

Forum 2020 Teratec Digital

Unlock the future!

SIMULATION
BIG DATA
HPC
IA

Compte-rendu Session plénière

PLATINUM SPONSORS



GOLD SPONSORS



SILVER SPONSORS



PARTENAIRE
EUROPA VILLAGE



Forum Teratec 2020 : HPC, IA et quantique au cœur des préoccupations des industriels et de l'Europe

Tenu en virtuel cette année, le Forum Teratec a été l'occasion pour les orateurs de montrer comment le HPC et la simulation numérique, souvent couplés à des applications d'Intelligence Artificielle, permet de lutter contre la pandémie en anticipant ses développements et accélérant le développement de nouveaux médicaments. Mais de nombreux autres exemples dans la Défense, ou l'Énergie ont aussi été présentés. Enfin, cette édition a été l'occasion pour le Commissaire européen Thierry Breton de réaffirmer la volonté de l'Europe de redevenir un leader mondial en terme de HPC en se dotant de supercalculateurs parmi les plus puissants au monde et en développant en Europe les technologies nécessaires, qu'il s'agisse de processeurs, de logiciels, d'architectures exascales ou de machines quantiques.

À cause de l'épidémie de Covid-19, le **Forum Teratec 2020**, qui devait se tenir comme d'habitude au mois de juin, a été reporté cette année au 13 et 14 octobre et a malheureusement dû se tenir de manière virtuelle à cause des restrictions sanitaires.

Le panel de la session plénière était composé de :

Daniel Verwaerde
président et co-fondateur Teratec

Thierry Breton
commissaire européen

Florence Parly
ministre des Armées

Alain Rousset
président du Conseil régional de Nouvelle-Aquitaine

Xavier Ursat
directeur exécutif du Groupe EDF

Marie-Noëlle Semeria
directrice Recherche et Développement du Groupe Total

Éric Genevois-Marlin
global Head of R&D Digital and Data Sciences de Sanofi

Trish Damkroger
vice-president d'Intel Data Center Group

Kevin D. Kissell
CTO de Google

Chacun des intervenants de la plénière s'est donc exprimé à travers une vidéo d'une dizaine de minutes dont voici les grandes lignes.



Credit Pascal Guillet - L'Usine Nouvelle

Daniel Verwaerde, président et co-fondateur **Teratec**, a ouvert le **Forum Teratec 2020** en rappelant que l'épidémie de Covid-19 a, dans un premier temps conduit à son décalage du mois de juin à celui d'octobre, puis à sa transformation en événement digital.

« Cela ne nuira pas à sa qualité puisque son programme a été intégralement maintenu, associant les industriels utilisateurs (**EDF, Total, Sanofi**), qui donneront leur vision du développement du HPC dans leurs secteurs, mais aussi des fournisseurs parmi les plus avancés (**Intel, Google**), qui dévoileront leur feuille de route tant dans le domaine des composants que des futurs usages, et de grands décideurs politiques de premier plan (**Thierry Breton**, pour

la Commission européenne ; **Florence Parly**, la ministre des Armées ; **Alain Rousset**, président de la Région Nouvelle Aquitaine), qui partageront leur vision du numérique dans la vie future et les actions qu'ils comptent conduire. Je vous engage à regarder leurs vidéos. »

Trois perspectives majeures

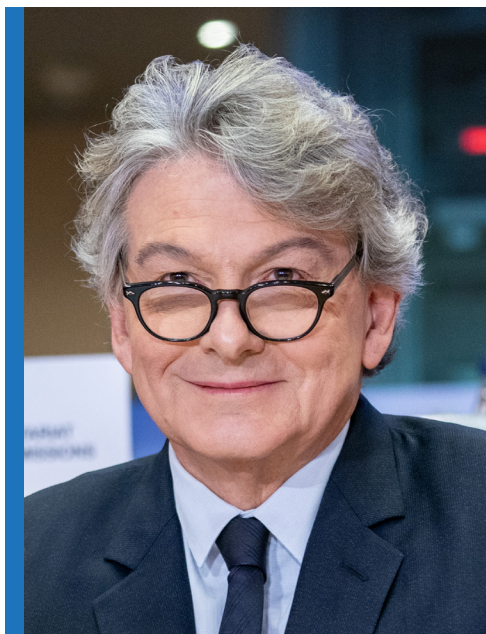
Il a ensuite rappelé que cette épidémie a monté l'importance fondamentale du numérique et tout spécialement du **HPC** (*High Performance Computing*) et du **HPDA** (*High Performance Data Analysis*) dans notre vie et notre économie, notamment dans la santé. Pour lui, l'avenir de ces technologies sera modelé par trois grandes perspectives : la relance voulue par la plupart des Etats qui met l'accent sur le numérique ; la montée en puissance de l'Europe dans le domaine des technologies numériques ; la progression rapide des technologies futures, notamment le quantique qui pourrait être l'une des grandes ruptures technologiques de la décennie à venir.

L'action de Teratec

Il a aussi mis en avant le rôle de Teratec dans ce monde évolutif : « Notre action cette dernière année a visé à encren la France au sein de l'Europe du HPC et du HPDA. Nous avons poursuivi trois directions de travail : participer activement à la gouvernance d'**EuroHPC** afin d'y représenter les intérêts français ; être le fer de lance de la création du Centre de Compétence français aux côtés de **Genci** et du **Cerfacts**, pour un large support aux entreprises, afin qu'elles bénéficient complètement des moyens mis à disposition par l'Union européenne ; faire participer les industriels européens à ce grand projet qu'est EuroHPC par la création d'une fédération des entreprises pour les y représenter formellement. »

Le quantique va remettre l'Europe du HPC en selle

Daniel Verwaerde, a terminé son intervention par sa vision du calcul quantique : « La décennie à venir verra une rupture technologique grâce au quantique, qui révolutionnera la manière de calculer. Les progrès réalisés ces dernières années, permettront de disposer des premiers calculateurs et accélérateurs opérationnels à l'horizon 2025/2030. C'est une véritable opportunité car la France fait la course en tête, et comme toute révolution technologique rebat toutes les cartes au niveau mondial, cela permettrait à l'Europe de reprendre un rôle de leader après une période de près de 70 ans où elle a dû se contenter d'être suiveuse en matière de HPC. »



La deuxième intervention, très attendue, a été celle de **Thierry Breton, Commissaire européen** en charge du marché intérieur. Il a lui aussi rappelé que la pandémie de la Covid-19 a démontré l'importance fondamentale des technologies numériques dans nos vies, avant d'insister sur l'implication de l'Europe dans le HPC et les technologies connexes.

« Je vois la décennie à venir comme la décennie numérique dans laquelle l'Europe peut devenir un leader sur la scène technologique mondiale. Il y a plusieurs raisons à cela. Tout d'abord, aujourd'hui tous les secteurs économiques et activités humaines dépendent du numérique. Pour analyser toutes ces données, les rendre utiles à nos activités, nous devons renforcer nos capacités dans le calcul haute performance, mais aussi l'Intelligence Artificielle, le Big Data, le Cloud, l'Edge Computing... »

Le HPC pilier de l'autonomie numérique de l'Europe

Il a ensuite insisté sur la volonté de l'Europe en matière de HPC : *« le calcul à haute performance permet aujourd'hui de résoudre des problèmes très complexes dans de nombreux domaines d'application essentiels pour l'Europe (médecine personnalisée, énergie, ingénierie, chimie, exploration gazière et pétrolière, cosmétique, matériaux, climatologie, cyber-sécurité, défense, etc.). C'est un défi stratégique majeur pour l'Europe, à la fois industriel, technologique et scientifique. Il constitue l'un des piliers de notre autonomie numérique. C'est pourquoi la Commission européenne a proposé aux Etats membres d'inclure le HPC dans leurs plans d'investissement massif, faisant partie du paquet de mesures de relance économique de l'Union européenne **Next Generation EU**. Tous les Etats membres consacreront a minima 20% de leurs plans d'investissement nationaux au numérique. Cela représentera plus de 130 milliards d'Euros cours des 2 à 4 prochaines années. C'est-à-dire un coup d'accélérateur majeur pour la décennie numérique de l'Europe. Et le 18 septembre la Commission européenne a également proposé d'investir, avec les Etats membres et l'industrie, plus de 8 milliards d'Euros dans les supercalculateurs exaflopiques, via l'entreprise commune **EuroHPC**. »*

EuroHPC, 8 milliards d'Euros pour le HPC

Ces investissements serviront à de multiples choses. *« Ces plans s'inscrivent dans la continuité de la stratégie de l'Union. Lancé en 2018, EuroHPC est entrain d'acquérir 8 supercalculateurs de niveau mondial, dont 3 devraient figurer dans le **Top5**. Ces machines multiplieront la puissance de calcul disponible en Europe par 8. Elles seront accessibles à tous les utilisateurs y compris les universités, le secteur public, les industriels et plus particulièrement les PME, où qu'ils se trouvent en Europe. »*



»»» « Le plan d'investissement annoncé le 18 septembre servira, quant à lui, à acquérir et déployer des supercalculateurs de nouvelle génération de capacités exaflopiques ; à investir en partenariat avec les industriels, afin d'acquérir des machines adaptées à leurs besoins et qualité de services ; à interconnecter toutes ces machines par des réseaux Terabytes ; à développer et maîtriser les technologies sous-jacentes des supercalculateurs, notamment investir sur des processeurs à basse consommation, technologie clé pour les machines exaflopiques, mais aussi les voitures autonomes, les téléphones intelligents, les serveurs du Edge Computing ou du Cloud, etc. Donc pour la souveraineté numérique de l'Europe. »

Relever le défi du quantique et des processeurs

Il a ensuite évoqué les grands défis qui s'offrent l'Europe, à savoir le quantique et les processeurs. « Enfin, nous devons aller au-delà du HPC et notamment vers le calcul quantique, le prochain défi technologique de ce siècle. Les ordinateurs quantiques seront capables de traiter des ensembles de données colossaux, afin de résoudre des problèmes jusque là inaccessibles aux meilleures machines actuelles. Cette révolution quantique va débiter par la mise sur le marché, avant même l'arrivée de supercalculateurs, d'accélérateurs dédiés à des algorithmes spécifiques par l'ajout de cartes dans les supercalculateurs traditionnels. »

« Au-delà des supercalculateurs, la souveraineté européenne sera aussi conditionnée par la capacité de l'Europe de produire les processeurs les plus puissants au monde, afin de réduire nos dépendances sur les technologies stratégiques. Nous en avons la capacité technologique et industrielle, ainsi que la volonté politique. Nous préparons donc le lancement d'une alliance industrielle européenne des microprocesseurs, autour de l'entreprise commune Ecsel, avec des financements très importants. »

Apprendre à collaborer

« Mon dernier message sera un appel à la coopération européenne pour faire de notre vision de la décennie numérique une réalité et pour garantir l'autonomie numérique de l'Europe. Nous devons construire des écosystèmes technologiques européens qui rassemblent tous les acteurs, les organismes de recherche, les petites et les grandes entreprises, et bien entendu les Pouvoirs publics. Nous devons apprendre les uns des autres et identifier nos points faibles et nos points forts sur lesquels on doit tout bâtir, et ce Forum Teratec est évidemment une excellente occasion de faire avancer l'apprentissage de cette collaboration. »





Autre intervention clé, celle de **Florence Parly, ministre des Armées**. Elle a rappelé l'intérêt des technologies numériques et des innovations de rupture qu'elles permettent pour son ministère.

« J'ai souhaité intervenir aujourd'hui parce que l'Intelligence Artificielle, le calcul haute performance, le quantique et plus généralement les innovations de rupture liées au numérique et à la donnée, sont des sujets de première importance pour le ministère des Armées. Depuis toujours il s'est imposé comme un acteur clé dans ces technologies de pointe qui sont au cœur des enjeux de souveraineté technologique et industrielle, qu'elle soit nationale ou européenne. Elles sont donc au cœur de notre stratégie d'innovation et de nos investissements, car nous avons l'objectif d'y consacrer un milliard d'Euros par an dès 2022. »

Jouer la synergie civil/militaire

Une course à l'innovation qui est aujourd'hui tirée par le monde civil et sur lequel doit s'appuyer l'industrie de défense. *« Parmi les domaines où nous avons beaucoup à gagner des échanges avec le monde civil, il y a évidemment l'IA, une technologie clé pour nous. Nous faisons face aujourd'hui à une véritable numérisation du champ de bataille et à l'irruption du combat connecté interarmées et interalliés. Nos armes et nos équipements ont beaucoup évolués, se sont dotés de capteurs embarqués et engendrent aujourd'hui une utilisation massive de données. C'est pourquoi en 2019 nous avons élaboré une feuille de route sur l'IA appliquée à la défense. Durant la loi de programmation militaire 2019-2025, 100 millions d'Euros seront investis chaque année en moyenne et près de 200 datascientists et autres experts dans le domaine seront recrutés d'ici 2023. »*

S'appuyer sur l'industrie et la recherche

*« Un des projets phare de cette feuille de route que nous dénommons **Artemis** vise à doter le ministère des Armées d'une infrastructure sécurisée et souveraine de traitement massif des données. Ce projet contribuera à mutualiser la masse de données produite au sein du ministère, à faciliter leur gestion, leur administration et leur exploitation. Les développements réalisés pour cet outil pourront, je l'espère, servir de briques pour des applications qui dépassent le secteur de la défense. C'est pourquoi j'ai souhaité que nos stratégies en matière d'IA et de technologies quantiques s'appuient sur des partenariats variés avec des industriels, des PME, des start-up mais aussi tout l'écho-système de la recherche, notamment l'INRIA, le **CEA**, le **CNRS** ou bien encore l'**ANR**. Un appel à projets a d'ailleurs été lancé avec l'ANR sur les technologies quantiques, l'objectif étant notamment de veiller à l'intégration d'accélérateurs quantiques dans les centres de calcul. »*

Faire jouer la complémentarité européenne

En conclusion, elle a insisté sur le fait que nous disposons en France et en Europe, de laboratoires de recherche, de fournisseurs de technologies, d'industriels capables de faire émerger de nouvelles applications et projets européens en la matière, tel **EuroHPC**. *« C'est l'émergence de cette approche européenne dans les technologies clés, portées par Teratec, qu'il nous faudra collectivement soutenir, Etat comme industrie. Soyez assurés que le ministère des Armées, au travers de sa politique industrielle et d'innovation, y veille scrupuleusement en s'appuyant sur votre savoir-faire. »*



Credit: Alban Gilbert

Dernière intervention de décideur politique, celle d'**Alain Rousset**, Président du **Conseil régional de Nouvelle-Aquitaine**, qui a insisté sur la complémentarité des actions à mener aux niveaux européen, national et régional.

« La France dans les domaines du calcul haute performance, du Big Data et de l'Intelligence Artificielle est bien placée. Mais nous sommes face à un défi que l'accélération des technologies

nous amène à relever. Cela implique de réfléchir à l'échelle de l'Europe. Pour autant, nous investissons aussi au niveau régional dans de multiples structures de recherche et des réseaux très haut débit. »

Des recherches qui couvrent de nombreux secteurs. Il a ainsi donné quelques exemples. « Nous avons des plates-formes dans notre région sur la santé avec l'oncologie, la chimie des matériaux, même sur la santé animale, qui sont d'apport extrêmement fort. Nous travaillons aussi sur la transition agro-écologique, où nous portons avec beaucoup d'opérateurs un projet qui s'appelle VitiREV, visant à sortir le vignoble des pesticides et du glyphosate. L'utilisation de l'IA et du HPC permet d'évaluer rapidement les impasses que rencontrent les agriculteurs et les viticulteurs, afin de pouvoir accélérer cette transition. »

« Nous avons de la même manière dans le domaine du traitement du cancer des dispositifs d'IA qui permettent de comparer l'ADN des individus avec une grande efficacité dans beaucoup d'hôpitaux dans le monde entier, afin de mieux gérer les réponses médicales à tel ou tel type de cancer. Il en va de même en cardiologie ou en neurologie. »

Pour relever ces défis, la Région Nouvelle-Aquitaine va installer une plate-forme sécurisée de Big Data pour faciliter les échanges en termes de biosécurité ou de cybercriminalité. « Nous comptons sur vos travaux pour éclairer les Pouvoirs publics et les entreprises dans ces domaines à la fois incontournables, critiques et de souveraineté », a-t-il conclu.



Premier industriel à prendre la parole, **Xavier Ursat**, Directeur exécutif du groupe **EDF**, a expliqué comment le HPC et la simulation numérique contribuaient à l'amélioration de la sécurité des installations industrielles du groupe.

« Le calcul haute performance et l'Intelligence Artificielle sont des vecteurs très utilisés dans notre secteur d'activité, sur lesquels nous investissons massivement. Nous doublons quasiment notre puissance de calcul tous les 2 ans pour atteindre aujourd'hui 7 PFlops, ce qui fait de nous l'un des 5 plus gros opérateurs français de supercalculateurs. Nous disposons aussi d'un ordinateur quantique d'Atos, qui avec ses 120.000 processeurs nous apporte des capacités supplémentaires. »

« Ces capacités de calcul haute performance sont vitales pour nous, car nous devons toujours augmenter la sûreté de nos réacteurs nucléaires et fournir toujours plus de précision dans les études qui nous sont demandées par l'Autorité de Sûreté Nucléaire. Ce qui nécessite beaucoup de simulations et donc de puissance de calcul. »

Le HPC augmente la sécurité de nos installations

Une puissance de calcul qui permet aussi d'exploiter les milliards de données enregistrées depuis des décennies dans les réacteurs nucléaires et les installations hydro-électriques, pour alimenter des simulations à partir de ces retours d'expérience.

« Nous avons aussi pu renforcer nos assemblages combustibles en nous basant sur des algorithmes de Machine Learning qui nous ont permis d'optimiser tous les paramètres pour garantir à la fois une meilleure performance et une meilleure sûreté. »

Enfin, les capacités de calcul sont utilisées pour simuler en conditions extrêmes le comportement des équipements, ce qui permet d'améliorer la réactivité des opérateurs pour augmenter la sûreté des installations.

2000 utilisateurs de HPC

Aujourd'hui le HPC et l'IA permettent à EDF de faire de nouveaux sauts qualitatifs. Il utilise par exemple des jumeaux numériques complets de son parc de production nucléaire, pour entraîner les opérateurs des centrales dans des conditions très proches de la réalité de fonctionnement et de simuler l'évolution dans le temps des différents organes pour optimiser leur maintenance. Des technologies qui servent aussi à simuler, grâce à des logiciels de Machine Learning, l'équilibre de la production face à l'évolution des scénarios de demande d'électricité. Il a aussi confirmé qu'EDF travaillant déjà sur l'adaptation de ses modèles aux futures machines quantiques. Aujourd'hui plus de 2 000 ingénieurs au sein d'EDF utilisent ces moyens de calcul haute performance, dont environ 800 au sein de la R&D.

Préparer le système électrique du futur

Et de conclure sur les défis du système électrique du futur que le HPC devrait aider à relever : *« Plus que jamais, demain les défis du système électrique du futur nécessiteront ces moyens de calcul haute performance. Les nouveaux moyens de production décentralisés et centralisés, les nouvelles formes de consommation, les défis que représente l'adaptation constante au changement climatique, rendent ces outils incontournables. Nous y travaillons ardemment et c'est pourquoi le Groupe EDF sera présent et saura relever le défi de la puissance de calcul. »*



Deuxième présentation faite par un industriel, celle de **Marie-Noëlle Semeria**, Directrice Recherche et Développement du groupe **Total**, qui a expliqué comment les technologies numériques pouvaient aider le groupe pétrolier à assurer sa transformation en une entreprise multi-énergie.

« Notre objectif est d'amener la part de l'électrique, aujourd'hui de 5%, à 15% en 2030, tout en intégrant complètement les enjeux du climat, en visant une production neutre en carbone en Europe à l'horizon 2050. On peut le faire en travaillant au niveau des outils, des logiciels, des solutions à apporter au système global, soit pour diversifier l'apport en recourant aux énergies vertes, soit en

récupérant et en stockant le CO2. Ces défis qui sont devant nous nécessitent des capacités de calcul importantes et toute l'expertise du HPC. »

Le HPC accélère notre mutation

Elle a ensuite donné quelques exemples d'utilisation de ces technologies dans le groupe : la capture du CO2 avec les enjeux de modélisation moléculaire pour trouver le matériau le plus efficace ; le stockage géologique du CO2 avec les enjeux de simulation sur les aspects fluidiques et mécaniques ; l'optimisation des giga-fermes d'éoliennes off-shore ou solaires ; l'hybridation des réseaux ; l'optimisation des flottes de véhicules électriques, etc. *« Dans tous ces domaines nous générons des quantités de données et grâce à la simulation couplée à l'IA nous pouvons à présent décupler notre vitesse d'apprentissage en développant des modèles prédictifs et en arrivant à modéliser des systèmes complexes qui ne sont pas observables. On reste dans la démarche de l'approche scientifique décrite par Descartes, mais avec un formidable accélérateur qu'apporte toutes les capacités du calcul haute performance, de la science des données et plus globalement les technologies du numérique. »*

L'IA est un vrai "Game Changer"

« Dans le domaine de l'IA, nous avons à développer des algorithmes de plus en plus complexes qui nécessitent de plus en plus de capacités de calcul, c'est là que le HPC intervient pour nous donner ces capacités, afin d'entraîner plus rapidement des modèles prédictifs et d'accompagner leur apprentissage dans le temps, pour garder leur fiabilité. Les modèles d'intelligence distribuée sont un vrai "game changer" car ils permettent d'adresser trois enjeux : la performance en concevant l'architecture du calcul pour optimiser ce qui se fait au plus près du terrain pour ne remonter que ce qui est important ; l'efficacité énergétique puisque nous limitons notre empreinte carbone ; la souveraineté en gardant les données au plus près des sites. La valeur de la donnée industrielle démarre dans la façon dont on la traite au plus près de la mesure. D'où l'enjeu du Edge Computing et des technologies 5G, qui font complètement partie de la feuille de route du HPC. »

Évaluer l'intérêt du quantique

Mais le groupe Total va un cran plus loin : *« Après les méthodes classiques s'ouvrent de nouveaux champs tel le quantique. Nous voulons y être présent et acteur, pour être capables de formaliser nos problématiques dans le bon langage quantique. Cette technologie a un potentiel formidable car elle permet d'accélérer tout ce qui est parallélisme en jouant sur la superposition et l'intrication des états quantiques. Nous utilisons déjà un émulateur de calcul quantique d'Atos pour apprendre. »* Et de conclure : *« Les technologies numériques sont pour Total un "asset", un accélérateur de transformation, un catalyseur par rapport aux technologies 5G, Edge Computing, ainsi qu'un formidable générateur d'innovation, car le plus enthousiasmant c'est ce que ces technologies vont nous permettre de découvrir dans de multiples domaines (matériaux, systèmes, procédés...). »*



Dernier industriel à prendre la parole, **Eric Genevois-Marlin**, Global Head of R&D Digital and Data Sciences de **Sanofi**, qui a expliqué comment les technologies numériques transforment fondamentalement les process de création des nouveaux médicaments.

« Mettre un nouveau médicament sur le marché c'est aujourd'hui 8 à 10 années de R&D, des centaines de collaborateurs et un budget de 1 à 2 milliards d'Euros. Nous voulons améliorer cela. »

« Nous portons nos efforts de R&D sur plusieurs domaines thérapeutiques spécifiques : le cancer; les maladies immuno-inflammatoires ; l'hémophilie ; les maladies rares ; les virus dont notamment la Covid-19. Il nous faut donc étudier ces pathologies, leur biologie compliquée avec de multiples variantes, les populations de malades, les différents phénotypes, de manière extrêmement précise. »

Et d'expliquer que la R&D dans ce domaine, fait appel à beaucoup de sciences (biologie, chimie, physique, chromatographie, médecine, ingénierie...), mais aussi beaucoup de mathématiques (probabilités, statistiques...) et maintenant d'Intelligence Artificielle.

Le Deep Learning sélectionne plus vite les molécules

« Aujourd'hui nous évaluons en recherche l'utilisation du Deep Learning couplé au HPC pour trouver dans l'espace des molécules chimiques (1060 à 1080), un sous-ensemble de molécules qui auraient les propriétés chimiques que nous souhaitons, ainsi que les capacités en termes d'activité et de tolérance, pour répondre au besoin thérapeutique envisagé. Nous travaillons également à l'application de ce type de méthodes sur des molécules biologiques issues de culture cellulaire, afin de fabriquer un anticorps qui pourra attaquer un antigène connu comme responsable d'une pathologie donnée. C'est un espace d'innovation considérable qui s'est ouvert, avec lequel nous espérons avoir des résultats intéressants dans un futur proche. »

L'IA pour mieux cibler les essais cliniques

L'IA est aussi largement utilisée dans la phase de test chez l'humain. « Nous testons ainsi un algorithme de Deep Learning pour étudier des images cellulaires issues de malades, afin d'identifier et de mesurer avec précision leur degré d'exposition à un antigène particulier. Nous allons cibler celui-ci avec un anticorps basé sur une de nos molécules. Cet exercice nous permettra de prédire l'activité de notre produit. Pour cela, nous allons simuler les essais cliniques selon les méthodes traditionnelles (essais randomisés) avec des méthodes d'analyse traditionnelles (modèle de régression de Cox). On va en déduire qu'elle est la probabilité qu'un essai clinique conduit chez ces patients soit conclusif. Cela n'a pas encore été fait, mais cette approche permettrait de cibler avec beaucoup de précision la population de malades que nous souhaitons traiter, en étant quasiment sûr de l'efficacité du traitement. »



- >>> Les technologies numériques ont aussi très largement utilisées chez Sanofi pour bâtir des modèles prédictifs en traitant les données collectées en temps réel via des capteurs. Ils servent à évaluer et optimiser les process de fabrication pour faciliter la prise de décisions précises. Enfin ces technologies servent aussi à gérer le volume de connaissances considérable accumulé par Sanofi depuis des décennies.

Une industrie en profonde mutation

Une utilisation des technologies numériques qui implique une profonde mutation de l'industrie pharmaceutique. « Depuis 5 ans nous avons vu les autorités d'enregistrement des grandes régions du monde (Europe, USA, Chine, Japon) commencer à adopter ces nouvelles techniques pour évaluer de nouvelles molécules qui découvertes sur la base d'algorithmes d'IA. Ce qui va induire dans les prochaines années une profonde mutation de l'industrie pharmaceutique et de sa R&D, car les données, la technique, les méthodes d'analyse et la capacité de calcul auront fondamentalement transformé le procédé intellectuel qui aboutit à la création d'un nouveau médicament. »





La session plénière s'est achevée par les présentations de deux fournisseurs de technologies. **Trish Damkroger**, Vice President d'**Intel Data Center Group**, a ainsi expliqué comment le fabricant de processeurs adapte ses produits pour être au cœur de la convergence HPC/IA.

« Le rôle des technologies numériques n'a jamais été aussi évident que durant cette pandémie. A la fois pour essayer de trouver des remèdes, mais aussi pour maintenir le fonctionnement des écoles et des entreprises, avec le travail à distance sur une échelle jusque là in-envisagée. »

Grâce à la croissance des cas d'usage utilisant l'IA de nombreuses équipes entrent dans une nouvelle ère du calcul et de la modélisation. La convergence du HPC et de l'IA permet d'accélérer de nombreuses simulations et des modèles créés par l'IA remplacent des modèles traditionnels.»

Une architecture adaptée à la convergence IA/HPC

*« Pour accompagner cette convergence, nous avons développé l'**Intel XPU Strategy**. Elle mixe CPU, GPU, FPGA et des accélérateurs spécifiques, avec du Deep Learning au niveau Data Center et Edge Computing, le tout autour d'un standard ouvert de modèle de programmation unifié. L'objectif étant de simplifier le développement d'applications et leur portabilité. »*

*« La convergence entre HPC et IA est le point d'inflexion critique pour l'industrie du HPC et Intel est l'un des partenaires clé pour y arriver. Notre processeur **Xeon** est optimisé pour cela avec les **Advanced Vector Extensions 512** qui accélèrent les applications HPC, le DL Boost accélère les applications d'IA, enfin la mémoire persistante **Optane** accélère le Data Analytic et les applications d'IA. Alors que la version **Cascade Lake** de notre processeur Xeon de 2019 utilisait une technologie de gravure 14 nm, la version **Ice Lake** de cette année utilise une technologie 10 nm et que la version **Sapphire Rapids** de 2021 verra arriver une nouvelle génération de DL Boost l'**Advanced Matrix Extension (AMX)**. Du côté des GPU l'architecture X^e est très polyvalente s'adaptant des machines classiques aux supercalculateurs, du TFlops à l'exascale. Le nouveau processeur **PonteVecchio** utilisant une technologie 10 nm sera quant à lui dédié aux machines HPC. »*

*« Nous avons aussi travaillé avec l'écosystème pour mettre au point **oneAPI**, afin de faciliter la programmation à travers de multiples types de processeurs et d'accélérateurs, CPU, GPU et FPGA, qu'il s'agisse de traiter des données scalaires, vectorielles, matricielles ou spatiales. »*

« Nous sommes donc prêts pour vous aider à construire un futur tout en convergences, qu'il s'agisse de processeurs, d'architecture, de mémoire, d'interconnexion, de sécurité ou de logiciel. »



Dernier intervenant, **Kevin D. Kissell**, CTO de **Google**, qui a décrit comment les solutions hybrides sont les plus efficaces pour s'adapter à la complexité d'un monde changeant.

« Le déploiement de solutions hybrides HPC/Cloud, combinant des infrastructures HPC locales avec des ressources dans le Cloud, fonctionne déjà, par exemple dans le domaine de la physique des hautes énergies. Ainsi dès 2016 nous avons aidé le FermiLab à doubler le nombre de cœurs de processeurs accessibles via le HEPCloud, le Cloud de la communauté des spécialistes de la physique des particules, en le connectant à notre Cloud via HTCondor. En 2019, nous avons aidé le CERN à reproduire la découverte du boson de Higgs en utilisant la technologie Kubernetes. Ce système Open Source fournit une plate-forme automatisant le déploiement,

la montée en charge et la mise en œuvre de conteneurs d'application sur des clusters de serveurs. Elle était utilisée ici avec notre Google Container Engine (GKE) pour traiter 70 TB de données en utilisant 20 000 cœurs de processeur virtuels. »

Mixer Machine Learning et HPC

Il a aussi donné un autre exemple d'hybridation dans le domaine de la prédiction météo où le **Google Brain Research Team** a travaillé pour la **NOAA** (National Oceanic and Atmospheric Administration). Ils ont remplacé la simulation physique traditionnelle par l'analyse optique d'images satellite pour réaliser les prévisions de précipitations, en fonctionnant sur un réseau de neurones de plus de 256 Google TPU, ce modèle baptisé MetNet s'est révélé beaucoup plus précis et beaucoup plus rapide que la simulation traditionnelle.

Le quantique n'échappe pas à l'hybridation

Il a expliqué que dans le domaine de l'informatique quantique, on retrouve aussi des applications hybrides mixant les méthodes variationnelles et classiques. Ainsi un modèle quantique paramétrique d'un système peut être optimisé de manière itérative en utilisant des algorithmes classiques. *« Cela a permis cette année de modéliser la molécule de diazène H₂N₂ avec suffisamment de précision pour simuler la formation des deux isomères en Cis et Trans, sur un de nos processeurs Sycamore. Une avancée importante montrant l'intérêt de l'informatique quantique dans le domaine des sciences. »*

Kevin Kissell a aussi présenté d'autres applications hybrides dans la gestion des grandes catastrophes climatiques pour anticiper et organiser les évacuations préventives des zones touchées, ou la calibration de détecteurs de neutrinos en physique.

« On voit l'intérêt des solutions hybrides mixant simulation numérique, IA, HPC, quantique, Cloud, etc., dans de multiples domaines. Elles offrent plus de possibilités de traitement, plus de puissance pour traiter plus rapidement des problèmes toujours plus complexes. Ce sera la solution pour faire face aux défis du futur dans les domaines de la santé avec les pandémies ou du changement climatique, » a-t-il conclu.

Jean-François Prevéraud