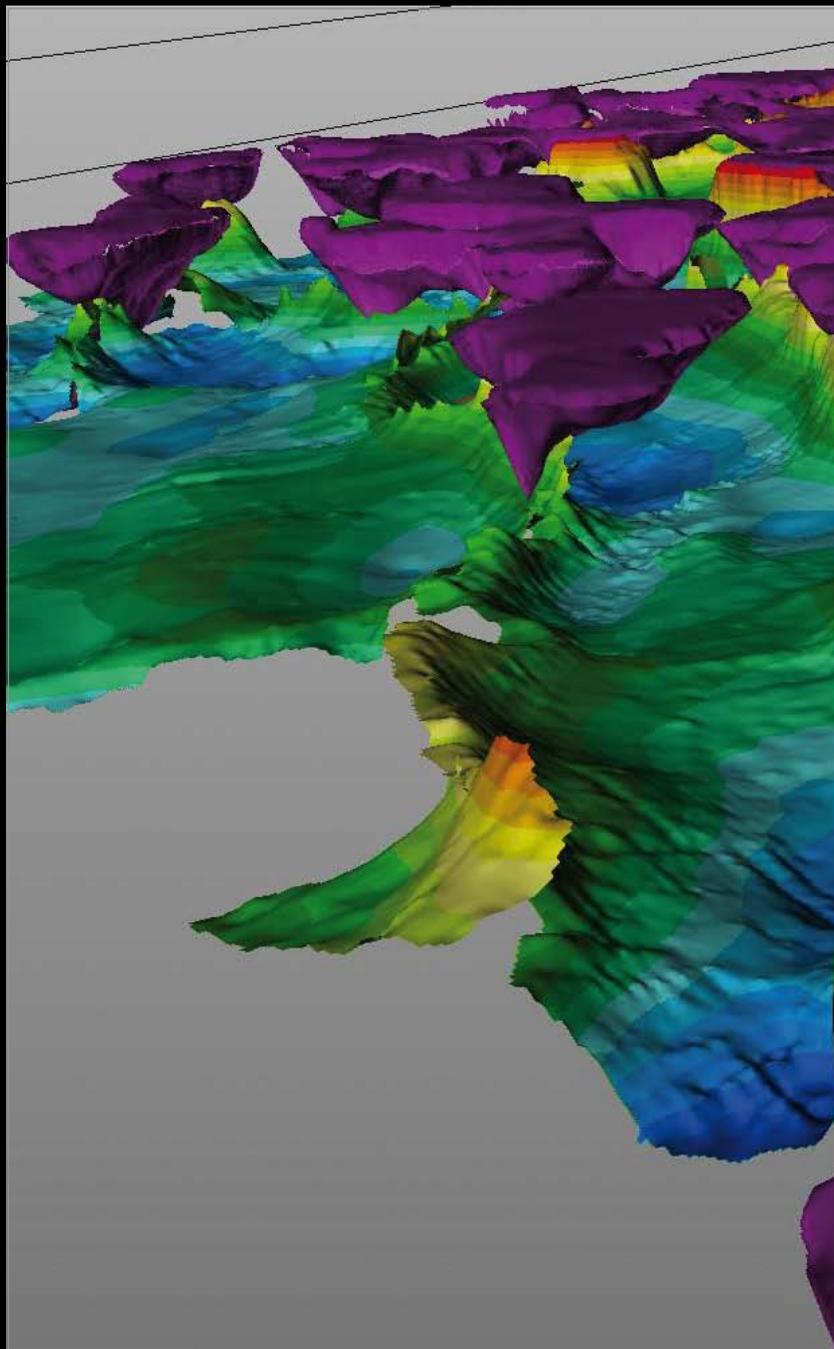


© DR/Bull

# Pétrole, des "supercalc

Xavier Muller,  
journaliste scientifique

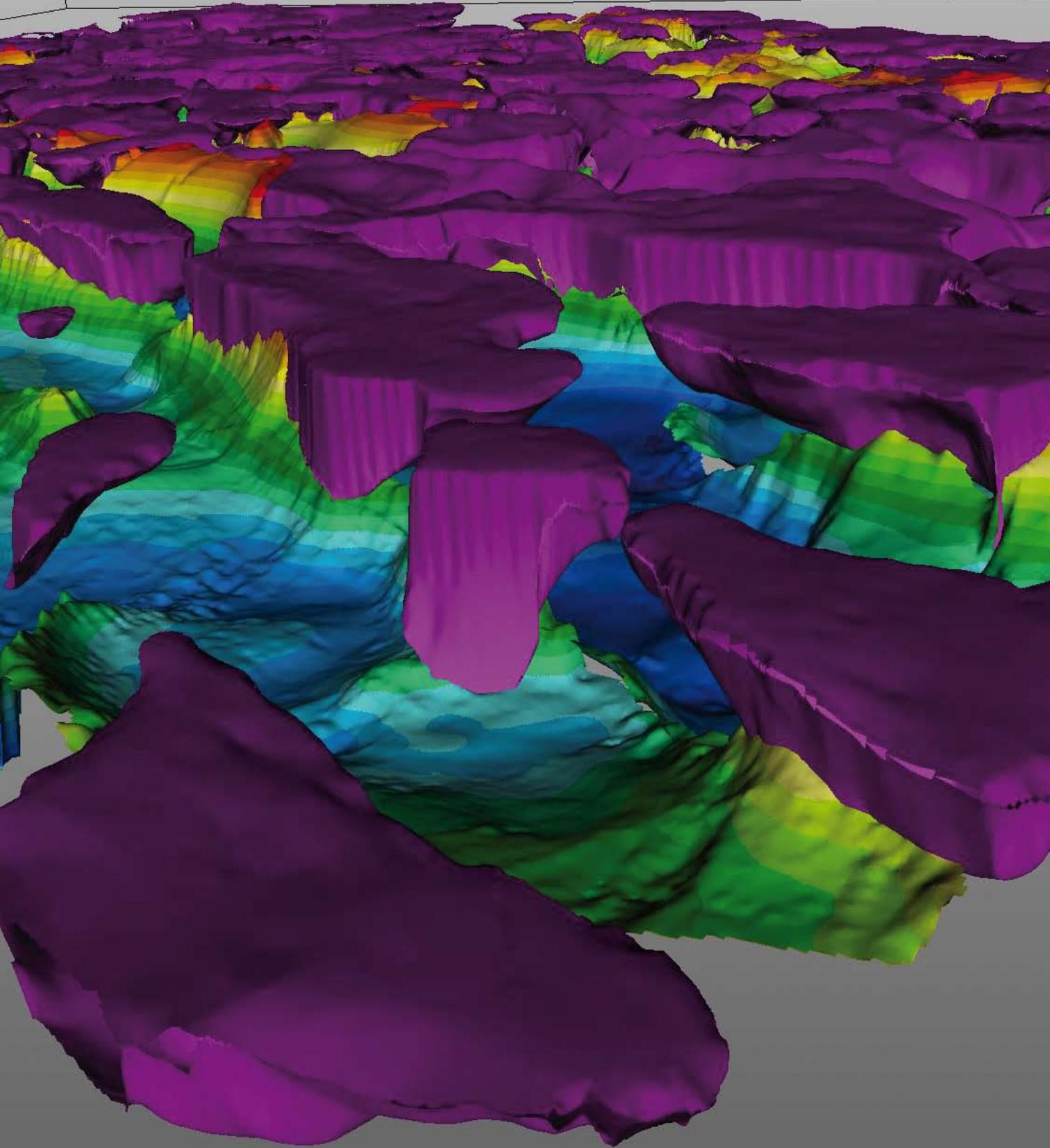
Plus risquée que le casino... la prospection pétrolière. Lorsqu'ils forent dans un sous-sol susceptible d'abriter du pétrole, les ingénieurs de Total peuvent découvrir un gisement de plusieurs millions de barils de brut ou... rien. Quand on sait qu'un forage d'exploration en mer coûte 60 à 80 millions d'euros, on comprend que pour sa prospection le géant pétrolier ne mise pas sur le facteur chance. Au milieu des années 1990, seuls 15 à 20 % des puits d'exploration et d'appréciation en géologie complexe remplissaient leurs promesses. Les simulations numériques, qui analysent les données obtenues par échographie sismique, ont radicalement changé la donne. Armés du troisième plus puissant ordinateur français après celui de l'Idris (Institut du développement et des ressources en informatique scientifique) à Orsay et du Cines (Centre informatique national de l'enseignement supérieur) à Montpellier, les ingénieurs de Total font aujourd'hui mouche dans 30 à 40 % des cas. Mais sur le long chemin qu'entreprind le pétrole de l'extraction jusqu'à sa transformation en produit fini, la prospection n'est que le premier des postes de travail qui demandent une "puissance de frappe" binaire. Le raffinage, la fabrication de bitumes et de joints en caoutchouc en sont d'autres. Pour ces opérations, le besoin de calcul intensif est notamment dû à la coexistence de phénomènes se déroulant à des échelles différentes et s'influençant mutuellement. Ces dernières années, Total a investi massivement dans le calcul intensif, preuve, s'il en faut, de l'importance que revêtent à présent les supercalculateurs dans l'ingénierie du pétrole.



Grâce à leurs supercalculateurs, les ingénieurs de Total ont reconstitué cette image du sous-sol dans l'offshore profond. La zone, qui couvre 4 000 km<sup>2</sup>, montre des dômes de sel de plusieurs kilomètres d'épaisseur (en violet) surplombant des couches de sédiments (du bleu au rouge) déposés au cours des 100 derniers millions d'années. Ce paysage géologique sous une profondeur d'eau de 2 000 m (*offshore* très profond) évolue jusqu'à une profondeur de 10 000 m. Dans sa lente migration, le pétrole contenu dans ces sédiments, plus léger que l'eau, est remonté vers la surface et s'est retrouvé piégé sous les corps de sel imperméables. Les puits pétroliers ont donc été forés jusqu'à la base des dômes salifères à plusieurs kilomètres sous le fond de la mer.

© TOTAL

# uls" à tous les étages



# Rechercher l'or noir

## "L'échographie sismique en offshore profond"

© TOTAL - Direction de la communication



1

L'échographie sismique, première étape de la prospection pétrolière, fonctionne de façon analogue à sa cousine médicale : des rafales d'ondes sonores sont envoyées, ici à partir d'un bateau, vers le fond marin. Puis, des milliers de capteurs fixés le long de câbles traînés par le navire enregistrent les échos produits par la réflexion des ondes sur les couches géologiques sous-jacentes. Les câbles, qui peuvent atteindre 8 km de long, sont reliés au bateau par l'intermédiaire de flotteurs équipés d'ailerons qui garantissent un déploiement correct dans le sillage.

© TOTAL



2

Les enregistrements sismiques sont ensuite traités pour obtenir des profils grossiers du sous-sol. Si l'ordinateur est l'acteur principal de cette étape, le regard humain reste irremplaçable. Seuls des géologues et des géophysiciens, spécialisés dans la région du globe concernée, savent identifier à l'intérieur de ce mille-feuille grisâtre les frontières des compartiments rocheux (en orange et rouge). Leurs analyses, qui s'appuient sur ces seules images et leurs connaissances générales de la région, nourriront les simulations informatiques, permettant en retour d'affiner les profils.



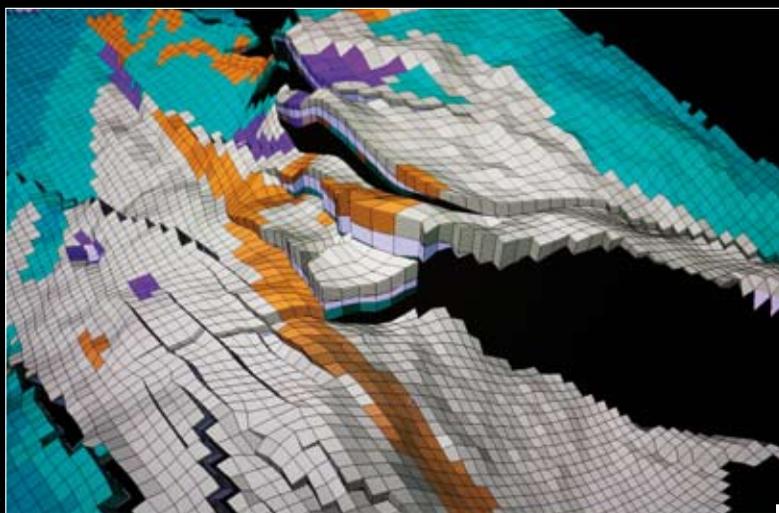
© TOTAL

3

Après plusieurs allers-retours entre les spécialistes du calcul numérique et les géologues, une image finale est produite. L'échelle de nuances traduit la réflexion des ondes sismiques : les zones foncées correspondent à une forte réflexion. La zone blanchâtre ondulée proche de la surface est composée de sel. Elle surplombe un empilement de sédiments plissés, où du pétrole est susceptible de s'être formé.

Grâce au calcul intensif, l'échographie sismique permet aujourd'hui de visualiser, au terme d'une campagne durant de quelques semaines à plusieurs mois, des régions couvrant jusqu'à 7 000 km<sup>2</sup> sur 10 km de profondeur.

© TOTAL



4

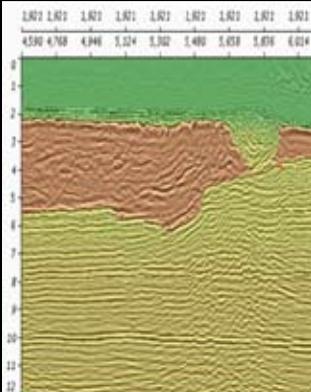
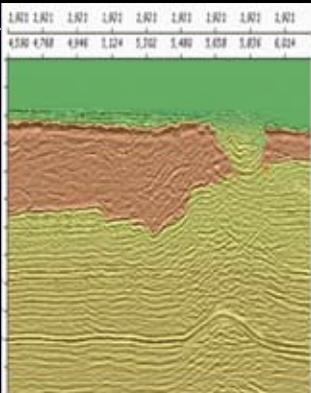
Zoom de l'image précédente sur un gisement pétrolier (la zone en blanc). Un gisement occupe une superficie de quelques dizaines à quelques centaines de kilomètres carrés. Selon les cas, un ou plusieurs puits seront forés pour l'exploiter. Pour décider où précisément, les ingénieurs s'aident de simulations numériques reproduisant le pompage de l'or noir à travers les pores de la roche. Ils ajustent ces simulations en fonction des propriétés visqueuses du pétrole, déduites des échantillons prélevés lors des tests de production réalisés lors des premiers puits d'exploration. L'usage de simulations permet d'augmenter la quantité d'huile récupérée de plusieurs pour cent par rapport à un pompage au hasard dans le gisement.

# Rendre plus fiable L'échographie sismique

Mathématiquement, l'échographie sismique se résume à la résolution d'un problème inverse d'une difficulté diabolique : il faut retrouver la nature et la forme des structures géologiques qui reproduisent le plus fidèlement possible la centaine de milliers d'enregistrements sismiques. Un travail titanesque que Total réalise sur son supercalculateur de 123 teraflops basé à Pau.

Profils sismiques d'un bassin pétrolier. L'image du haut, obtenue, en 2003, grâce à un ordinateur à 64 processeurs, montre dans le bas à droite une structure en chapeau melon, typique d'une zone pétrolière. En se basant sur cette image, les ingénieurs de Total étaient prêts à lancer l'implantation sur le site d'un puits de forage.

Une nouvelle analyse des données sismiques (en bas), réalisée sur supercalculateur, a révélé que la structure était un artefact.

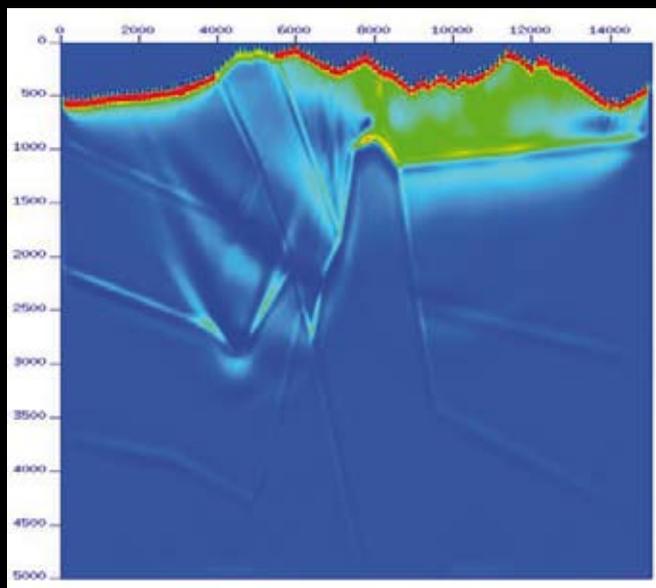


© TOTAL



© TOTAL - Direction de la communication

L'échographie sismique sur terre demande plus de calculs que sur mer, parce que la surface d'où sont envoyées les rafales d'ondes est irrégulière. Total s'est associé avec l'Inria pour développer des méthodes numériques spécifiques pour prendre en compte la topographie du site. Les tests de validation sont effectués sur des données synthétiques : les chercheurs fabriquent de toutes pièces une structure géologique, un assemblage de formes géométriques représentant les structures rocheuses, avec des vitesses variables de propagation des ondes sonores. Ils calculent les enregistrements sismiques qu'ils auraient obtenus en plaçant un chapelet de détecteurs à la surface du sol, et à partir de ces données tentent de retrouver la structure géologique initiale (en rouge, la surface du sol, en bleu et vert, des compartiments géologiques). Une concordance entre structures calculées et initiales certifie la qualité de la simulation.



© TOTAL/INRIA - Hélène Barucq

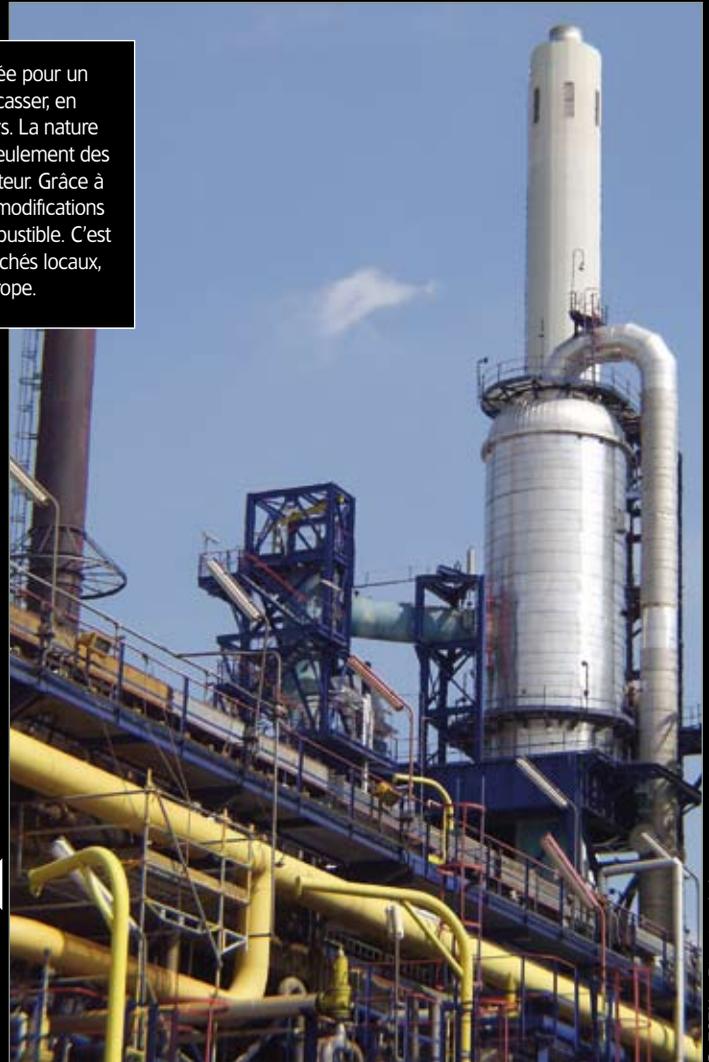
# Améliorer le raffinage

Raffinerie d'Anvers, en Belgique. La "fusée" rutilante qui semble parée pour un lancement est le réacteur d'un craqueur catalytique. Il permet de casser, en présence d'un catalyseur, les hydrocarbures lourds en éléments légers. La nature de ces éléments (gaz liquéfié, diesel ou essence) dépend en théorie seulement des conditions thermodynamiques (température et pression) dans le réacteur. Grâce à des simulations, les ingénieurs de Total peuvent donc prévoir quelles modifications apporter à ces conditions pour que le réacteur produise un autre combustible. C'est ainsi qu'ils adaptent la production des raffineries à l'évolution des marchés locaux, notamment à l'augmentation de la demande en diesel en Europe.

Simulation de la partie haute du craqueur catalytique. Après avoir été transformés en produits légers dans le bas du craqueur, les hydrocarbures, encore mêlés aux grains de catalyseurs, décrivent une trajectoire en spirale. Les hydrocarbures quittent le craqueur par le haut, tandis que les grains de catalyseurs sortent par un conduit sur le côté (à gauche), avant d'être recyclés. Cette simulation a été obtenue sur un ordinateur de plusieurs dizaines de téraflops.



Les hydrocarbures quittent le craqueur par le haut, tandis que les grains de catalyseurs sortent par un conduit sur le côté (à gauche), avant d'être recyclés. Cette simulation a été obtenue sur un ordinateur de plusieurs dizaines de téraflops.



© TOTAL - Direction de la communication

Un craqueur catalytique met en jeu des phénomènes se déroulant à plusieurs échelles. C'est pourquoi simuler son fonctionnement exige des calculateurs puissants. A l'échelle du millimètre, les hydrocarbures lourds percutent les catalyseurs, réagissant chimiquement avec eux et formant des turbulences à l'arrière des grains (image 1). A l'échelle du centimètre, les catalyseurs forment une suspension dans l'atmosphère du réacteur (image 2). Enfin, aux dimensions du réacteur, on observe un brassage général des fluides (image 3).

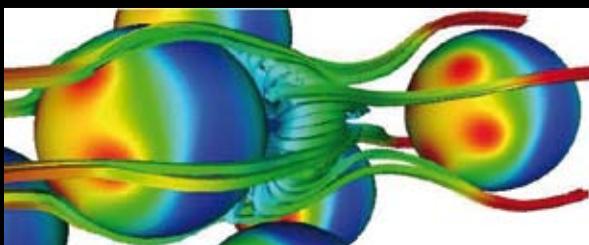


image 1

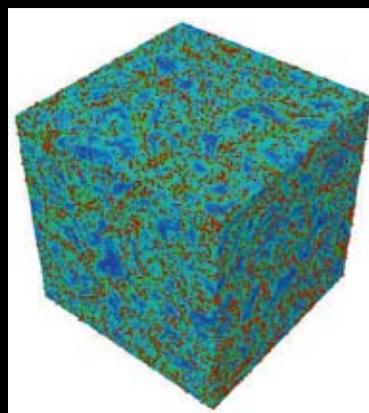


image 2

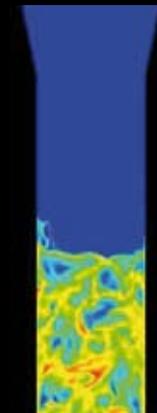


image 3

© TOTAL - IMFT

# Transformer le pétrole



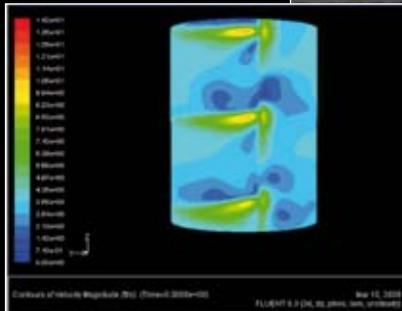
© Hutchinson

Via sa filiale Hutchinson, Total consacre une partie importante de ses capacités de calcul au développement d'élastomères, des caoutchoucs artificiels fabriqués à partir de polymères. Les simulations numériques servent, par exemple, à réaliser des tests de fatigue virtuels de joints de portières de voiture ou des soufflets du métro parisien. (Sur l'image de la porte, à gauche, les couleurs représentent les différents maillages qui ont servi pour sa représentation numérique ; sur l'image du soufflet, à droite, le rouge indique les parties très étirées du caoutchouc, le bleu foncé, les moins étirées.) Les simulations de joints de portières peuvent être réalisées sur un ordinateur de 7 téraflops.



© Hutchinson

Située au bord du fleuve Mississippi en Louisiane, l'usine Total de Carville est le plus grand site de production de polystyrène dans le monde. Le polystyrène est produit à l'intérieur d'un réacteur contenant 150 tonnes de fluides, par polymérisation du styrène (un hydrocarbure benzénique) en présence de catalyseurs. Le rendement de la réaction et la qualité du produit peuvent-ils être améliorés par un meilleur design des pales qui brassent les fluides ? Des simulations tentent d'apporter la réponse (en vert, les hautes vitesses atteintes par les fluides au contact des pales).



© TOTAL - Direction de la communication



Test de porosité sur un enrobé, mélange de graviers et de bitume utilisé dans les revêtements de chaussée. En injectant des polymères dans le bitume, on fabrique un enrobé sur lequel la pluie formera moins de flaques : le matériau devient poreux, ce qui permet à l'eau de s'écouler à travers. Total utilise des simulations pour mieux comprendre comment les polymères, en réagissant avec les grains de carbone contenus dans le bitume, produisent cette perméabilité.

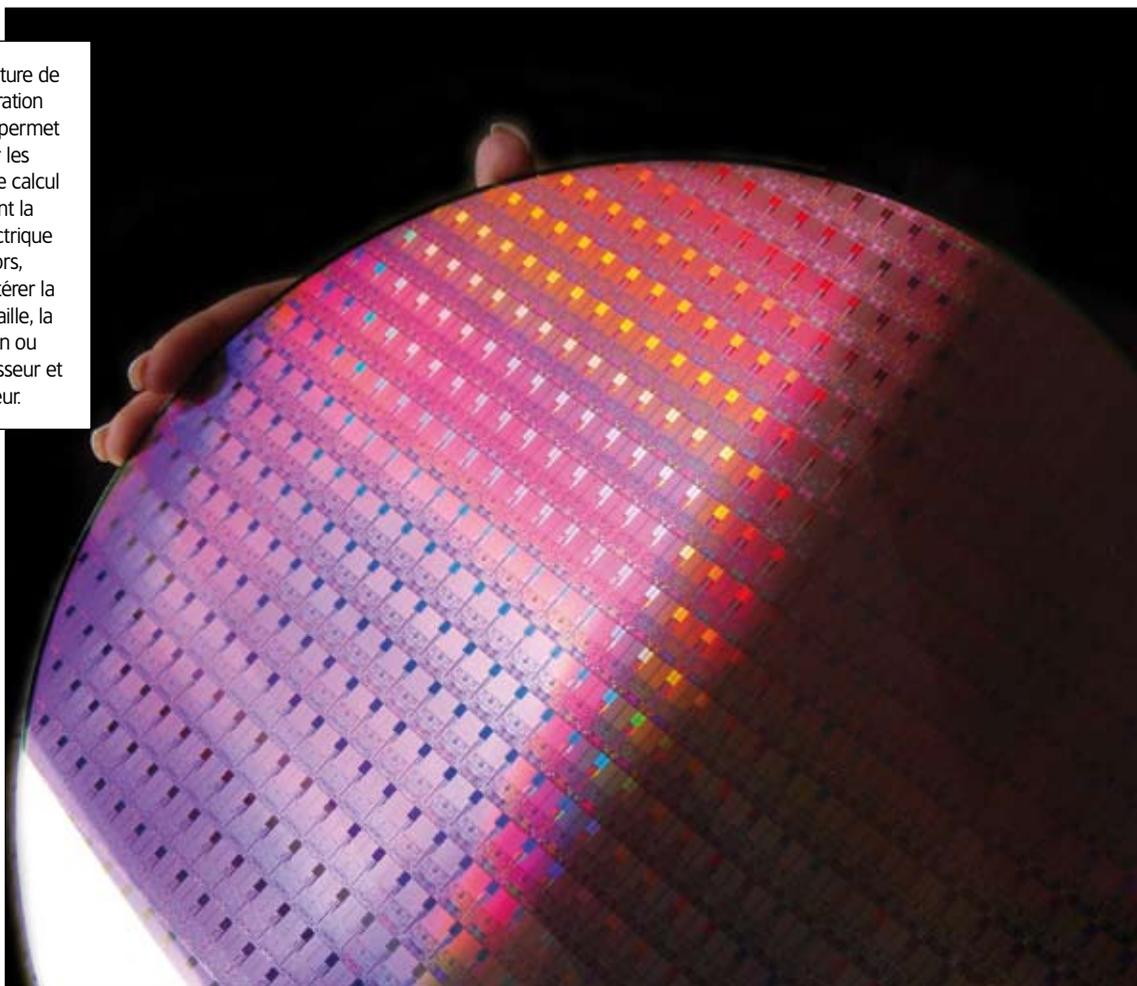
© TOTAL - Direction de la communication

# Le calcul scientifique

Les supercalculateurs sont voraces. Si cela continue, il faudra les installer à deux pas d'une centrale électrique. Le temps est venu de les mettre au régime.

Léo Gerat,  
journaliste scientifique

La microarchitecture de nouvelle génération Intel (Nehalem) permet de pulvériser les performances de calcul tout en limitant la déperdition électrique des transistors, laquelle peut altérer la conception, la taille, la consommation ou le coût du processeur et de l'ordinateur.



© Intel

L'informatique mondiale s'est découverte, il y a deux ans, un problème : elle est boulimique, elle consomme trop et toujours plus d'énergie. Le premier chiffre alarmant fut publié, en 2007, par Jonathan Koomey, un professeur à Stanford. Il indiquait que l'ensemble des serveurs informatiques de la planète avait consommé 0,8 % de la production d'électricité en 2005. Et deux fois plus qu'en 2000.

La même année, le cabinet de conseil et d'études Gartner déterminait que l'informatique mondiale, dans son ensemble, était responsable de 2 % environ des émissions totales de CO<sub>2</sub> par l'homme. Autant que l'aviation civile. Voilà pourquoi on assiste depuis deux ans à une prise de conscience de l'industrie informatique. Elle s'or-

ganise au sein de structures comme *Green Grid*. Les administrations commencent à réagir. Ainsi, la commission européenne a lancé le 30 octobre 2008 son *Code of Conduct for Data Centers*. Ce texte peu contraignant n'a pas force de loi, mais on peut espérer que des administrations en fassent une condition lors d'appels d'offres.

Quid de la question énergétique dans le contexte du calcul haute performance (HPC) ? C'est bien simple, au train où vont les choses, les plus gros supercalculateurs consommeront autant qu'une ville. Il faudrait envisager d'installer ceux qui, vers 2020, atteindront le milliard de milliards d'opérations par seconde (exaflops), à côté d'une centrale électrique. On parle de

# se met au "vert"

50 mégawatts (MW), 100 MW, peut-être plus. La facture d'électricité pourrait devenir dissuasive.

La voracité des équipements informatiques est une fusée à étages. Les processeurs sont gourmands. Les mémoires et périphériques aussi. Ils sont souvent sous-utilisés. Leurs alimentations électriques ont un mauvais rendement. L'énergie consommée est essentiellement transformée en chaleur, qu'il faut évacuer, sous peine de hausse de température préjudiciable, à l'aide d'équipements de climatisation eux-mêmes très gourmands.

Pour une part, la cure d'amaigrissement reposera sur des solutions faciles, en éliminant des gâchis identifiés. Ainsi, les alimentations affichaient des rendements pitoyables et transformaient souvent en chaleur un tiers ou un quart de l'électricité. Les constructeurs ont déjà commencé à redresser la barre. On peut espérer qu'une alimentation d'ordinateur restituant moins de 90 % de ce qu'elle consomme sera bientôt l'exception.

Un aspect particulier de la question est lié à la nécessité de garantir un fonctionnement ininterrompu de nombreuses installations informatiques. On a pris l'habitude d'appliquer des règles confortables, mais parfois simplistes. Ainsi, il est de bon ton de prévoir dans les centres de calcul qui s'estiment indispensables des UPS (*Uninterruptible Power Supply*), autrement dit, des alimentations sans interruption. Elles comportent essentiellement des batteries et des onduleurs, capables de produire un courant alternatif similaire à celui du secteur, quand celui-ci fait défaut.

Google, le détenteur du plus gros parc d'ordinateurs de la planète (peut-être un million de serveurs) vient de dévoiler quelques-unes des recettes appliquées dans ses gigantesques "fermes" de serveurs. L'une d'elles consiste à équiper chaque serveur de sa propre batterie. Cette solution distribuée permettrait de frôler les 100 % de rendement, contre les 92 % avec une UPS centralisée.

Autre exemple, Bull propose désormais des solutions HPC ne nécessitant pas d'UPS, grâce à la présence de supercondensateurs dans les armoires. Ce type de composant, bien plus robuste qu'une batterie, est capable de stocker assez d'énergie pour parer aux microcoupures du secteur. Or, dans la grande majorité des applications HPC, la microcoupure est le seul vrai souci, au moins dans un pays doté d'un réseau fiable.

Reprenons au point de départ : la manipulation de l'information, par d'infimes transistors gravés sur des puces de silicium, consomme de l'électricité. Tout part de là. Cette consommation s'accroît très rapidement

avec la fréquence à laquelle on travaille, et depuis l'invention de l'ordinateur, elle ne cesse de grimper. Vers 2002, l'industrie se cogne sur un mur : au-delà de 25 watts par centimètre carré ( $W/cm^2$ ), une puce devient un fer à repasser.

Voilà pourquoi l'industrie fait à cette époque volte-face et se met à exploiter d'une nouvelle manière sa capacité à graver toujours plus de transistors toujours plus petits. En regroupant deux unités centrales sur la même puce, IBM lance la première puce à "double cœur" (le Power 4) en 2001, une approche essentielle pour juguler la consommation énergétique des ordinateurs (voir article p. 48).

## Réduire la consommation des puces

Désormais, la fréquence d'horloge des processeurs reste bloquée entre 2 et 5 gigahertz. IBM fait même marche arrière, en choisissant, pour sa gamme de supercalculateurs Blue Gene, une puce de sa famille Power cadencée à la fréquence très modérée de 700 mégahertz (850 par la suite). D'où un dégagement de chaleur très réduit permettant d'obtenir une densité jamais vue : le premier Blue Gene/P, la machine

la plus puissante du monde en 2005, comportait 1 024 exemplaires de cette puce (bicœur) par armoire... Par ailleurs, les fabricants améliorent sans cesse des techniques tendant à réduire la consommation de leurs puces. D'abord à un niveau purement électronique. Il s'agit de lutter contre les "courants de fuite", les "capacités parasites" et autres miasmes induits par la miniaturisation. Un exemple bien connu est l'introduction récente par Intel du dioxyde de hafnium, dont la constante diélectrique est particulièrement élevée, pour remplacer le dioxyde de silicium des portes de transistor dans sa dernière filière de puces gravées en 45 nanomètres.

Un autre type d'amélioration consiste à contrôler de plus en plus subtilement la consommation du circuit. En modulant par exemple la tension d'alimentation de modules momentanément inutiles, ou en faisant varier la fréquence horloge de tout ou partie de la puce, en fonction de la charge de travail et d'autres critères.

## Remplacer les disques durs

Pour après-demain, des pistes plus radicales sont explorées. Ainsi, un communiqué laconique d'Intel évoquait récemment un prototype de "transistor à canal P", réalisé sur un substrat de silicium, mais à l'aide de matériaux dits "III-V" (en référence à leur

**Des solutions pour garantir un fonctionnement ininterrompu des installations**

position dans le tableau de Mendeleïev). Associée à un transistor similaire, mais à “canal N”, déjà au point, cette réalisation pourrait déboucher sur une nouvelle technologie de circuits intégrés alimentés

chaud jusque sur les puces. Non sans consommer de l'électricité.

Un petit gain d'efficacité a été obtenu ces dernières années avec les “serveurs lames”, qui réorganisent

l'occupation des armoires informatiques en regroupant typiquement 6 ou 8 serveurs disposés verticalement dans des châssis comportant une alimentation et une ventilation communes.

La circulation de l'air est désormais étudiée de près. On a recours à la simulation des flux thermiques afin d'optimiser l'implantation à toutes les échelles, depuis les composants sur les cartes jusqu'aux équipements dans une salle. On cherche de plus à réguler la climatisation plus localement, et avec anticipation, à l'aide de logiciels et de capteurs thermiques distribués.

Quand l'air ne suffit plus, on a recours au refroidissement liquide.

La porte réfrigérée par circulation d'eau, ou “porte froide”, que l'on place à l'arrière d'une armoire, est désormais au catalogue des constructeurs. En forçant l'air chaud provenant de l'intérieur, à l'aide de ventilateurs, à travers les lames d'un radiateur où circule de l'eau froide, elle permet de restituer à la salle de l'air à la température de départ. Cela permet de concentrer plus de puissance (informatique et donc électrique) dans une armoire (30 kilowatts et plus) sans solliciter la climatisation générale. Les salles informatiques



© Bull

Porte à haute efficacité énergétique conçue par Bull pour ses supercalculateurs. L'air ressort avec une température égale à celle de l'air ambiant et la consommation énergétique par rapport à une climatisation traditionnelle est réduite de 75 %.

sous une tension deux fois inférieure à la norme actuelle et consommant dix fois moins.

Les mémoires de masse sont également voraces. On envisage le remplacement progressif des disques durs par des unités (SSD : Solid State Drive) qui stockent l'information sur des puces de “mémoire flash”. Cette technologie, largement exploitée dans les baladeurs et autres objets nomades, reste aujourd'hui plus coûteuse que le disque, mais progresse à grands pas.

Les ordinateurs transforment l'électricité en chaleur aussi sûrement qu'un radiateur, mais comme ils commencent à dérailler à partir d'une certaine température, il faut absolument évacuer ces calories. D'où la présence peu discrète de ces “Crac” (*Computer Room Air Conditioning*), comme on dit dans le milieu. Mais aussi de ces ventilateurs petits et grands qui vont chercher l'air

comporteront de plus en plus souvent un réseau de distribution d'eau froide sous leur faux plancher.

Il s'agit là d'un retour vers le futur. Dès 1976, le Cray-1, parrain de tous les supercalculateurs, était déjà réfrigéré par un liquide. Du fréon, comme n'importe quel réfrigérateur de l'époque. Cray poursuit d'ailleurs dans cette voie (avec bien sûr des liquides plus “verts”). Le constructeur a lancé l'année dernière ECOphlex, une nouvelle technologie de réfrigération utilisant le changement de phases (gaz-liquide) d'un liquide réfrigérant très efficace, pour véhiculer la chaleur entre une armoire et l'installation externe de climatisation.

Une autre idée progresse : et si l'on cessait de régler la climatisation autour de 20 °C ? On sait bien pourquoi on voulait garder les ordinateurs au frais, au départ : les pannes se multiplient avec la température.

Intel a voulu secouer cette habitude en conduisant une expérience au Nouveau-Mexique, dans deux locaux remplis de 450 serveurs chacun. L'un d'eux fut climatisé classiquement à 20 °C en permanence, tandis que, dans l'autre, un dispositif économiseur se contentait d'évacuer l'air chaud en le remplaçant par de l'air extérieur, tant que la température ne dépassait pas 32 °C. Bilan : une facture énergétique divisée par trois. Et un taux de panne augmenté, mais acceptable. Voilà qui fait réfléchir.

### Mieux gérer la climatisation

Plus généralement, on parle de "free cooling", de climatiser autant que possible sans fabriquer du froid. C'est évidemment plus facile dans les régions fraîches. Au fait, Google vient d'annoncer l'installation de son prochain gros centre européen en... Finlande. Pourquoi ce pays de 5 millions d'habitants, loin de tout ? Son climat pourrait bien être l'explication. A noter que l'on peut encore rafraîchir ses ordinateurs en exploitant l'eau d'un fleuve.

Puisque le matériel informatique produit de la chaleur, une autre idée consiste à tenter de l'exploiter. C'est ce qu'a notamment fait IBM, l'année dernière, en installant, chez un client de la banlieue de Zurich, un système de refroidissement qui fournit la chaleur récupérée à la piscine municipale. Une idée à creuser...

S'agissant d'énergie et de gaspillage, on serait tenté de croire que seul le matériel informatique est en cause. Il n'en est rien. Tout d'abord parce qu'une façon très efficace de jeter les kilowattheures par les fenêtres consiste à confier à un ordinateur un logiciel bâclé. Cela existe. Mais l'état d'esprit est différent

dans la sphère HPC. On y est plus souvent enclin à optimiser et réoptimiser les codes pour tirer le maximum du supercalculateur dont on a obtenu de haute lutte une maigre tranche.

Enfin, le logiciel peut aussi apporter une aide appréciable. Des solutions logicielles sont aujourd'hui proposées pour améliorer la gestion de l'énergie au niveau de chaque serveur comme d'une ferme géante, en optimisant la répartition de la charge de travail, en cherchant à mettre hors tension des équipements au chômage...

Pour terminer, rappelons que, si l'informatique est devenue un gouffre énergétique, elle offre par ailleurs des armes essentielles pour "verdier" toutes les activités humaines. Qui inventerait la voiture du futur ou les énergies propres sans ordinateur ?

(1) Un mégaflops correspond à une capacité de traitement d'un million d'opérations par seconde.

(2) Un pétaflops correspond à une capacité de traitement de 10<sup>15</sup> opérations par seconde.

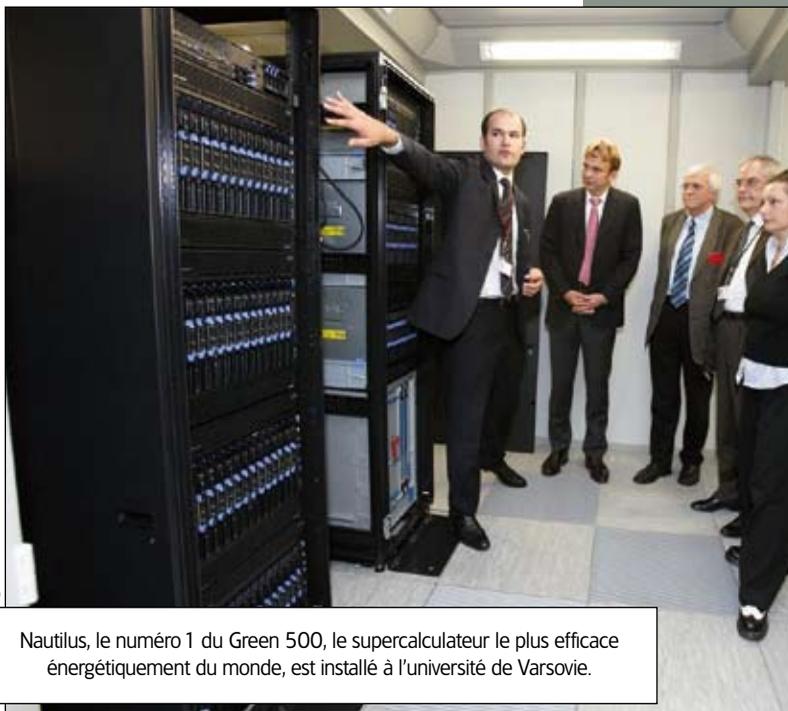
## Green 500, le palmarès du supercalculateur économe

Il existe depuis 2005 un hit-parade des supercalculateurs "verts", organisé par deux chercheurs américains de la Virginia Tech, Wu-chun Feng and Kirk Cameron. Green500.org reprend la liste des machines les plus puissantes établie par le célèbre site Top500.org, divise pour chacune la puissance mesurée au "banc d'essai" Linpack (un étalon forcément imparfait...) par sa consommation électrique, et obtient un indice exprimé en mégaflops<sup>(1)</sup> par watt (Mflops/W). IBM rafle les 20 premières places, après quoi on trouve deux Silicon Graphics et un Cray. Les sept supercalculateurs les plus efficaces sont des BladeCenter d'IBM, reposant sur sa célèbre puce Cell (destinée à la PlayStation de Sony), qui comporte 9 cœurs. Le champion, installé à l'Université de Varsovie, affiche une efficacité de 536 Mflops/W. Le n° 7 (445 Mflops/W) n'est autre que Roadrunner, l'actuel ordinateur le plus puissant du monde (1,1 Pflops<sup>(2)</sup>) selon le Top 500.

De la 8<sup>e</sup> à la 17<sup>e</sup> position (360-370 Mflops/W), IBM aligne dix de ses fameux BlueGene, équipés d'une puce Power "lente", donc froide. On chute ensuite vers les 260 Mflops/W, pour trouver encore IBM, aux 19<sup>e</sup> et 20<sup>e</sup> places, avec une troisième approche technologique, reposant sur des puces Xeon d'Intel.

Il faut préciser que le constructeur obtient ce classement enviable en partie au prix d'innovations qui ne profitent pas également à tous les types d'applications (BlueGene est la machine la plus parallèle actuelle) et qui compliquent la programmation, du fait de l'hétérogénéité des cœurs (jusqu'à trois types dans le cas de Roadrunner).

Le fameux Jaguar (1,06 Pflops) de Cray, le numéro deux du Top500, est relégué en 79<sup>e</sup> position du Green500, car il consomme trois fois plus d'électricité (7 MW) que Roadrunner (2,5 MW).



Nautilus, le numéro 1 du Green 500, le supercalculateur le plus efficace énergétiquement du monde, est installé à l'université de Varsovie.

# Grille : Les ordinateurs

Faire travailler ensemble des dizaines de supercalculateurs, des milliers de serveurs ou même des millions de PC, c'est le principe de la "grille". Un concept qui évolue...

Léo Gerat,  
journaliste scientifique

L'idée remonte à une douzaine d'années. La plus ancienne grille connue, distributed.net (qui existe encore), est née en 1997. Elle regroupe aujourd'hui quelque 160 000 PC qui unissent leurs efforts pour résoudre des problèmes de cryptographie. Mais c'est surtout Seti@home, en 1999, qui a popularisé le concept. Il s'agissait cette fois d'analyser des tranches de signaux reçus par un radiotélescope à la recherche d'un (éventuel) "coucou" extraterrestre. Trois millions de personnes prêtent aujourd'hui le temps libre de leur ordinateur à ce projet.

Dans ces exemples, la grille regroupe les forces d'un très grand nombre de machines modestes. Ce type de collectif de machines, par ailleurs très faiblement couplées (au départ, la plupart des PC recrutés étaient encore connectés au Net *via* un modem...) convient à une catégorie de problèmes que l'on qualifie de *embarrassingly parallel*. Le cas de Seti@home illustre bien ce cas de figure : des milliers d'heures d'enregistrement de signaux tombés des étoiles sont découpées en fines tranches, qui sont soumises à un algorithme qui les rumine une par une. Le volume de données indépendantes rend le problème très parallélisable. Mais dès le départ, on imagine d'appliquer la notion de grille dans d'autres contextes. On songe en particulier à faire collaborer des machines plus conséquentes, reliées *via* des lignes à haut débit, pour traiter des problèmes parallélisables, mais sans plus. On doit à une équipe conduite par Ian Foster (*Argonne National Laboratory*) et Carl Kesselmann (*University of Southern California*) la réalisation, dès 1997, de la première "boîte à outils" permettant de mettre en œuvre une grille, Globus Toolkit. Le concept de grille entame une brillante carrière...

L'idée de départ, c'est donc la décomposition de tâches lourdes en rondelles, qui sont réparties sur un grand nombre de machines dispersées, *a priori* hétérogènes, et qui n'ont pas toujours que ça à faire. Grâce à une couche de logiciel *ad hoc* – on parle d'intergiciel (*middleware* en anglais) – l'utilisateur voit ces nombreuses machines comme une seule supermachine. Ce n'est, au fond, qu'une autre manière de pratiquer ce que l'on appelle "l'informatique distribuée". Laquelle est

devenue monnaie courante, à une époque où n'importe quel supercalculateur est réalisé en interconnectant une tribu d'ordinateurs. La différence essentielle est que ces "grappes" (*clusters* en anglais) sont constituées de nœuds identiques, rassemblés en un même lieu, et qu'ils communiquent *via* un *interconnect* à très haut débit.

Dix ans plus tard, où en est le concept de grille ? « *Il est vrai qu'il a été un peu survendu au départ, comme cela arrive à bien des idées neuves*, admet Thierry Priol, responsable de l'équipe Paris à l'Inria. *Mais il est entré aujourd'hui dans une phase de maturation et se porte bien. On en connaît mieux les limites, on cerne mieux les défis qui restent encore à relever.* »

## Une grande diversité de grilles

L'idée initiale a enfanté toute une faune d'espèces différentes. On distingue désormais les grilles de calcul, les grilles de données, et même des spécimens mixtes. Cet instrument de recherche superlatif qu'est l'accélérateur de particules LHC (*Large Hadron Collider*) du CERN, à Genève, produira chaque année 15 Po (pétaoctets), c'est-à-dire 15 millions de milliards d'octets. Lesquels seront étudiés par des équipes de recherche dispersées sur la planète, *via* la grille de données WLCG (*Worldwide LHC Computing Grid*). Un autre exemple est la grille Birn (*Biomedical Informatics Research Network*), aux États-Unis, qui réunit des laboratoires spécialisés en neuro-imagerie.

On doit distinguer par ailleurs les grilles de production, opérationnelles, des grilles de recherche. Egee, par exemple, qui réunit des machines dédiées, est une grille européenne opérationnelle, alors que Grid'5000, en France, est clairement une grille expérimentale, de recherche, réunissant 5 000 nœuds répartis sur 9 sites dans l'Hexagone. Enfin, certaines grilles sont à "gros grains", comme Deisa, qui fédère de gros centres de calcul, ou au contraire à grain fin, les meilleurs exemples étant Seti@home et ses semblables (on dénombre quelque 40 projets de ce type), qui font collaborer des PC ordinaires et privés, *via* Internet.

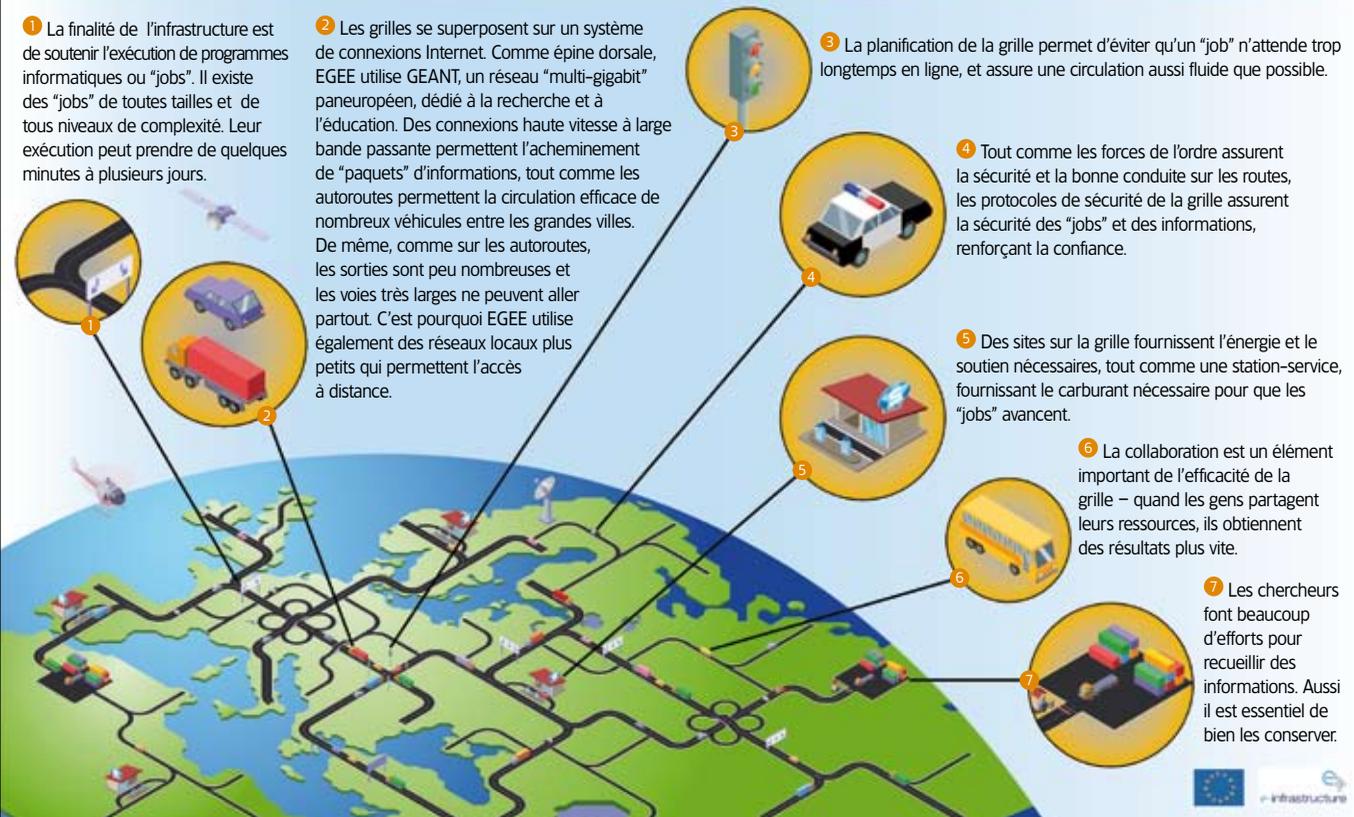
« *Il faut encore noter qu'une grille peut fonctionner selon deux modes différents*, ajoute Thierry Priol. *Dans le mode dit*

« Les grilles spécialisées marchent mieux que celles qui se veulent généralistes »

# jouent collectif



## L'infrastructure de l'EGEE



"Push", c'est le logiciel d'administration de la grille qui distribue le travail et envoie aux ordinateurs affiliés des tâches à effectuer. A l'inverse, en mode "Pull", chaque membre prend l'initiative de signaler quand il le veut qu'il est disponible et réclame du travail. Les grilles de PC du genre Seti@home fonctionnent ainsi. »

### Du "Grid" au "Groud computing"

« Une chose que l'on sait mieux aujourd'hui, estime de son côté Franck Cappello, responsable à l'Inria du projet Grand Large, à l'origine de l'initiative Grid'5000, c'est que les grilles spécialisées marchent mieux que celles qui se veulent généralistes. La grille européenne Deisa, qui regroupe une douzaine de gros centres de calcul scientifique, par exemple, ou encore Egee, qui regroupe quelque 300 sites et vise d'abord la gestion de données massives, ont fait leurs preuves. A l'inverse, la grille à tout faire Teragrid, aux Etats-Unis, se cherche encore. »

Depuis peu, un paradigme proche mais distinct piètine les plates-bandes du "grid computing": le "cloud computing". Apparu dans un contexte éloigné du calcul scientifique, chez des acteurs du Web comme Google, Yahoo,

Amazon, Salesforce ou IBM, il propose de manière asymétrique à des clients d'exploiter via Internet des ressources informatiques offertes par des fournisseurs dotés de vastes "fermes de serveurs". Ressources qui peuvent prendre des formes assez "brutes" comme de la puissance de calcul, ou une capacité de stockage. Ou à l'inverse des formes plus élaborées comme une application prête à servir, un service complet délivrant l'utilisateur de tout souci informatique.

Le HPC est-il vraiment concerné par ce "cloud computing"? « Pas dans l'immédiat, estime Franck Cappello. Il manque plusieurs éléments critiques, dont un réseau public assez rapide et des réseaux internes assez puissants pour satisfaire les besoins du calcul intensif. » On imagine pourtant que les deux concepts puissent se rapprocher dans l'avenir, d'une manière ou d'une autre, ne serait-ce qu'en cohabitant sur des installations communes. Ian Foster, le père du Grid, a déjà forgé un mot pour désigner l'enfant de cette union: le "Groud computing".



# Des puces avec toujours

Désormais, le parallélisme va se nicher jusque sur la puce, le microprocesseur a plusieurs "cœurs", il est multiprocesseur. Deux, quatre, huit, seize cœurs...

Et après ? Les idées ne manquent pas pour la suite.

Léo Gerat,  
journaliste scientifique

Le calcul scientifique est décidément dans l'ère du parallélisme massif. Désormais, un supercalculateur qui se respecte met les petits plats dans les grands jusque dans ses microprocesseurs, dans lesquels plusieurs "cœurs" ("core" en anglais) travaillent côte à côte, en partageant des informations. Deux cœurs par puce est déjà un minimum, quatre banal, huit normal, on attend de pied ferme les puces à 16 cœurs, 32 cœurs et plus.

Ces puces ont-elles été mises au point pour les besoins du calcul haute performance (HPC) ? Pas le moins du monde. On les retrouve dans les supercalculateurs parce que les constructeurs n'ont plus les moyens de s'offrir le développement des puces dont ils rêvent, ils ont pris l'habitude d'utiliser ce qu'ils trouvent "dans le commerce" (*off the shelf* en anglais). Or, l'informatique en général est passée au multicœur. Tout ordinateur récent, ou presque, est doté d'un microprocesseur au moins bicœur. Monsieur Tout-le-Monde a-t-il vraiment besoin de pratiquer le parallélisme à tout va ? La réponse est "non". D'ailleurs, personne n'a réclamé cette nouvelle forme de parallélisme, pas plus que les autres. La vérité, c'est que, si un constructeur annonçait demain un

nouveau supercalculateur offrant une puissance de plusieurs téraflops<sup>(1)</sup> sans parallélisme, par exemple en tournant à une fréquence de quelques térahertz, on ne lui en voudrait pas. Le parallélisme, ce sont surtout des difficultés de programmation. Le multicœur n'échappe pas à la règle. L'industrie ne s'est pas mise à le pratiquer pour le plaisir. « *Le multicœur est un choix de raison, sur lequel il y a d'ailleurs quasi-unanimité* », précise Olivier Temam, responsable à l'Inria Saclay du projet Alchemy.

L'industrie informatique a pris le virage du multicœur au début de ce siècle. Petit rappel des faits. Au départ, l'industrie s'est mise à réduire régulièrement la taille des transistors, ce qui permet d'en rassembler toujours plus sur une même puce, et en même temps d'augmenter la fréquence de fonctionnement. En théorie. Mais plus un transistor commute vite, plus il consomme de l'électricité et dissipe de la chaleur. S'ajoute à cela que la miniaturisation a tellement réduit la taille de certaines

régions isolantes du circuit que l'on assiste à une augmentation des courants de fuite, la puce se met donc à consommer beaucoup, même quand elle ne fait rien. Pire, dans les années qui viennent, réduire la taille des transistors ne réduirait plus d'autant leur consommation. Conséquence : ils ne pourraient plus tous fonctionner en même temps, on ne pourrait plus utiliser tous les cœurs d'un multicœur, ce qui rendrait caduque l'option multicœur.

On constate donc, au début des années 2000, qu'il est de plus en plus difficile de faire grimper la fréquence. C'est d'autant plus ennuyeux que l'on a pris l'habitude de mettre en avant ce paramètre comme indice de puissance de chaque nouvelle puce. Et si l'on n'est plus capable de sortir la nouvelle génération qui galope deux fois plus vite, que pourrait-on bien dire aux clients ? C'est décidé, on va exploiter les progrès de la miniaturisation en gravant deux processeurs côte à côte sur la même puce, avec un petit quelque chose pour les interconnecter, bien sûr. En 2001, IBM lance le premier microprocesseur à double cœur, le Power 4. Intel et AMD font de même en 2005. Désormais, l'horloge reste bloquée à une poignée de gigahertz (GHz), et on compte les cœurs.

« Le multicœur est un choix de raison »

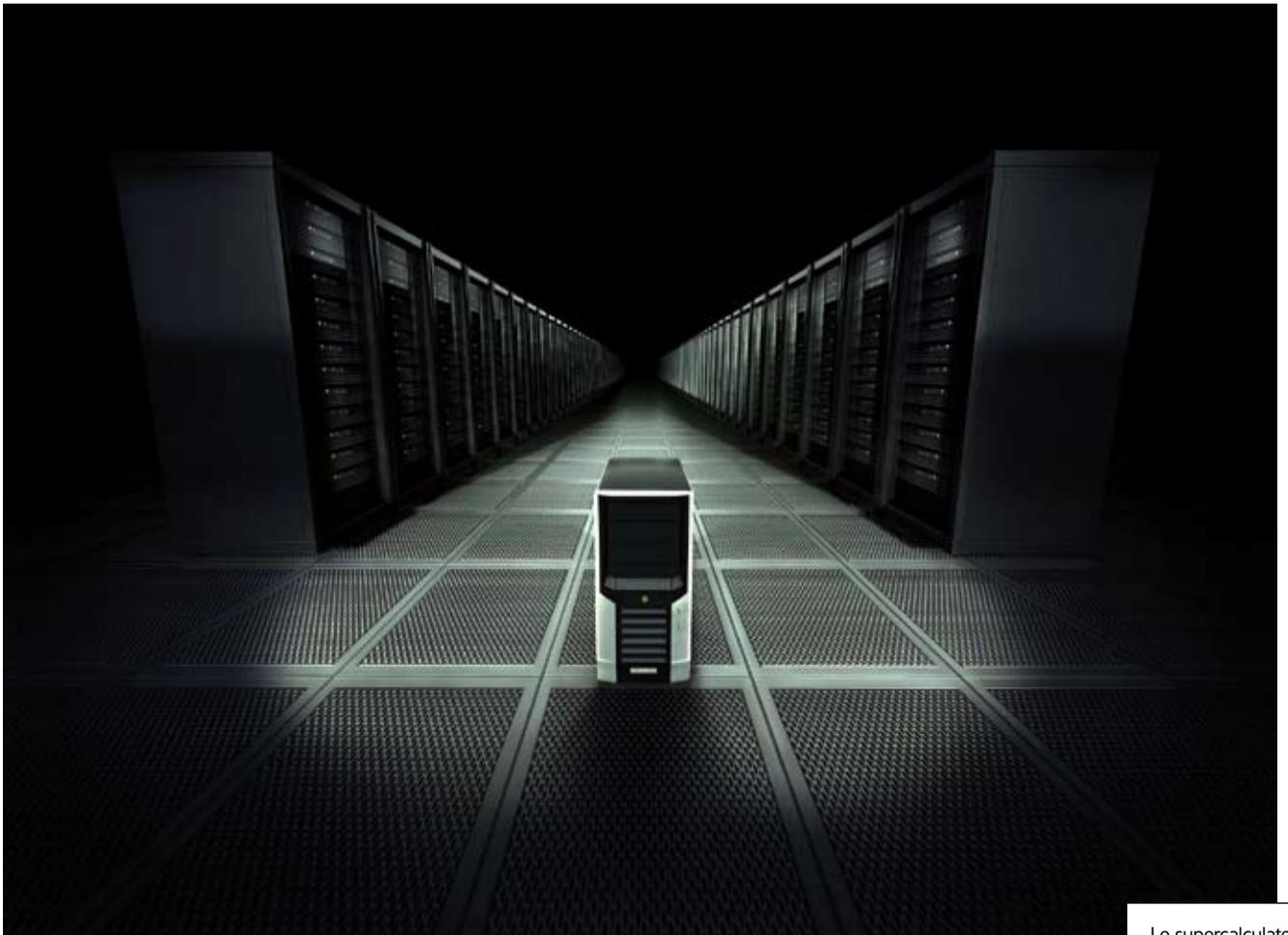
NEHALEM,  
la dernière  
puce Intel.



© Intel

(1) Un téraflops correspond à une capacité de traitement de  $10^{12}$  opérations par seconde.

# plus de cœurs



© Nvidia

Deux, quatre ou huit cœurs par puce aujourd'hui, 16 demain, 32 après-demain, la course folle reprend, on multiplie désormais les cœurs au lieu des GHz. Mais est-ce si simple ? Pour commencer, on ne peut se contenter de juxtaposer ces cœurs. « Une question essentielle est la sophistication de leur interconnexion », explique Jean-Laurent Philippe, directeur technique Europe chez Intel. Plus ils sont nombreux, plus ils ont besoin de pouvoir échanger efficacement, de partager de la mémoire rapide, toutes choses qui consomment également du silicium.

Cependant, tout indique que le nombre de cœurs devrait suivre une courbe impressionnante. Intel a déjà présenté, en décembre 2007, à l'*International Solid-State Circuits Conference* de San Francisco, un prototype nommé Polaris, qui comportait 80 cœurs.

Mais au fait, pourquoi forcément toujours plus de copies du même cœur ? Et si l'on ajoutait aux unités centrales classiques, généralistes, autrement dit aux CPU (*Central Processing Unit*), des processeurs d'un autre type, capables de faire vite et bien certaines

choses que les CPU ne font pas très bien ? C'est d'ailleurs une pratique courante dans n'importe quel ordinateur du commerce : on trouve dans le moindre portable, d'une part, un microprocesseur généraliste qui prend en charge tous les logiciels habituels, mais aussi un processeur graphique, ou GPU pour *Graphics Processing Unit*, sur lequel sont effectués tous les calculs relatifs à ces images époustouflantes qui s'agitent sur nos écrans.

« Un processeur graphique, explique André Seznec, responsable du projet CAPS à l'Inria Rennes, n'est rien d'autre qu'une grosse machine vectorielle, une sorte de Cray. » Autrement dit, un processeur spécialisé dans l'exécution d'opérations entre vecteurs. Dont le traitement d'images, entre autres, est gourmand.

Non seulement il y a un GPU dans le moindre ordinateur, mais en plus il est souvent lui-même multicœur, et pas qu'un peu. Ainsi, la puce Tesla T10 de nVidia ne comporte pas moins de 240 cœurs. Précisons néanmoins que ces derniers réalisent un petit jeu d'opérations bien particulières et que, de ce fait,

Le supercalculateur personnel NVIDIA® Tesla™. Basé sur une architecture GPGPU de calcul, il fonctionne avec 960 cœurs de traitement parallèles.

ils sont moins complexes et occupent une surface de silicium moindre qu'un cœur généraliste comme celui d'une puce Nehalem, le dernier cri chez Intel.

Ces puces ont beau avoir été conçues pour le traitement graphique, elles intéressent bigrement certains consommateurs de HPC qui ne font pas exactement dans l'image. Au fil du temps, les fabricants ont élargi la palette des possibilités de leurs puces GPU, pour tenir compte de la demande, qui est exprimée notamment par l'industrie du jeu vidéo. Et les jeux d'aujourd'hui font bien plus que du bidouillage d'image. Il suffit d'y jeter un coup d'œil pour voir qu'ils pratiquent par exemple la simulation de phénomènes physiques variés. D'ailleurs, cela fait quelque temps déjà que l'idée prend corps de réaliser des supercalculateurs, certes un peu spécialisés, à partir de puces GPU. Un fabricant comme nVidia, justement, propose depuis peu des solutions HPC exploitant ses puces GPU.

On appelle GPGPU, pour *General-Purpose Graphics Processing Unit*, cette approche consistant à faire du calcul scientifique sur des puces graphiques. Certains pratiquent ce sport en grand. Ainsi une équipe du *Tokyo Institute of Technology* a réalisé une machine hybride, connue sous le nom de Tsubame, qui contient, entre autres, 680 puces T10 de nVidia, dotées chacune de 240 cœurs,

**GPU et CPU,  
bientôt sur  
la même puce !**

ce qui représente un total de 163 200 cœurs graphiques. Dans l'Hexagone, un supercalculateur de ce type est déjà installé chez Bull pour le compte du Genci (Grand équipement national de calcul intensif). Il s'agit

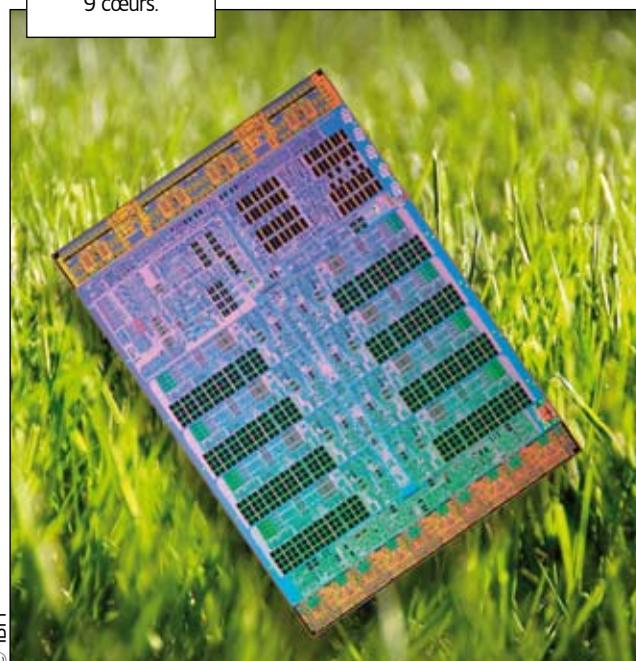
d'une machine hybride qui comportera 192 puces Tesla T10 de nVidia.

Dès lors, on peut se poser la question : si pratiquement tous les ordinateurs ont besoin d'un processeur graphique en

plus de leur microprocesseur généraliste, pourquoi ces deux-là ne se rejoindraient-ils pas sur une même puce ? « *La logique technique, estime André Seznec, voudrait que le GPU ait migré dans la puce du CPU depuis longtemps. On pourrait avoir aujourd'hui des puces rassemblant CPU et GPU au lieu de CPU à deux cœurs. Mais la logique commerciale en a décidé autrement.* »

Une évolution possible du multicœur verrait ainsi des cœurs graphiques rejoindre les cœurs généralistes sur

La puce Cell  
d'IBM à  
9 cœurs.



© IBM

Un des plus puissants systèmes hybrides au monde, installé récemment au Centre de calcul, recherche et technologie (CCRT) de Bruyères-le-Châtel.

© Bull

## Vers des cœurs à géométrie variable ?

Le rêve, dans le fond, pour l'utilisateur final, ce serait de disposer d'une machine parfaitement adaptée à son problème, dotée de puces conçues pour faire tourner son logiciel le plus efficacement possible. Or, pour des raisons économiques, l'industrie pratique exactement l'inverse : elle investit des sommes colossales dans la production massive de quelques puces visant de vastes marchés. Ces derniers temps, les supercalculateurs sont réalisés avec les mêmes puces que des ordinateurs ordinaires, vendus à des millions d'exemplaires. Une vieille idée vise à résoudre cette contradiction entre le circuit spécialisé efficace et le circuit générique économique. « *C'est l'hypothèse des circuits reconfigurables* », explique Olivier Temam de l'Inria. L'idée consiste à réaliser des circuits constitués de modules dont on peut programmer l'interconnexion à un moment donné de manière à créer momentanément, à la demande, un opérateur capable d'effectuer un certain calcul. La forme la plus connue est le FPGA (*Field-Programmable Gate Array*), une puce comportant un réseau de portes logiques interconnectables à la demande sous le contrôle d'un logiciel. Il permet littéralement de "programmer" un circuit logique. « *Une idée passionnante sur le papier, mais dont la mise en œuvre restera sans doute limitée dans un premier temps* », tempère Olivier Temam. Des solutions FPGA sont disponibles sur le marché et employées pour satisfaire quelques besoins particuliers. Mais rien n'interdit d'imaginer qu'une génération à venir de processeurs multicœurs puisse un jour intégrer des circuits "un peu" reconfigurables. « *C'est une idée intéressante, une possibilité, admet Jean-Laurent Philippe d'Intel, mais encore théorique.* »

le même bout de silicium. « C'est une possibilité, admet Jean-Laurent Philippe, d'Intel. Ce qui est sûr, c'est que le GPU, qui est aujourd'hui souvent fort éloigné du CPU (sur une "carte graphique"), va s'en rapprocher. Et pourrait à terme le rejoindre sur la même puce. »

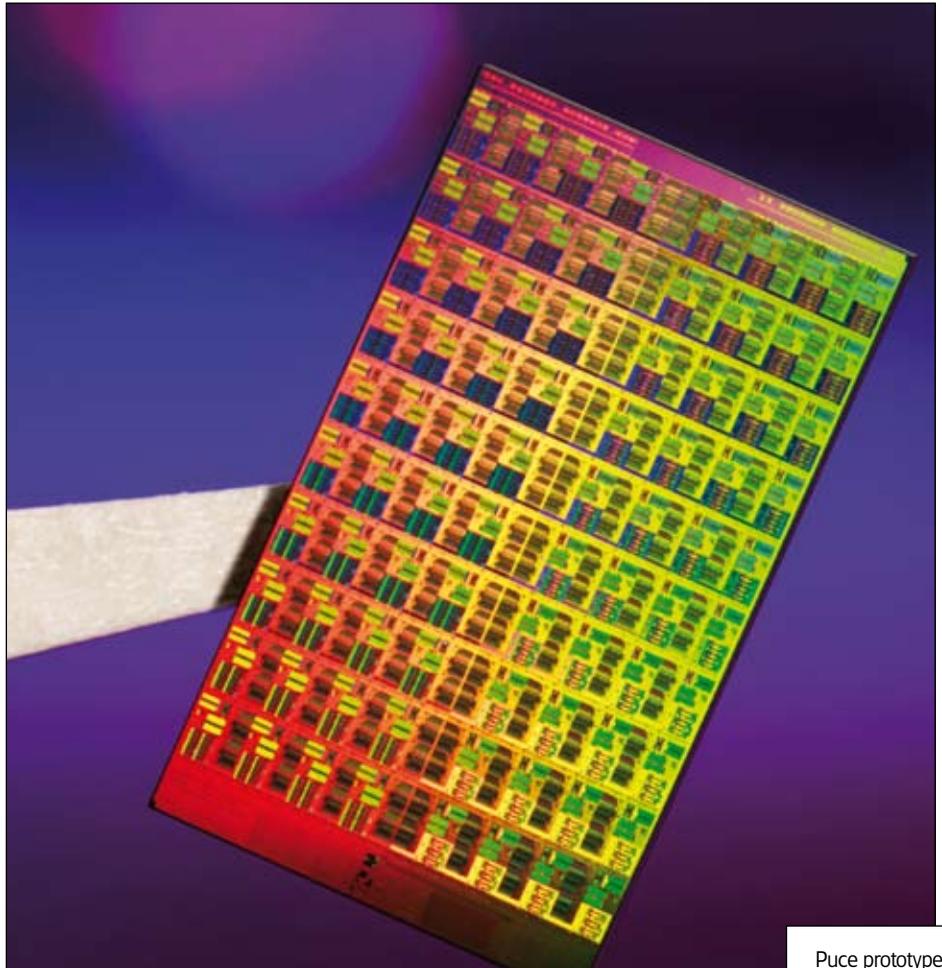
Ce mouvement sera d'autant plus souhaitable si, dans le même temps, les processeurs graphiques évoluent dans le sens d'une moindre spécialisation. La description que fait Intel de sa future puce graphique Larrabee, dont une première version à 24 cœurs est attendue pour la fin de l'année, est intéressante à ce titre. Larrabee devrait offrir de belles performances en tant que processeur graphique. Nul doute que certains voudront l'utiliser en GPGPU. On devrait donc la retrouver sur des machines HPC.

Une autre puce va déjà un peu plus loin encore. La célèbre Cell qu'IBM a conçue en partenariat avec Sony comporte à la fois un cœur classique, de la famille Power, et huit cœurs doués pour le calcul scientifique intensif. Elle indique la voie prometteuse de la puce multicœur hétérogène, comportant à la fois des cœurs généralistes et des cœurs plus spécialisés.

On songe même à compliquer encore un peu plus le jeu. « Le multicœur, indique Olivier Temam, n'est pas la seule façon d'exploiter l'augmentation du nombre de transistors disponibles. On peut aussi s'en servir pour ajouter des accélérateurs de toutes sortes. » Si l'on dispose demain d'assez de place sur le silicium pour installer des dizaines de cœurs, pourquoi n'en garderait-on pas une partie pour graver des opérateurs spécialisés, capables d'effectuer très efficacement certaines opérations ?



Carte GPU NVIDIA Tesla.



Puce prototype Intel Polaris à 80 cœurs.

Le jeu en vaut-il la chandelle ? La fréquence avec laquelle ce silicium très spécialisé se rend utile justifie-t-il la place qu'il occupe ? De tels choix dépendront de solides études de marché. Au final, il s'agit tout simplement d'exploiter plus finement le "budget silicium" que la technologie du moment offre au concepteur de circuit.

Dans cette recherche du juste milieu entre le très spécialisé efficace, mais rarement utilisé, et le générique, on aimerait pouvoir jouer sur les deux tableaux. « Une idée consiste à faire en sorte de ne pas graver des fonctions trop spécialisées, ajoute Olivier Temam, mais plutôt des familles d'algorithmes pouvant servir dans plusieurs contextes. On cherche à définir des fonctions spécialisées mais néanmoins flexibles. »

Impossible de conclure sur le rôle du multicœur dans le calcul haute performance sans parler de l'aspect logiciel. « Il ne faut pas se leurrer, il n'est pas facile pour une application d'exploiter vraiment tout le potentiel du multicœur », affirme Thierry Priol, responsable de l'équipe PARIS à l'Inria Rennes.

L'exploitation optimale de cette nouvelle façon de réaliser les calculateurs scientifiques suppose de gros efforts côté logiciel.

# Calcul intensif : un jeu d'enfant ?

Regain d'intérêt pour les architectures "hybrides" associant des processeurs de calcul généralistes et des cartes graphiques comme celles des jeux vidéo : elles promettent une accélération des calculs d'un facteur 10... à condition "d'hybrider" les logiciels en jeu.

Isabelle Bellin,  
journaliste scientifique

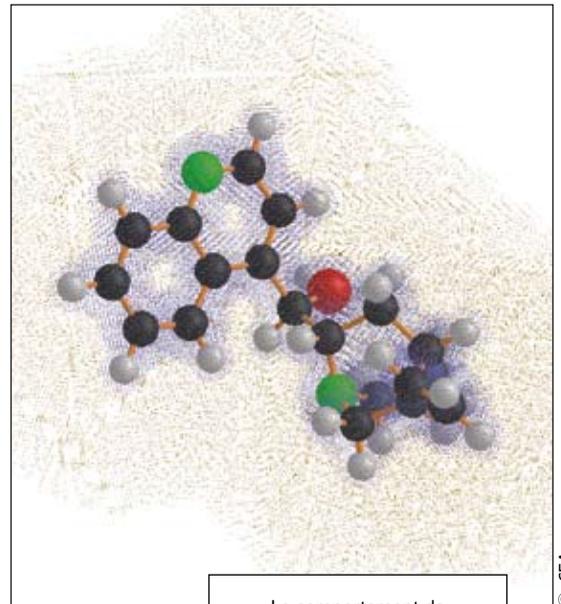
Depuis l'avènement des architectures parallèles (voir article p. 48), les algorithmes des applications scientifiques se sont adaptés à ces nouveaux environnements de calcul. Depuis deux ans, ce sont les processeurs graphiques des consoles de jeux, cent fois plus rapides que les processeurs généralistes, qui empruntent la voie du multicœur. Ces nouvelles architectures, dites hybrides, promettent de booster le calcul haute performance. Mais tirer parti de ce potentiel suppose d'adapter leur programmation, un domaine de recherche complexe encore balbutiant... alors que ces nouvelles bêtes de calcul se multiplient déjà. En avril dernier, le premier exemplaire européen de 300 téraflops (Tflops<sup>(1)</sup>), financé par le Genci<sup>(2)</sup>, a été installé par Bull au CEA de Bruyères-le-Châtel.

## Une application majeure : les nanosimulations

Au premier rang des applications intéressées : les nanosimulations, ces simulations à l'échelle électronique indispensables pour élaborer des nanomatériaux à des coûts raisonnables. « Il faut 100 000 heures de calcul sur une architecture classique de supercalculateur pour simuler le comportement de 100 atomes pendant une picoseconde avec le logiciel Abinit, l'une des références mondiales », précise Thierry Deutsch, chercheur au laboratoire de simulation atomistique du CEA à Grenoble. Que faut-il pour qu'un tel code de calcul bénéficie des capacités prometteuses d'une architecture hybride ?

« Il faut savoir estimer quels codes peuvent être transférés, de quelle taille d'architecture ils ont besoin, quels calculs sont à réserver aux processeurs généralistes ou graphiques et comment limiter les échanges de données entre les uns et les autres », répond Jean-François Méhaut, professeur à l'université Joseph-Fourier (Grenoble), chercheur à l'Inria dans l'équipe Mescal. Tout un programme ! A terme, le but est d'automatiser ces processus en conservant les mêmes performances d'une génération à une autre de carte graphique, d'une architecture hybride à une autre. Ces équipes de l'Inria et du CEA y travaillent ensemble depuis deux ans. « Pour l'instant, nous localisons au fur et à mesure les portions de calcul les plus coûteuses en temps et facilement parallélisables pour les attribuer aux cartes graphiques », explique Jean-François Méhaut. Elles sont alors accélérées d'un facteur 30, voire 50. Mais la "lenteur" d'autres portions freine encore ces performances. « Nous avons testé, sur un petit calculateur hybride de 20 Tflops, un de nos codes de nanosimulation (la méthode des ondelettes) que l'on sait massivement parallèle, ajoute Thierry Deutsch. Nous avons gagné un facteur 7 en

teuses en temps et facilement parallélisables pour les attribuer aux cartes graphiques », explique Jean-François Méhaut. Elles sont alors accélérées d'un facteur 30, voire 50. Mais la "lenteur" d'autres portions freine encore ces performances. « Nous avons testé, sur un petit calculateur hybride de 20 Tflops, un de nos codes de nanosimulation (la méthode des ondelettes) que l'on sait massivement parallèle, ajoute Thierry Deutsch. Nous avons gagné un facteur 7 en



Le comportement de ce genre de molécule peut être calculé très rapidement avec des processeurs graphiques. On distingue aussi le maillage adaptatif associé.

vitesse de calcul sans optimiser la répartition des calculs entre processeurs graphiques et généralistes.»

Les chercheurs escomptent un gain d'un facteur 10. C'est l'un des objectifs du projet ProHMPT<sup>(3)</sup>, lancé en janvier, coordonné par l'Inria et soutenu par l'Agence nationale de la recherche. « Nous comptons aussi sur les prochains standards mondiaux de programmation dédiés à ces architectures, poursuit Jean-François Méhaut. L'un d'entre eux pourrait être celui développé par CAPS Entreprise (PME essaimée de l'Inria), l'un des partenaires du projet ProHMPT. »

(1) Un téraflops correspond à une capacité de traitement de  $10^{12}$  opérations par seconde.

(2) Grand équipement national de calcul intensif.

(3) ProHMPT réunit des chercheurs de l'Inria, du CEA, de Bull, de CAPS Entreprise et de l'Université Versailles-Saint-Quentin-en-Yvelines.

# Terrasser le pétaflops : un partenariat public-privé unique en Europe

Opérationnel en 2010, Tera 100, développé par Bull en coopération avec le CEA, devrait être le premier supercalculateur conçu en Europe à franchir la barre symbolique du pétaflops, soit une capacité de calcul d'un million de milliards d'opérations par seconde.

Par **Sophie Houssiaux**, directrice du projet Tera 100 chez Bull, et **Pierre Leca**, chef du département sciences de la simulation et de l'information à la direction des applications militaires du CEA

Depuis un an, les équipes d'ingénieurs de Bull et de la direction des applications militaires du CEA travaillent conjointement à la conception du supercalculateur Tera 100. L'équipe mixte mise en place allie une capacité de développement unique en Europe à une grande connaissance des besoins applicatifs, des contraintes d'intégration et des architectures de calculateurs. Il s'agit de regrouper plusieurs milliers de nœuds de calcul (les éléments de base du calculateur) grâce à un réseau dense d'interconnexions. Celui-ci connectera 3 000 à 5 000 nœuds, en l'occurrence des multiprocesseurs constitués chacun d'une trentaine de "cœurs", les unités de calcul élémentaires.

Tera 100 possédera une architecture en archipels reliant des grappes de nœuds qui auront un accès rapide à des médias de stockage des données : il ressemblera à un réseau dense de grands centres urbains interconnectés par des voies rapides, plutôt qu'à un réseau de villes moyennes reliées par des routes départementales.

Avec la prise en compte du coût complet de possession et la montée des préoccupations écologiques, l'équipe Bull/

CEA s'est focalisée sur les économies d'énergie.

Une batterie de mesures a été prise pour limiter la consommation électrique, l'une des principales étant un système d'optimisation logicielle qui permet de baisser la fréquence des cœurs s'ils ne sont pas utilisés à pleine puissance, voire provoquer l'arrêt complet d'un nœud tout en maîtrisant l'impact sur les calculs en cours.

D'une consommation prévue de 5 mégawatts, Tera 100 pose un véritable défi en ce qui concerne l'évacuation de sa chaleur. Un refroidissement par eau conduira à une efficacité

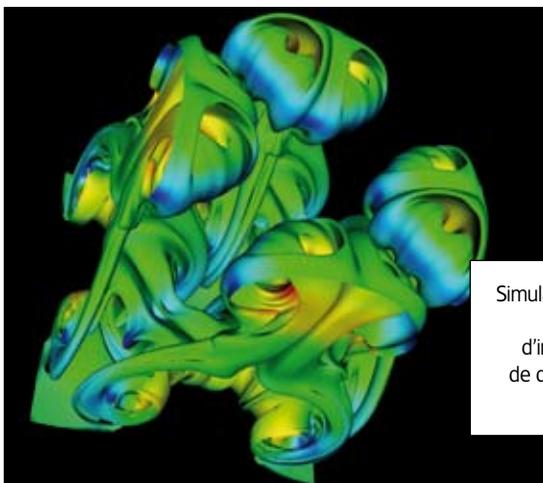
énergétique accrue et une plus grande compacité. Ainsi le calculateur occupera la même surface au sol que son prédécesseur Tera 10, soit environ 600 mètres carrés, pour une capacité de calcul vingt fois supérieure.

Autre particularité : les processeurs multicœurs capables d'exécuter 50 à 100 milliards d'opérations par seconde et le réseau physique d'interconnexions entre nœuds sont standards. Quant à la partie logicielle, elle repose sur des logiciels libres optimisés pour atteindre les niveaux de performance requis. Ce parti pris de bâtir le calculateur à partir d'éléments non propriétaires, donc plus facilement adaptables, a été l'une des bases du succès du calculateur Tera 10. Pour Tera 100, l'accent est mis sur une architecture modulaire, généraliste et compatible avec l'environnement de stations de travail fonctionnant sous le système d'exploitation Linux, tolérante aux pannes et sans goulet d'étranglement dans le traitement des données.

C'est donc toute la communauté de la recherche qui bénéficiera des avancées dues à Tera 100. C'est l'intérêt de ce type de coopération entre un organisme public et un industriel, encore unique en Europe et qu'il faut développer pour rattraper les grands pays à la pointe du calcul intensif.

**Toute la communauté de la recherche bénéficiera des avancées dues à Tera 100**

Simulation en trois dimensions du développement d'instabilités à l'interface de deux fluides de densités différentes.



Ter@tec, première technopole européenne dédiée à la simulation haute performance.

© www.imaconcept.tv

# En route pour

Après le pétaflops, c'est l'exaflops (milliard de milliards d'opérations par seconde) qui est visé. Les difficultés à surmonter sont nombreuses.

Léo Gerat,  
journaliste scientifique

La barre du pétaflops (million de milliards d'opérations par seconde) a été franchie, en 2008, par le Roadrunner d'IBM, onze ans après le téra-flops (1997 : ASCI Red, Intel). On vise désormais le milliard de milliards d'opérations par seconde. La demande est déjà exprimée par des administrations comme le DOE (*Department of Energy*), aux Etats-Unis, ou certains secteurs scientifiques comme la modélisation climatique.

L'exaflops dans une dizaine d'années ? Autant dire l'infini. Comment gagner ce facteur mille ? Bien peu de réponses, à ce stade, surtout des questions. Un rapport commandé par la Darpa<sup>(1)</sup> à une équipe dirigée par Peter Kogge (*University of Notre-Dame, Indiana*), intitulé *Exascale Computing Study*, énonce quatre grands "challenges". Le premier est la question de l'énergie. Tout le monde en convient, c'est le problème majeur.

Roadrunner consomme 2,5 mégawatts (MW), ce qui semble déjà une prouesse, puisque Jaguar (Cray) le talonne côté puissance de calcul, mais en consommant 7 MW. S'il fallait pour atteindre l'exaflops multiplier par mille la facture énergétique, il faudrait s'offrir des gigawatts, soit la production d'une grosse centrale. Impensable.

On veut bien à la rigueur imaginer une installation informatique exceptionnelle consommant un dixième de gigawatt. Mais 125 MW, par exemple, pour un exaflops, cela représenterait déjà un progrès en efficacité énergétique d'un facteur 20 par rapport à Roadrunner, ce qui n'est pas rien.

Il va falloir faire de gros progrès dans ce domaine. Cela concerne d'abord les puces qui fourniront les "flops". Or, le coût de développement d'une nouvelle

génération de microprocesseurs est aujourd'hui tel que les fabricants de supercalculateurs n'imaginent plus d'en faire concevoir à leur usage.

« C'est une contrainte avec laquelle il faut se débrouiller, estime William Jalby, responsable de l'équipe Arpa du laboratoire Prism à l'Université Versailles-Saint-Quentin-en-Yvelines. *Seuls des composants "du commerce", produits massivement, offrent un ratio puissance/prix suffisant.* »

Les supercalculateurs actuels emploient des microprocesseurs conçus pour d'autres usages. Il y a peu, c'étaient des puces destinées à des gros ordinateurs, des serveurs. Mais, plus récemment, on a commencé à s'intéresser à des puces plus modestes et économes. Ainsi, le BlueGene d'IBM, numéro un au Top 500 en 2004, utilisait déjà une puce sobre conçue à l'origine pour les systèmes embarqués. Même chose avec le champion de 2008, Roadrunner, toujours chez IBM, qui exploite cette fois une puce conçue pour... une console de jeu, la Playsation de Sony.

« Le monde du calcul scientifique intensif s'habitue à détourner à son profit des puces qui ne lui sont pas destinées, assure Jean-François Lavignon, responsable chez Bull des collaborations R&D. *Nous en avons un bel exemple en France avec ce prototype hybride que Bull réalise pour le Cines (Centre informatique national de l'enseignement supérieur), qui utilise la puce Tesla T10 à 240 cœurs de nVidia, destinée aux cartes graphiques.* »

Voilà pourquoi on dit souvent que les supercalculateurs de la prochaine génération pourraient être réalisés à partir de puces conçues pour des objets grand public nomades. C'est à Santa Clara, en Californie, qu'une équipe de chercheurs du Lawrence Livermore Laboratory et de l'université de Stanford ont trouvé la technologie qui

(1) *Defense Advanced Research Projects Agency*, agence américaine en charge des projets de recherche pour la défense.



© www.imaconcepttv

Le Campus Ter@tec regroupera 1 000 personnes sur 15 000 m<sup>2</sup> de laboratoires et de bureaux d'ici à 2011, à Bruyères-le-Châtel.

# L'exaflops

devrait leur permettre de réaliser un ordinateur exafloppique, capable de simuler le climat terrestre en décomposant l'atmosphère en 20 milliards de cubes.

Xtensa, une puce nomade réalisée par Tensilica, possède 32 cœurs et consomme seulement 0,09 W. D'après les calculs de ces chercheurs, la puissance de calcul par watt obtenue serait plus de quatre fois ce qu'offre la puce du BlueGene d'IBM, et 100 fois supérieure à celle d'une puce Core 2 d'Intel, destinée aux ordinateurs portables.

Le deuxième défi identifié par la Darpa est celui de la mémoire et du stockage. Nourrir des millions de cœurs affamés ne sera pas une petite affaire. Une nouvelle technologie de mémoire serait la bienvenue. Steve Scott, le directeur de la technologie de Cray, est optimiste à ce sujet.

Côté stockage à long terme, la mémoire flash (celle de nos objets nomades), encore chère mais très sobre, devrait jouer un rôle majeur. « On peut s'attendre à l'apparition d'une couche de mémoire flash entre la mémoire centrale et le stockage sur disque », assure Steve Scott. Avis partagé par Steve Pawlowski, le directeur de la technologie d'Intel, un acteur majeur du marché de la mémoire flash.

La troisième gageure identifiée par la Darpa est intitulée : "concurrency et localité". « Il va falloir apprendre à distribuer l'application sur un milliard de cœurs, estime William Jalby. Il n'y aura pas trop de problèmes pour les algorithmes qui travaillent beaucoup sur des données locales. Mais pour les autres... »

« Il y a dix ans, rappelle Franck Cappello, responsable du projet Grand Large à l'Inria Saclay, personne n'aurait prédit que le multicœur serait un pilier du pétaflops. Aujourd'hui, on ne sait pas quels seront les piliers de l'exaflops, et si le multicœur jouera un rôle positif. Il n'est même pas certain qu'il soit si évident à exploiter. »

Du coup, on pense qu'il va falloir littéralement réinventer une nouvelle manière de programmer. On

risque même de voir se répandre des pratiques étranges. « Par exemple, indique William Jalby, il arrivera que l'on préfère recalculer une donnée dont on a un besoin immédiat, plutôt que d'attendre quelle parvienne d'une puce lointaine. »

La gestion de l'énergie elle-même pourrait influencer la programmation. « Si les résultats de deux calculs parallèles sont attendus pour faire autre chose, explique Serge Petiton, responsable de l'équipe MAP au Laboratoire d'informatique fondamentale de Lille, il sera parfois logique de ralentir le plus rapide des deux, pour gagner des watts. »

Le quatrième et dernier pari de l'exascale identifié par la Darpa est la fiabilité. « Une question centrale, estime Jean-François Lavignon, qui nous oblige à réinventer notre façon de concevoir

un ordinateur. » « La complexité de ces machines sera telle, avance Jean-Pierre Panziera, ingénieur chez Silicon Graphics (SGI), que le temps moyen entre deux pannes devrait se mesurer en heures, si ce n'est pire. »

« La panne deviendra un événement normal, estime Franck Cappello. Il faut donc inventer des technologies qui la banalisent, qui permettent de poursuivre le déroulement de chaque logiciel et donc des applications, tandis que l'on répare localement. »

**Il va falloir littéralement réinventer une nouvelle manière de programmer**



Ter@tec, vue d'architecte.

© www.imaconcepttv

# La recherche européenne

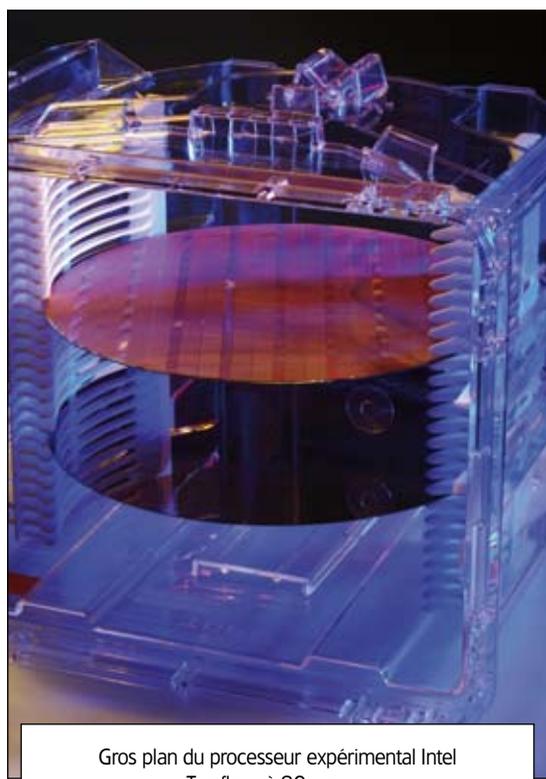
Mettre à la disposition des chercheurs européens des installations de simulation et de modélisation parmi les plus pointues au monde, tel est le grand défi lancé par le projet européen PRACE. Ce partenariat, fondé sur des collaborations transnationales et des échanges interdisciplinaires, entend donner à l'Europe les moyens de se hisser au niveau mondial.

**Jane Nicholson**, présidente de l'initiative PRACE et responsable de la recherche à l'EPSRC (*Engineering and Physical Sciences Research Council*), agence gouvernementale britannique finançant la recherche et la formation en génie et en sciences physiques

Le recours à la simulation et à la modélisation est une démarche de plus en plus importante pour mieux comprendre le monde qui nous entoure. Par leur faculté de numériser des hypothèses et d'explorer les détails, simulation et modélisation ouvrent de nouveaux horizons scientifiques, en permettant de mener des études impossibles à envisager par l'expérimentation, en testant de nouvelles théories, et en proposant de nouvelles pistes de programmes expérimentaux qui permettent des économies de temps et d'argent. Nous pouvons ainsi non seulement approfondir notre compréhension scientifique, mais aussi exploiter la science à des fins économiques et sociétales. Nombre de modèles développés jusqu'à présent reposaient sur des systèmes simplifiés, extrapolés autant que possible pour comprendre des problématiques de plus grande envergure. Mais dans la réalité, les phénomènes en question s'accommodent rarement de ces modèles simplifiés ; ils sont extrêmement complexes, et intègrent une variété de conditions qui imposent des modélisations de plus en plus pointues et des ressources informatiques adaptées.

## Des ressources informatiques adaptées

Que ce soit pour concevoir des moteurs plus efficaces dans le secteur aérospace, pour comprendre et prévoir les changements climatiques, que ce soit pour modéliser le cœur humain ou des sciences fondamentales comme la physique des particules ou l'étude de phénomènes à l'échelle des attosecondes, tous ces domaines ont intérêt à bénéficier des moyens de calcul les plus puissants. Ces secteurs présentent non seulement un grand intérêt scientifique, mais ils contribuent également à traiter de vrais problèmes à l'échelle mondiale. Ces dernières années, de nombreux pays européens ont investi dans des supercalculateurs sur leur territoire propre. Cela traduit clairement l'importance qu'ils accordent au fait que les milieux de la recherche puissent disposer de ces ressources informatiques de pointe. Néanmoins, dans l'avenir, s'il



Gros plan du processeur expérimental Intel Teraflops à 80 cœurs.

© Intel

« Un défi en termes de coût et d'expertise »

est sûr que tant nos besoins en ressources informatiques que les performances des supercalculateurs proposés par les constructeurs continueront à croître, il est aussi certain que continuer à équiper l'Europe de ces machines est un véritable défi. Un défi tant du point de vue des coûts que des sites potentiels capables d'accueillir ces calculateurs haute performance.

D'où l'intérêt de l'initiative PRACE (*Partnership for Advanced Computing in Europe*), ce partenariat de 18 membres signataires d'un protocole de collaboration, qui ont décidé de mettre en commun leurs ressources informatiques de pointe. Cette approche collective européenne permettra d'appréhender les problèmes scientifiques les plus comple-

# enne en première ligne



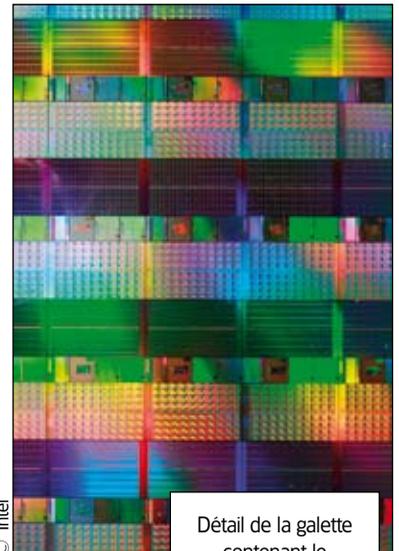
La puce Xtensa de Tensilica, 0,09 W pour 32 cœurs.

et de modélisation de classe mondiale. Au cours des 18 à 24 premiers mois, l'initiative a axé ses efforts sur la recherche des meilleures infrastructures informatiques adaptées aux défis à relever. Le premier projet a été monté pour créer un service paneuropéen

durable de calcul haute performance pour la recherche. Grâce aux financements des membres partenaires

et de la Commission européenne, la phase préparatoire, qui doit s'achever fin 2009, servira à définir la structure organisationnelle transnationale pour les supercalculateurs scientifiques en Europe. En rassemblant l'expertise et les infrastructures de ses membres, PRACE devrait permettre aux chercheurs européens de disposer de capacités de supercalculateurs de classe mondiale, bien supérieures à ce dont ils disposent au niveau national.

Cela implique une démarche coordonnée en termes d'approvisionnement en matériel informatique et, à terme, la création d'une plate-forme européenne pour développer matériels et logiciels en commun avec l'industrie. Cela suppose aussi une collaboration étroite entre les centres de calcul nationaux et régionaux et les organismes scientifiques pour faciliter l'accès, à tous les niveaux, à ces ressources informatiques pour les chercheurs et ingénieurs du monde académique et industriel.



Détail de la galette contenant le processeur expérimental Intel Teraflops, premier processeur programmable capable d'effectuer plus de mille milliards d'opérations par seconde.

en exploitant les milliers, centaines de milliers, voire millions de cœurs (unités de calcul élémentaires) que renfermeront nos futurs supercalculateurs (voir article p. 48). Elle permettra aussi à la recherche européenne de maintenir et de renforcer encore sa position sur la scène mondiale.

Au XVIII<sup>e</sup> siècle, Johann Wolfgang von Goethe tenait ces propos : « *La Science et les Arts sont universels. Les barrières des nationalités s'effacent devant eux.* » Cela reste vrai de nos jours. Seules des initiatives de collaboration entre les meilleurs chercheurs des différentes nations sur des ressources partagées permettront d'obtenir des résultats auxquels des chercheurs travaillant seuls ne pourraient prétendre.

## Une démarche collective

En ma qualité de présidente de l'initiative PRACE, je peux témoigner de l'enthousiasme et de l'intérêt suscité par cette démarche collective qui a pour objectif de mettre dans l'avenir à la disposition des chercheurs européens des installations de simulation

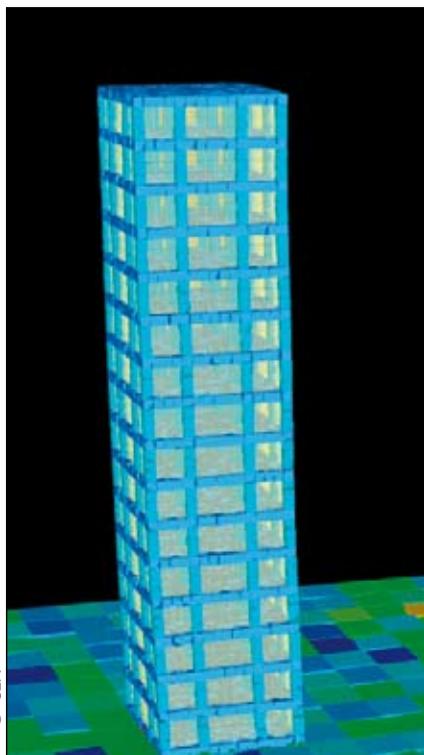
## Les objectifs de PRACE et les pays participants

### Les objectifs du projet PRACE sont de :

- Préparer la création d'un service de calcul haute performance (HPC) paneuropéen viable et durable.
- Préparer l'installation de 3 à 5 systèmes de puissance pétaflopique sur plusieurs sites européens.
- Définir et mettre en place une structure légale et organisationnelle regroupant les centres HPC, les agences nationales de financement et les communautés d'utilisateurs scientifiques.
- Mettre au point des modèles de financement et d'utilisation et concevoir des procédés d'évaluation par des pairs.
- Assurer la formation de chercheurs européens et créer un cursus scientifique.

### 18 pays ont signé l'initiative PRACE

- |   |  |
|---|--|
|  • France      |  • Norvège  |
|  • Allemagne   |  • Pologne  |
|  • Pays-Bas    |  • Portugal |
|  • Espagne     |  • Suède    |
|  • Royaume-Uni |  • Suisse   |
|  • Autriche    |  • Chypre   |
|  • Finlande    |  • Irlande  |
|  • Grèce       |  • Serbie   |
|  • Italie      |  • Turquie  |



Simulation numérique réalisée sur le calculateur Tera 10 (CEA). Ici, un instantané sur un immeuble au moment du passage d'ondes sismiques ; on note la déformation de la tour.

© CEA

Comme tous les acteurs du calcul haute performance le savent bien, s'il est essentiel de disposer d'un excellent matériel informatique, la technologie seule ne suffit pas. Les utilisateurs de supercalculateurs doivent disposer de logiciels capables d'exploiter tout le potentiel du matériel. Pour répondre à ces deux besoins, il nous faut aussi des chercheurs ayant l'expertise sur ces sujets, tant pour gérer ces infrastructures, que les programmer et concevoir les logiciels adaptés aux besoins des scientifiques et des industriels. Si PRACE s'est jusqu'à présent concentré sur le premier de ces trois ingrédients essentiels du calcul haute performance, les partenaires ont su tirer parti de ces deux années de contacts et de collaborations pour commencer à appréhender ensemble ces

deux autres points clés. Des collaborations se mettent en place pour explorer les différentes voies en termes de développement logiciel, PRACE a déjà organisé deux formations de jeunes chercheurs, lesquelles ont eu beaucoup de succès, et en envisage d'autres prochainement.

### Une véritable base de connaissances

Au Royaume-Uni, nous avons d'ores et déjà intégré dans nos futurs projets non seulement l'accès au matériel informatique, mais aussi le développement logiciel sur la base des connaissances et de l'expertise de nos chercheurs.

Nous favorisons autant que possible les échanges interdisciplinaires, entre autres entre mathématiciens et informaticiens, pour que les logiciels développés tirent au mieux parti des progrès de l'analyse numérique et de l'informatique. Ceux qui travaillent à pourvoir aux besoins informatiques de la recherche ont du pain sur la planche. Les opportunités technologiques issues du développement des processeurs multicœurs, généralistes ou spécifiques, sont autant de nouveaux défis que ce soit en termes de programmation ou d'exploitation optimale. En ces temps de restrictions budgétaires, l'échelle de ces infrastructures est un véritable défi en termes de finan-

cement. Mais si nous parvenons à relever ce défi, il en résultera assurément des retombées scientifiques majeures tant en Europe qu'avec des partenaires du monde entier.

## « Trois questions à »

**Catherine Rivière**, présidente de Genci  
(Grand équipement national de calcul intensif)

Propos recueillis par  
**Isabelle Bellin**

### Où en est Genci, cette société créée en 2007, détenue par l'Etat, le CEA, le CNRS et les universités, et destinée à financer et organiser les moyens de calcul français ?

Notre budget annuel de 25 millions d'euros par an nous a permis de doubler les moyens mobilisés en France pour le calcul intensif. La capacité de calcul disponible est passée de 21 à 470 téraflops<sup>(1)</sup> début 2009, grâce aux équipements installés au CCRT<sup>(2)</sup> du CEA, à l'Idris<sup>(3)</sup> pour le CNRS et au Cines<sup>(4)</sup> pour les universités. Les heures de calcul sont désormais attribuées de façon transparente et commune aux trois centres par des comités scientifiques de pairs.

### Genci représente la France dans le projet PRACE en tant que partenaire principal.

#### En quoi cela consiste-t-il ?

Cela traduit la volonté d'inscrire notre politique nationale en matière de calcul intensif dans une perspective européenne. Cela comporte un engagement financier important, de 25 millions d'euros par an, de 2010 à 2015, et l'installation, dès 2010, d'un supercalculateur en France sur le site du Très grand centre de calcul (TGCC) à Bruyères-le-Châtel, dans le cadre de l'Institut Jacques-Louis Lions commun au CNRS et au CEA.

### Quelles seront, selon vous, les retombées majeures en France ?

Les chercheurs auront évidemment accès à une puissance de calcul exceptionnelle et à une variété d'architectures de supercalculateurs. Nous ouvrirons aussi ces moyens aux industriels et aux PME. Nous organisons un séminaire à ce sujet à Toulouse les 7 et 8 septembre 2009 avec nos collègues allemands de PRACE. En France, avec l'Inria, nous élaborons un programme<sup>(5)</sup> à destination des PME, en partenariat avec les pôles de compétitivité, pour leur faciliter l'accès au calcul intensif. Cela pourrait concerner une centaine de PME. Cette initiative aura valeur d'exemple pour PRACE.

(1) Un téraflops correspond à une capacité de traitement de  $10^{12}$  opérations par seconde.

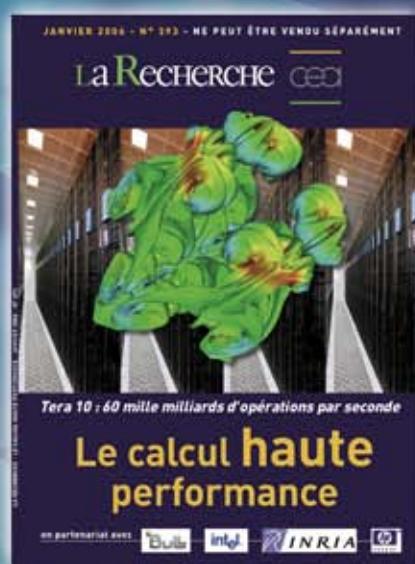
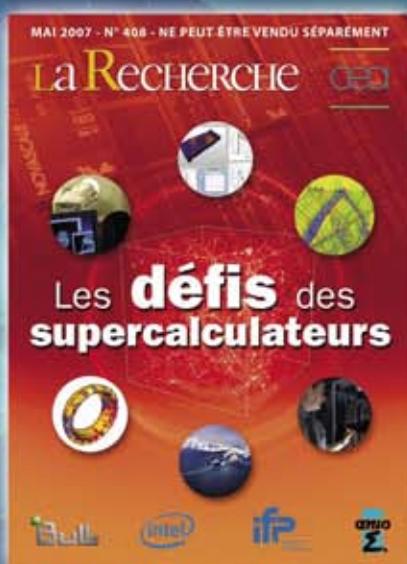
(2) Centre de calcul, recherche et technologie.

(3) Institut du développement et des ressources en informatique scientifique.

(4) Centre informatique national de l'enseignement supérieur.

(5) Simulation haute performance pour les PME.

POUR COMPLÉTER VOTRE COLLECTION,  
CONNECTEZ-VOUS SUR LE SITE : [WWW.HPC-TV.COM](http://WWW.HPC-TV.COM)  
POUR TÉLÉCHARGER LIBREMENT LES SUPPLÉMENTS  
ET VISIONNER LES VIDÉOS EN LIGNE



Les cahiers spéciaux  
du magazine La Recherche :  
une vue panoramique  
sur le calcul haute performance

# bullx



Conçu sans compromis pour  
INNOVER SANS LIMITE.



Le premier supercalculateur conçu spécifiquement pour l'Extreme Computing par la plus grande équipe d'experts en Europe. Doté des processeurs Intel® Xeon® 5500.

Découvrez **bullx, instruments for innovation** sur  
[www.bull.fr/extremecomputing](http://www.bull.fr/extremecomputing)



Architect of an Open World™\*

\*Architecte d'un monde ouvert