

LES SUPERCALCULATEURS RELEVENT LE DÉFI

MÉDECINE
RISQUES NATURELS
ÉNERGIE DU FUTUR
TRANSPORTS PROPRES
CHANGEMENT CLIMATIQUE
MATÉRIAUX

EN PARTENARIAT AVEC





Au cœur du calcul haute performance

Serveurs équipés de la nouvelle famille
de processeurs Intel® Xeon® E5-2600

Accélérez
votre processus
d'innovation

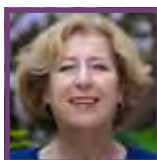
— Bande passante optimisée
— Performances améliorées

Pour en savoir plus sur les solutions HPC Intel
et pour consulter nos études de cas,
connectez vous sur :
www.intel.fr/hpc



Les supercalculateurs changent la donne

BRUNO MOYEN



par
**GENEVIÈVE
FIORASO**

ministre de
l'Enseignement
supérieur et
de la Recherche

Le calcul haute performance est un élément stratégique d'une politique de recherche ambitieuse. Aujourd'hui, il est structurant dans de nombreux domaines scientifiques où il permet de modéliser et de simuler des phénomènes complexes, souvent inaccessibles à l'échelle humaine. Il intervient en complément des approches théoriques et expérimentales.

Les supercalculateurs se sont imposés en changeant la donne : les grandes puissances rivalisent à présent entre elles pour se doter des machines les plus puissantes. La recherche académique les utilise pour de nombreux travaux, à l'instar des grandes infrastructures de recherche comme les télescopes ou les accélérateurs de particules. Les applications sont nombreuses dans les sciences de l'environnement pour simuler le climat, dans les sciences de la vie ou encore en astrophysique.

Le calcul haute performance est également stratégique pour nos industriels, en soutien de leur capacité d'innovation. C'est une clé de notre compétitivité. La simulation est en effet partie prenante des cycles de conception et de production dans de nombreuses filières industrielles, comme les transports terrestres, l'aéronautique et le spatial, ou encore l'énergie.

Les enjeux relèvent enfin de la politique de souveraineté et de sécurité individuelle et collective des États. La politique énergétique, la politique de prévention des risques naturels et la politique de défense s'appuient sur les apports de la simulation et du calcul haute performance.

Ce cahier spécial de *La Recherche* est une magnifique illustration du dynamisme des acteurs français du calcul intensif, qu'ils soient scientifiques ou industriels. Notre pays dispose d'atouts formidables dans ce domaine, que cette publication contribuera à encore mieux faire connaître.

Chercher et innover avec le HPC



À l'interface des sciences informatiques et des mathématiques, les chercheurs d'Inria établissent depuis 40 ans les bases scientifiques d'un nouveau champ de connaissances : les sciences du numérique. En interaction avec les autres disciplines scientifiques, les sciences du numérique proposent de nouveaux concepts, langages, méthodes et objets d'enseignement qui ouvrent des perspectives inédites dans l'appréhension des phénomènes complexes.

Le calcul intensif (« HPC » pour High Performance Computing) est un thème stratégique pour Inria, qui concerne près d'une trentaine de ses équipes de recherche.

L'institut est engagé dans des partenariats stratégiques sur ces sujets avec Bull pour la conception des futures architectures et avec EDF R&D pour la simulation haute performance dans le domaine de l'énergie.

Au niveau international, Inria et l'université d'Urbana Champaign (Etats-Unis), ont créé en 2009 un laboratoire commun de recherche en calcul intensif, le Joint Laboratory for Petascale Computing (JLPC).

Ce laboratoire concentre ses travaux sur le développement d'algorithmes et de logiciels pour des ordinateurs à échelle pétaflopique et au-delà. Les chercheurs du laboratoire ont intégré leurs travaux dans le cadre du projet Blue Waters.

Par ailleurs, plusieurs sociétés issues d'Inria proposent des technologies dans ce domaine, comme par exemple Kerlabs, Caps Entreprise, Activeeon ou encore Sysfera.

Dans le cadre de sa mission de transfert de technologies, Inria a lancé, avec le GENCI, OSEO et cinq pôles de compétitivité (Aérospatiale valley, Axelara, Cap Digital, Minalogic, System@tic) l'Initiative « HPC-PME ».

Objectif ? Faciliter et encourager l'accès des PME au calcul haute performance. Parce qu'il permet de simuler des phénomènes plus globaux, de limiter ou remplacer des expériences, de raccourcir la phase de test ou de traiter des données pléthoriques et hétérogènes, le recours au calcul intensif sert la compétitivité des PME.

Les PME qui souhaitent faire appel à la simulation ou au calcul haute performance pour élaborer leurs produits et services (conception, modélisation, système, test, traitement et visualisation des données) peuvent postuler sur le site web dédié à cette Initiative HPC-PME. L'Initiative les accompagne dans la construction technique et financière de leur projet grâce à l'expertise et aux ressources des partenaires du programme.

Contact Inria :
brigitte.dueme@inria.fr
thomas.lebrat@inria.fr

www.inria.fr

www.initiative-hpc-pme.org

Inria est l'institut de recherche en sciences du numérique. Inria accueille chaque année plus de 1000 jeunes chercheurs.

Rencontre Inria Industrie
Modélisation, Simulation,
Calcul intensif
Mars 2013

Inria
INVENTEURS DU MONDE NUMÉRIQUE

Le cahier 2 de «La Recherche» ne peut être vendu séparément du cahier 1 (LR N° 469). «La Recherche» est publiée par Sophia Publications, filiale d'Artémis.

SOPHIA PUBLICATIONS
74, avenue du Maine 75014 Paris
Tél. : 01 44 10 10 10
e-mail rédaction : courrier@larecherche.fr

**PRÉSIDENT-DIRECTEUR GÉNÉRAL
ET DIRECTEUR DE LA PUBLICATION**
Philippe Clerget

CONSEILLER DE LA DIRECTION
Jean-Michel Ghidaglia

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

DIRECTRICE DE LA RÉDACTION
Aline Richard

**RÉDACTEUR EN CHEF ADJOINT
DU CAHIER 2**
Pierre Mira

**SECRÉTAIRE DE RÉDACTION
DU CAHIER 2**
Jean-Marc Denis

**DIRECTION ARTISTIQUE
ET RÉALISATION**
A noir, 01 48 06 22 22

RESPONSABLE DE FABRICATION
Christophe Perrusson (1378)

**DIRECTRICE COMMERCIALE PUBLICITÉ
ET DÉVELOPPEMENT**
Caroline Nourry (1396)

DIRECTEUR DE CLIENTÈLE
Eddie Barazuol (1212)

**DIRECTEUR ADMINISTRATIF
ET FINANCIER**
Dounia Ammor

**DIRECTRICE DES VENTES
ET PROMOTION**
Évelyne Miont (1380)

Les titres, les intertitres, les textes de présentation et les légendes sont établis par la rédaction du cahier 2. 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 L.122-4 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 : 0914 K 85863.
ISSN 0029-5671

IMPRIMERIE
G. Canale & C., Via Liguria 24, 10071 Borgaro (TO), Italie.
Dépôt légal à parution.

© 2012 SOPHIA PUBLICATIONS.
IMPRIMÉ EN ITALIE. PRINTED IN ITALY

SOMMAIRE

NOUVEAUX HORIZONS

- 06 **LES CINQ ANNÉES QUI ONT CHANGÉ LE CALCUL INTENSIF**
Genci rattrape le retard de la France parmi les Européens en ouvrant la simulation numérique aux scientifiques français.
- 10 **CATHERINE RIVIÈRE : « LE HPC, OUTIL DE LA RECHERCHE »**
Catherine Rivière, PDG de Genci depuis 2007, et à la tête de Prace, dévoile les chantiers à venir du côté du calcul haute performance.
- 12 **L'EUROPE FAIT DU HPC UNE PRIORITÉ**
En voulant doubler d'ici à 2020 ses investissements dans la simulation numérique, l'Europe vise une place de leadership.
- 15 **LE SUPERCALCULATEUR CURIE JOUE LA POLYVALENCE**
Le supercalculateur Curie, conçu pour couvrir une large gamme de domaines, se place parmi les plus puissants du monde.
- 18 **LE CALCUL INTENSIF S'OUVRE AUX PME**
À l'instar d'HydrOcean, les PME peuvent commencer à accéder aux supercalculateurs.
- 20 **LE FUTUR DE LA SIMULATION SE JOUE DÈS AUJOURD'HUI**
Le projet C2S@Exa d'Inria s'attache à repenser les logiciels de simulation numérique des supercalculateurs de demain.

GRANDS DÉFIS

- 22 **LES MODÈLES CLIMATIQUES GAGNENT EN PRÉCISION**
Avec une simulation du climat à 10 km près, les petits phénomènes, qui jouent un rôle important, sont pris en compte.
- 24 **LE HPC DÉCRYPTÉ LA CHIMIE DU VIVANT**
Les scientifiques modélisent les molécules du vivant impliquées

- dans le processus des maladies, comme celle d'Alzheimer.
- 26 **LIMITER LES POLLUANTS DES RÉACTEURS**
Comprendre les phénomènes physiques de la combustion au sein des réacteurs d'avion permettra de réduire les polluants.
- 28 **SIMULER L'UNIVERS POUR CERNER L'ÉNERGIE NOIRE**
Les astrophysiciens projettent de simuler l'organisation des galaxies pour appréhender la fameuse énergie noire.
- 30 **LES SUPERCALCULATEURS DONNENT L'ALERTE TSUNAMI**
La simulation permet au Cenalt de prévenir et d'indiquer les zones à risque de la Méditerranée occidentale en temps réel.
- 32 **LA FUSION NUCLÉAIRE BIENTÔT SOUS CONTRÔLE**
La fusion nucléaire pourrait être une source d'énergie majeure. La simulation cherche à maîtriser la quantité de chaleur dégagée.

VERS L'EXAFLOPS

- 34 **DANS LES COULISSES DES LOGICIELS DE DEMAIN**
La course à l'exaflops passe par le Laboratoire Exascale Computing Research du campus de Versailles.
- 36 **COMMENT L'EXAFLOPS VA CHANGER NOTRE VIE**
Attendues vers 2020, les machines exaflopiques devraient permettre de résoudre des problèmes ayant un fort impact sur la société.
- 38 **LES DÉFIS FUTURS DES SUPERCALCULATEURS**
Le changement complet de l'architecture interne des supercalculateurs est la clé pour atteindre l'exaflops d'ici à 2020.
- 41 **ALAN GARA : « LA CLÉ EST DANS L'INNOVATION »**
Le chercheur d'Intel nous éclaire sur les défis lancés par l'exaflops.



Les cinq années qui ont changé le visage du calcul intensif

Il y a cinq ans encore, la France accusait un retard sur ses voisins européens en matière de calcul intensif, un outil pourtant stratégique pour notre développement scientifique et économique. Créée en 2007, la structure publique Genci l'a aujourd'hui comblé en grande partie. Son ambition de démocratiser l'utilisation de la simulation numérique en la rendant accessible à tous les scientifiques français est en passe de devenir une réalité.

Jeudi 12 juillet 2012. Bruyères-le-Châtel (Essonne), à une vingtaine de kilomètres de Paris. Geneviève Fioraso, ministre de l'Enseignement supérieur et de la Recherche, inaugure officiellement le supercalculateur Curie au Très grand centre de calcul du CEA (TGCC).

Pour Genci (Grand équipement national de calcul intensif), qui a commandé et financé la machine, on ne pouvait pas rêver mieux comme cadeau d'anniversaire. En cinq années d'existence, la structure publique a installé dans l'Hexagone toute une série de superordinateurs dont Curie, machine dite petaflopique*, est la figure de proue. Ces machines sont si puissantes qu'elles peuvent effectuer en une seule journée

une tâche qu'un ordinateur de bureau mettrait 150 ans à accomplir – d'où l'expression de « calcul intensif ». Elles permettent de reproduire, par la modélisation et la simulation, des expériences qui ne peuvent pas être réalisées en laboratoire quand elles sont dangereuses, coûteuses, de longue durée ou très complexes.

La simulation numérique est devenue aujourd'hui une démarche essentielle de la recherche scientifique en complément de la théorie et de l'expérimentation. Et Genci, chargé de porter la politique française en matière de calcul intensif pour la recherche académique, a fortement contribué à ce succès. « *Le chemin parcouru par Genci depuis sa création en 2007 est impressionnant, se félicite Ca-*

therine Rivière, PDG de Genci. *En cinq ans, nous avons en effet multiplié par 50 la puissance de calcul mise à disposition des scientifiques, qui dépasse actuellement le petaflops.* »

L'aventure de Genci commence en 2004... Le ministre de la Recherche d'alors confie à l'Inspection générale de l'administration de l'Éducation nationale et de la Recherche et au Conseil général des technologies de l'information le soin de créer et d'animer un groupe de travail dont les réflexions devront permettre « *de définir et de préfigurer les structures de concertation et de décision nécessaires à la mise en œuvre d'une politique forte en matière de calcul scientifique en France* ». Animé par Michel Héon, inspecteur général de

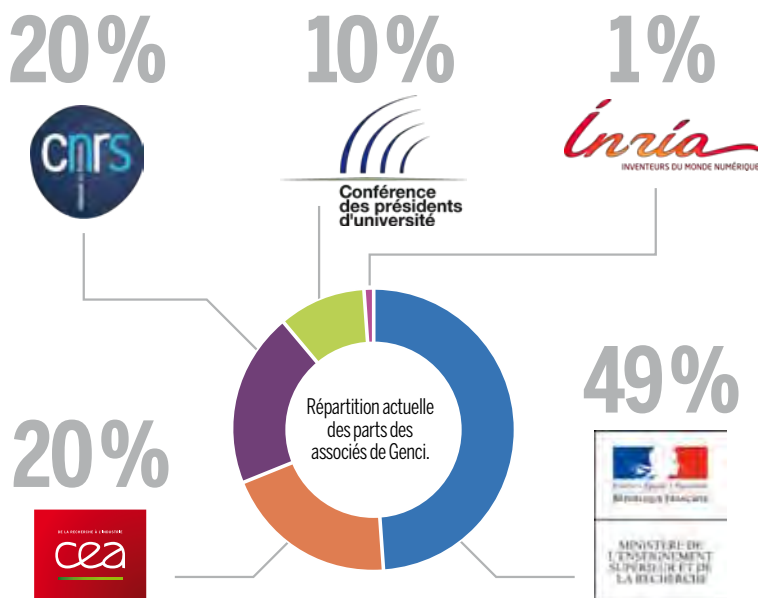


PETAFLOPIQUE

Se dit d'une machine capable d'effectuer un million de milliards d'opérations par seconde.



CNRS PHOTO THÉRIÈRE / CYRIL PRÉSILLON



GENCI 2012

Avec sa puissance de calcul de 2 petaflops, la machine Curie est le fer de lance de Genci.

l'administration de l'Éducation nationale et de la Recherche, et Emmanuel Sartorius, ingénieur général des télécommunications, ce groupe de travail réunit les directeurs des grands centres de calcul, des représentants des grands utilisateurs scientifiques et industriels (le CNRS, le CEA et EDF) ainsi que ceux d'organismes liés étroitement au développement du calcul scientifique (Inria et Renater). Différentes personnalités, du monde de la recherche comme de la sphère industrielle, sont également auditionnées.

Coordonner les trois centres nationaux

Le rapport qui suit souligne qu'un « consensus [s'est dégagé] sur la nécessité d'un pilotage stratégique du domaine, d'une meilleure coordination entre centres de calcul et d'un financement à un niveau convenable, et surtout régulier, du parc français de grands ordinateurs scientifiques ». Michel Héon et Emmanuel Sartorius arrivent à la conclusion que le retard français en calcul intensif doit être comblé : « La qualité de la recherche française exige une puissance de calcul intensif comparable à celle de ses homologues européennes. » Ils recommandent également de « structurer les acteurs du calcul intensif » et proposent « de regrouper

tout ou partie de [ces] acteurs dans une structure juridique souple, telle qu'une société civile du calcul intensif, dont seraient actionnaires les établissements de recherche – organismes et universités – et les ministères concernés ».

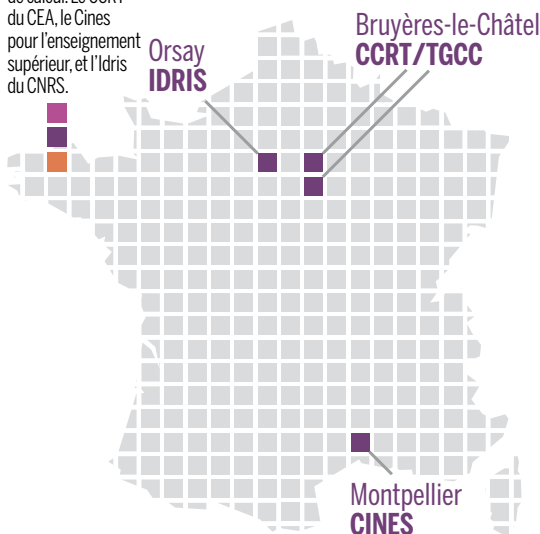
En 2007, leur recommandation se concrétise, et Genci voit le jour sous la forme d'une société civile, qui associe les principaux acteurs du calcul intensif : le ministère de l'Enseignement supérieur et de la Recherche, le CEA, le CNRS et les universités représentées par la Conférence des présidents d'université (CPU), un cinquième, Inria, les rejoignant en 2009. Les objectifs

de Genci sont clairs : animer la politique nationale en matière de calcul intensif, au bénéfice de la communauté scientifique française, en coordonnant l'équipement des trois centres nationaux de calcul intensif, participer à l'organisation et la réalisation d'un espace européen du calcul intensif pour la recherche et enfin promouvoir l'utilisation du calcul intensif, auprès du monde de la recherche et des industriels.

Fin 2010, Genci a déjà rempli une grande partie de sa feuille de route. Après avoir réalisé une première série d'investissements, en 2008 et 2009, pour renouveler les moyens du Centre informatique national de l'enseignement supérieur (Cines) en installant le supercalculateur Jade et renforcer ceux du CEA avec les machines Platine et Titane, Genci met en œuvre, courant 2010, l'extension de la capacité de calcul de Jade, portant la puissance du supercalculateur à 267 teraflops, puis lance, en fin d'année, l'installation de la première tranche du supercalculateur Curie au CEA. Sans oublier le renouvellement des moyens de calcul de l'Institut du développement et des ressources en informatique scientifique (Idris) prévu d'ici à la fin de cette année.

En cinq ans, avec un budget annuel de 30 millions d'euros,

Localisation des trois centres nationaux de calcul. Le CCRT du CEA, le Cines pour l'enseignement supérieur, et l'Idris du CNRS.



GENCI 2012



Genci fait ainsi passer la puissance de calcul disponible de 20 téraflops à un peu plus de 1 petaflops. Le retard, constaté en 2005 par Michel Héon et Emmanuel Sartorius, est bel et bien comblé!

Développer les échanges européens

Avec les trois centres nationaux de calcul, la stratégie de Genci est simple : mettre à disposition des chercheurs français des moyens complémentaires afin de répondre au mieux aux priorités scientifiques et à la variété des thématiques. Et pour gagner en efficacité, une procédure unifiée d'attribution des heures de calcul est mise en place. Elle vient simplifier l'accès aux moyens nationaux et assurer une meilleure transparence dans l'évaluation des projets proposés par la communauté scientifique. Depuis 2008, plus de 600 projets scientifiques, académiques ou industriels, bénéficient ainsi chaque année d'une allocation d'heures de calcul sur les moyens nationaux. Ces allocations, qui peuvent aller de quelques centaines de milliers d'heures à plusieurs millions, couvrent tout le spectre des disciplines scientifiques.

Pour amplifier la dynamique nationale développée depuis 2007, Genci met sur pied en 2010 le projet Equip@meso ou Equipement d'excellence de calcul intensif de mésocentres coordonnés, qui associe dix partenaires académiques et universitaires de différentes régions françaises. Retenu dans le cadre

de l'appel à projets « Équipements d'excellence » mené sous l'égide du Commissariat général à l'investissement, Equip@meso bénéficie d'un financement de 10,5 millions d'euros pour renforcer les moyens de calcul à l'échelle régionale en complément des moyens nationaux. « Grâce à Equip@meso, neuf centres de calcul en région participent désormais à la dynamique nationale créée par Genci », se réjouit Catherine Le Louarn, responsable des opérations de Genci.

Se met ainsi en place une véritable pyramide du calcul intensif autour de ses trois strates géographiques. « Au niveau régional, on trouve les moyens d'une puissance inférieure à 50 téraflops exploités dans les centres universitaires, explique Stéphane Requena, responsable technique

de Genci. Au niveau national, les moyens d'une puissance de plusieurs centaines de téraflops coordonnée par Genci. Et enfin, au niveau européen, les moyens de capacité petaflopique. »

Au sommet de la pyramide, l'Europe du calcul intensif est désormais une réalité. Convaincus qu'aucun pays ne pouvait, à lui seul, financer et faire évoluer de manière durable une infrastructure de calcul de visibilité mondiale, vingt représentants de pays européens, dont Genci, ont en effet créé en 2010 l'infrastructure de recherche Prace (Partnership for Advanced Computing in Europe). Objectif? Mettre en place et animer en Europe une infrastructure distribuée et pérenne de calcul, composée de plusieurs centres équipés de machines dotés d'une puissance au moins égale au petaflops.

Parmi les acteurs principaux de Prace, la France, représentée par Genci, s'est engagée comme l'Allemagne, l'Espagne et l'Italie à installer un des supercalculateurs de l'infrastructure. Cet engagement, qui représente un investissement de 100 millions d'euros sur cinq ans, s'est concrétisé par l'acquisition puis l'installation de Curie, accessible dans sa configuration complète depuis le 8 mars 2012.

Genci s'implique également dans différents projets financés par la Commission européenne, comme HPC-Europa 2, mis en place entre 2009 et 2011. Le but : encourager les échanges et les coopérations entre les équipes de recherche européennes en

Carte des 24 membres de l'infrastructure européenne de calcul intensif, Prace.





leur donnant accès aux ressources de sept centres de calcul répartis dans toute l'Europe, dont le Cines en France. Ou encore l'European Exascale Software Initiative (EESI), qui a fourni fin 2011 une feuille de route pour atteindre la barre de l'exaflops; les premières machines dotées d'une telle puissance sont attendues à l'horizon 2020. Parmi ses recommandations, celle de mettre en place un projet multi-thématique dédié à l'exaflops avec un agenda de recherche sur vingt ans, en collaboration avec les autres unités de recherche européennes et en lien avec les agences nationale de financement.

Mais le champ du calcul intensif et de la simulation numérique ne se résume pas à la recherche académique. Ce sont également des outils stratégiques

d'un point de vue économique. Parce qu'ils permettent de réduire les cycles de développement et les coûts, ils sont en effet un élément essentiel de compétitivité industrielle. Les grands groupes industriels ou financiers – comme Airbus, Total, BNP Paribas ou la Société Générale – l'ont bien compris, eux qui ont communément intégré le calcul intensif dans leurs schémas de développement. «*Mais c'est un peu l'arbre qui cache la forêt*, note Stéphane Requena. *L'utilisation du calcul intensif est beaucoup moins répandue dans les PME et les PMI qui constituent pourtant un vivier important pour l'innovation et l'emploi en France.*»

D'où l'initiative «HPC-PME», lancée en 2010 par Genci, Inria et Oseo, pour aider les PME à évaluer et démontrer les gains de compétitivité qu'elles obtien-

Le supercalculateur Jade du Cines, qui a fourni plus de 150 millions d'heures de calcul à la communauté scientifique en 2011.

De g. à d., en présence de Cédric Villani, mathématicien et médaille Fields 2010, qui parraine la manifestation, et de Catherine Le Louarn, responsable des opérations de Genci, Julien Bohbot, ingénieur de recherche à l'IFP énergies nouvelles, reçoit le prix Bull-Fourier des mains de Matthew Foxton, vice-président Stratégie et marketing de Bull.

draient en passant au calcul intensif. Depuis, une vingtaine de PME issues de différents secteurs (automobile, aéronautique, média numérique, industrie navale, microélectronique, traitement du signal, etc.) ont été convaincues par cette approche et de nombreuses autres sont en passe de les rejoindre.

Un résultat extrêmement encourageant – un de plus – qui démontre combien la simulation numérique est devenue aujourd'hui un outil essentiel pour soutenir le développement scientifique et économique de notre pays. En cinq ans d'existence, Genci, qui n'a eu de cesse d'interpeller les différents acteurs du monde académique et industriel sur ce constat, est en passe de réaliser son pari de démocratiser le calcul intensif. ■

Pierre Mira



BULL

LES CHERCHEURS À L'HONNEUR

Promouvoir la simulation numérique et le calcul intensif, c'est le leitmotiv de Genci. Et pour amener de nouveaux utilisateurs à ces outils aujourd'hui essentiels, il faut montrer tous les bénéfices que la science, et plus largement la société, peuvent en tirer. C'est pourquoi Genci a créé avec le constructeur Bull le prix Bull-Joseph-Fourier, qui récompense chaque année les travaux d'un chercheur français qui utilise la simulation numérique tant dans le domaine académique que dans ses applications industrielles. Depuis sa création en 2009, le prix a permis ainsi de mettre en valeur des résultats dans tous les domaines : astrophysique, nouveaux matériaux, moteurs automobiles ou encore prévention des séismes. Autre initiative, cette fois en partenariat avec la Conférence des présidents d'université : le label C3I (pour Certificat de compétences en calcul intensif). Lancé en 2009, il a déjà permis de distinguer une cinquantaine de jeunes docteurs ayant développé et utilisé des compétences en calcul intensif durant leur thèse.

« Les supercalculateurs, outils essentiels de la recherche »

Catherine Rivière, PDG de Genci (Grand équipement national de calcul intensif) depuis 2007, est à la tête de Prace (Partnership for Advanced Computing in Europe) depuis juin dernier. Elle revient sur les grandes réalisations accomplies en cinq ans et nous dévoile les chantiers à venir en matière de calcul haute performance (HPC).



CEA-CADAM

La mission de Genci, c'est de donner accès à des moyens de calcul de haute performance à un maximum de chercheurs français. En cinq ans, cet engagement a-t-il été tenu ?

Catherine Rivière : Oui et je pense que l'année 2011 a été particulièrement décisive. Trois résultats notamment concrétisent les efforts que nous avons déployés à Genci, depuis 2007, pour asseoir la politique nationale en matière de calcul intensif. Début janvier 2011, le projet Equip@meso, porté par Genci avec dix partenaires académiques et universitaires en région, a été retenu au terme du premier appel à projets « Équipements d'excellence », dans le cadre des Investissements d'avenir décidés par les pouvoirs publics. Avec Equip@meso, Genci dispose désormais des moyens de développer, au niveau régional, et en lien avec les centres universitaires de calcul, la dynamique initiée en 2007 au niveau national. Début juillet 2011, une première PME française, le motoriste Danielson Engineering, obtenait d'Oseo le financement de sa nouvelle plate-forme de calcul dans le cadre de l'initiative HPC-PME mise en œuvre par Genci, Inria et Oseo. L'expertise technique dont il a bénéficié avec HPC-PME a permis à cette

PME de s'équiper des moyens de simulation numérique les mieux adaptés à ses besoins, donc d'accroître sa compétitivité, mais également de créer au moins quatre emplois. Globalement, une vingtaine de PME bénéficient actuellement de cet accompagnement qui vise à faire, avec elles, la démonstration du gain de compétitivité et d'innovation qu'elles obtiendraient en passant au calcul intensif. Les grandes entreprises utilisent déjà la simulation pour réduire leurs coûts et leurs cycles de développement ; nous aidons les PME qui le souhaitent à intégrer ces enjeux. Enfin, le mois de décembre 2011 a vu la réception définitive du supercalculateur Curie. Conçu par Bull pour Genci, exploité par les équipes opérationnelles du Très grand centre de calcul du CEA à Bruyères-le-Châtel, Curie constitue le fer de lance de la politique portée par Genci et vient renforcer l'offre en ressources pétaflopiques disponibles en Europe via Prace (Partnership for Advanced Computing in Europe).

Le supercalculateur Curie a été ouvert à la communauté scientifique au mois de mars dernier, quel premier bilan en tirez-vous ?

C. R. : Un bilan très positif

Inauguration du supercalculateur Curie le 12 juillet à Bruyères-le-Châtel (Essonne). De gauche à droite : Bernard Bigot, administrateur général du CEA, Geneviève Fioraso, ministre de l'Enseignement supérieur et de la Recherche, Philippe Vannier, PDG de Bull et Catherine Rivière, PDG de Genci qui gère l'utilisation scientifique de la nouvelle machine pétaflopique.

puisque deux équipes françaises viennent d'obtenir grâce à cette machine des résultats remarquables. Dans le domaine des sciences de la vie, la structure d'une protéine impliquée dans le processus de la maladie d'Alzheimer a été entièrement modélisée avec une précision inégalée. Et en astrophysique, une première mondiale vient d'être réalisée : le calcul de la structuration de tout l'Univers observable, du Big Bang jusqu'à aujourd'hui. Avec une puissance de 2 petaflops et une architecture unique en Europe, combinant une très grande puissance de calcul et une capacité élevée de traitement des données générées, Curie va permettre d'autres avancées dans de nombreux domaines, notamment l'énergie et la climatologie.

Quels sont les grands chantiers à venir pour Genci ?

C. R. : D'abord le renouvellement des moyens de l'Idris, le centre de calcul intensif du CNRS : avec ce nouvel investissement, concrétisé au cours du premier semestre 2012, Genci a achevé de renforcer les moyens de calcul nationaux, après ceux du Cines avec Jade et ceux du CEA avec Titane et Curie. Un cycle s'achève mais Genci poursuit son objectif de faire du calcul intensif un outil à la pointe de la production de connaissances et de l'innovation. Il faudra pour cela relever plusieurs défis : amplifier les actions d'accompagnement à l'utilisation du HPC, susciter la mise en place de formations dans ce domaine, renforcer les liens entre les scientifiques qui utilisent le HPC (High Performance Computing), et enfin valoriser les investissements qui ont déjà été faits en termes d'équipements, en veillant bien au succès de Prace au niveau européen.



CNRS PHOTO THÉRIQUE / CYRIL PRÉSTILLON



GENCI - L. GODART

Pouvez-vous nous en dire plus sur Prace dont vous êtes, depuis juin dernier, la présidente du conseil ?

C. R. : L'infrastructure européenne de calcul intensif Prace est une structure indépendante, financée par vingt-quatre États dont la France, qui y est représentée par Genci. Prace a pour mission de coordonner un réseau européen de centres de calcul de très haut niveau. Avec Curie, dont les ressources ont été intégrées aux appels à projets de Prace dès 2011, la France a tenu son engagement d'accueillir un des supercalculateurs de l'infrastructure européenne de calcul intensif mais aussi permis à Prace de poursuivre son déploiement, conformément à la feuille de route décidée dès 2008. Cette dimension est capitale car aucun État européen ne peut à lui seul être compétitif avec les États-Unis, la Chine ou le Japon, les grandes puissances actuelles du HPC. La seule solution était donc de s'associer, c'est ce que nous avons fait ! Il y a quelques années encore, l'Europe accusait un sérieux retard sur ses concurrents mais elle l'a aujourd'hui comblé. Pour

preuve, au dernier classement des meilleurs supercalculateurs mondiaux, le Top 500, sur les dix premières machines, quatre sont européennes. Et la Commission européenne a annoncé le 15 février dernier son intention de doubler d'ici à 2020 ses investissements dans le HPC, rappelant que la croissance de l'Europe dépend de sa capacité à innover et que le HPC en est un des outils.

Comment développer cette capacité à innover ?

C. R. : Par la démonstration de tous les bénéfices que la science, et plus largement la société, peuvent tirer du HPC ! À cet égard, les résultats présentés plus loin dans ce magazine en sont une illustration parfaite. Cette démonstration est une des conditions du développement du HPC dans l'industrie comme dans la recherche, pour répondre notamment aux défis sociétaux que constituent par exemple le vieillissement, les changements climatiques et l'efficacité énergétique.

Avec l'infrastructure Prace et des supercalculateurs comme Curie, assiste-t-on à

CATHERINE RIVIÈRE

vient d'être nommée pour deux ans à la tête de Prace, qui anime un réseau de centres de calcul de très haut niveau, rassemblant pas moins de 24 États européens.

À gauche, une vue du supercalculateur Curie.

l'émergence d'une Europe du calcul intensif ?

C. R. : Le calcul intensif est devenu stratégique pour la recherche académique comme industrielle. C'est même un vrai enjeu de souveraineté à l'échelle de la nation et de l'Europe, comme l'a souligné Geneviève Fioraso, ministre de l'Enseignement supérieur et de la Recherche, lors de l'inauguration de Curie, le 12 juillet dernier. Grâce à la dynamique instaurée avec la création de Genci en 2007, la puissance de calcul disponible pour tous les scientifiques français a été multipliée par 50 en cinq ans. Cette vitalité permet à la France aujourd'hui d'être en très bonne place dans l'impulsion engagée en Europe par Prace. Avec les scientifiques et les industriels, avec les instances nationales et internationales, se met rapidement en place en Europe tout un écosystème autour du HPC, qui permettra à nos laboratoires et à nos entreprises d'accroître leur compétitivité. Curie, avec Prace, est, à ce titre, un investissement capital pour l'avenir. ■

Propos recueillis par Pierre Mira

L'Europe fait du calcul haute performance une priorité

Reconnaissant enfin l'importance stratégique du calcul intensif pour l'industrie et la recherche, l'Europe a décidé de doubler d'ici à 2020 ses investissements consacrés à la simulation numérique. Objectif affiché du Vieux Continent : être un leader mondial à la fois pour la conception des supercalculateurs et également pour leur utilisation.

12

NOUVEAUX HORIZONS

15 février 2012 : la Commission européenne, par la voix de Neelie Kroes, commissaire chargée de la société numérique, annonce officiellement son intention d'inclure dans le futur programme européen de recherche et développement, pour les années 2014 à 2020, un chapitre conséquent sur le calcul haute performance (HPC, pour High Performance Computing). Pour cela, elle entend doubler d'ici à 2020 ses investissements consacrés au HPC en les faisant passer annuellement de 630 millions d'euros à 1,2 milliard d'euros. Cette décision marque un véritable tournant dans la politique européenne en matière de calcul intensif et redonne espoir à ceux qui, depuis longtemps, militent pour que le Vieux Continent

n'abandonne pas à d'autres pays un outil aussi stratégique pour son avenir.

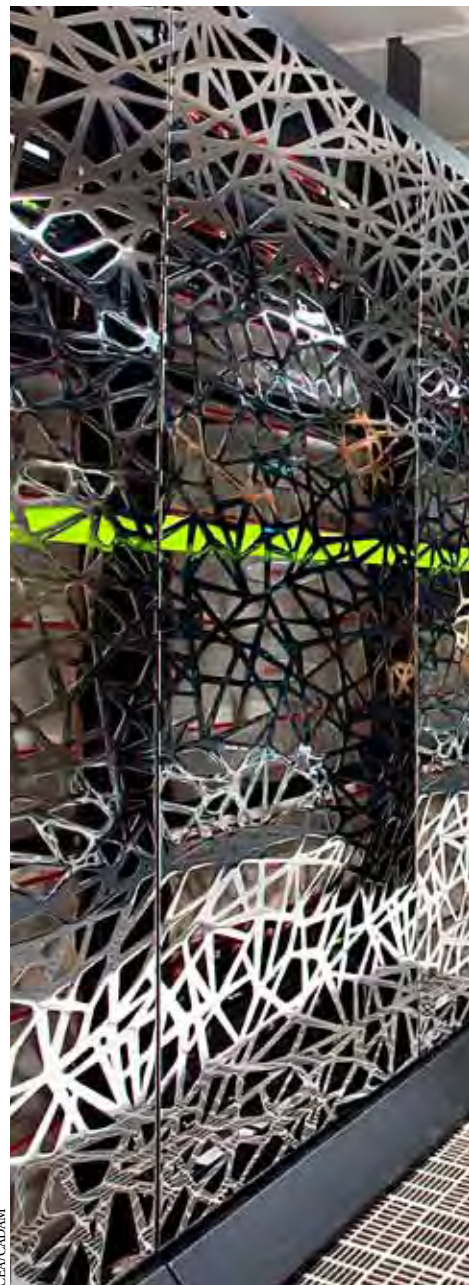
Il faut dire que le calcul intensif est devenu aujourd'hui un enjeu vital. Pour les industries tout d'abord, où, en réduisant considérablement le temps entre la conception et la mise sur le marché d'un produit, il est un élément essentiel de leur productivité et donc de leur survie dans la compétition internationale. Pour la recherche ensuite, où il permet à la connaissance de progresser dans des domaines inaccessibles à l'expérience. Et pour la société toute entière, enfin, où il offre des perspectives nouvelles d'amélioration de la vie au quotidien – communications, santé, risques naturels... En France, ça l'est depuis toujours pour notre défense et notre sécurité où il contribue de ma-



CEA

par **JEAN GONNORD**

chef de projet Simulation numérique et informatique à la Direction des applications militaires du Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA).



CEA/CADAM

DES MOYENS DE CALCUL DE TRÈS HAUT NIVEAU

Avec ses six supercalculateurs aux architectures complémentaires, installés en Allemagne, pour trois d'entre eux, en Espagne, en France et en Italie, accessibles indépendamment du lieu où ils sont situés, Prace (Partnership for Advanced Computing in Europe) est l'infrastructure européenne de calcul intensif. Depuis sa création en avril 2010, elle a déjà attribué un total de 3 milliards d'heures de calculs aux 102 projets sélectionnés pour leur excellence scientifique. Une réussite due à l'engagement pris et tenu par ces quatre pays de mettre à la disposition des chercheurs académiques et industriels européens des machines de très grande puissance – du niveau du petaflops. L'engagement de la France, représentée par Genci dans Prace, s'est concrétisé par l'acquisition et l'installation au Très grand centre de calcul du CEA (TGCC) du supercalculateur Curie en 2011. Prace regroupe 24 pays membres et d'ici à la fin 2012, la puissance totale de calcul déployée par le réseau européen pour ses scientifiques devrait atteindre 15 petaflops. De quoi permettre à notre continent de faire progressivement jeu égal avec les autres grandes puissances du calcul intensif que sont les États-Unis, la Chine et le Japon.

nière déterminante à la prévention des menaces de tous ordres.

Paradoxalement, il existe un écart inacceptable entre ce besoin stratégique de l'Europe et sa capacité à y répondre par ses propres ressources. En effet, si notre continent accueille plus de 30% des meilleurs supercalculateurs mondiaux, moins de 4% d'entre eux sont fournis par des industriels européens. Il y a là un double problème de dépendance stratégique et de déficit commercial. Si une partie de cet écart peut être imputée aux politiques protectionnistes des grands pays, comme les États-Unis et la Chine, l'absence de politique européenne ces vingt



EC - AUDIOVISUAL SERVICE - ANSOTTE
ETIENNE SHIMERA



► NEELIE KROES

La vice-présidente de la Commission européenne, commissaire à la société numérique, valorise l'avenir du HPC.

« L'Europe veut rester compétitive »

La commissaire Neelie Kroes entend doubler les investissements dédiés au calcul haute performance dans le programme de développement 2014-2020. Ci-dessous, quelques extraits de sa déclaration à la Commission européenne le 15 février 2012 :

« ... 97 % des entreprises industrielles qui recourent au HPC considèrent qu'il est indispensable à leur compétitivité et leur survie... »

« ... les supercalculateurs fabriqués aux États-Unis accaparent 95 % du marché de l'Union... »

« ... garantir à l'Union européenne un accès indépendant aux technologies, systèmes et service du HPC... »

« ... asseoir la position de l'Union européenne en tant qu'acteur mondial... »

dernières années en est bien la cause principale. Ainsi, en 2009, sur les 650 millions d'euros dépensés dans ce domaine par les organismes publics européens, plus de 95 % l'ont été auprès d'industriels situés hors d'Europe ! C'est bien ce déséquilibre que la Commission européenne entend aujourd'hui faire disparaître. Comment ? Notamment en aidant les entreprises et les chercheurs dans le secteur du HPC à maintenir une chaîne d'approvisionnement maîtrisée en Europe et à la pointe du progrès.

Pour l'Europe, c'est le moment où jamais de rattraper son retard. Le calcul intensif est en effet sur le point de connaître de grands

Jean Gonnord et Pierre Leca, chef du Département des sciences de la simulation et de l'information du CEA/DAM, devant le Bull Tera 100, qui est la première machine petaflopique conçue et réalisée en Europe, d'ores et déjà considéré comme un important succès industriel.



EXAFLOPIQUE

Se dit d'une machine capable d'effectuer 1 milliard de milliards d'opérations par seconde.

bouleversements susceptibles de changer complètement la donne. Tout d'abord, le développement de supercalculateurs dotés d'une puissance de calcul exaflopique*, prévus à l'horizon 2020, ne pourra pas se faire sans rupture technologique profonde. Le « Cloud computing » ensuite, tout juste émergent, qui va révolutionner et démocratiser l'accès au calcul intensif, fera appel à des technologies dérivées directement du HPC.

L'explosion des données produites par les industries et les scientifiques également, à laquelle on assiste aujourd'hui ira de pair avec des moyens importants de stockage issus du HPC. Enfin, les technologies de basse

énergie développées pour l'électronique portable, où l'Europe a une position de leader, vont rapidement devenir des technologies de référence pour le HPC. La maîtrise de la consommation électrique sera en effet la clé pour mettre au point les prochaines générations de supercalculateurs.

Gouvernance paneuropéenne

Dans ce contexte, la Commission européenne affiche un objectif ambitieux : tendre vers un leadership européen à la fois dans le domaine de la fourniture des technologies que dans leur utilisation. Pour cela, elle souhaite installer une gouvernance paneuropéenne basée sur

deux piliers. D'un côté, la plateforme technologique baptisée ETP4HPC (European Technology Platform for HPC), pilotée par des industriels européens du secteur, associés à six grands laboratoires européens – notamment le CEA –, sera chargée de garantir « un accès indépendant aux grands systèmes informatiques et à leurs services ». De l'autre, l'infrastructure Prace (Partnership for Advanced Computing in Europe), sous présidence française pour deux ans, et qui a pour mission de donner à la recherche européenne l'accès à des ressources informatiques de niveau mondial.

La France en fer de lance

Ces idées, que le CEA a initiées et portées depuis plus de quinze ans, montrent que le jeu est ouvert et que l'Europe conserve une réelle chance de rétablir sa position. Pour cela, le Vieux Continent pourra compter sur la France, seul pays européen à maîtriser l'ensemble des composantes du HPC : la recherche et le développement avec le CEA grâce à son programme de défense – le CEA garantit la fiabilité et la sûreté des armes nucléaires par la seule simulation – et à son expertise en micro-électronique; la conception et la réalisation de supercalculateurs de niveau mondial, comme le Tera 100 ou Curie, avec l'industriel Bull; l'utilisation avec des initiatives qui amplifient cette dynamique (le pôle de compétitivité SYSTEMATIC, Ter@tec, l'IRT SystemX).

Bref, un écosystème de calcul intensif unique en Europe, qui rassemble de grands laboratoires, des fournisseurs de technologie, des centres de formation et de recherche. Et qui lui donne une capacité d'attraction reconnue : c'est en France qu'Intel a installé son premier laboratoire européen de recherche pour le calcul intensif. Sans oublier qu'avec le passage à l'exaflops, il faudra nécessairement revoir en profondeur les logiciels permettant aux machines de fonctionner. L'école française, reconnue comme l'une des meilleures du monde dans le domaine des mathématiques appliquées et de l'algorithmique, devrait ainsi tirer son épingle du jeu. La France peut donc apporter beaucoup à la nouvelle politique européenne. Pour les présidences de Prace et de ETP4HPC, voilà une belle feuille de route en perspective! ■

Les experts d'ETP4HPC préparent un programme de recherche sur les technologies du calcul haute performance (matériel et logiciel) à l'horizon 2014-2020. Élaborée par des industriels et organismes de recherche du domaine, cette feuille de route sera soumise à la Commission Européenne à la fin 2012, dans le but de lancer des programmes renforçant la compétitivité et la position des industriels européens dans ce domaine.



DR



DR

Un leadership européen

▶ JEAN-FRANÇOIS LAVIGNON

président de l'ETP4HPC (European Technology Platform for High Performance Computing)

La plateforme technologique ETP4HPC est l'un des piliers de la politique européenne en matière de calcul intensif. En quoi consiste-t-elle ?

J.-F.L.: Née en juin 2012, l'European Technology Platform for High Performance Computing est une structure qui vise à rassembler les grands acteurs industriels et académiques menant des recherches et des développements (R & D) sur les technologies du calcul haute performance, ou HPC, pour High Performance Computing, en Europe. Elle a été créée par sept grands industriels du secteur informatique, dont Bull, des PME et six centres de recherche, dont le CEA. Et d'autres les rejoignent actuellement.

Quel est l'objectif de la plateforme ETP4HPC ?

J.-F.L.: Son but principal est de développer en Europe les technologies nécessaires au HPC, des composants matériels aux logiciels, en passant par les services, dont l'accès à des ressources de calcul, l'optimisation des codes de calcul, etc. C'est

indispensable pour que le Vieux Continent devienne un leader en matière d'utilisation du calcul intensif et améliore avec ce formidable outil sa compétitivité industrielle et son leadership scientifique. L'Europe possède l'ensemble des expertises et compétences nécessaires pour concevoir et développer des supercalculateurs, ainsi que des logiciels au meilleur niveau mondial. Il est donc possible de mettre en place sur notre continent tout un écosystème autour des technologies HPC extrêmement compétitif et pérenne.

Comment y parvenir ?

J.-F.L.: Pour atteindre cet objectif, nous préparons une feuille de route qui définira les priorités en matière de R & D sur l'ensemble des technologies du calcul haute performance. Ce document est conçu à partir de l'expertise des membres de l'ETP et tiendra compte des besoins exprimés par les communautés d'utilisateurs du HPC, scientifiques comme industriels. Il servira de base pour établir les objectifs du futur programme de R & D qui sera lancé en Europe, dont l'ambition est de disposer de machines exaflopiques à l'horizon 2020. ■

Curie mise sur la polyvalence

Mis à la disposition des chercheurs français et européens depuis mars 2012, le supercalculateur Curie a été conçu pour couvrir une très grande gamme de domaines scientifiques. Une polyvalence unique qui le distingue des autres machines mais qui ne l'empêche pas pour autant de figurer parmi les ordinateurs les plus puissants de la Planète.

Comprendre l'évolution du climat ou de l'Univers, prévenir les risques naturels, diagnostiquer la maladie d'Alzheimer ou certains cancers, développer des énergies propres, concevoir de nouveaux matériaux... La liste est longue des défis scientifiques que le

supercalculateur Curie tentera de relever dans les années qui viennent. Il faut dire que le dernier supercalculateur de Genci (Grand équipement national de calcul intensif), développé par le constructeur français Bull et piloté par les équipes du Commissariat à l'énergie atomique et aux

énergies alternatives (CEA) dans son Très grand centre de calcul de Bruyères-Le-Châtel (91), est l'une des machines les plus polyvalentes en son genre. Mis à la disposition des chercheurs français et européens en mars dernier, Curie a été conçu pour couvrir une très grande palette de thématiques scientifiques. Sa performance mesurée à 2 petaflops l'a placé au mois de juin au 9^e rang des cinq cents ordinateurs les plus puissants du monde, mais il se classerait probablement dans les cinq premiers si l'on ramenait sa performance au regard de sa polyvalence.

Pour faciliter l'utilisation de Curie par un maximum de scientifiques, la machine a été bâtie avec des logiciels libres et des composants de grande diffusion. C'est l'architecture très répandue des microprocesseurs X86 d'Intel qui a été retenue. Le supercalculateur s'intègre ainsi parfaitement à l'environnement de stations de travail fonction-

Vue du supercalculateur Curie installé au sein du TGCC.



CEA/CADAM

nant sous le système d'exploitation Linux et les chercheurs n'ont pas de mal à utiliser sur Curie une méthode numérique ou un algorithme préalablement développé sur un simple PC.

Les choix ont tenu compte de l'évolution technologique des microprocesseurs : leur fréquence – ou vitesse de travail – n'augmente guère, ce sont leurs cœurs, les unités de calcul élémentaires, qui se multiplient dans chaque microprocesseur. Ceux retenus pour construire Curie comportent de quatre à huit cœurs. Plusieurs de ces microprocesseurs sont assemblés pour former un système multiprocesseur, véritable brique de base du supercalculateur, appelé nœud de calcul dans le jargon des informaticiens. Au sein de Curie, un nœud peut être rangé à l'horizontale – on parle de serveur – ou à la verticale (une lame). Au cours d'une simulation, il s'agit de répartir au mieux – on dit que l'on parallélise – les tâches à réaliser et les données de calcul sur un grand nombre de nœuds. Pour atteindre sa puissance de calcul, Curie interconnecte ainsi chaque nœud à plusieurs milliers d'autres via un réseau très haut débit.

100 000 fois plus vite que l'ADSL

Grande spécificité de Curie : son architecture, pensée afin de pouvoir répondre aux besoins d'un très grand nombre d'applications scientifiques, se décline en trois différentes tranches dotées de ressources matérielles et logicielles complémentaires. Selon le type de simulation, les chercheurs peuvent ainsi utiliser une des trois parties du supercalculateur.

Une première tranche, dite à nœuds larges, est composée de 90 serveurs Bull S6010, chacun étant équipé de 16 processeurs à huit cœurs Intel Xeon X7560 qui partagent une mémoire de 512 gigaoctets. Ces nœuds, dotés d'une forte densité de calcul et de mémoire, sont destinés aux applications ayant un parallélisme limité mais nécessitant des capacités mémoire très importantes. Ils peuvent aussi être utilisés pour générer des maillages et analyser les résultats de calculs exécutés sur les autres partitions de Curie. Au total, cette tranche représente un ensemble de 11 520 cœurs de calcul pour une puissance de 105 téraflops.

Une seconde partie, dite à nœuds hybrides, est constituée



DR
par STÉPHANE REQUENA,
responsable technique de Genci (Grand équipement national de calcul intensif).



DR
et HERVÉ LOZACH,
chargé de mission « Complexe de calcul » du CEA (Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives).

de 144 lames de calcul Bull B505, chacun des nœuds étant équipé de deux processeurs à quatre cœurs Intel Xeon E5640 qui partagent une mémoire de 24 gigaoctets. Ces lames sont dites hybrides car elles contiennent en plus des processeurs graphiques Nvidia (GPU*) qui sont utilisés pour augmenter la vitesse de calcul. Au total, cet ensemble permet de disposer d'une puissance de plus de 200 téraflops.

Enfin, la dernière partition, dite à nœuds fins, constitue la composante essentielle de Curie, celle qui la distingue des autres supercalculateurs. Elle rassemble 5040 lames de calcul Bull B510, chacune étant équipée de deux processeurs à huit cœurs de dernière génération Intel Xeon E5-2680 – baptisé SandyBridge – qui partagent une mémoire de 64 gigaoctets. À la différence des nœuds larges ou hybrides, cette partition, dotée d'un très grand nombre de cœurs (80640) et ainsi d'une grande puissance de calcul

(1,74 petaflops), est adaptée à l'utilisation de codes de calcul complexes, capables de mobiliser conjointement jusqu'à plusieurs dizaines de milliers de cœurs de calcul.

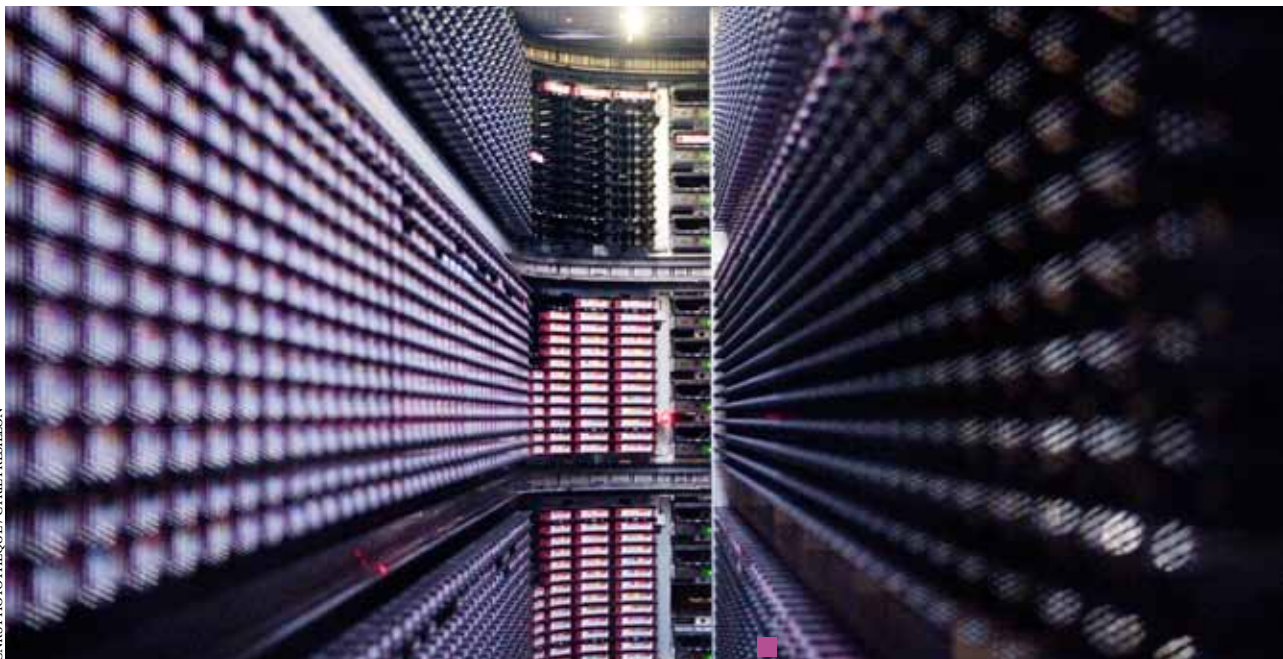
Touche finale : les 92 000 cœurs de calcul de Curie sont couplés à un système permettant de stocker l'équivalent de 50 fois le contenu de la *Library of Congress*, la plus grande bibliothèque du monde (15 pétaoctets) à une vitesse de 250 gigaoctets par seconde, soit 100 000 fois supérieure à celle d'une connexion ADSL très haut débit. Cette architecture équilibrée, qui combine une puissance de calcul élevée, une capacité très grande de traitement des données et une grande capacité mémoire – plus de 360 téraoctets de mémoire distribuée entre tous les nœuds – est extrêmement rare dans les supercalculateurs. Elle est indispensable pour accéder très rapidement aux données sans ralentir les calculs tout en

▶ **LA FRANCE EN 9^e POSITION MONDIALE**

Comme chaque année, en juin et en novembre, le palmarès des cinq cents supercalculateurs les plus puissants du monde – surnommé le Top 500 – est établi sur la base de l'exécution d'un calcul étalon baptisé Linpack. Le dernier classement de juin 2012 marque le retour en force des pays européens : l'Allemagne avec deux machines, dont Supermuc, la plus puissante d'Europe, l'Italie, qui fait ainsi ses débuts parmi les dix premiers du palmarès mondial et la France avec Curie. Le supercalculateur français se classe à la 9^e place. La Chine continue sa progression fulgurante avec deux supercalculateurs dans le Top 10. Le Japon, à la tête du classement dans les deux dernières éditions, se fait voler la vedette par les États-Unis et leur supercalculateur Sequoia, loin devant avec ses 16,32 petaflops. Les États-Unis restent qui plus est le pays leader incontesté côté supercalculateurs installés.

▶ **LE TOP 10 DES SUPERCALCULATEURS**

RANG	SITE – PAYS	NOM	CONSTRUCTEUR	PUISSANCE MESURÉE (en petaflops)
1	DOE/Lawrence Livermore National Laboratory - Californie, États-Unis	Sequoia	IBM	16,32
2	RIKEN Advanced Institute for Computational Science - Japon	Super K	Fujitsu	10,51
3	DOE/Argonne National Laboratory - Illinois, États-Unis	Mira	IBM	8,16
4	Leibniz Rechenzentrum - Allemagne	Supermuc	IBM	2,9
5	National Supercomputing Center - Tianjin, Chine	Tianhe-1A	NUDT	2,57
6	DOE/Oak Ridge National Laboratory - Tennessee, États-Unis	Jaguar	Cray	1,94
7	Cineca - Italie	Fermi	IBM	1,72
8	Forschungszentrum Juelich - Allemagne	Juqueen	IBM	1,38
9	CEA/TGCC-GENCI France	Curie	Bull	1,36
10	National Supercomputing Centre - Shenzhen, Chine	Nebulae	Dawning	1,27



étant capable de stocker les résultats des simulations qui peuvent générer jusqu'à plusieurs centaines de téraoctets chacune. Pouvoir maîtriser la consommation d'énergie, problème majeur de ces installations d'envergure, a été l'une des grandes préoccupations des concepteurs de Curie.

Déjà des avancées majeures

Parmi les principales innovations, un dispositif de refroidissement à eau glacée installé dans les portes des armoires comportant plusieurs centaines de cœurs de calcul chacune. À cela s'ajoute le fait que Curie se compose essentiellement de lames de calcul – verticales –, a permis de rendre l'installation compacte. Le calculateur n'occupe que 200 m² au sol, soit trois fois moins que les supercalculateurs de la génération précédente. Ce refroidissement au plus proche du dégagement de chaleur améliore l'efficacité énergétique du centre de calcul. Par ailleurs, l'utilisation des processeurs Intel E5-2680, qui, à consommation équivalente, peuvent effectuer deux fois plus d'opérations à la seconde, a aussi permis de réduire la facture électrique. Au total, Curie consomme 3,2 mégawatts, soit, à puissance de calcul égale, deux fois moins que les supercalculateurs de la génération précédente.

Pour répondre aux attentes des scientifiques, le CEA a mis en place une équipe d'une dizaine d'experts spécialisés, sollicités pour résoudre des problèmes

allant du portage de l'application sur le calculateur jusqu'au transfert des résultats des calculs (stockage, archivage des données, traitement et visualisation des résultats), en passant par toutes les étapes intermédiaires : recherche de la meilleure répartition des tâches sur les cœurs, suggestion de pistes pour améliorer la performance du code de calcul... Au total, ce sont plus de 40 personnes qui contribuent quotidiennement à l'exploitation et au maintien en condition opérationnelle du calculateur et de son environnement, à cette échelle inédite de plus de 5 500 nœuds de calcul.

Avec Curie, dont l'investissement représente 100 millions d'euros sur cinq ans, la France tient ainsi ses engagements auprès de l'infrastructure européenne de recherche Prace (Partnership for Advanced Computing in Europe), dont elle est un des membres fondateurs.

 Vue du système d'archivage des données produites par Curie sur des bandes magnétiques.

Associant 24 pays au total, Prace anime aujourd'hui un réseau de plusieurs centres de calcul équipés de supercalculateurs d'une puissance au moins égale à 1 petaflops, dont Curie.

Mis en place en deux phases, entre la fin 2010 et la fin 2011, Curie est aujourd'hui entièrement installé et sa configuration a été testée avant que son accès soit totalement ouvert aux scientifiques européens, précisément le 8 mars 2012. Dans cette ultime phase de test, le bon fonctionnement du supercalculateur a été vérifié en exécutant des simulations de très grande taille sur la quasi-totalité de ses composants. Cette période dite de « Grands challenges » a d'ores et déjà permis aux chercheurs de réaliser des avancées scientifiques majeures. Avec plusieurs dizaines d'autres projets scientifiques actuellement en cours, de nombreuses autres découvertes ne sauraient tarder. ■



GPU
De l'anglais Graphics Processing Unit. Un processeur graphique est un circuit intégré présent sur une carte graphique assurant les fonctions de calcul d'affichage.

» UNE MACHINE OUVERTE

L'accès à la machine Curie est simple : elle est utilisable pour 80 % de ses ressources par les chercheurs de toute l'Europe, français y compris, académiques comme industriels, pour des travaux de recherche ouverte – civile uniquement –, dans le cadre d'appels à projets lancés deux fois par an par Prace, la structure européenne du calcul intensif. Les projets soumis sont évalués techniquement par les centres de calcul et scientifiquement par un collège d'experts indépendants. Le critère unique de sélection est l'excellence scientifique et l'accès aux ressources, une fois le projet sélectionné, est gratuit. Les 20 % restants sont réservées aux besoins français, notamment via les appels à projets organisés deux fois par an par Genci, sur des critères similaires à ceux de Prace.

Les PME aussi se tournent vers le calcul intensif

Les grandes entreprises misent depuis longtemps sur les supercalculateurs pour se passer des processus classiques d'expérimentation et ainsi réduire le temps de développement et le coût de leurs produits. Jusqu'ici peu familières du calcul intensif, les PME commencent enfin à l'adopter. Avec de beaux succès. Illustration avec la société nantaise HydrOcean, spécialisée dans la simulation numérique des écoulements fluides.

18

NOUVEAUX HORIZONS

La modélisation numérique prend une place de plus en plus importante dans le monde industriel. C'est le cas notamment en mécanique des fluides, discipline qui permet entre autres d'améliorer l'aérodynamique des avions et l'hydrodynamique des bateaux. Dans ce domaine, les logiciels de calcul complètent, voire pour certaines applications remplacent les essais réels. Grâce à la simulation, on peut ainsi étudier, optimiser ou encore limiter les risques de conception, tout en augmentant les capacités d'innovation.

Ces vingt dernières années, les principaux travaux de recherche et développement réalisés en mécanique des fluides ont porté sur des méthodes numériques visant à résoudre les équations de Navier-Stokes qui décrivent la dynamique des écoulements. Parmi ces méthodes, celle dite des « volumes finis » s'est imposée comme une référence. Elle permet de réaliser sur des maillages – on divise l'espace en un grand nombre d'éléments géométriques élémentaires – des simulations fiables et précises et d'étudier des objets à la géométrie complexe rencontrés dans l'industrie.

C'est pourquoi cette méthode est utilisée par la plupart des outils de simulation généralistes du marché. Elle comporte cependant plusieurs limitations : l'utilisation d'un maillage fait qu'on ne peut pas réaliser simplement de simulation de corps au mouvement complexe ou de corps déformables, ou encore de mélanges complexes de fluides. Qui plus est, ces simulations sont très coûteuses en temps de calcul dès



DR
par ERWAN JACQUIN,
président de la PME
HydrOcean à Nantes.

lors que les maillages dépassent plusieurs dizaines ou plusieurs centaines de millions de cellules.

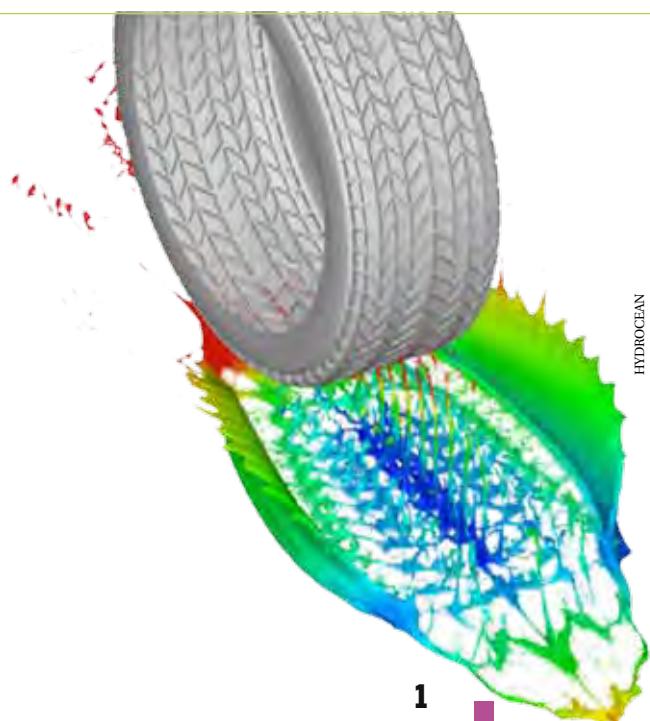
Depuis plusieurs années, des équipes de recherche travaillent donc au développement de nouvelles méthodes numériques capables de supprimer ces inconvénients. Parmi elles, l'une des plus prometteuses est la méthode baptisée Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH). Pour résoudre les équations de la mécanique des fluides, elle fait appel à des particules qui se déplacent au sein de l'écoulement. Ainsi, les particules sont libres d'évoluer dans le fluide, ce qui rend possible la simulation d'objets en mouvement à la géométrie complexe et déformable ou de mélanges de fluides.

Depuis plus de dix ans, l'École centrale de Nantes, soutenue par sa start-up HydrOcean créée en 2007 et spécialisée dans la simulation numérique des écoulements de fluide, développe le logiciel SPH-flow. Il est aujourd'hui l'un des codes SPH les plus avancés en termes de fonctionnalités. Cependant, à précision équivalente, cette méthode peut parfois avoir un coût de calcul supérieur aux méthodes classiques – comme celle des volumes finis –, ce qui a longtemps limité son utilisation. Mais la parallélisation du code sur les supercalculateurs ouvre désormais de nouvelles perspectives.

Ainsi, dans le cadre du projet européen NextMuse, une

> LE CALCUL INTENSIF À LA PORTÉE DE TOUTES LES ENTREPRISES

Démocratiser les technologies du calcul intensif et contribuer à ce que les entreprises et les PME créent grâce à elles de nouveaux usages et offrent de nouveaux services, c'est l'objectif du projet NumInnov. Porté par Bull, ce projet bénéficie du soutien de l'État dans le cadre des « Investissements d'avenir ». Il vise à créer un opérateur indépendant de services de calcul intensif en mode Cloud Computing : les entreprises pourront disposer via Internet de puissance de calcul, de logiciels et de services selon leurs besoins précis, au moment où elles le souhaitent. Le calcul intensif se met ainsi à l'ère de « l'informatique en nuage ». Et plutôt que d'investir dans l'acquisition et la mise en œuvre de centres de calcul, très coûteux, les entreprises pourront bénéficier de puissance de calcul payée à l'utilisation. Avec le Cloud Computing, tout le monde aura droit à la puissance. De nouveaux usages vont apparaître. Pour accélérer leur développement, l'ambition de NumInnov est de réunir des éditeurs de logiciels et des spécialistes des multiples domaines concernés : la santé par exemple, avec la médecine à distance et le traitement d'image, ou la protection civile avec la gestion de crise. NumInnov associe déjà vingt-cinq PME autour de Bull. Avec d'un côté NumInnov qui donne accès à des ressources de calcul à la demande et de l'autre l'initiative HPC-PME qui fournit conseils et services aux PME pour qu'elles puissent évaluer ce que le calcul intensif peut apporter à leur croissance, l'innovation va véritablement être à la portée de toutes les entreprises.



1

Grâce au logiciel SPH-flow, des simulations mettant en jeu des écoulements de fluide complexes sont réalisées sur un supercalculateur dans des temps de calculs compatibles avec les contraintes industrielles. Comme la simulation d'un pneumatique en aquaplaning (1), l'amerrissage d'un hélicoptère (2), ou la simulation de l'impact d'un radeau de survie sur l'océan (3).

efficacité de 95 % a été obtenue pour un calcul mettant en jeu 3 milliards de particules sur les 32000 cœurs de la machine suisse Monte Rosa du CSCS (Swiss National Supercomputing Centre). Une performance exceptionnelle qui rend aujourd'hui possible des simulations très compliquées, et ce dans des temps de calcul compatibles avec les contraintes industrielles.

Le logiciel SPH-flow, développé par HydrOcean et l'École centrale de Nantes, permet aujourd'hui, grâce à l'utilisation du calcul parallèle, de réaliser certaines simulations hors de portée d'outils généralistes, que ce soit en termes de complexité des phénomènes physiques mis en jeu et de précision dans la description de l'écoulement. Pour aller plus loin encore, HydrOcean est soutenu aujourd'hui par Genci, Inria et Oseo dans le cadre du dispositif HPC-PME pour utiliser SPH-flow sur des supercalculateurs dotés de processeurs graphiques (GPU*).

À la clé: réduire les temps de calcul d'un facteur 10, voire 20, et ouvrir de nouvelles perspectives d'applications industrielles dans les domaines de l'aéronautique, des transports, des procédés industriels ou encore de l'ingénierie biomédicale. ■

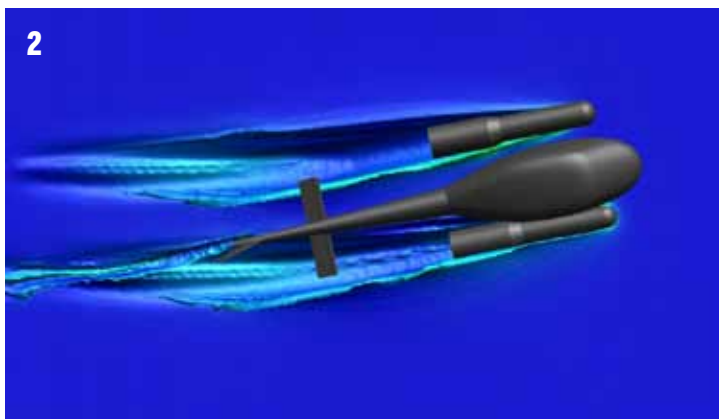


GPU
De l'anglais Graphics Processing Unit. Un processeur graphique est un circuit intégré présent sur une carte graphique assurant les fonctions de calcul d'affichage.

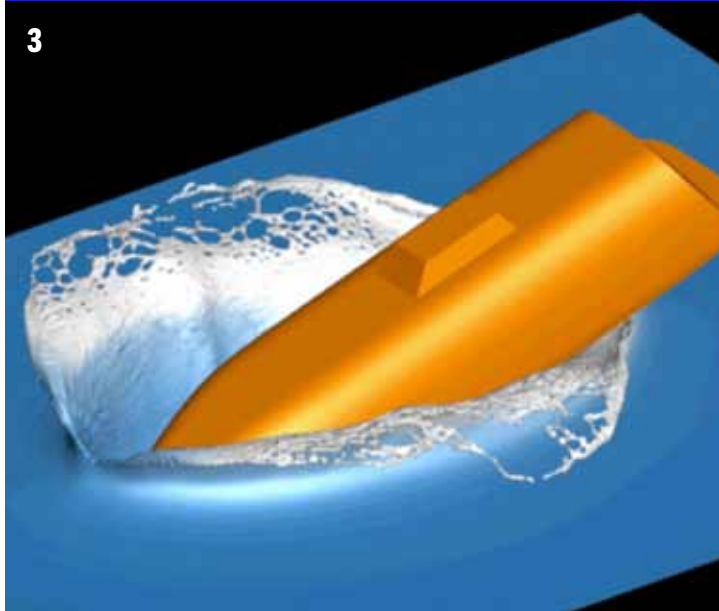
► ACCOMPAGNEMENT SUR MESURE

Portée par Genci, Inria et Oseo, l'initiative HPC-PME a pour objectif d'aider les PME à évaluer et démontrer les gains de productivité et de compétitivité qu'elles obtiendraient en utilisant le calcul intensif. Lancée en 2010, cette action est menée en partenariat avec cinq pôles de compétitivité : Aerospace Valley (aéronautique, espace), Axelera (chimie et environnement), Minalogic (solutions miniaturisées intelligentes pour l'industrie) et Systematic (systèmes complexes) et Cap Digital (contenus et services numériques). Pour accompagner les PME dans leur approche du calcul intensif, les compétences de chaque partenaire sont mobilisées en fonction des besoins exprimés : expertise technologique, formation, accès aux ressources de calcul, enjeux économiques et financiers. Plus d'une vingtaine de PME bénéficient actuellement de ce programme d'accompagnement. Couvrant l'ensemble du territoire national, elles sont issues de domaines aussi divers que l'automobile, l'industrie maritime, les biotechnologies, la microélectronique ou encore l'aéronautique.

.....
Pour en savoir plus : www.initiative-hpc-pme.org
.....



2



3

Le futur de la simulation numérique se joue dès aujourd'hui

En 2020, les supercalculateurs seront mille fois plus puissants que les machines actuelles. Pour les exploiter au maximum de leurs capacités, les logiciels de simulation numérique devront être repensés. Dans ce but, Inria, l'Institut de recherche français en sciences du numérique, vient de lancer le projet C2S@Exa qui réunit une trentaine de spécialistes du calcul haute performance.

20

NOUVEAUX HORIZONS

Les supercalculateurs petaflopiques commencent à peine à entrer en service que les acteurs du calcul intensif pensent déjà à leurs successeurs : les machines exaflopiques, mille fois plus puissantes, capables d'effectuer un milliard de milliards d'opérations par seconde. C'est en 2020 que les premières d'entre elles devraient faire leur apparition. Ce sera une véritable révolution pour les scientifiques qui vont pouvoir s'attaquer à des problèmes bien plus complexes et réaliser des simulations beaucoup plus réalistes.

Revers de la médaille : parce que leur architecture interne sera plus compliquée, ces monstres du calcul seront plus difficiles à utiliser. En effet, si les machines actuelles sont constituées d'environ 100 000 cœurs de calcul – ces unités de traitement situées au sein des processeurs –, les calculateurs de demain en posséderont un million. La façon d'effectuer les calculs n'aura alors plus rien à

voir. Car les informations devront être traitées en parallèle, c'est-à-dire simultanément sur tous les cœurs. Cela pose des questions en termes de programmation. Les logiciels de simulation actuels devront être adaptés.

Mathématiciens et informaticiens main dans la main

C'est pour répondre à ces enjeux qu'Inria, l'institut de recherche français en sciences du numérique, vient de lancer le projet C2S@Exa – acronyme anglais de Calcul très haute performance pour les sciences computationnelles. Objectif : réunir des chercheurs aux spécialités multiples pour mettre en œuvre des simulations numériques complexes de très grande taille qui exploiteront le plus efficacement possible les très grandes capacités de traitement et de stockage des données des futurs supercalculateurs. « Il s'agira de faire travailler ensemble des spécialistes des mathéma-

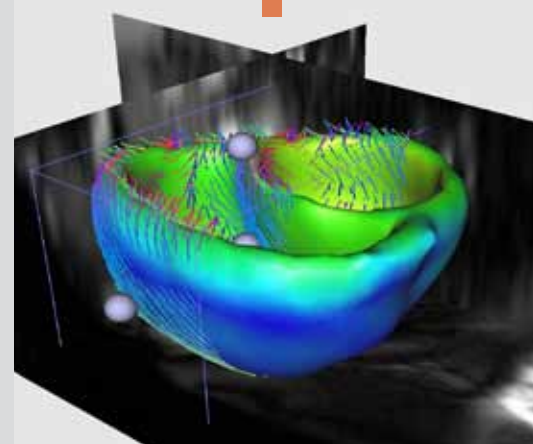
tiques appliquées qui développent des outils de calcul numériques, et des informaticiens spécialistes du calcul haute performance qui conçoivent des logiciels permettant d'exploiter au mieux les caractéristiques matérielles de ces nouvelles architectures massivement parallèles. Une démarche encore trop peu répandue mais essentielle pour relever le défi de l'exaflops », souligne Stéphane Lanteri, responsable du projet.

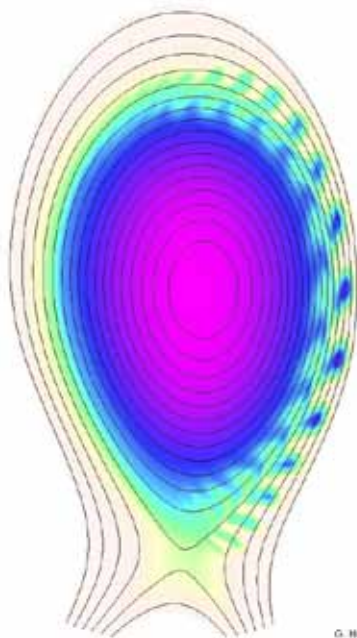
De cette collaboration devraient naître des logiciels de simulation repensés pour les calculateurs exaflopiques. « Dans la plupart des cas, les logiciels existent déjà mais s'ils étaient utilisés bruts, ils ne fourniraient pas un rendement suffisant par rapport à la puissance théorique de ces machines, explique le chercheur d'Inria. Notre objectif sera de rendre ces outils beaucoup plus performants. Tout en gardant une simplicité d'usage, afin qu'ils restent utilisables par tous les scientifiques. » Déjà, les prin-

Modélisation des deux ventricules du cœur et de l'architecture des fibres cardiaques à partir d'images médicales dans le cadre du projet d'Inria baptisé **Cardiosense3D**.

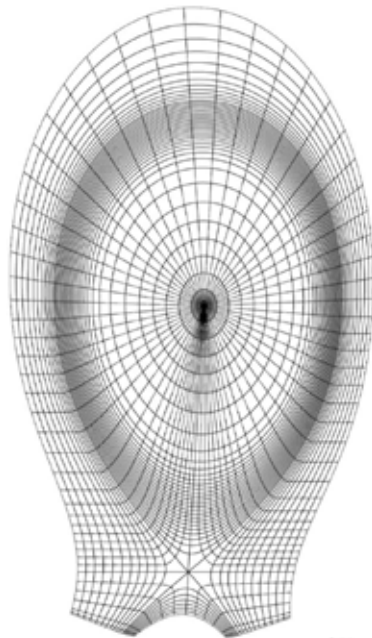
► RÉUNIR DES CHERCHEURS D'HORIZONS DIFFÉRENTS

Le projet C2S@Exa fait partie des Actions d'envergure d'Inria. Lancées en petit nombre – neuf en cours actuellement – pour une durée de quatre ans, ces initiatives s'organisent autour de sujets de recherche majeurs sur lesquels Inria a décidé de consacrer davantage de moyens. Multidisciplinaires, elles rassemblent des chercheurs aux compétences variées au sein même d'Inria mais font aussi appel à des partenaires extérieurs, académiques ou industriels. Les problématiques abordées par ces actions sont extrêmement variées, depuis la simulation du fonctionnement du cœur pour mieux comprendre certaines pathologies cardiaques jusqu'au développement de technologies d'assistance aux personnes âgées ou dépendantes en passant par l'étude par des outils informatiques de la croissance des bactéries dans l'espoir de mettre au point de nouveaux médicaments.

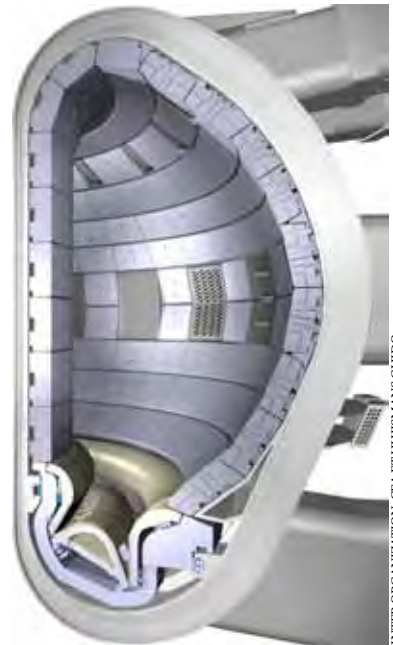




G. Hejri



G. Hébert



INTER ORGANIZATION, CEA ET HUISMANS GUIDO

cipaux verrous à faire sauter ont été identifiés par la trentaine de chercheurs du projet C2S@Exa. Les logiciels devront être capables de distribuer au mieux les tâches à effectuer entre tous les cœurs de calcul des machines en réduisant au maximum le mouvement des données – le principal frein à la performance du calculateur. Ils devront également sauvegarder les données au cours de l'exécution des calculs pour que celles-ci ne soient pas perdues si un composant de la machine tombe en panne – on estime que les calculateurs exaflopiques connaîtront une panne toutes les heures. Il leur faudra enfin prendre en compte l'aspect «hybride» des machines de demain qui seront composées de plusieurs types de processeurs aux caractéristiques radicalement différentes.

Des problèmes qui touchent la société

Dans un premier temps, les chercheurs d'Inria se pencheront sur deux problématiques scientifiques touchant de près la société : la fusion nucléaire, source d'énergie extrêmement prometteuse dans le futur, et le stockage des déchets radioactifs générés par les centrales nucléaires. Pour la fusion, l'un des grands enjeux sera de confiner la matière chauffée à plus de cent millions de degrés bien au centre du réacteur pour éviter qu'elle endommage les parois. Pour les déchets nucléaires de haute activité et de moyenne activité à vie longue, les

Pour mettre au point des réacteurs à fusion (image de droite, lter vu en coupe), il faudra simuler très finement le comportement de la matière (image de gauche en couleur) chauffée à plus de 100 millions de degrés.

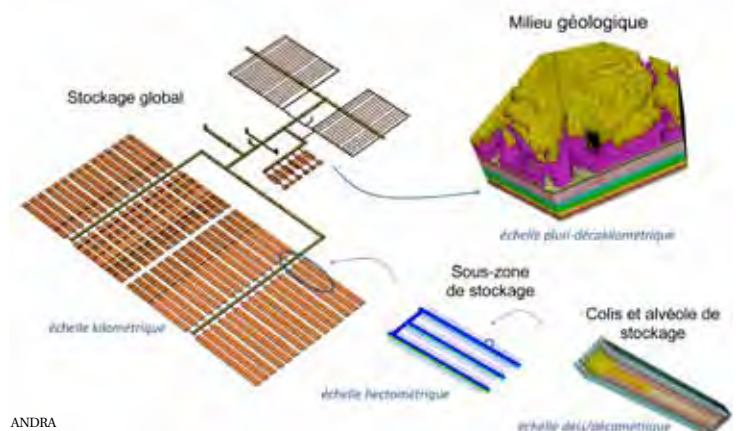
scientifiques étudient la possibilité de les enfouir en profondeur dans le sous-sol et tentent de dire pendant combien de temps ils pourront y être stockés, dans des containers spécifiques, sans danger. « Ces deux problèmes pourront être résolus uniquement en mettant au point des simulations numériques de très grande taille », explique Stéphane Lanteri. En effet, dans le cas de la fusion, les phénomènes sont extrêmement complexes et font appel à un jeu d'équations mathématiques très compliqué qui génèrent un fantastique volume de données à traiter. Et pour les déchets radioactifs, la difficulté vient du fait qu'il faut prendre en compte toutes les interactions à toutes les échelles de taille, depuis celle du kilomètre pour les roches jusqu'à celle du centimètre pour le container renfermant les éléments radioactifs, et ce sur des temps extrêmement

longs – jusqu'à plusieurs centaines de milliers d'années.

Pour atteindre cet objectif, les mathématiciens et informaticiens de C2S@Exa travailleront main dans la main avec le CEA – pour la fusion – et avec l'Agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs (Andra). Il s'agira alors d'améliorer les logiciels de simulation déjà utilisés par ces deux organismes mais pas encore adaptés à l'exaflops. Et ce n'est pas tout. « Les outils que nous mettrons au point pour ces deux premiers défis scientifiques pourront être adaptés à de nombreuses autres problématiques majeures, depuis le risque sismique jusqu'à la conception aérodynamique des avions en passant par la modélisation du cerveau », s'enthousiasme Stéphane Lanteri. Avec les bons outils, la simulation n'aura pas de limite. ■

Pierre Mira

Pour évaluer le risque posé par le stockage des déchets radioactifs en profondeur, la simulation numérique à toutes les échelles de taille sera incontournable.



Les modèles climatiques gagnent en précision

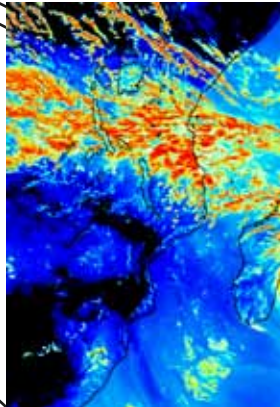
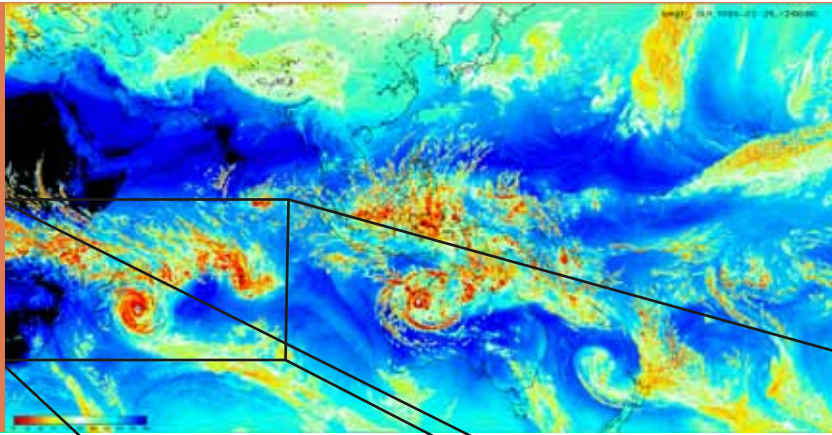
Les supercalculateurs permettent aujourd'hui de simuler le climat sur l'ensemble de notre planète à une échelle de 10 kilomètres contre 100 kilomètres il y a peu. Mal reproduits, voire absents jusqu'ici dans les modèles climatiques, les phénomènes à petite échelle, qui jouent pourtant un rôle important, peuvent ainsi être pris en compte.

La compréhension du climat et de ses variations passées, actuelles et à venir est l'un des enjeux scientifiques majeurs de notre siècle. Dans cette quête, la simulation est devenue un outil indispensable. Cette démarche permet, en effet, de mieux comprendre les mécanismes qui régulent le climat et ainsi de faire des prévisions sur des échelles de temps allant de la saison (rigueur des hivers, anticipation de période de sécheresse ou d'inondation...) à quelques siècles, dans le cas des scénarios de changement climatique.

Les modèles climatiques, qui font appel aux équations de la mécanique des fluides et de la thermodynamique, consistent à recréer en quelque sorte une planète virtuelle. Ils permettent alors de calculer l'état de l'at-

mosphère et des océans (températures, précipitations, vents, courants...) sur un maillage de points répartis sur l'ensemble de ce globe reconstitué.

Actuellement, la puissance de calcul des superordinateurs limite la densité de ce maillage à environ 100 km pour des simulations du climat global de la Planète sur plusieurs centaines d'années – celles utilisées pour les scénarios de changement climatique. Tous les phénomènes à plus petite échelle (tourbillons océaniques, nuages...) ne peuvent pas être reproduits fidèlement. C'est là la source majeure d'incertitude des modèles climatiques. En effet, les scientifiques savent que certains processus à petite échelle (inférieurs à 10 km) peuvent se répercuter sur le climat de notre planète et donc participer à ses



par **SÉBASTIEN MASSON, CHRISTOPHE HOURDIN et RACHID BENSHILA**

du Laboratoire d'océanographie et du climat : expérimentations et approches numériques (Paris).

ÉRIC MAISONNAVE,

ingénieur de recherche au Centre européen de recherche et de formation avancé en calcul scientifique (Cerfacs) de Toulouse.

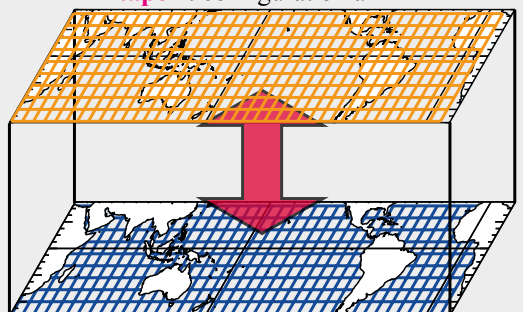
et **YANN MEURDESOLF,**

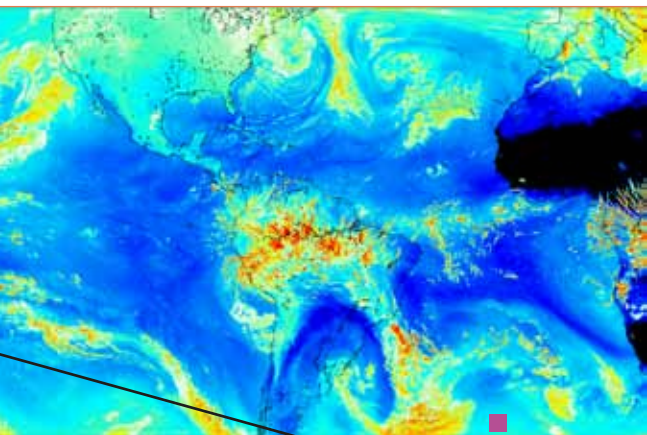
ingénieur au Laboratoire des sciences du climat et de l'environnement (Gif-sur-Yvette - Essonne).

variations. Il est donc impératif de mieux les prendre en compte pour améliorer la précision des modèles.

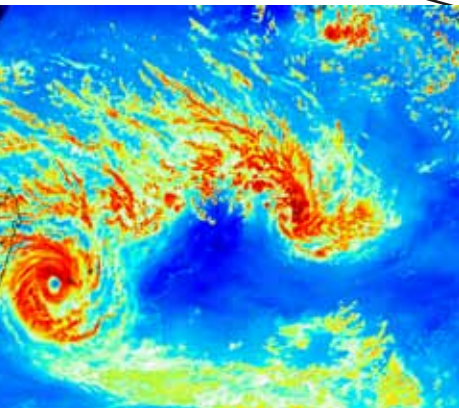
Avec l'arrivée des supercalculateurs petaflopiques, dont la puissance de calcul permet d'atteindre une résolution de 10 km, il est désormais possible de s'attaquer à ce problème. Notre équipe vient de réaliser des simulations du climat global sur la machine Curie de Genci, installée au Très grand centre de calcul du CEA, à Bruyères-le-Châtel (Essonne). Objectif : identifier les phénomènes clés qui sont mal représentés voire absents dans les modèles de

Étape 1 : configuration à 27km





S. MASSON (LOCEAN-IPSL)



S. MASSON (LOCEAN-IPSL)

Détail sur un cyclone au large de la Réunion. Les couleurs représentent la couverture nuageuse. Simulation réalisée sur le supercalculateur Curie avec une configuration à très haute résolution (9 km) sur l'ensemble du Globe entre 45° S. - 45° N.

climat et quantifier dans quelle mesure leur prise en compte permet d'améliorer ces modèles.

Suivre de près les remontées d'eau froide

Plus particulièrement, les efforts ont été concentrés dans des régions bien précises : certaines zones côtières des océans Pacifique et Atlantique le long desquelles sont piégées des remontées d'eaux froides vers la surface. Le phénomène qui se produit dans ces régions, représentant pourtant moins de 1% de la surface de la Terre, a des conséquences sur l'ensemble du Globe : il a une influence sur les

Simulations du climat avec une résolution de 27 km à 9 km, soit sur l'ensemble du domaine, soit dans des régions clés (comme le Pacifique sud-est) pour le climat à grande échelle.



vents, la couverture nuageuse et les précipitations sur la totalité de la ceinture tropicale qui recouvre environ la moitié de la Planète. Des études récentes ont suggéré qu'il serait possible d'améliorer significativement nos modèles si l'on parvenait à mieux reproduire ce phénomène.

Pour atteindre cet objectif, deux modèles différents développés depuis plus de vingt ans et déjà utilisés par des milliers de chercheurs à travers le monde – et qui sont parmi les plus performants existants – ont été combinés en un seul et même modèle : un modèle atmosphérique de prévision météorologique et climatique, baptisé WRF et adapté à un large éventail d'applications à des échelles allant de quelques mètres à des milliers de kilomètres, et un modèle océanique baptisé Nemo, utilisé pour la recherche océanographique ainsi que les études climatiques, référence pour la modélisation de l'océan en Europe. Les deux modèles ont été couplés grâce au logiciel OASIS3-MCT utilisé pour assembler tous les modèles de climat développés en Europe.

Une finesse d'analyse jamais atteinte

Une fois ce travail accompli, une série de simulations a pu être effectuée sur près de 10 000 cœurs de calcul de la machine Curie, pour des régions du Globe situées entre 45° de latitude sud et 45° de latitude nord, dans lesquelles la résolution spatiale a progressivement été augmentée jusqu'à ce qu'elle atteigne 9 km (voir ci-dessous). Une première mondiale ! Pour certaines simulations, notre équipe a choisi de représenter la totalité des régions en

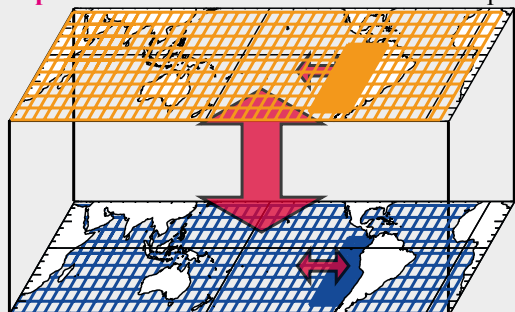
question à ce niveau de détail. Pour d'autres, seules les zones côtières clés à l'intérieur de ces régions (le Pacifique sud-est par exemple) ont été reproduites avec cette très grande résolution.

Les données issues de notre modèle (température, vents, courants, précipitations...) seront par la suite comparées aux mesures faites sur le terrain ou obtenues par satellite. On pourra alors quantifier précisément dans quelle mesure l'augmentation de la résolution spatiale du modèle a permis d'accroître sa précision. Il s'agira notamment de savoir s'il faut mener des simulations jusqu'à 9 km de résolution pour l'ensemble des régions étudiées ou si l'on peut se contenter de cette très grande précision uniquement pour les zones côtières sans trop altérer la précision du modèle. Si c'est le cas, cette approche novatrice permettra alors de gagner un précieux temps de calcul.

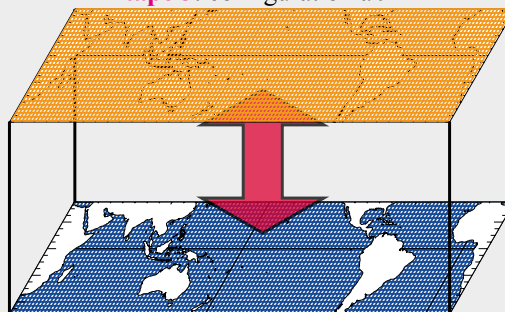
Mieux décrire la variabilité du climat

La finesse des phénomènes que nous avons réussi à reproduire grâce à ces premières simulations (voir sur ci-dessus à gauche les cyclones ou encore les structures au sein des amas de nuages au-dessus de l'Indonésie par exemple) dépasse de loin tout ce qui a été fait dans le domaine jusqu'à présent. Les simulations sur Curie constituent une étape cruciale pour notre projet, ne serait-ce que pour démontrer la faisabilité et la pertinence de ce type d'approche. Plus qu'un aboutissement, elles marquent le début d'un long travail d'analyse. Avec à la clé une meilleure description du climat et de sa variabilité. ■

Étape 2: zoom à 9km dans l'océan et l'atmosphère



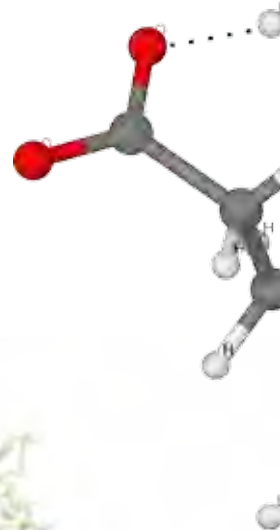
Étape 3: configuration à 9km



S. MASSON (LOCEAN-IPSL)

Les supercalculateurs décryptent la chimie du vivant

Pour mieux comprendre comment les pathologies telle que la maladie d'Alzheimer se déclenchent, les scientifiques modélisent les molécules du vivant impliquées dans le processus. La simulation numérique est devenue un passage obligé pour orienter la recherche vers les bons traitements thérapeutiques.



24

GRANDS DÉFIS

Au cœur des êtres vivants, les interactions entre les molécules – protéines, acides nucléiques, lipides, sucres... – assurent les fonctions vitales de l'organisme. Pour mieux comprendre les relations entre ces briques élémentaires du vivant, la simulation numérique est devenue un outil incontournable. Il s'agit pour les scientifiques de modéliser des systèmes comportant plusieurs milliers d'atomes, de prédire les forces qui s'établissent entre ces atomes – les interactions – et d'estimer avec précision leur comportement collectif. Au-delà de la compréhension fondamentale des phénomènes en jeu, la démarche est essentielle pour déterminer l'efficacité d'une molécule à visée thérapeutique. En effet, plus les interactions entre cette molécule et une biomolé-

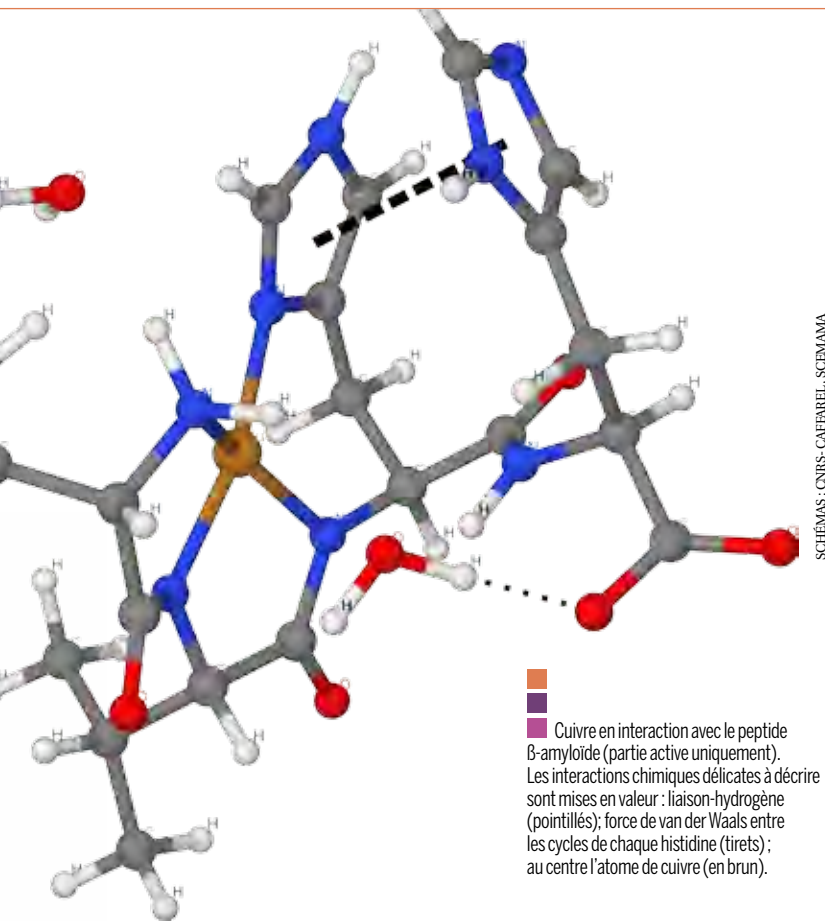


Représentation des trajectoires des électrons (points blancs et gris) obtenues par simulation QMC dans le peptide β -amyloïde (traits en couleurs) impliqué dans la maladie d'Alzheimer. L'analyse de la nature et de la fréquence des échanges électroniques entre atomes le long de ces trajectoires permet de déterminer les propriétés quantiques.

cule sont importantes et plus les chances de réparer la fonction défectueuse de cette biomolécule et donc d'aboutir à un médicament efficace sont grandes.

Pour simuler le comportement des biomolécules, les chercheurs utilisent des modèles basés sur les lois microscopiques de la mécanique quantique et les lois statistiques de la thermodyna-

mique. Au cœur de ces modèles, la partie délicate à décrire est la partie quantique. Les échanges d'électrons à l'origine des liaisons chimiques et des interactions se doivent d'être reproduits exactement en résolvant la célèbre équation de Schrödinger. Or, il s'agit d'une équation extrêmement difficile à résoudre car des milliers d'atomes, donc des mil-



SCHEMAS : CNRS-CAFFAREL, SCEMAMA

■ Cuivre en interaction avec le peptide β -amyloïde (partie active uniquement). Les interactions chimiques délicates à décrire sont mises en valeur : liaison-hydrogène (pointillés); force de van der Waals entre les cycles de chaque histidine (tirets); au centre l'atome de cuivre (en brun).

liers d'électrons, sont à prendre en compte. Disposer de méthodes de calcul quantique performantes est donc essentiel.

Trajectoires électroniques indépendantes

La méthode de référence en la matière a pris son essor dans les années 90 : la DFT (Density Functional Theory), ou théorie de la fonctionnelle de la densité, est une méthode qui exprime les propriétés chimiques des molécules en fonction de la densité des électrons. Bien que cette approche ne permette de résoudre l'équation de Schrödinger que de manière approchée, elle s'avère être un bon compromis entre rapidité de calcul et précision. Malheureusement, ce caractère approximatif est délicat à contrôler et peut conduire parfois à des prédictions qualitativement fausses.

C'est pourquoi le Laboratoire de chimie et physique quantiques de Toulouse participe depuis plusieurs années au développement d'une méthode de résolution alternative de l'équation de Schrödinger, dont l'objectif est d'être aussi facile à implémenter pour les systèmes complexes que la DFT mais mieux contrôlée et plus précise : une méthode baptisée Monte-Carlo quantique

(Quantum Monte-Carlo, ou QMC). Celle-ci propose de simuler le monde réel quantique où les électrons possèdent un caractère délocalisé*, par un monde fictif où les électrons suivent des trajectoires déterministes similaires à celles de la mécanique classique de Newton. Afin de rendre compte de la délocalisation quantique*, une composante aléatoire est ajoutée au mouvement des électrons. C'est ce caractère aléatoire qui donne son nom à la méthode Quantum Monte-Carlo : car pour chaque déplacement d'électron, on tire au sort un nombre au hasard comme à la roulette du célèbre casino monégasque. Une méthode relativement simple mais qui requiert un volume de calcul considérable pour faire avancer des milliards de fois les milliers d'électrons du système!

Cette tâche colossale nécessite des superordinateurs dotés d'une grande capacité de calcul. Actuellement, la puissance de ces machines repose sur l'utilisation d'un nombre toujours croissant de processeurs. Or, l'avantage de cette dynamique probabiliste basée sur des trajectoires électroniques aléatoires est qu'elle est massivement parallélisable : on peut déployer le calcul à effectuer sur un nombre de processeurs aussi

grand que l'on souhaite, chaque processeur travaillant indépendamment des autres. Pourquoi? Parce que la simulation peut être découpée à loisir en un ensemble de trajectoires électroniques indépendantes. Une propriété unique pour exploiter harmonieusement l'ensemble des processeurs et qui fait toute la force de cette méthode.

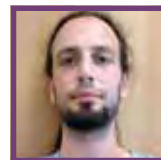
Au cœur de la chimie du vivant

En décembre 2011, cette approche a fait ses preuves sur la machine Curie de Genci, installée au Très grand centre de calcul du CEA, à Bruyères-le-Châtel (91). Au cours des simulations réalisées sur 80000 cœurs de calcul du supercalculateur, une première étude concernant la chimie de la maladie d'Alzheimer a pu être réalisée. On sait que cette maladie est associée à une dégénérescence du cerveau liée à l'apparition de plaques composées d'amas de molécules : les peptides amyloïdes bêta. Comprendre pourquoi et comment ces molécules s'agrègent, c'est ouvrir la voie à des traitements thérapeutiques pour atténuer voire stopper la maladie. Au cœur du phénomène, pensent bon nombre de scientifiques : les liaisons chimiques entre ces peptides et des atomes métalliques comme le cuivre, le zinc ou le fer. De l'analyse des trajectoires des électrons produites par les simulations, il va être possible de déduire la nature de ces liaisons et ainsi mieux comprendre comment la maladie se déclenche. Un vrai défi! Et surtout l'espoir de développer la recherche sur cette pathologie pour laquelle les essais cliniques sont très difficiles à réaliser.

Grâce aux supercalculateurs pétaflopiques comme Curie, il est désormais possible d'explorer avec la précision nécessaire les processus électroniques au cœur de la chimie du vivant. Même si beaucoup reste à faire, c'est un premier pas important. Les calculs requis sont encore très volumineux et donc difficiles d'accès. Mais avec l'arrivée des machines exaflopiques mille fois plus puissantes d'ici à 2020, on devrait pouvoir transformer ces techniques émergentes en un outil d'investigation du vivant accessible à la communauté scientifique la plus large. Pour que celle-ci trouve rapidement des traitements thérapeutiques contre les maladies, et notamment celle d'Alzheimer. ■



DR



DR

par MICHEL CAFFAREL et ANTHONY SCEMAMA,

du Laboratoire de chimie et physique quantiques de Toulouse



DÉLOCALISATION QUANTIQUE

Un atome est formé d'électrons gravitant autour du noyau. La mécanique quantique indique qu'il n'est pas possible de définir précisément la position des électrons, et la notion classique d'orbite n'a plus de sens. L'électron est délocalisé dans l'espace et il a simplement une certaine probabilité de se trouver à un endroit donné à un instant donné.

Limiter les polluants des réacteurs en modélisant la combustion

Si l'on veut réduire de façon drastique les polluants émis par les avions, il est indispensable de comprendre les phénomènes physiques liés à la combustion au sein même des réacteurs.

26

GRANDS DÉFIS

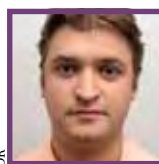
La réduction des émissions de polluants est devenue une priorité dans l'aéronautique. En Europe, les constructeurs de moteurs d'avion et d'hélicoptère se sont ainsi engagés à respecter d'ici à 2020 les normes fixées par le Conseil consultatif pour la recherche aéronautique en Europe (Acare). Dans ce cadre, un avion construit en 2020 devra par exemple émettre 80 % d'oxydes d'azote de moins qu'un appareil de 2000. Et ses émissions de CO₂ devront être réduites de 50 %.

La clé pour atteindre ces objectifs ambitieux? Améliorer la chambre de combustion, située au cœur même des moteurs. Dans ces machines tournantes de la famille des turbines à gaz, l'air extérieur est comprimé dans un premier étage, puis mélangé

avec du carburant pour être brûlé dans la chambre de combustion, avant la phase de détente à travers les turbines. La chambre de combustion joue un rôle capital car elle doit brûler de manière la plus complète et la plus propre possible la totalité du mélange air-carburant. C'est donc de ses performances que dépend la quantité de polluants émise dans l'atmosphère.

Raffiner le maillage

Or, concevoir une chambre de combustion performante est un réel défi technologique et scientifique tant les phénomènes qui s'y produisent sont complexes et multiples : injection et atomisation du carburant liquide sous forme de fines gouttelettes, évaporation du carburant liquide en carburant gazeux, mélange



par VINCENT MOUREAU

chercheur au Complexe de recherche interprofessionnel en aérothermochimie (Coria) de Rouen. Prix Bull - Joseph-Fourier 2010.

turbulent du carburant évaporé et de l'air, combustion du mélange en régime partiellement prémélangé ou non prémélangé*, échanges thermiques avec les parois, formation de multiples polluants tels que les suies, les oxydes d'azote et les hydrocarbures imbrûlés... Sans oublier que la combustion se produit dans des conditions extrêmes, à forte température et à forte pression pour avoir le meilleur rendement thermodynamique possible.

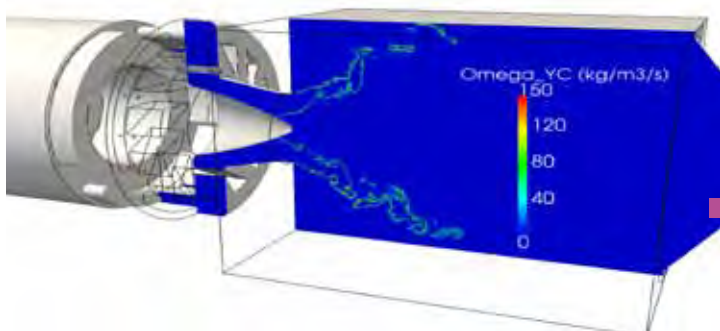
Pour mieux comprendre tous ces phénomènes physiques et ainsi dimensionner de la meilleure façon les chambres de combustion, la modélisation numérique est devenue un passage obligé. Il s'agit là de résoudre par ordinateur les équations de Navier-Stokes, qui gouvernent l'écoulement des fluides turbulents et réactifs. On a alors accès aux champs de température, de vitesse et, avec des modèles appropriés, aux émissions de polluants. Pour réaliser ces simulations, il est nécessaire de diviser la chambre de combustion en un grand nombre d'éléments géométriques élémentaires, des tétraèdres par exemple. L'ensemble de ces éléments est appelé le maillage. Comme en photographie, où plus le nombre de pixels est élevé et meilleure est la résolution de l'image, plus le nombre d'éléments du maillage est important et meilleure est la précision du modèle. En contrepartie, plus le maillage est dense et plus la puissance de calcul nécessaire va en augmentant.

Au Coria, pour décrire le plus finement possible la combustion, des simulations dites massivement parallèles du phénomène ont été menées sur les superordinateurs nationaux exploités par Genci, dont le supercalcul-

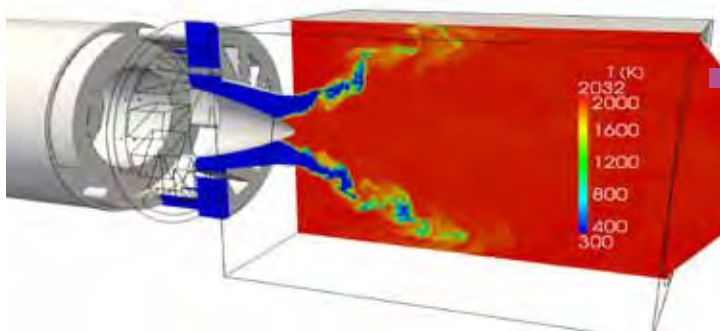


LE RÉGIME PARTIELLEMENT PRÉMÉLANGÉ

correspond à un régime où l'air et le carburant se mélangent partiellement avant de brûler. En régime non-prémélangé, l'air et le carburant arrivent dans la zone de combustion de manière séparée.

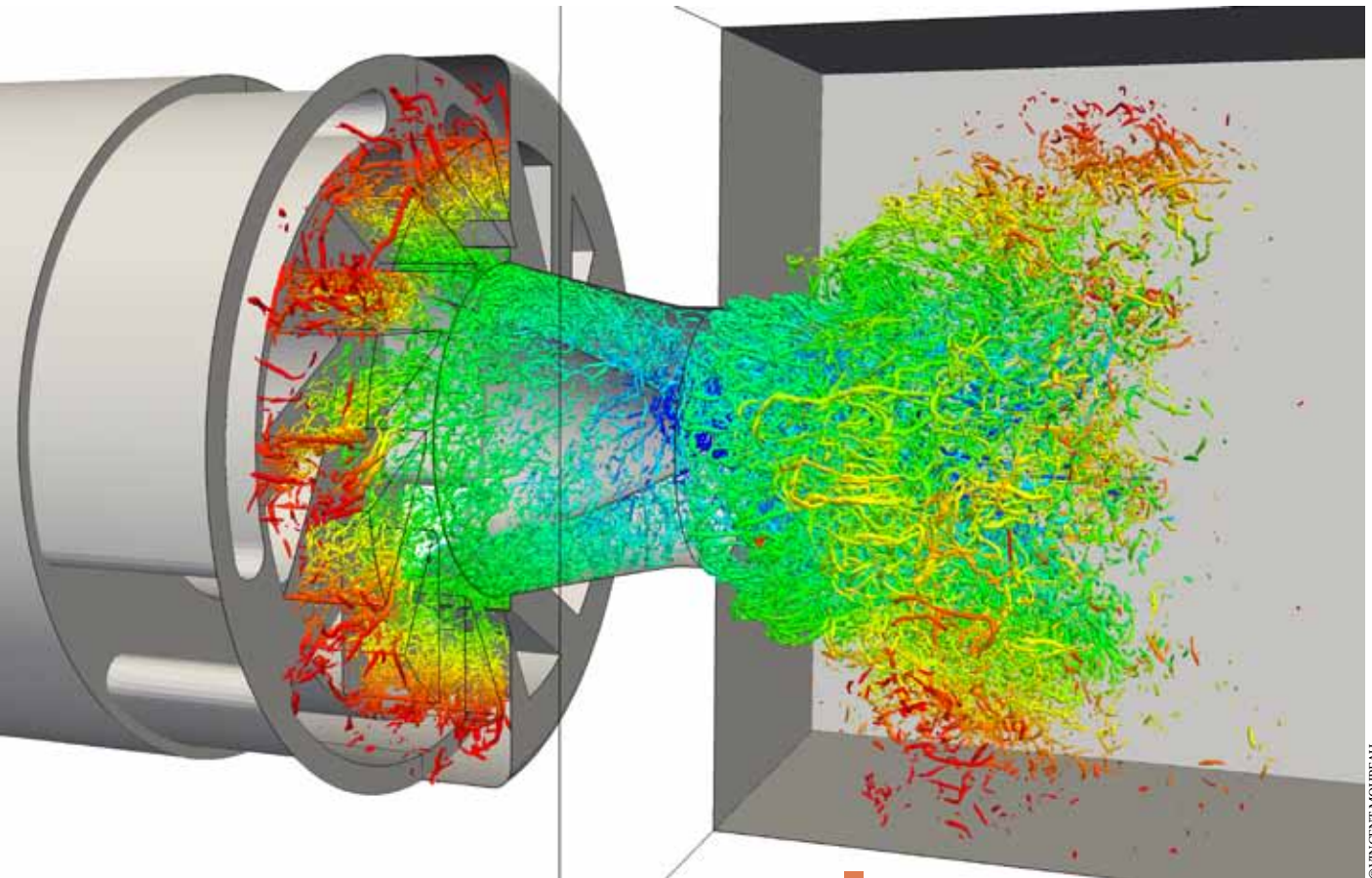


Visualisation des zones où l'air et le méthane prémélangés brûlent dans une chambre de combustion aéronautique.



Visualisation du champ de température dans une chambre de combustion aéronautique. La température atteint au maximum 2032 Kelvin dans les gaz brûlés, soit 1759° Celsius.

© VINCENT MOUREAU



© VINCENT MOUREAU

Visualisation des plus petits tourbillons turbulents résolus dans les simulations. L'intensité de la turbulence joue un rôle primordial dans la dynamique de la flamme.

détail les effets de mélange de l'air et du carburant sur la flamme, est toujours en cours d'exploitation et devrait bientôt conduire à la conception de nouveaux modèles de combustion. Ces modèles, ajoutés aux méthodes de calcul et aux outils de simulation développés par les chercheurs, intéressent évidemment de près les motoristes de l'aéronautique. Ces derniers comptent rapidement les utiliser non seulement pour atteindre leurs objectifs de réduction des émissions de polluants. Mais également pour accélérer les cycles de développement de nouveaux moteurs. ■

lateur Curie, installé au Très grand centre de calcul du CEA, à Bruyères-le-Châtel (Essonne), et européens dans le cadre du programme Prace. Chaque simulation a nécessité de l'ordre de 10 000 à 30 000 cœurs de calcul, soit l'équivalent de plusieurs milliers d'ordinateurs de bureau, et a duré une vingtaine d'heures. Ces simulations ont ensuite été ajoutées les unes aux autres pour atteindre des temps physiques simulés suffisamment longs.

Modéliser les chambres de combustion

Pour exploiter au mieux une telle puissance de calcul, le Coria a développé un outil de simulation de haute performance : le logiciel Yales 2. Cet outil, utilisé actuellement par une soixantaine de chercheurs dans huit laboratoires français, leur a permis de modéliser des chambres de combustion de géométrie complexe sur un grand nombre de processeurs.

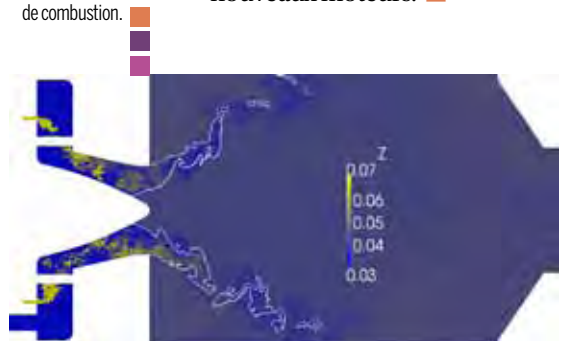
Concrètement, le Coria a cherché à simuler avec une très grande précision la combustion turbulente partiellement prémé-

langée au sein d'une chambre de combustion modèle, conçue par la société Turbomeca du groupe Safran, le leader mondial des turbines pour hélicoptères. Ce dispositif semi-industriel a été l'objet de nombreuses études expérimentales et numériques dans différents projets européens. Les données recueillies par les chercheurs au cours des tests sont primordiales pour la validation des simulations numériques.

Grâce au logiciel Yales 2, le Coria est parvenu à reproduire la chambre de combustion avec une résolution spatiale encore jamais atteinte dans le domaine : 60 microns pour une chambre de combustion qui mesure 11 cm de hauteur. Au total, cette simulation aura nécessité un impressionnant maillage composé de 12,4 milliards d'éléments géométriques. Ce degré de précision a permis de visualiser les plus petits tourbillons qui apparaissent dans l'écoulement turbulent et la façon dont ils interagissent avec la flamme.

Cette base de données incroyablement riche, qui décrit en

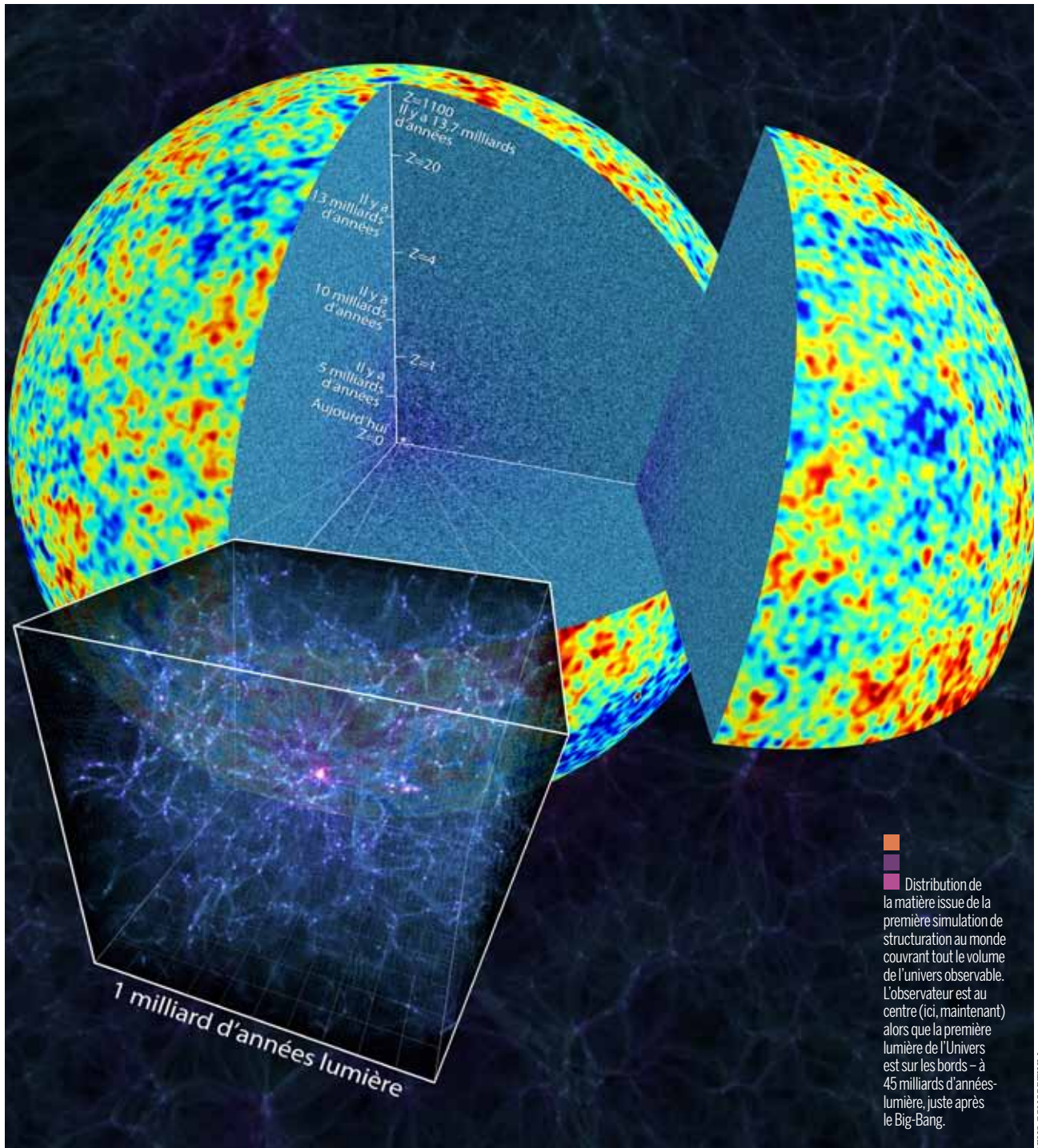
Visualisation du mélange turbulent entre l'air et le méthane au centre de la chambre de combustion.



© VINCENT MOUREAU

Simuler l'Univers pour percer la nature de l'énergie noire

Sous l'influence d'une mystérieuse force, baptisée énergie noire, l'Univers voit son expansion s'accélérer. Pour tenter de comprendre la nature de cette énergie, les astrophysiciens se sont lancés dans un projet titanesque : simuler la façon dont les galaxies s'organisent dans l'univers observable tout entier, et ce depuis sa naissance.



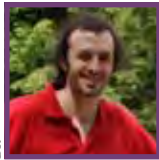
Depuis l'observation de la fuite des galaxies par Edwin Hubble, en 1929, et son interprétation dans le cadre de la relativité générale, la théorie actuelle de la gravité, on sait que l'Univers est en expansion : les galaxies s'éloignent toutes les unes des autres. En effectuant des mesures plus précises encore, grâce aux supernovae*, les astronomes Saul Perlmutter, Brian Schmidt et Adam Riess, récompensés par le prix Nobel de physique en 2011, ont découvert en 1998 que l'expansion allait en s'accélération. Ce fut une formidable surprise : la force de gravité qui attire les différents constituants de l'Univers devrait en effet, tel un élastique, ralentir cette expansion.

Leur découverte semblait donc remettre en question nos connaissances sur la nature profonde des lois physiques qui gouvernent l'Univers. Pour l'expliquer, certains n'ont pas hésité à faire appel à une composante mystérieuse, baptisée énergie noire, qui emplit tout le cosmos et agit comme une force répulsive. À l'heure actuelle, différents modèles d'énergie noire s'affrontent, sans qu'on puisse trancher entre eux.

Pour départager ces modèles, il faut comprendre très finement l'influence de telle ou telle théorie sur les propriétés de l'Univers et les confronter aux observations. Et pour mieux contraindre l'énergie noire, il faut en étudier l'influence à toutes les échelles. Car contrairement à ce qu'on pourrait penser, l'énergie noire n'agit pas uniquement à de très grandes distances cosmologiques mais ses effets se ressentent également sur les propriétés même d'une galaxie.

Une sphère de 90 milliards d'années-lumière

Plus facile à dire qu'à faire lorsqu'on sait que l'univers observable est une sphère de 90 milliards d'années-lumière* de diamètre ! En effet, plus on observe loin dans l'Univers, plus on observe loin dans le passé, car la lumière met du temps à nous parvenir. Et dans notre univers né au moment du Big Bang, il y a 13,7 milliards d'années, la lumière parcourt une distance plus grande que



DR



DR

par
**YANN
RASERA et
JEAN-MICHEL
ALIMI**

astrophysiciens
au Laboratoire univers
et théories à Paris.

13,7 milliards d'années-lumière pour arriver jusqu'à nous, du fait de l'expansion de l'Univers au cours de son trajet.

Seule solution pour les astrophysiciens : simuler une série d'univers suivant différents modèles d'énergie noire et comparer les paramètres (distribution de matière, nombre de galaxies, etc.) qui divergent de l'un à l'autre. C'est précisément l'objectif de notre projet baptisé Deus (Dark Energy Universe Simulation). Son ambition ? Simuler l'univers observable tout entier, soit cette sphère de 90 milliards d'années-lumière de diamètre. Pour cela, il faut reproduire la formation des grandes structures de l'Univers à partir de ses « particules » de base : les galaxies. Ce qui revient à calculer l'évolution de pas moins de 550 milliards de ces particules ! Et requiert un superordinateur doté d'une mémoire de 300 000 gigaoctets et d'une puissance de calcul permettant de réaliser plus de 1 million de milliards d'opérations par seconde.

Trois modèles d'énergie noire

Début 2012, après des développements de plusieurs années, nous y sommes parvenus : grâce au supercalculateur Curie, l'équipe composée de six chercheurs¹ a réalisé les premières simulations au monde de la structuration de tout l'univers observable, du Big Bang jusqu'à aujourd'hui. Ces simulations donnent le tournis : elles ont nécessité l'utilisation pendant plusieurs semaines de 80 000 cœurs de calcul du supercalculateur de Genci, installé au Très grand centre de calcul du CEA, à Bruyères-le-Châtel (Essonne). Un tel calcul aurait duré plus de 3 000 ans sur un ordinateur de bureau. Et le volume de données stocké a atteint plus de 1 million de gigaoctets, soit l'équivalent de 200 000 DVD.

Trois simulations différentes qui correspondent à trois modèles d'énergie noire différents ont été réalisées. Le premier est le scénario standard, dit de « constante cosmologique », accepté par une majorité de physiciens. Il fait l'hypothèse que la quantité d'énergie noire, dans un volume d'espace donné, reste constante malgré l'expansion de l'Univers – qui tend à tout diluer. Dans les deux autres

scénarios, au contraire, la quantité d'énergie noire varie quand l'Univers se dilate, le dernier modèle allant même jusqu'à mimer une modification des lois de la gravité aux grandes échelles.

Le mystère de l'accélération de l'expansion

Grâce à ces simulations, on peut rejouer le film de la formation de tous les amas de galaxies de l'Univers, les plus grosses structures liées par la gravitation connues actuellement. Pour chacun de ces amas, l'histoire est différente mais la trame du film reste la même : de petites fluctuations de densité dans la soupe primordiale issue du Big Bang sont amplifiées par la gravité, pour former les premières galaxies, puis ces galaxies fusionnent pour donner des structures de plus en plus grosses jusqu'aux amas de galaxies.

Les simulations ont déjà livré leurs premiers résultats. Ainsi, nous avons pu mesurer le nombre d'amas de galaxies présents dans l'Univers actuel : il s'élève à plus de 100 millions. Mais seul un amas sur deux cents est suffisamment proche pour être observable. Pour les autres, on ne peut observer que les temps reculés où ils n'étaient encore qu'à l'état d'embryon d'amas. Autres enseignements : le premier amas de ce type est apparu alors que l'Univers n'avait que deux milliards d'années ; l'amas le plus massif pèse 10 millions de milliards de masses solaires.

Selon le modèle d'énergie noire utilisé, le nombre d'amas et leur masse varient. En confrontant ainsi les résultats de nos simulations aux différents paramètres qui seront mesurés par les futurs grands projets d'observation et de cartographie de l'Univers – comme la prochaine mission Euclid qui vient d'être sélectionnée par l'Agence spatiale européenne –, on pourra alors mieux comprendre la nature de l'énergie noire. Et arbitrer entre les différents scénarios. Le mystère de l'accélération de l'expansion de l'univers, l'une des plus grandes questions de la science, pourrait alors être percé. ■

(1) Alimi, Rasera, Bouillot, Reverdy, Corasaniti, Balmès (www.deus-consortium.org)



SUPERNOVA

Une supernova désigne l'explosion d'une étoile très massive qui peut, pendant un temps, briller plus qu'une galaxie entière et ses milliards d'étoiles.

ANNÉE-LUMIÈRE

Une année-lumière correspond à la distance parcourue par la lumière en une année, soit environ 9500 milliards de kilomètres.

Tsunamis : les supercalculateurs donnent l'alerte

La France vient de se doter d'un Centre d'alerte aux tsunamis (Cenalt) pour la Méditerranée occidentale. Sa mission : prévenir les autorités de l'arrivée imminente de vagues générées par un séisme sous-marin. La simulation permet d'indiquer en temps réel les zones à risque. Avec les supercalculateurs, les hauteurs d'eau pourraient même être estimées avec précision dans un proche avenir.

Les tsunamis de Sumatra en 2004 et du Japon en 2011 ont presque fait oublier que les pays côtiers de la Méditerranée – notamment la France – sont eux aussi exposés à ces vagues dévastatrices. Dans cette région en effet, même si les tsunamis sont plus modérés que dans le Pacifique, la rencontre entre les deux grandes plaques continentales, africaine et eurasienne, peut générer des séismes qui, à leur tour, peuvent produire des tsunamis. Ce fut le cas en 1908 lorsqu'un séisme de magnitude 7,1 dans le détroit de Messine, au large de la Sicile, engendra un tsunami qui fit de très nombreuses victimes dans la région. Ou plus récemment, en 2003, lorsqu'un tremblement de terre de magnitude 6,9 à Boumerdès en Algérie provoqua des vagues de deux mètres aux Baléares ainsi que des remous et des tourbillons brutaux dans plusieurs ports de la Côte d'Azur.

Pour faire face à ce risque, la France vient de se doter du Centre d'alerte aux tsunamis (Cenalt). Opérationnel depuis juillet dernier, le Cenalt, exploité par le CEA à Bruyères-le-Châtel (Essonne), surveille une zone s'étendant de l'Atlantique nord-est à la Méditerranée occidentale. Sa mission : signaler toute alerte aux autorités françaises et aux pays de la région concernée. Et ce, dans un délai très court car, vu la taille relativement modeste du bassin méditerranéen, le temps séparant la survenue d'un séisme et l'arrivée du tsunami sur les côtes est de quelques dizaines de minutes seulement.

Lorsqu'un séisme est détecté, les chercheurs analysent sa magnitude, sa localisation géographique et sa profondeur sous le plancher océanique pour évaluer s'il est susceptible de conduire à la formation d'un tsunami et de quelle amplitude. Un tableau, obtenu à partir des précédents événements observés en Méditerranée, répertorie les combinaisons possibles de ces trois paramètres et permet ainsi de lancer un premier message d'alerte au tsunami en moins de 15 minutes, selon trois niveaux : jaune pour un risque négligeable, orange pour un risque modéré et rouge pour un risque élevé. Si la magnitude du séisme dépasse un certain seuil, les heures d'arrivée du tsunami sont calculées et ajoutées au message.

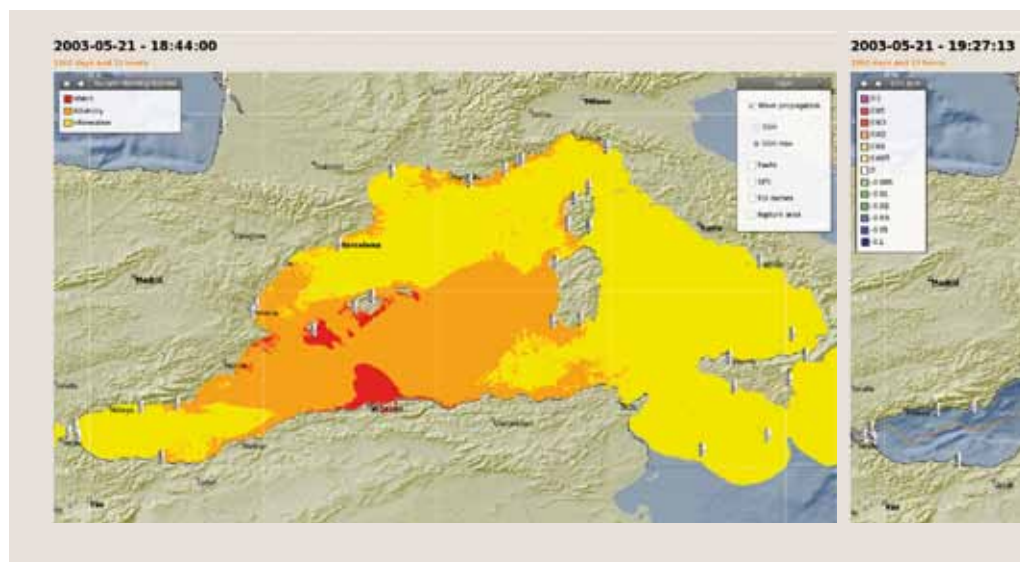
par **AUDREY GAILLER, SÉBASTIEN ALLGEYER, PIERRE DUPERRAY et HÉLÈNE HÉBERT**

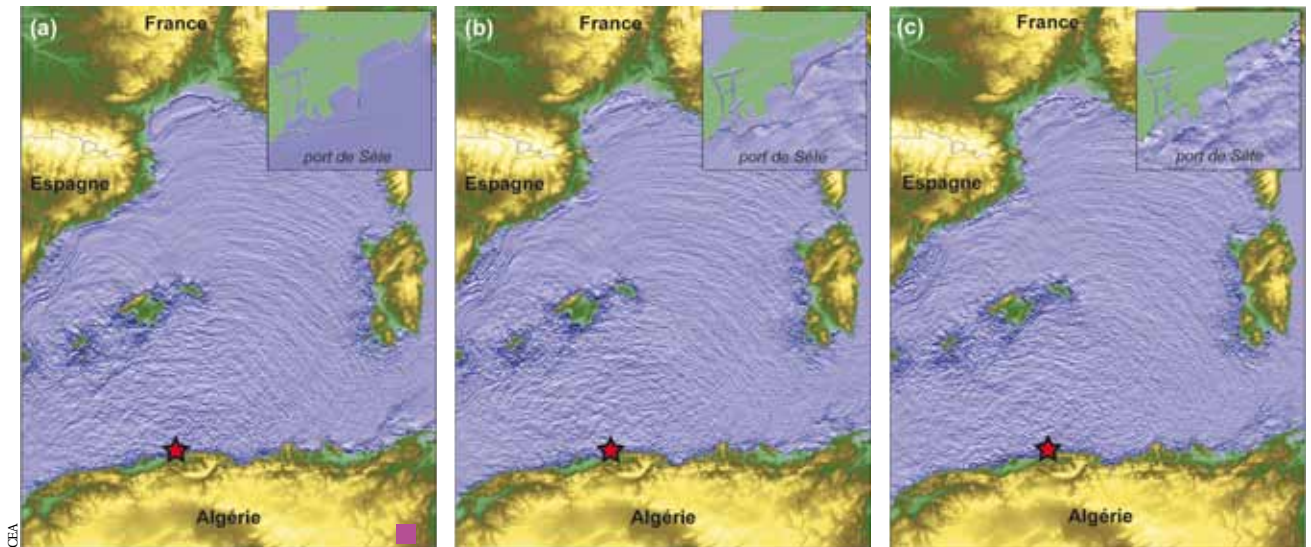
du département Analyse Surveillance Environnement du CEA/DAM.

Plus précise, la simulation numérique des tsunamis vient renforcer l'estimation du risque et fournit une carte nettement plus détaillée de l'impact attendu de la vague sur les côtes. Jusqu'à récemment, cette approche demandait un temps de calcul prohibitif pour une utilisation en temps réel. La parallélisation du code sur les calculateurs haute performance ouvre désormais de nouvelles perspectives.

Bathymétrie et topographie

Les simulations numériques des tsunamis reposent sur la modélisation de trois phénomènes : les déformations du plancher océanique causées par le séisme, la propagation en océan profond et les effets côtiers. La déformation initiale de la surface de l'océan est déduite de modèles





CEA

élastiques de déformation de la croûte terrestre. La propagation au large, quant à elle, repose sur la résolution des équations non linéaires de la mécanique des fluides dans l'hypothèse des «ondes longues». En effet, les longueurs d'onde des tsunamis (de 100 à 300 km) sont largement supérieures à la profondeur du milieu de propagation (de 4 à 6 km). Enfin, la simulation des effets du tsunami à l'approche des côtes n'est possible que si des données bathymétriques (profondeurs marines) et topographiques de haute résolution sont disponibles. L'acuité de la représentation des processus physiques tels que l'inondation, les tourbillons ou encore l'amplification par résonance dans un port dépend de la résolution des grilles de calcul.

Modèle du tsunami de 2003 lors de son arrivée dans le port de Sète (en encart), après 2 h (a), 2 h 10 mn (b) et 2 h 20 mn (c) de propagation depuis l'épicentre (étoile rouge), avec le logiciel Calypso multigrille.

Simulation du tsunami lié au séisme de Boumerdes (2003 - logiciel Calypso) dans le cadre du Cenalt (monogrille). À gauche, modèle du risque à l'échelle du bassin transposé dans un code couleur sans dimension rouge/orange/jaune, signifiant risque élevé/modéré/négligeable. À droite, propagation du tsunami 43 mn après le séisme.



CEA

Au Cenalt, le logiciel baptisé Calypso est utilisé pour modéliser la propagation d'un tsunami. Il requiert une puissance de calcul importante pour une estimation rapide des risques, laquelle pourrait être intégrée dans le futur aux messages d'alerte. C'est pourquoi ce code a été parallélisé sur les cœurs de calcul d'un ordinateur du CEA, nommé Para, et installé au Cenalt.

Une version multigrille

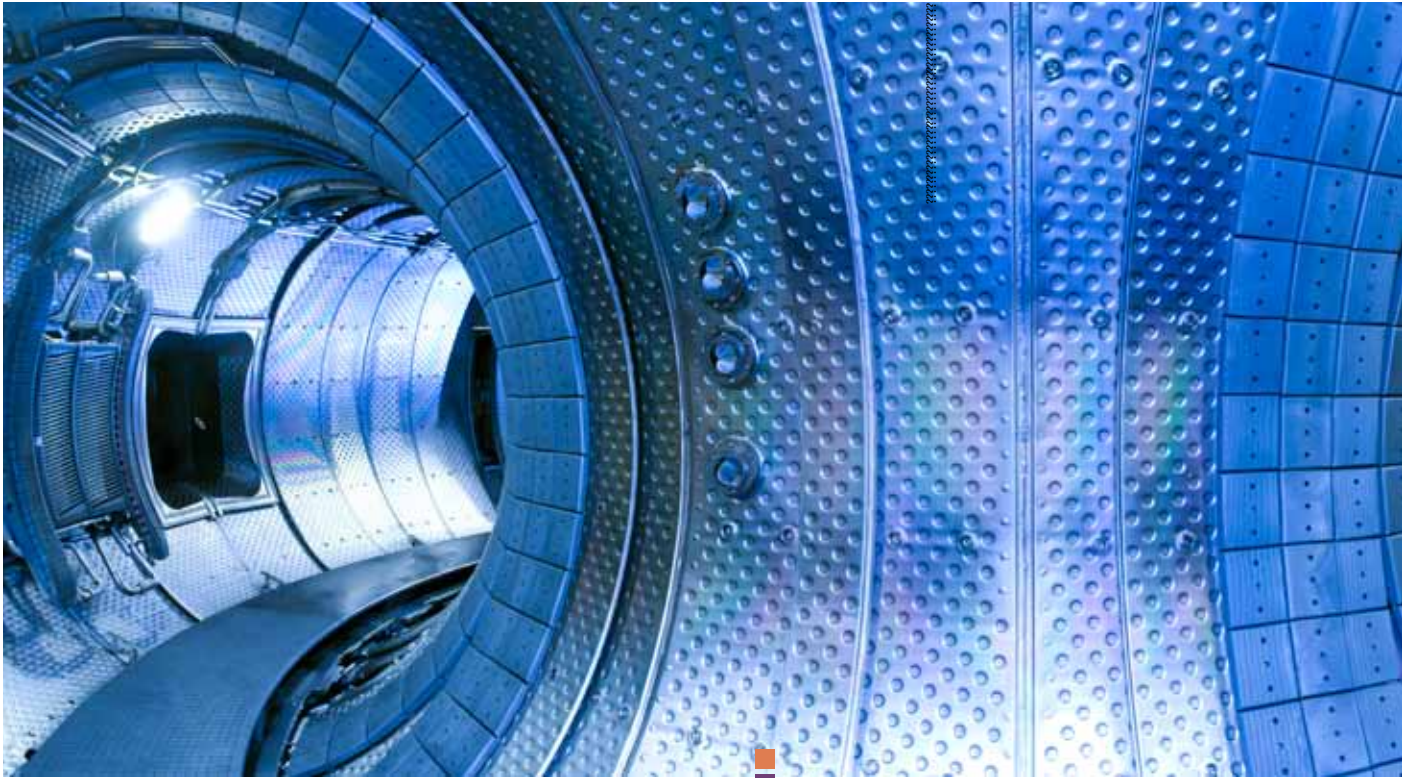
En cas d'alerte, Calypso est lancé automatiquement dans une version dite monogrille qui fait appel à 12 cœurs de calcul de Para. Nous accédons alors à une description de la bathymétrie avec une résolution spatiale de 4 kilomètres pour la totalité du bassin méditerranéen occidental. Les calculs donnent une estimation du rayonnement de l'énergie du tsunami à travers l'océan, indiquant ainsi les zones à risque. La simulation d'un tsunami qui met trois heures à se propager dans la réalité est effectuée en cinq minutes seulement (*voir ci-contre*). Contrepartie de cette rapidité de calcul : on ne peut pas estimer les valeurs des hauteurs d'eau attendues sur les côtes, car la résolution utilisée n'est pas suffisante.

Mais Calypso peut également être utilisé dans une seconde version, dite multigrille, qui permet alors de prévoir en détail les inondations dans les ports. Comment? En imbriquant des grilles bathymétriques de résolution croissante. Le tsunami de

2003 a pu ainsi être reproduit sur 21 grilles différentes, avec une résolution allant de 900 mètres pour la grille principale couvrant la Méditerranée occidentale, à des résolutions de trois mètres pour les grilles fines des ports ciblés par l'étude (Palma, Cannes et Sète). Les résultats de ces simulations (*voir ci-dessus*) sont en très bon accord avec la réalité : le tsunami atteint le port de Sète environ deux heures après le séisme et les hauteurs d'eau associées sont de 20 centimètres environ, soit celles mesurées par les marégraphes.

Pouvoir avertir à temps

Cette finesse de détails a cependant un impact sur le temps de calcul, et ce malgré la parallélisation du code : pour quatre heures de propagation du tsunami, la simulation est réalisée en une heure en utilisant 64 cœurs de Para. On comprend alors pourquoi cette version multigrille est utilisée actuellement uniquement dans un but de recherche. D'autant plus qu'elle nécessite une connaissance très précise de la bathymétrie et de la topographie des zones côtières, des données qui ne sont pas toujours disponibles. Mais les choses devraient bientôt changer : en améliorant la parallélisation du code pour réduire le temps de calcul et en disposant de plus de données sur le terrain, la simulation fine pourrait alors être intégrée au message d'alerte. Pour que les populations soient averties au plus vite de l'arrivée du tsunami. ■



Vue de l'intérieur du tokamak Tore Supra de l'IRFM. On distingue une antenne de chauffage (à gauche) et le limiteur plancher toroïdal.

La fusion bientôt sous contrôle

La fusion nucléaire pourrait constituer une source d'énergie majeure dans le futur. Mais pour enclencher la réaction au sein d'un réacteur, l'un des enjeux majeurs sera de confiner la chaleur dégagée par le phénomène bien au centre de la machine. Des simulations numériques permettent de faire un pas important dans cette direction.

En 2019, la construction du réacteur expérimental Iter devrait s'achever à Cadarache (13) dans le sud-est de la France. Objectif de cet ambitieux projet international auquel collaborent sept des plus grandes puissances mondiales : démontrer la viabilité de la fusion nucléaire comme source d'énergie du futur.

La réaction de fusion consiste à fabriquer à partir de deux noyaux légers un noyau atomique plus lourd. Cette réaction, qui dégage une énergie gigantesque, permet aux étoiles de briller. Dans le cas d'Iter, il s'agira de faire

fusionner de manière contrôlée des atomes de deutérium et de tritium, pour obtenir des atomes d'hélium. Mais les noyaux, ayant une charge électrique de même signe se repoussent à grande distance l'un l'autre. Pour que la fusion puisse se produire, il faut vaincre cette répulsion. Un moyen d'y parvenir consiste à chauffer les particules à des températures extrêmes, de plus de cent millions de degrés, pour qu'elles se rapprochent suffisamment près grâce à l'agitation thermique. À de telles températures, la matière est alors sous la forme d'un plasma*.

par **YANICK SARAZIN** et **VIRGINIE GRANDGIRARD**

chercheurs à l'Institut de recherche sur la fusion par confinement magnétique (IRFM) du CEA à Cadarache (CEA/DSM/IRFM) - Saint-Paul-Lès-Durance (Bouches-du-Rhône).

et **ANTOINE STRUGAREK**

doctorant à l'IRFM et chercheur au laboratoire d'Astrophysique, instrumentation et modélisation, à Gif-sur-Yvette (Essonne).

Avec Iter, les physiciens disposeront d'un anneau de plasma de 840 mètres cubes, dix fois plus volumineux que celui obtenu dans les plus grandes machines du même type, appelées tokamaks*. Il s'agira alors de porter son cœur à quelque 150 millions de degrés pour y déclencher les réactions de fusion thermonucléaire. L'un des enjeux de cette expérience sera de montrer qu'il est possible de réduire les échanges de chaleur entre le cœur où brûlera le combustible et les bords froids du plasma, et ainsi de limiter les pertes. Des échanges dus, pour l'essentiel, à de minuscules tourbillons turbulents de taille centimétrique qui se forment dans le plasma. Parvenir à réguler cette turbulence apparaît dès lors capital si l'on veut confiner la chaleur au sein du réacteur.

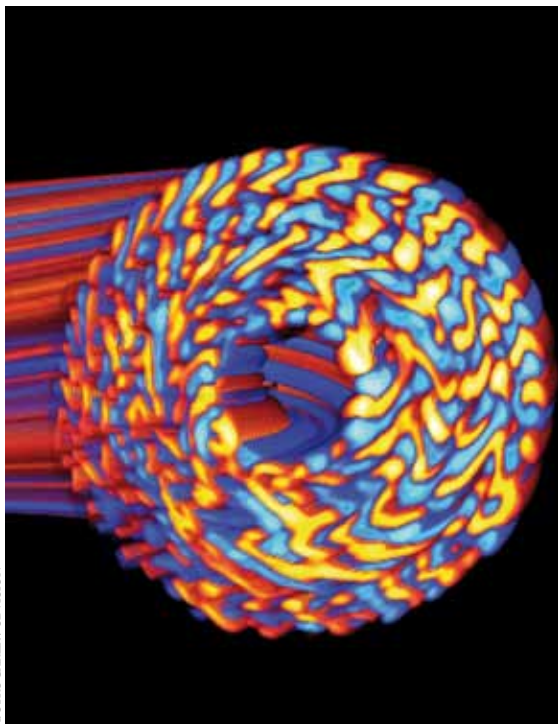
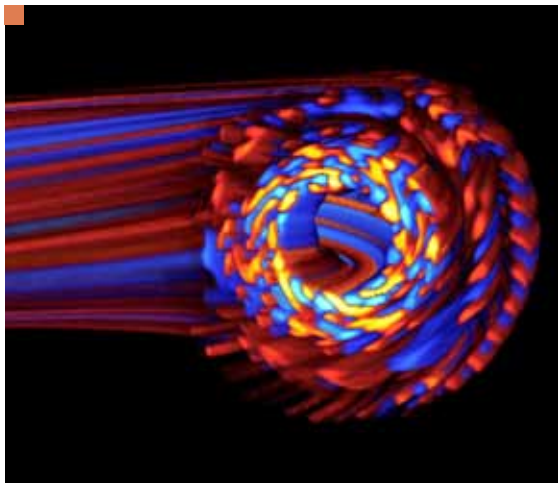
Désordre organisé

Expérimentalement, les scientifiques ont constaté par le passé qu'en chauffant davantage le plasma dans les tokamaks, la turbulence naturellement présente pouvait être brutalement réduite. Mais ce phénomène reste encore très mal compris et pas du tout maîtrisé. Il serait dû à la nature même de la turbulence qui, en dépit de son désordre apparent, présente une certaine organisation. En interagissant les uns avec



CEA

Cartes instantanées des structures turbulentes dans un plasma. Ces tourbillons s'étirent le long des lignes de champ magnétique, visualisées grâce au potentiel électrique en couleurs. Pendant des temps extrêmement courts, la turbulence connaît de brusques sursauts d'activité. Les tourbillons microscopiques, qui étaient jusque-là localisés au cœur du plasma (ci-contre), se propagent vers les bords (ci-dessous).



A. STROGAREK / SDVISION

les autres, les petits tourbillons seraient en effet capables de générer des écoulements de matière à grande échelle dans l'anneau de plasma. En retour, ces écoulements auraient pour effet de cisailer les tourbillons qui leur ont donné naissance, réduisant du même coup leur taille et diminuant d'autant les pertes de chaleur du cœur vers la périphérie.

Jusqu'à aujourd'hui, aucune modélisation numérique ab-initio – c'est-à-dire sans paramètre ajustable, s'appuyant uniquement sur les lois fondamentales de la physique – n'était parvenue à reproduire le phénomène pour tenter de mieux le comprendre. C'est ce qui vient d'être accompli. Pour la première fois, les simulations réalisées sur Curie décrivent en détail la dynamique des tourbillons turbulents et confirment la possibilité de contrôler la turbulence via les écoulements dans le plasma.

Pour réaliser cette grande première, le code de calcul Gysela a été développé en partenariat avec Inria et dans le cadre de la Fédération de recherche sur la fusion par confinement magnétique. Ce code utilise une description dite gyrocinétique de la turbulence dans les plasmas de fusion. À chaque pas de temps – de l'ordre du centième de microseconde –, il a fallu calculer la position et la vitesse de toutes les particules du

plasma, sur chacun des 34 milliards de points de maillage. Avec Gysela, il a été possible de modéliser les échanges à l'intérieur d'un plasma de la taille de Tore Supra, le tokamak français de l'Institut de recherche sur la fusion par confinement magnétique du CEA, à Cadarache (13). Il s'agissait de reproduire dans un premier temps le phénomène sur un tokamak de taille moyenne avant de pouvoir extrapoler les résultats sur un réacteur aussi grand qu'Iter.

Des étoiles sur Terre

Plusieurs millions d'heures de calcul ont permis de simuler quelques millisecondes des interactions entre les particules dans un plasma. Ces quelques millisecondes, courtes à notre échelle, sont cependant très longues devant le temps d'évolution des fluctuations turbulentes. Cela a permis de mettre en évidence des processus physiques extrêmement riches. Non seulement il a été montré comment la turbulence pouvait être régulée par les écoulements à grande échelle, mais également de découvrir un autre phénomène inattendu : pendant des temps extrêmement courts, de l'ordre de quelques centaines de microsecondes, la turbulence connaît de brusques sursauts d'activité. Les tourbillons microscopiques, qui étaient



PLASMA

Gaz constitué d'électrons et d'ions – atomes ayant perdu un ou plusieurs électrons. Sa température varie de quelques dizaines de degrés à plusieurs centaines de millions de degrés, et sa densité peut être 1 million de fois plus faible à 1 million de fois plus forte que celle de l'air.

TOKAMAK

Enceinte en forme de tore capable de confiner un plasma à l'aide de champs magnétiques intenses et ainsi de créer les conditions nécessaires aux réactions de fusion.

jusque-là localisés au cœur du plasma, se propagent vers les bords. Un fort flux de chaleur est alors expulsé du cœur vers la périphérie.

La compréhension physique apportée par ces simulations constitue un premier pas important pour améliorer les performances d'Iter. Grâce à elles, on devrait bientôt mettre au point des stratégies efficaces pour contrôler les écoulements à grande échelle dans le plasma. On pourra alors confiner la chaleur bien au centre du réacteur de fusion et éviter les « débordements » de plasma vers les parois, un phénomène qui, à la longue, endommage les parois du réacteur. Pour que les étoiles brillent sur Terre. ■



Dans les coulisses des logiciels de demain

Dans la course à l'exaflops, le logiciel occupera une place primordiale. Tel un chef d'orchestre, sa mission sera de faire travailler de concert les millions de constituants élémentaires des machines de demain. Visite au laboratoire Exascale Computing Research, à l'université de Versailles-Saint-Quentin-en-Yvelines, où l'on prépare les logiciels du futur.

Dans une grande salle aménagée en open space et percée de larges fenêtres, des chercheurs regardent avec attention des lignes de code défilier sur leur écran d'ordinateur. Au fond de la pièce, sur un tableau blanc, des diagrammes sibyllins dessinés aux feutres multicolores attirent l'attention. Pour le néophyte, le laboratoire Exascale Computing Research (ECR), situé sur le campus de l'université de Versailles, a quelque chose d'énigmatique. Ici se joue pourtant l'avenir du calcul intensif.

Dans cette unité de recherche née, il y a deux ans seulement, de la collaboration entre le CEA, Genci, l'université de Versailles-Saint-Quentin-en-Yvelines et Intel, on réfléchit en effet aux logiciels du futur qui permettront aux superordinateurs exaflopiques de fonctionner sans accroc. Vu la complexité de telles machines, le logiciel tiendra une place primordiale. «*Actuellement, les supercalculateurs petaflopiques comportent des centaines de milliers de cœurs de calcul*, explique Marie-Christine Sawley, directrice du laboratoire

côté Intel. *Pour atteindre l'exaflops* d'ici à 2020, il faudra faire travailler ensemble des millions de ces unités situées au sein des microprocesseurs. Une telle montée en puissance nécessite de revoir de fond en comble les algorithmes de calcul.*»

Le codesign comme approche

Pour préparer cette petite révolution conceptuelle, les informaticiens et autres mathématiciens du laboratoire versaillais travaillent main dans la main avec des scientifiques venus de tous horizons – chimistes, physiciens,



OTHMAN BOUIZI, INTEL EXASCALE LAB

Les chercheurs du laboratoire versaillais Exascale Computing Research (ECR) réfléchissent aux logiciels qui équiperont les futurs supercalculateurs exaflopiques. Vu la complexité de telles machines, les algorithmes de calcul tiendront une place primordiale.

grand centre de calcul du CEA, à Bruyères-le-Châtel (Essonne), préfigure ce que seront les machines exaflopiques. « Avec ce dispositif "miniature", nous pouvons ainsi tester à petite échelle comment la machine se comporte avec tel ou tel algorithme de calcul, poursuit la chercheuse. C'est un passage obligé si l'on veut ensuite faire fonctionner ces applications sur un superordinateur tout entier. » Et pour contrôler que le logiciel utilise bien l'ordinateur au maximum de sa capacité, les chercheurs versaillais ont développé des outils informatiques qui, tels de véritables mouchards, traquent le moindre calcul inutile dans un algorithme. « Les codes de calcul, qui sont généralement longs et complexes, sont d'abord découpés en petits morceaux, explique William Jalby, directeur scientifique du laboratoire. Nos outils permettent de révéler des failles dans ces codes et de les corriger. On fait ensuite fonctionner le logiciel modifié sur l'ordinateur jusqu'à gagner en performance. »

Des machines tout terrain

Or dans cette course à la puissance, il faut trouver un équilibre subtil entre les contraintes imposées par le matériel et celles dictées par les logiciels. Un travail de longue haleine. « Pour un même logiciel, nous testons différentes architectures de processeurs, souligne ainsi Bettina Kramer. Car si la tendance générale est à la multiplication des cœurs de calcul, l'architecture définitive n'est pas encore arrêtée. » Ainsi la multidisciplinarité du laboratoire ECR trouve tout son intérêt. « En collaborant avec les scientifiques qui développent les codes de calcul et en utilisant les outils du laboratoire, nous avons pu constituer une grande bibliothèque de logiciels qui nous a permis d'identifier les facteurs clés de leur performance », poursuit Marc Dollfus.

Ces indications sont précieuses pour les concepteurs des superordinateurs qui tentent actuellement de trouver l'architecture et l'optimisation idéale pour les ordinateurs exaflopiques. « Notre objectif n'est pas de créer des machines ultraspécialisées mais des machines tout terrain, adaptées à une large palette d'applications, comme le souhaitent les scientifiques et les industriels qui les utilisent », résume ainsi Marc Dollfus. ■ **Pierre Mira**

climatologues – qui mettent au point les logiciels de simulation. « Ils viennent avec leurs codes de calcul et nous avec notre connaissance fine des architectures matérielles dont seront constitués les futurs superordinateurs, explique Marc Dollfus, responsable de la collaboration entre les membres du laboratoire. L'enjeu consiste à trouver ensemble les solutions qui seront adaptées aux applications logicielles et aux machines. On parle de codesign pour qualifier cette approche où tous les acteurs travaillent de concert. Concrètement, il s'agira d'abord de paralléliser à l'extrême les calculs, c'est-à-dire de les diviser en un très grand nombre de sous-calculs exécutés par les cœurs des processeurs. Il faudra répartir les tâches équitablement entre les cœurs pour permettre aux machines d'être performantes, en limitant au maximum le mouvement des données, ce processus consommant énormément d'énergie électrique. »

L'ampleur de la tâche est immense, mais le jeu en vaut la chandelle. Car une fois les logiciels fin prêts pour le passage à l'exaflops, ils permettront de réduire considérablement le temps

de calcul et d'améliorer d'un facteur 100 la précision des modèles numériques. Les sociétés pharmaceutiques devraient ainsi identifier des molécules actives bien plus vite qu'aujourd'hui et donc réduire le temps de développement d'un médicament. En médecine, en simulant au plus juste le parcours dans l'organisme des rayons utilisés pour le traitement du cancer, on devrait être capable de cibler précisément la tumeur avec une grande précision. En météorologie enfin, en diminuant la taille des plus petites cellules de l'atmosphère simulées, on devrait augmenter la précision des prévisions. Et les autres exemples sont nombreux.

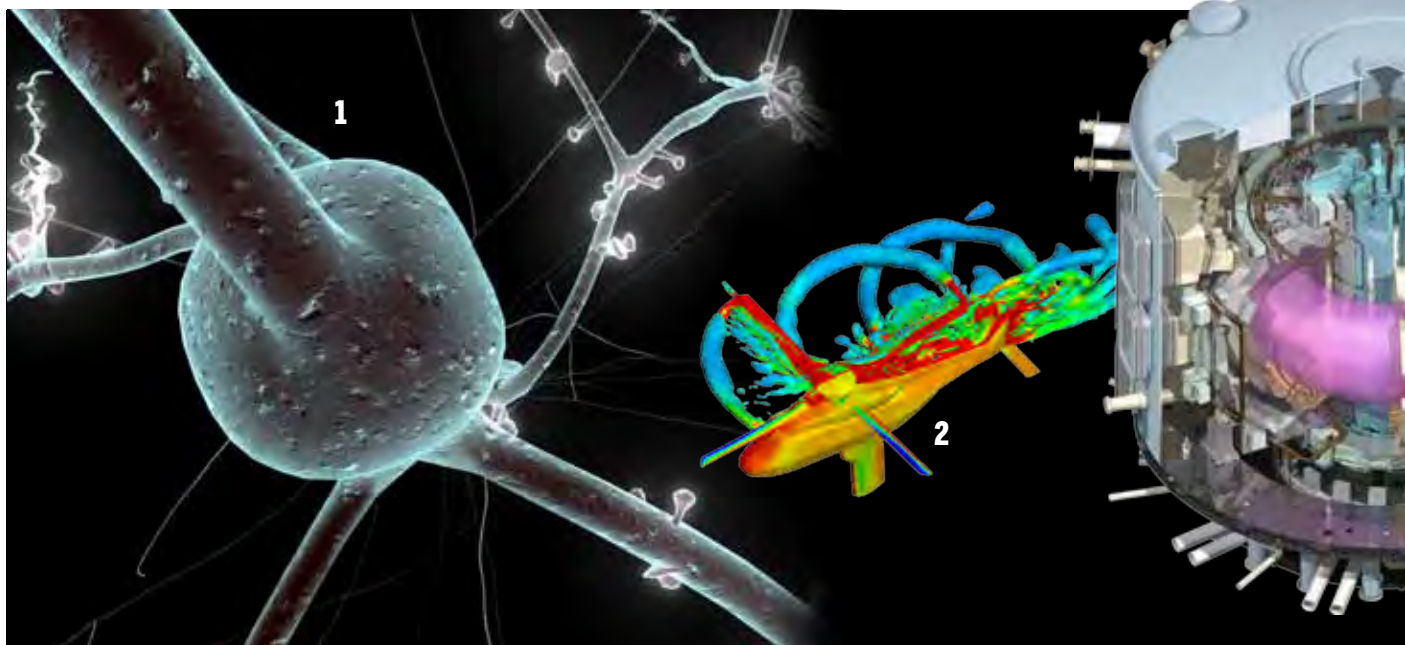
La chasse aux calculs inutiles

La visite de l'Exascale Computing Research se poursuit au fond d'un couloir étroit. Ici, une porte fermée à clé intrigue. « Derrière, dans une pièce climatisée, se trouvent des armoires informatiques similaires à celles qu'on trouve sur le supercalculateur Curie », confie Bettina Kramer, chercheur à l'ECR. Constitué de plus de 92 000 cœurs de calcul, Curie, installé au Très



EXAFLOPS

Le flops (Floating point Operations Per Second) est l'unité de mesure de la puissance des ordinateurs en nombre d'opérations par seconde : un téraflops en effectue mille milliards (10^{12}), un petaflops un million de milliards (10^{15}) et un exaflops un milliard de milliards (10^{18}) par seconde.



Comment l'exaflops va changer notre vie

D'ici à 2020, les supercalculateurs exaflopiques devraient faire leur apparition. Mille fois plus puissants que les machines actuelles, ils permettront alors de résoudre une multitude de problèmes touchant de près la société. De la médecine à la climatologie en passant par les transports, tous les domaines de la vie sont concernés.

Sans que nous nous en rendions compte, le calcul intensif fait partie de notre vie quotidienne. Il est présent partout : dans nos voitures, qu'il aide à rendre plus sûres, dans les bulletins météo, qu'il rend plus fiables, ou encore dans les hôpitaux, où il permet d'obtenir des résultats d'imagerie plus rapidement. Et le futur s'annonce plus excitant encore : d'ici à la fin de la décennie, les supercalculateurs exaflopiques – c'est-à-dire capables d'effectuer un milliard de milliards d'opérations par seconde – devraient faire leur apparition. Dotés d'une puissance de calcul mille fois supérieure à celle des machines actuelles, «*Ils permettront de résoudre une multitude de problèmes touchant de près la société et aujourd'hui inaccessibles*», s'enthousiasme Jean-Yves Berthou, directeur du département Sciences et tech-

nologies de l'information et de la communication à l'Agence nationale de la recherche. Celui-ci a coordonné de 2010 à 2012 le projet européen EESI (European Exascale Software Initiative) dont un des objectifs était précisément de déterminer les grandes applications qui tireront parti du passage à l'exaflops.

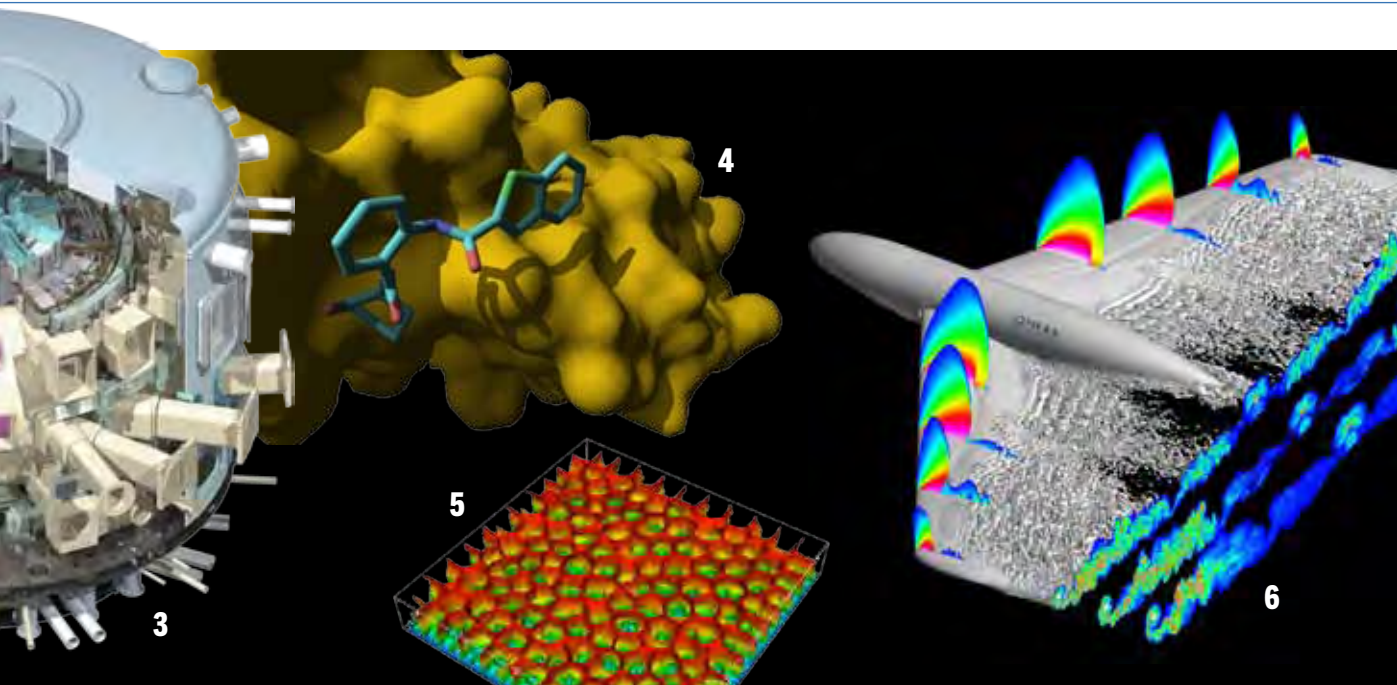
Domaine emblématique où les futurs supercalculateurs permettront de faire des pas de géant : les simulations du climat. Actuellement, les modèles disposent d'une résolution spatiale d'environ 100 km. D'ici à 2020, grâce aux machines exaflopiques, cette précision commencera à se rapprocher du kilomètre. Les phénomènes atmosphériques et océaniques même les plus petits, comme la formation de certains nuages pourront alors être reproduits fidèlement. Les simulations intégreront des processus complexes

comme le cycle complet du carbone sur la Terre. Rendus ainsi plus réalistes, les modèles fourniront des scénarios plus fiables sur le changement climatique à venir, à l'échelle de toute la Planète comme à celle d'une région. Des données extrêmement précieuses pour l'agriculture ou encore la production d'énergie.

Simuler notre propre cerveau !

Dans le domaine de la santé aussi, la puissance des calculateurs du futur permettra de gagner en réalisme. On pourra par exemple simuler dans le détail le fonctionnement des membranes des cellules vivantes pour mieux comprendre comment les médicaments pénètrent dans la cellule et agissent. Et en modélisant plus finement le fonctionnement des molécules impliquées dans certaines maladies pour lesquelles les essais cliniques sont très difficiles à réaliser – notamment le cancer et les maladies neurodégénératives comme Alzheimer ou Parkinson –, il sera possible de mettre au point de nouveaux médicaments bien plus vite.

En réalité, c'est l'ensemble du corps humain avec tous ses organes qui pourra être reproduit à un niveau de détail inégalé. Le cœur, par exemple, avec ses différentes structures (artères, veines, ventricules...) et même le cerveau. «*Du fait du nombre gigantesque de ses constituants* [on estime que le cerveau humain contient cent milliards de



1. BILLIE BRAUN/IBMP; 2 ET 6. ONRA/THE FRENCH AEROSPACE LAB; 3. ITIBR ORGANIZATION; 4 ET 5. GINCI

neurons, ndlr], la modélisation complète de notre cerveau est hors de portée des calculateurs actuels, il faudra attendre les machines exaflopiques pour tenter d'y parvenir», note Jean-Yves Berthou. C'est d'ailleurs l'objectif affiché par le projet européen Human Brain, qui pourrait aboutir d'ici à dix ans. Cette simulation hors du commun permettrait de répondre à de nombreuses questions sur le fonctionnement du cerveau et notamment sur la cause des troubles neurologiques, ouvrant ainsi de nouvelles voies thérapeutiques.

Les moyens de transport bénéficieront eux aussi du passage à l'exaflops. À commencer par les avions. «L'Europe s'est fixée des objectifs ambitieux de faire baisser de moitié les émissions de CO₂ des appareils et de réduire leur bruit d'au moins 10 décibels, précise Jean-Yves Berthou. Pour y parvenir, les essais physiques réels ne suffiront pas; nous n'aurons pas d'autre choix que de faire appel aux machines exaflopiques.» Contrairement à la modélisation du climat ou du cerveau humain, qui nécessiteront de mobiliser la totalité de la puissance de calcul des machines exaflopiques pour chaque simulation, il s'agira cette fois de lancer plusieurs milliers de simulations en même temps sur la même machine. Et chacune d'entre elles requerra la puissance de calcul d'un calculateur petaflopique actuel tout entier! On pourra ainsi explorer toutes les formes aérodyna-

■ Dans quelques années, avec l'arrivée de nouveaux supercalculateurs mille fois plus puissants, les simulations numériques deviendront bien plus réalistes dans tous les domaines. On pourra modéliser le cerveau humain avec son réseau complexe de neurones (1), simuler l'aérodynamique d'un hélicoptère dans ses moindres détails (2), reproduire les phénomènes complexes qui auront lieu dans les futurs réacteurs de fusion nucléaire tels l'ITER (3), simuler le fonctionnement des molécules impliquées dans certaines maladies pour mettre au point des médicaments plus rapidement (4), mesurer l'usure des matériaux très finement pour les rendre plus résistants (5), ou explorer toutes les formes aérodynamiques possibles d'ailes d'avion, les comparer et choisir la plus efficace et la plus sûre (6).

miques possibles et imaginables d'ailes d'avion, les comparer entre elles pour choisir la plus efficace et la plus sûre. Même chose pour les réacteurs où il faudra simuler toutes sortes de configurations de combustion du carburant pour trouver la moins polluante d'entre elles.

Vers la fusion nucléaire ?

En matière d'énergie, les supercalculateurs du futur seront également d'une aide précieuse. Pour la découverte de nouveaux réservoirs de pétrole tout d'abord. La méthode de prospection consiste à générer des ondes sismiques dans le sous-sol au moyen d'explosifs. En étudiant les ondes renvoyées par les roches profondes, on peut déduire la nature de ces dernières et déterminer si elles contiennent du pétrole. L'analyse de ces signaux est si lourde à réaliser qu'on a aujourd'hui recours à la simulation numérique. Mais même avec cette approche, il arrive souvent de conclure à tort à la présence d'un puits et le taux de succès d'un forage n'est «que» de 60%. Avec les calculateurs exaflopiques, il devrait largement augmenter.

Grâce à l'exaflops, de nouvelles énergies pourront voir le jour. À commencer par la fusion nucléaire, source d'énergie extrêmement prometteuse car potentiellement beaucoup plus propre et plus sûre que sa cousine la fission. Mais les défis à relever pour mettre au point des réacteurs à

fusion sont tels qu'il faudra simuler en détails leur fonctionnement avant même de les construire.

Les superordinateurs de demain ne brilleront pas seulement par leur puissance de calcul : ils seront également capables de gérer et de traiter de gigantesques quantités de données. Ce sera le cas en météorologie, où les progrès réalisés en matière de capteurs des satellites font que ces derniers devraient renvoyer d'ici à une dizaine d'années mille fois plus de données qu'aujourd'hui. Une fois intégrées dans les modèles météorologiques, toutes ces mesures devraient permettre d'obtenir des prévisions à court terme plus justes. Dans le domaine de la santé, le développement de la médecine dite personnalisée devrait aussi conduire à une véritable avalanche de données. Cette démarche révolutionnaire vise à rechercher le meilleur traitement thérapeutique d'un patient en fonction de son patrimoine génétique. Avec elle, il serait possible de développer des médicaments adaptés à chaque malade et sans effets secondaires. «Des essais sont en cours dans cette direction qui font appel à des machines petaflopiques pour traiter les données de quelques centaines d'individus seulement, confie Jean-Yves Berthou. Avec l'exaflops, on pourrait cette fois s'occuper de millions de patients.» Bref, les supercalculateurs n'ont pas fini de changer notre quotidien. ■

Pierre Mira



Cinq défis pour les supercalculateurs du futur

L'accroissement de la puissance des supercalculateurs passe par un changement complet de leur architecture interne. Meilleure efficacité énergétique, nouveaux processeurs, refroidissement, interconnexions plus rapides, résistance aux pannes... Toutes les pistes sont explorées pour atteindre l'exaflops d'ici à 2020.

Depuis vingt ans, la puissance de calcul des superordinateurs n'a cessé d'augmenter. Ainsi, entre les machines apparues dans les années 1990 et celles d'aujourd'hui, la performance a été multipliée par 1 million ! En 2008, au moment où le premier supercalculateur a atteint la barre symbolique du petaflops, soit 1 million de milliards d'opérations par seconde, les acteurs du domaine, extrapolant cette tendance constante à la hausse, se sont fixés comme objectif de passer à l'exaflops, soit 1 milliard de milliards d'opérations

par seconde, c'est-à-dire mille fois mieux, d'ici à 2020. Mais pour atteindre cet objectif ambitieux, les supercalculateurs de demain ne pourront pas être une simple évolution des machines actuelles ; ils devront incorporer de nouvelles approches révolutionnaires. Ce sont tous les aspects de leur architecture – consommation d'énergie, microprocesseurs, refroidissement, réseau d'interconnexion entre les composants et tolérance aux pannes – qu'il faut revoir de A à Z. Tour d'horizon des cinq défis technologiques à relever pour y arriver.

par
JEAN-PIERRE PANZIERA,
directeur technique
du Calcul haute
performance chez Bull.

1/ Maîtriser la consommation d'énergie

La maîtrise de la consommation d'énergie est le principal chantier sur lequel il faut travailler. La voracité énergétique des machines est devenue le frein majeur au développement de supercalculateurs plus puissants. Les besoins en électricité des supercalculateurs s'élèvent aujourd'hui à plus de 10 mégawatts pour les plus gourmands, soit la puissance nécessaire pour alimenter en électricité (hors chauffage) environ 30 000 foyers ! Avec un coût d'environ 1 million d'euros par an pour chaque mégawatt consommé, la facture d'électricité représente ainsi jusqu'à 30 % du coût de fonctionnement d'un centre de calcul. Dans le futur, les infrastructures qui accueilleront les supercalculateurs exaflopiques ne pourront pas payer davantage, d'autant qu'elles seront soumises à certaines normes environnementales : les machines devront donc consommer la même énergie, soit 10 mégawatts. Actuellement, l'efficacité énergétique des ordinateurs les plus puissants – dotés d'une puissance de 10 petaflops – est d'environ un gigaflops par watt (10 petaflops rapportés à 10 mégawatts). En 2020, la performance par watt des machines exaflopiques devra passer à



Le supercalculateur Curie du Genci (Grand équipement national de calcul intensif) affiche une puissance de 2 petaflops. Conçu par Bull, il est installé au TGCC (Très grand centre de calcul) de Bruyères-le-Châtel (Essonne).



GPU
De l'anglais Graphics Processing Unit. Un processeur graphique est un circuit intégré présent sur une carte graphique assurant les fonctions de calcul d'affichage.

REGISTRES
Les registres sont les blocs de mémoire directement intégrés dans le processeur. De taille réduite, ils contiennent des données appelées à être utilisées immédiatement.

«Aubrey Isle» est le prototype des processeurs MIC (Many Integrated Cores) d'Intel. Cette puce regroupe plusieurs dizaines de cœurs indépendants fonctionnant en parallèle.

100 gigaflops par watt. Pourra-t-on multiplier la puissance des supercalculateurs actuels par 100 tout en améliorant leur efficacité énergétique du même facteur ? Pour relever ce défi, les chercheurs explorent de nombreuses pistes, à commencer par la mise au point de microprocesseurs et de mémoires plus économes en énergie.

2/ Mettre au point de nouveaux microprocesseurs

Pour réaliser des milliards d'opérations par seconde, les supercalculateurs ont besoin de toujours plus de processeurs qui contiennent d'innombrables transistors ayant, chacun, besoin de courant électrique pour s'ouvrir ou se fermer à chaque cycle d'opérations. Il leur faut une quantité d'énergie phénoménale : les processeurs représentent ainsi la part la plus importante (70%) de la consommation des supercalculateurs. L'un des challenges pour passer à l'exaflops sera donc de développer de nouveaux processeurs plus économes en énergie. Jusqu'au milieu des années 2000, les industriels qui fabriquaient ces composants ont réussi à augmenter les vitesses de travail des transistors tout en limitant le voltage des puces. Mais actuel-

lement, la vitesse ne pouvant plus augmenter, les progrès en miniaturisation ont été mis au service du parallélisme. Chaque microprocesseur contient désormais plusieurs cœurs – jusqu'à huit – qui sont des unités de traitement capables de travailler de manière autonome et en parallèle. La puissance des supercalculateurs actuels repose ainsi sur le travail simultané de plusieurs centaines de milliers de cœurs. Pour les machines exaflopiques, ce seront plusieurs millions de cœurs. Cette prolifération des cœurs permet d'améliorer l'efficacité énergétique en diminuant le voltage des puces.

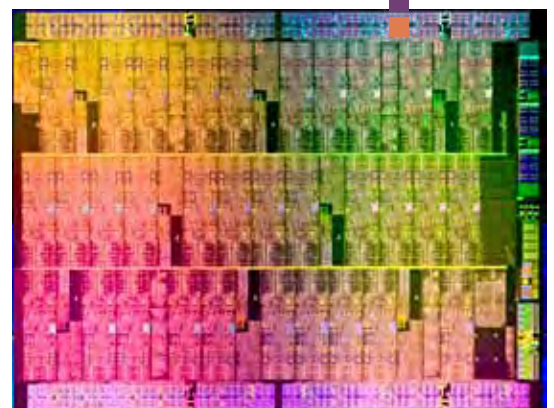
Malheureusement, cela ne suffira pas : l'évolution de ces processeurs dits généralistes (ou CPU pour Central Processing Unit), dont les performances doublent tous les ans, sera en effet trop lente pour aboutir rapidement aux 100 gigaflops par watt tant recherchés. Il faudra donc développer de nouveaux processeurs optimisés pour le calcul.

Deux grandes tendances s'affrontent. Certains privilégient l'utilisation des processeurs graphiques (GPU*), qui servent normalement au rendu réaliste des jeux vidéo. La puissance de ces processeurs repose sur l'utilisation de plusieurs centaines de cœurs de calcul organisés selon

une architecture simplifiée, l'architecture SIMD (pour Single Instruction Multiple Data), où toutes les unités exécutent en parallèle une même tâche mais sur des données différentes.

D'autres misent plutôt sur le parallélisme d'un grand nombre de cœurs généralistes – une centaine par processeur – dont les performances seront boostées par l'ajout d'unités dites vectorielles qui opèrent sur des registres* de 512 bits au lieu de 64 habituellement. On réalise ainsi huit fois plus de calculs par cycle. Cette nouvelle architecture proposée par Intel a été baptisée MIC (Many Integrated Cores).

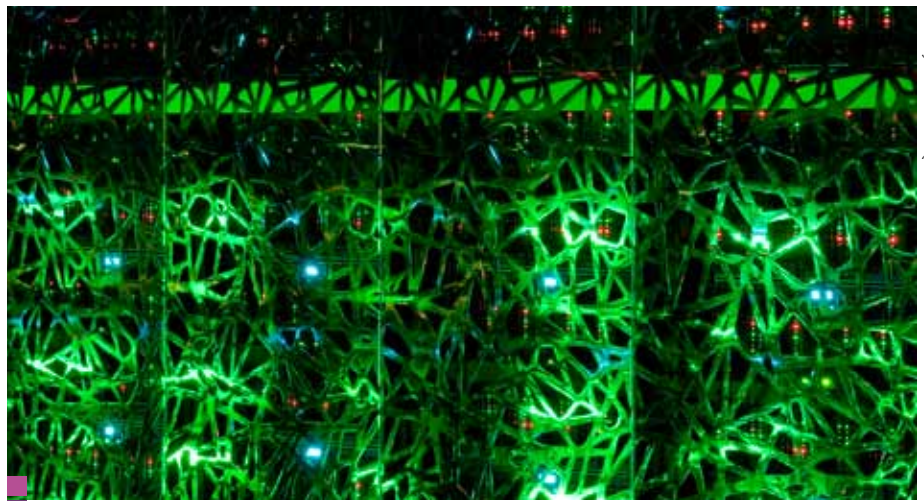
Les GPU ou les MIC jouent ainsi le rôle d'accélérateur de calcul dans certaines applications et permettent d'améliorer



l'efficacité énergétique. Dans les deux cas, on pourrait atteindre une performance extrêmement prometteuse de 4 gigaflops par watt. Revers de la médaille : ces deux types de processeurs restent difficiles à bien utiliser car ils nécessitent de fréquents échanges avec les CPU pour accéder aux données en mémoire. Pour qu'ils deviennent les moteurs de l'exaflops, il faudra en faire des processeurs indépendants, ce qui nécessitera de revoir en profondeur les logiciels de calcul.

3/ Améliorer le refroidissement

L'énergie électrique consommée par un ordinateur est transformée en grande partie en chaleur – effet Joule –, ce qui nécessite, pour le bon fonctionnement de la machine, l'installation de systèmes de refroidissement également gourmands en énergie. Ces derniers peuvent faire augmenter la facture d'électricité de 50 à 75%. Les concepteurs multiplient donc les innovations pour concevoir des systèmes plus efficaces. Il y a peu de temps encore, les systèmes d'air conditionné de certains centres nécessitaient



CNRS PHOTO THÉRIE / CYRIL FRÉSILLON

Logés dans des armoires, les nœuds du supercalculateur Curie, véritables briques de base de la machine composées de plusieurs microprocesseurs, sont interconnectés les uns aux autres par un réseau de communication haut débit. Dans le futur, il faudra accélérer encore davantage le transport des données.

Le serveur DLC (Direct Liquid Cooling) de Bull est refroidi par de l'eau circulant dans des plaques directement en contact avec les composants des cartes électroniques.



BULL

autant d'énergie que le fonctionnement du ordinateur proprement dit. Pour faire mieux, on équipe désormais les portes des armoires qui contiennent les grappes de processeurs de circuit d'eau froide, mais cela nécessite toujours 40% d'électricité en plus de celle dédiée au ordinateur lui-même. Et pour aller plus loin, on fait circuler de l'eau dans des plaques directement en contact avec les composants des cartes électroniques sans même avoir besoin de la refroidir. Cette technique de refroidissement, dite passive, est pratiquement « gratuite », la seule énergie nécessaire étant celle consommée par les pompes pour faire circuler l'eau. C'est le cas des nouveaux serveurs de Bull, baptisés bullx DLC (Direct Liquid Cooling). Qui plus est, comme le refroidissement liquide direct permet d'absorber bien plus de calories qu'un refroidissement par air, on peut rapprocher les composants entre eux sans risque de surchauffe, et ainsi réduire le temps de communication entre eux et donc améliorer la performance du ordinateur.

4/ Accélérer le transport des données

L'épine dorsale d'un supercalculateur est son réseau de communication qui interconnecte des milliers de nœuds, un nœud étant la brique de base d'un superordinateur, et qui consiste en un assemblage de plusieurs microprocesseurs. Pour les machines exaflopiques, il faudra cette fois relier entre eux dix fois plus de nœuds. Pour être efficace à cette échelle-là, les communications s'exécuteront de façon complètement autonome sans faire inter-

venir les cœurs des processeurs qui seront uniquement dédiés aux calculs. On tente ainsi de développer de nouvelles architectures de réseaux d'interconnexions intimement intégrés aux nœuds de calcul.

Par ailleurs, les liaisons entre les composants devront être plus rapides. Actuellement, le déplacement des données entre les processeurs atteint environ 15 gigabits par seconde. En 2020, il devra passer à 50 gigabits par seconde. Pour atteindre cet objectif, il faudra abandonner les câbles traditionnels en cuivre pour des liaisons optiques.

5/ Éviter à tout prix les pannes

Sur les supercalculateurs actuels, on observe en moyenne une fois par jour une défaillance d'un de ses composants (processeurs, mémoire, lien réseau, alimentation...) sans toutefois que cela n'interrompe les opérations, du fait de la forte redondance des systèmes. Or, la fréquence des pannes augmente avec le nombre de composants d'un système. On estime ainsi que les machines exaflopiques, qui contiendront plusieurs millions de cœurs de calcul, seront sujettes à une panne par heure! Pour surmonter ce risque, les logiciels devront sauvegarder régulièrement les données nécessaires à la reprise et la continuation des calculs. L'architecture des futurs calculateurs incorporera un système hiérarchique de sauvegarde afin de pouvoir redémarrer rapidement l'application sur le reste du système, en utilisant éventuellement des composants de remplacement. ■

«L'innovation est la clé pour atteindre l'exaflops»

Alan Gara dirige la recherche d'Intel sur les futurs calculateurs exaflopiques. Le scientifique américain a été le concepteur des supercalculateurs Blue Gene d'IBM, qui figurent aujourd'hui parmi les machines les plus puissantes du monde. Il nous éclaire sur les défis qu'il faudra relever pour passer à l'exaflops et dévoile ce à quoi pourraient ressembler les supercalculateurs de demain.



Alan Gara est à la tête de la recherche sur l'exascale chez Intel depuis 2012. Il est aussi le concepteur des supercalculateurs Blue Gene d'IBM.

les ans alors que la technologie du silicium sur laquelle sont basés les composants électroniques voit ses performances doubler tous les deux ans seulement. Comment? En inventant sans cesse de nouvelles façons d'organiser les composants – on parle d'architectures – et en y incorporant de nouvelles technologies. Plus que jamais, nous devons continuer sur cette lancée. Mais il va falloir aussi que nous travaillions main dans la main avec les utilisateurs qui développent les logiciels pour ces machines, afin d'augmenter drastiquement la capacité de ces outils informatiques à utiliser en même temps de très nombreux cœurs de calcul au sein des processeurs – on estime en effet que les machines exaflopiques contiendront environ un million de cœurs contre 100 000 aujourd'hui.

Cette collaboration permettra de définir l'architecture idéale des machines de demain. Conjointement, les concepteurs de modèles numériques, disposant de cette première ébauche de plate-forme matérielle, pourront mettre au point de nouveaux algorithmes de calcul qui viendront renforcer encore la puissance des machines exascale très rapidement après leur mise en route.

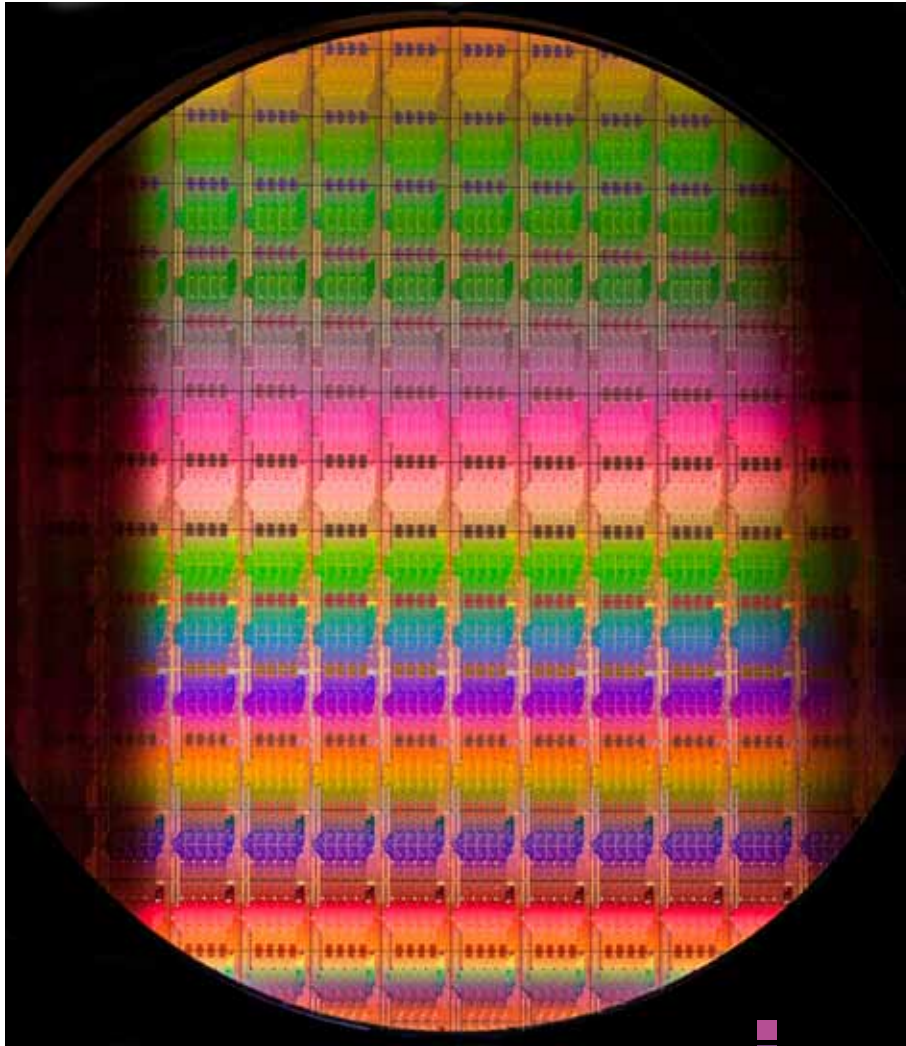
À quoi ressembleront les futurs supercalculateurs?

A. G. : Difficile de dire à quoi ressemblera la première machine exaflopique mais, ce qui est sûr en tout cas, c'est qu'elle devra être plus compacte qu'aujourd'hui. Il faudra pour cela intégrer dans un seul et même de ses composants électroniques plusieurs fonctions qui sont remplies actuellement par des composants différents. Ce sera particulièrement le cas pour les mémoires et les liaisons de communication. Une démarche importante si on ne veut pas que le coût des supercalculateurs exaflopiques – qui contiendront forcément plus de composants qu'aujourd'hui – explose. Car dans la course à l'exascale, comme dans tout autre grand projet, les meilleures solutions seront celles qui seront les plus viables économiquement. Rendues ainsi plus compactes, les machines pourront faire appel à des technologies de communi-

Le prochain objectif affiché par les acteurs du calcul intensif, dont Intel, est de mettre au point d'ici à 2020 des machines exaflopiques, donc cent fois plus puissantes encore que les meilleurs calculateurs actuels. De quelle manière va-t-on y parvenir?

Alan Gara : Le plus grand challenge qui nous attend sera de mettre au point des supercalculateurs à la fois peu gourmands en énergie, tolérants aux pannes

et simples d'utilisation. Concevoir une machine qui remplisse une seule de ces conditions est relativement simple. Réunir les trois en même temps est beaucoup plus difficile. Pour y parvenir, l'architecture des machines va devoir être particulièrement innovante. L'innovation est d'ailleurs ce qui caractérise le mieux le calcul intensif. Depuis trente ans, nous sommes parvenus à créer des machines dont les performances doublent tous



INTEL

■ Wafer de processeurs Intel Xeon.

cation qui utilisent des solutions techniques éprouvées et compétitives à base de cuivre, réservant ainsi les liaisons optiques très onéreuses au déplacement des données sur les longues distances à l'intérieur du calculateur. Les processeurs aussi devront être différents. Mais ils permettront, dans le même temps, aux logiciels actuels de continuer à fonctionner correctement. Tout cela va donc orienter nos choix pour l'architecture des machines. Cela jusqu'à un certain point seulement : il faudra aussi prendre des risques en explorant de nouvelles pistes technologiques qui pourraient aboutir à des innovations plus performantes encore.

Pensez-vous que les machines exaflopiques vont naître d'une simple évolution des calculateurs actuels ? Ou va-t-on devoir tout revoir de A à Z pour les mettre au point ?

A. G. : Je pense qu'on va devoir ouvrir un nouveau paradigme si

l'on veut voir arriver de telles machines d'ici à la fin de la décennie. Jusqu'à présent, la performance des supercalculateurs a doublé en moyenne tous les ans. Mais il s'agit d'une moyenne car lorsque vous regardez de plus près, vous vous apercevez qu'en réalité il y a eu des changements radicaux à peu près tous les dix ans qui ont permis d'augmenter largement la puissance de calcul. À mon avis, l'histoire va se répéter. Pourquoi ? Aujourd'hui, pour augmenter la puissance des supercalculateurs, la tendance est à la multiplication des cœurs de calcul au sein des processeurs. Mais cela ne va pas suffire pour répondre aux contraintes de consommation d'énergie. Il va donc falloir inno-



■ Le coprocesseur Intel Xeon Phi.

ver. En même temps, je m'attends à ce que les premières machines exaflopiques soient quelque peu hybrides, reprenant certaines caractéristiques des calculateurs actuels et en possédant d'autres totalement nouvelles.

La maîtrise de l'énergie semble le principal chantier sur lequel il faut travailler pour atteindre l'exaflops. Pourquoi ?

A. G. : Jusqu'ici, la consommation des superordinateurs double environ tous les cinq ans. Désormais, tout le monde est d'accord sur un point : nous pourrions doubler cette consommation une dernière fois encore avant d'atteindre une limite qu'on ne pourra plus dépasser. Cela va nous obliger à l'avenir à être beaucoup plus attentifs à l'efficacité énergétique des machines si l'on veut que leur puissance de calcul continue à doubler chaque année. En admettant que la consommation électrique reste constante, cela signifie qu'il va falloir doubler l'efficacité énergétique tous les ans. C'est comme si dans l'industrie automobile, on arrivait à construire des voitures mille fois moins gourmandes en carburant tous les dix ans. Impossible ! C'est pourtant ce que nous tentons de faire avec les supercalculateurs.

Plusieurs laboratoires de recherche en partenariat avec Intel sont installés en Europe, dont un en France. Pourquoi est-il si important pour vous d'être présent sur notre continent ?

A. G. : L'Europe est très active en matière de calcul haute performance, et pour nous il est très important de participer à cette dynamique. Nous savons que le logiciel sera fondamental pour gagner la bataille de l'exaflops. Les laboratoires, en partenariat avec Intel, travaillent sur la mise au point de nouveaux logiciels, qui vont être déterminants pour pouvoir l'atteindre.

Dans ce domaine, la France, particulièrement, va jouer un rôle très important pour indiquer les principales directions à prendre en matière de recherche, et cela grâce à la présence conjointe de notre laboratoire Exascale Computing Research, de centres de recherches académiques et industriels réputés mais aussi de centres de calcul parmi les plus puissants d'Europe. ■

Propos recueillis par Pierre Mira



le Campus Teratec

&

Le cœur du **HPC**

le Très Grand Centre de calcul du **CEA**



Industriels

Présence sur le site des industriels du HPC - grands groupes et PME - et fourniture aux entreprises de toutes tailles de services de conception numérique et de simulation associés aux moyens de calcul les plus performants.

Laboratoires

Regroupement sur le site de plusieurs laboratoires de recherche industrielle couvrant toute la chaîne du HPC depuis les composants et les systèmes jusqu'aux logiciels et aux applications.

CCRT

300 téraflop/s de puissance de calcul sécurisés, au service de grands industriels mutualisant avec le CEA, compétences, coûts et risques au travers de partenariats durables.

Contacts et demande
d'informations

Campus TERATEC : Tél. +33 (0)9 70 65 02 10 • jean-pascal.jegu@teratec.fr • www.teratec.eu
2 rue de la Piquetterie - 91680 Bruyères-le-Châtel - France

CEA - TGCC : Tél. +33 (0)1 69 26 46 01 • francois.robin@cea.fr • www.hpc.cea.fr
2 rue de la Piquetterie - 91680 Bruyères-le-Châtel - France

bullx

Conçu sans compromis pour
INNOVER SANS LIMITE



Chaque jour des milliers de chercheurs et d'ingénieurs utilisent les supercalculateurs bullx™ pour accélérer leurs travaux de recherche et concevoir de nouveaux produits. Équipés de processeurs Intel® Xeon® des familles E5 et E7, les supercalculateurs bullx sont parmi les plus puissants au monde. Ils confirment le savoir-faire acquis par Bull dans le développement de technologies de calcul de très grande puissance.

The Bull logo, featuring a stylized 'B' with a green square above it, followed by the letters 'ULL'.