

La politique française dans le domaine du calcul scientifique

*rapport à monsieur le ministre
de l'éducation nationale,
de l'enseignement supérieur
et de la recherche*

*à monsieur le ministre délégué
à la recherche*

Mars 2005

N° II-B-14-2004

N° 2005-017

La politique française
dans le domaine du calcul scientifique

Mars 2005

Emmanuel SARTORIUS
*Ingénieur général
des Télécommunications*

Michel HÉON
*Inspecteur général de l'administration
de l'éducation nationale et de la recherche*

SOMMAIRE

INTRODUCTION	1
I- POURQUOI LE CALCUL INTENSIF ?	2
II- LES GRANDS CENTRES DE CALCUL SCIENTIFIQUE EN FRANCE	3
LE CINES	3
L'IDRIS.....	4
LE CEA.....	4
LE CENTRE DE CALCUL DE L'IN2P3	5
SYNTHESE	6
III- LES MESOCENTRES ET LES MOYENS DES LABORATOIRES	7
IV- LE DIAGNOSTIC	8
V- LA FRANCE ET L'EUROPE	15
DEISA	15
LES GRILLES	16
LE 7 ^{EME} PCRD.....	16
L'INITIATIVE TRIPARTITE ALLEMAGNE - FRANCE - ROYAUME-UNI.....	16
VI- LES LOGICIELS	17
VII- BESOINS SCIENTIFIQUES ET BESOINS INDUSTRIELS	20
VIII- EXTERNALISER LE CALCUL SCIENTIFIQUE ?	21
IX- CALCUL VECTORIEL, CALCUL PARALLELE OU GRILLES ?	21
X- ELEMENTS D'UNE POLITIQUE	23
RECOMMANDATION 1 : METTRE EN PLACE UN COMITE STRATEGIQUE DU CALCUL SCIENTIFIQUE	24
RECOMMANDATION 2 : COMBLER LE RETARD FRANÇAIS EN CALCUL INTENSIF	25
RECOMMANDATION 3 : LA STRUCTURATION DES ACTEURS DU CALCUL INTENSIF	26
RECOMMANDATION 4 : RENFORCER LA COOPERATION EUROPEENNE	27
RECOMMANDATION 5 : FAIRE FACE A LA POSSIBLE DISPARITION DU CALCUL VECTORIEL	29
RECOMMANDATION 6 : DEVELOPPER LES SYNERGIES EN MATIERE DE LOGICIELS.....	29
RECOMMANDATION 7 : DEVELOPPER UN RESEAU D'EXPERTS	30
RECOMMANDATION 8 : ACCROITRE ET PERENNISER LES MOYENS FINANCIERS DU CALCUL INTENSIF	31
ANNEXES	33

Introduction

Par lettre du 21 septembre, le ministre délégué à la Recherche a demandé le concours de l'Inspection générale de l'administration de l'Education nationale et de la Recherche et du Conseil général des technologies de l'information pour animer un groupe de travail dont les travaux seraient destinés à définir et à 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 (voir annexe 1).

Les rapporteurs ont donc tenu cinq réunions d'un groupe réunissant les représentants des administrations concernées, les directeurs des grands centres de calcul, des représentants des grands utilisateurs scientifiques et industriels (CNRS, CEA, EDF), ainsi que d'organismes liés étroitement au développement du calcul scientifique (INRIA et RENATER). L'annexe 2 donne la liste des membres du groupe de travail ainsi que celle des autres personnalités entendues par les rapporteurs.

Ceux-ci ont également tenu trois réunions ciblées sur la prospective avec des représentants du CNRS pour la première, de la communauté des nanotechnologies pour la seconde, et de la communauté de la biologie pour la troisième.

L'ensemble de ces réunions et de ces auditions ont permis de dégager un consensus 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. A partir de là les avis divergent sur les modalités de mise en œuvre de ces principes généraux. Il doit donc être clair que les opinions exprimées dans ce rapport et les recommandations qu'il contient sont celles des seuls rapporteurs.

Ceux-ci tiennent à remercier toutes les personnalités qu'ils ont rencontrées pour le temps qu'elles leur ont consacré et les échanges fructueux qu'elles ont eus avec eux. Ils remercient plus particulièrement les membres du groupe de travail qu'ils ont animé entre novembre 2004 et février 2005 qui, par leurs contributions, leurs remarques et leur connaissance approfondie du sujet, leur ont permis de progresser dans leurs travaux. Ils remercient enfin tout spécialement Alain Lichniewsky, chargé de mission à la direction de la Recherche, avec qui ils ont eu de nombreux échanges, qui les a fait bénéficier de son expérience et de sa connaissance des acteurs et qui a, en outre, assuré avec efficacité et dévouement le secrétariat du groupe de travail.

I- Pourquoi le calcul intensif ?

Désormais incontournables aussi bien dans le domaine de la recherche que dans celui de l'industrie, la modélisation et la simulation¹ sur ordinateur ont pour objet de créer une représentation virtuelle d'un objet, d'un phénomène ou d'un concept afin de l'analyser et de le comprendre, de façon à pouvoir prévoir son comportement, voire le contrôler. Modélisation et simulation se sont introduites naturellement entre théorie et expérience, qui sont au cœur de la démarche scientifique. Elles constituent désormais un moyen privilégié d'investigation pour les chercheurs. Elles sont devenues une condition nécessaire du progrès scientifique dans des domaines aussi variés que la climatologie, la chimie quantique, la biologie, la fusion contrôlée ou les nanotechnologies.

En outre, dans certains domaines, la nature même de la connaissance scientifique a évolué au cours des dernières décennies, en raison de l'étude de systèmes et de phénomènes complexes. Elle repose désormais sur la gestion et l'utilisation d'une masse d'information qu'il faut systématiser, recueillir, distribuer et exploiter. La biologie génomique et post-génomique, qui met en jeu des volumes d'informations toujours plus importants, constitue l'exemple le plus frappant de cette évolution.

Les enjeux économiques de la modélisation et de la numérisation sur ordinateur dépassent de beaucoup la mise à disposition des chercheurs d'outils particulièrement performants. D'une part la capacité d'un état à effectuer des modélisations et des simulations sur ordinateur est devenu un élément essentiel de sa crédibilité aussi bien dans le domaine de la défense (nucléaire) que dans celui de la préservation de l'environnement (climatologie). D'autre part, le niveau de compréhension et de caractérisation des systèmes complexes autorisé par la simulation numérique permet de réduire les risques, partant les coûts de développement, des grands programmes et d'optimiser les investissements industriels, dans les secteurs de pointe (microélectronique, nanotechnologies, sécurité des installations). La puissance de calcul dont dispose un pays est ainsi devenue un facteur essentiel à sa crédibilité sur la scène internationale, au succès de sa politique de recherche et un levier important pour sa compétitivité industrielle.

La mise en œuvre de ces techniques nécessite le recours à des calculateurs particulièrement puissants que leurs performances situent bien au-delà de celles des produits catalogue des constructeurs d'ordinateurs. C'est pourquoi on parle à leur propos de *calcul intensif* ou de *calcul de haute performance* (*High Performance Computing* ou *HPC*, en anglais).

La nécessité d'affiner sans cesse les modèles pour de meilleures prévisions (météorologie) ou d'étendre leur application dans le temps (océanographie) ou dans l'espace (nombre de molécules prises en compte dans une réaction chimique) conjuguée au progrès technologique conduit à améliorer sans cesse les performances des calculateurs. C'est ainsi que de nombreuses simulations numériques recourent à la technique du *maillage* qui consiste à découper l'objet étudié (l'atmosphère terrestre, un avion, etc.) en petits volumes élémentaires, les *mailles*. Augmenter la précision de la simulation signifie réduire la taille des mailles. Mais, si on divise celle-ci par 10, on multiplie le nombre de mailles par 1 000 (10^3). Or la puissance de calcul nécessaire évolue au moins dans les mêmes

¹ La simulation consiste à reproduire par le calcul, en général dans un souci d'économie ou parce que l'expérimentation est impossible, le fonctionnement d'un système dont on connaît les principes de fonctionnement (*crash tests* de voitures, simulateurs de vol, par ex.). En revanche, la modélisation consiste à essayer d'approcher de façon simplifiée, par choix délibéré ou par nécessité, par le calcul le fonctionnement de systèmes complexes (les océans, par ex.) ou d'évaluer les conséquences de théories scientifiques (la chromodynamique quantique, par ex.). La simulation numérique peut servir à valider ou à exploiter ces modèles. C'est souvent le transfert de codes de simulation (codes de simulation de *crashes* ou d'aérodynamique) qui concrétise le transfert des connaissances du monde de la recherche à celui de l'industrie.

proportions, si ce n'est plus vite, que le nombre de mailles, en dépit des progrès des sciences de l'algorithmique et du calcul.

Cette tendance conduit à l'utilisation d'ordinateurs de plus en plus puissants. Elle demande aussi un grand savoir-faire de la part des chercheurs qui doivent développer les programmes correspondants (les *codes*), suffisamment parallélisés pour exploiter au mieux ces machines. Celles-ci exigent une grande fiabilité pour pouvoir fonctionner sans faute pendant des centaines d'heures, voire des milliers dans certains cas extrêmes.

II- Les grands centres de calcul scientifique en France

La France a mis en place un dispositif national à trois niveaux pour donner aux chercheurs accès aux moyens de calcul, de stockage et de gestion de données dont ils ont besoin. Ce dispositif comprend :

- un premier niveau avec les quatre grands centres nationaux de calcul intensif que sont le CINES et l'IDRIS, le centre de calcul du CEA et celui de l'IN2P3² ;
- un échelon intermédiaire de *mésocentres*, généralistes ou thématiques, dans les régions ;
- les moyens propres des laboratoires et des universités.

Enfin, le réseau à haut débit RENATER assure l'interconnexion de l'ensemble, ainsi que l'accès des calculateurs français au réseau européen GEANT.

Le CINES

Créé en 1999, le CINES (Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur) est situé à Montpellier, où il a succédé au CNUSC (Centre National Universitaire Sud de Calcul). C'est un établissement public administratif (EPA) national placé sous la tutelle du ministère de l'Education nationale et de la recherche, avec une triple mission :

- de calcul numérique intensif ;
- d'exploitation de bases de données d'information et de documentation au profit des organismes de recherche publique ou des établissements d'enseignement supérieur qui le demandent ;
- d'expertise et formation en matière de réseaux informatiques ; le CINES collabore notamment avec le GIP RENATER dont il accueille une antenne.

² On n'a pas tenu compte ici des moyens de calcul de Météo France dans la mesure où ils sont dimensionnés en fonction des besoins opérationnels de l'établissement, même s'ils sont également utilisés pour des activités de recherche centrées sur l'amélioration des prévisions météorologiques.

Le CINES dispose principalement d'un ordinateur IBM SP 4 de 1,85 teraflop³ et d'un ordinateur SGI Origin 3 800 de 0,8 teraflop.

Le CINES emploie 50 personnes, dont 41 de l'Education nationale et 5 du CNRS.

L'IDRIS

L'IDRIS (Institut du Développement des Ressources en Informatique Scientifique) a été créé en 1993, à l'issue d'une profonde restructuration de l'informatique scientifique du CNRS, dont il est une unité propre de service (UPS). Administrativement, l'IDRIS est rattaché au département Sciences et Techniques de l'Information et de la Communication (STIC) du CNRS. Situé à Orsay, l'IDRIS intervient comme une structure de service qui assure la mise en place et l'exploitation d'un environnement de calcul intensif répondant au besoin de communautés scientifiques qui ont besoin de très grandes puissances de calcul. L'IDRIS dispose essentiellement d'un ordinateur vectoriel NEC SX-5 de 0,3 teraflop et d'un ordinateur parallèle IBM SP 4 de 6,5 teraflops.

Par ailleurs, l'IDRIS jouit également d'un certain *leadership* à l'échelle européenne en matière de réseaux de grands ordinateurs (voir p. 15).

L'IDRIS emploie une cinquantaine de personnes, essentiellement à statut CNRS.

Le CEA

Le Commissariat à l'Energie Atomique (CEA), pour sa part, a procédé il y a quelques années au regroupement de l'ensemble de ses moyens de calcul sur le seul centre de Bruyères-le-Châtel, qui relève de sa direction des applications militaires (DAM). La DAM exploite en fait deux ensembles de calcul bien distincts :

- des moyens militaires, particulièrement puissants mais radicalement isolés de l'extérieur (aucune connexion), qui concourent à la crédibilité de la dissuasion nucléaire française par les simulations qu'ils permettent après les arrêts des essais nucléaires dans le Pacifique ; ces moyens ne sont utilisés qu'à la marge pour certains besoins scientifiques très particuliers (génomique, par ex.) ; ils reposent actuellement sur un cluster HP SC 45 de 5,1 teraflops. A la suite d'un appel d'offres lancé en 2004, le CEA disposera dès fin 2005 d'une nouvelle machine de la classe des 60 teraflops.
- le Centre de Calcul de la Recherche Technologique (CCRT), qui regroupe les autres moyens de calcul du CEA ; le CCRT a pour vocation principale de satisfaire les besoins des pôles civils du CEA en matière de grands calculs scientifiques, mais aussi de pratiquer une

³ La puissance d'un ordinateur se mesure fréquemment en nombre d'opérations en virgule flottante par seconde (*floating point operation per second* en anglais) qu'il peut exécuter, d'où le nom de *flop* donné à cette unité. Ce sont surtout ses multiples qui sont utilisés : le gigaflop (10^9 flops), le teraflop (10^{12} flops) et le petaflop (10^{15} flops). Pour des applications n'effectuant pas ce type d'opérations, on recourt à d'autres unités de mesure qui reposent sur des benchmarks empiriques standardisés, tel le SPECint (cf. <http://www.spec.org/>). Sauf indication contraire, les puissances indiquées dans ce rapport sont des puissances *crête*, c'est-à-dire la puissance maximum que peut délivrer la machine. La puissance crête est évidemment supérieure, souvent d'un facteur 5 à 10, à la puissance *soutenue* qui est celle que le ordinateur peut fournir en pratique dans un fonctionnement normal.

politique d'ouverture, en particulier vers le monde industriel (EDF, SNECMA, ONERA), qui le cofinance, et de favoriser les échanges scientifiques entre partenaires ; le CCRT dispose principalement d'une machine HP SC 45 de 2,4 teraflops et d'une machine NEC SX-6 de 0,4 teraflop.

- A cela s'ajoute TERATEC qui est une initiative du CEA pour développer un centre de compétence en calcul intensif et algorithmique qui permette à ses utilisateurs de se retrouver et d'échanger sur leurs approches (ingénieurs CEA, chercheurs universitaires, CNRS, mais aussi des industriels comme Bull, EDF ou SNECMA) ; TERATEC reste essentiellement une structure d'accueil du CEA, largement financée sur fonds propres.

Le département Sciences de la simulation et de l'information du CEA-DAM compte 190 personnes. Il reçoit 15 à 20 stagiaires et produit 5 ou 6 thèses par an. Il se positionne délibérément sur le créneau de la recherche technologique. Au fil des ans, il a développé un grand savoir-faire en ingénierie architecturale, indispensable à l'exercice de son rôle de maître d'ouvrage de grands systèmes, et en matière de logiciels, notamment de logiciels libres (*open source*) qu'il utilise largement, dans un souci d'indépendance technologique.

Le centre de calcul de l'IN2P3

Enfin, le centre de calcul (CC-IN2P3) de l'Institut National de Physique Nucléaire et de Physique des Particules (IN2P3) est l'une des 18 entités de l'IN2P3, lui-même laboratoire du CNRS. Le CC-IN2P3 a le statut d'unité de service du CNRS. Il a été créé pour répondre aux besoins des laboratoires travaillant dans les domaines de la physique des particules, de la physique des astroparticules et de la physique hadronique et de la matière nucléaire. Il a une approche client pour une quarantaine d'expériences internationales, pluriannuelles et impliquant des laboratoires de l'IN2P3. Le CC-IN2P3 travaille en fait depuis 50 ans dans un cadre européen, celui du CERN, et depuis une dizaine d'années dans un cadre mondial. En terme de calcul proprement dit, les besoins de l'IN2P3 se caractérisent essentiellement par la grande quantité de données à manipuler et à stocker (de l'ordre du petaoctet (10^{15} octets), dans un futur proche pour certaines expériences), alors que les calculs sont massivement parallèles. Le CC-IN2P3 semble bien répondre aux besoins spécifiques d'une communauté scientifique bien organisée, au sein de laquelle il a trouvé sa place tant au niveau européen qu'au niveau international et au travers de laquelle il s'est doté d'un savoir-faire important en ingénierie logicielle⁴.

Le CC-IN2P3 dispose de fermes de calculateurs (1,8 teraflop). Il emploie environ 60 personnes, dont 50 % à statut CNRS et 45 % de CDD.

La mise en service prochaine au CERN du projet de *Large Hadron Collider* (LHC), dont les résultats seront mis à la disposition de la communauté mondiale, a conduit le CC-IN2P3 à s'impliquer fortement dans les *grilles* de calculateurs (voir ci-dessous pp. 16 et 21) et à participer au programme européen EGEE, coordonné par le CERN.

⁴ Notamment au travers du logiciel ROOT d'exploitation de données expérimentales (<http://root.cern.ch/>) et de ses utilisations sur les expériences Virgo et GANIL.

Synthèse

En fin de compte, il apparaît que, sur les quatre grands centres de calcul existant en France, seuls le CINES et l'IDRIS constituent réellement des centres à vocation généraliste, ouverts à l'ensemble de la communauté scientifique. Le centre de calcul de l'IN2P3 (CC-IN2P3) est, lui, orienté très nettement projet autour de la physique des hautes énergies. Pour ce qui est du CEA, s'il est à l'évidence impossible de prendre en compte les moyens militaires de la DAM dans une problématique du calcul scientifique, il concourt clairement au travers du CCRT à la satisfaction de besoins scientifiques propres aussi bien qu'externes. En tout état de cause, parmi les quatre centres, c'est certainement celui du CEA qui constitue la meilleure référence en matière de gouvernance de moyens informatiques.

Les budgets des quatre centres sont difficiles à cerner avec précision, pour plusieurs ordres de raisons :

- les coûts de personnels n'apparaissent jamais dans les budgets ;
- les investissements ont connu ces dernières années des à-coups qui ôtent beaucoup de leur signification aux montants d'une année donnée ;
- les sources de financement sont multiples : ministère délégué à la Recherche en direct pour le CINES ou via le CNRS pour l'IDRIS et le CC-IN2P3, ministère de la Défense pour le CEA-DAM, ministère délégué à l'Industrie pour des opérations ponctuelles au CEA, contrats extérieurs de recherche (CC-IN2P3, qui les utilise pour recruter du personnel en CDD) ou prestations de services pour des industriels (CCRT), le tout complété pour certains de ressources propres⁵ ;
- enfin, pour des raisons compréhensibles, le CEA n'a pas communiqué de chiffres détaillés.

Sous ces réserves, et plutôt que de chercher à reconstituer avec précision le budget 2004 des quatre grands centres, le tableau suivant tente, à partir des données recueillies par la mission et au prix de comparaisons et d'extrapolations, de reconstituer les ordres de grandeur des financements publics, en régime permanent, pour les quatre grands centres nationaux de calcul intensif.

Centre	Fonctionnement ⁶ M€	Investissement M€	Personnel M€	Coût total annuel (M€)
CINES	1,7	2,8 ⁷	0,9	5,4
IDRIS	4,1	2,8 ⁸	2,3	9,2
CEA/CCRT	4,0 ⁹	6,0 ¹⁰	p.m.	10,0
CC-IN2P3	3,2	3,5	2,1	8,8
Total	13,0	15,1	> 5,3	33,4

⁵ Produits de placements financiers pour le CINES, contrats extérieurs pour le CC-IN2P3, financement par des industriels pour le CCRT.

⁶ A l'IDRIS, la rubrique fonctionnement comptabilise les investissements, hors grosses machines.

⁷ Pour obtenir un chiffre significatif en dépit des à-coups qu'ont connus les investissements du CINES ces dernières années, on a retenu en fait le montant annuel de l'amortissement linéaire sur 5 ans des matériels qui y sont actuellement en service.

⁸ Au cours des 5 dernières années (2000-2004), l'IDRIS n'a procédé à des investissements qu'en 2000 (5,7 M€) et en 2003 (6,2 M€). Pour obtenir un chiffre significatif, on a retenu en fait la moyenne des investissements effectués sur la période 1995-2004 (27,8 M€ au total).

⁹ Y compris les frais de personnel, mais hors frais de siège du CEA.

¹⁰ Moyenne des investissements effectués par le CEA au CCRT sur la période 2003-2005 (19 M€). Pour mémoire le CEA finance 72 % des coûts du CCRT.

C'est donc un peu plus de 35 M€ qui sont dépensés annuellement dans les quatre grands centres de calcul français, la moitié en investissements, un tiers en fonctionnement et un sixième en personnel.

III- Les mésocentres et les moyens des laboratoires

Ces dernières années ont vu l'apparition de centres de calcul de taille intermédiaire, dits *mésocentres*, au sein d'universités notamment. Ces centres sont destinés à mutualiser à un niveau régional les besoins de différents laboratoires ou d'équipes de recherche. Ils offrent des possibilités raisonnables de calcul de proximité à des équipes qui n'ont pas la possibilité de s'équiper individuellement. Les mésocentres permettent ainsi de traiter de grands volumes de calcul sans engorger les grands centres nationaux, dont l'utilisation ne se justifie que pour des calculs d'une autre ampleur. Leur gestion est aussi beaucoup plus souple que celle des grands centres.

Si l'utilité de ces mésocentres ne doit donc pas être remise en cause, il n'en va pas de même de leur mode de financement. Les rapporteurs ont tenté, avec l'appui de la direction de la Recherche, d'appréhender les budgets des mésocentres, dont une partie est financée par le ministère délégué à la Recherche et une autre par les régions, sans que cela épuise le sujet. De fait, les réponses obtenues se sont révélées difficilement exploitables. L'ampleur de la tâche justifierait en fait à elle seule une mission spécifique, indispensable pour avoir une vue exhaustive des moyens disponibles et des sommes qui y sont consacrées. En toute hypothèse, compte tenu des moyens limités dont il dispose, le ministère délégué à la Recherche doit se concentrer sur une stratégie d'équipement des grands centres nationaux. Sauf exception dûment justifiée, il doit donc laisser le financement des mésocentres aux universités, qui peuvent éventuellement y contribuer grâce aux fonds qu'elles obtiennent au titre du volet recherche du contrat quadriennal, et aux régions.

Enfin, certains laboratoires se sont équipés en moyens informatiques relativement lourds. Il s'agit le plus souvent d'initiatives locales de groupes d'utilisateurs très actifs qui peuvent ainsi gérer leurs calculs au plus près de machines, dont ils sont souvent allés rechercher le financement. Le côté dynamique d'une telle approche, qui peut être à l'origine du développement de certains logiciels ou de techniques de programmation innovantes, ne doit pas pour autant faire perdre de vue le nécessaire équilibre à respecter entre moyens individuels et moyens collectifs, notamment en termes de financement.

La hiérarchisation à trois niveaux (grands centres, mésocentres, moyens propres des laboratoires) du système français est saine dans son principe, mais on peut s'interroger sur le point d'équilibre à atteindre entre les trois catégories. En outre, selon la formule très parlante d'un interlocuteur de la mission, *le système français encourage les voyageurs sans billet*. Il est en effet facile de compter sur *les autres* pour obtenir les moyens informatiques dont on a besoin. La gratuité de l'accès aux grands moyens de calcul n'entre pas pour rien dans ce comportement.

La dernière conférence *Supercomputing 2004* tenue à Pittsburgh (Etats-Unis) a d'ailleurs souligné la mauvaise utilisation générale des grosses machines aux Etats-Unis¹¹, l'immense majorité des programmes y utilisant moins de 32 processeurs. Cela n'empêche au demeurant pas lesdites grosses machines d'être saturées par ces petits programmes. Plusieurs indices donnent à penser que la situation française n'est guère différente. Selon une analyse rapide effectuée par le CINES sur son ordinateur IBM Power 4 (256 processeurs) à la demande des rapporteurs :

- 10 % seulement des heures produites utilisent 128 processeurs ou plus (la moitié de la machine) ;
- 31 % seulement des heures produites utilisent 64 processeurs ou plus (le quart de la machine) ;
- 54 % seulement des heures produites utilisent 32 processeurs ou plus (le huitième de la machine).

Il serait utile à la réflexion globale de réaliser une étude plus détaillée sur ce sujet au CINES et à l'IDRIS. Il apparaît en tout cas d'ores et déjà que certains petits utilisateurs recourent aux calculateurs de l'IDRIS uniquement pour bénéficier d'un accès gratuit à ses bibliothèques de programmes, alors qu'ils n'y sont pas à leur place en termes de ressources nécessaires, uniquement pour ne pas avoir à payer de droits d'usage de logiciels.

IV- Le diagnostic

Le système français de calcul scientifique est en difficulté en raison de la conjonction de l'accroissement des besoins par le développement de nouvelles disciplines consommatrices de calcul et leur intensification par la substitution progressive de la simulation numérique à l'expérimentation traditionnelle et du début de la course à la puissance de la fin des années 90 dans laquelle la France ne s'est pas encore positionnée.

L'université de Mannheim et l'université du Tennessee se sont associées pour publier, deux fois par an, le *TOP 500*¹², classement des 500 calculateurs les plus puissants au monde. Cette liste, dont la version la plus récente date de novembre 2004, constitue une référence mondiale, même si elle présente trois défauts principaux reconnus. Le premier est que ce classement n'est pas exhaustif : certains utilisateurs, soit pour des raisons de confidentialité, soit qu'ils n'en voient pas l'intérêt, ne déclarent pas leurs machines. Le second est que le TOP 500 n'est qu'un instantané dans un monde en évolution permanente où la durée de vie d'une machine ne dépasse pas 5 ans et où, en pratique, elle fait l'objet d'augmentations constantes de configuration (*upgrades*). Son troisième défaut est qu'il s'appuie sur l'exécution de programmes de tests arbitraires (*Linpack*) et donc non nécessairement représentatifs de l'utilisation réelle des machines¹³. Cela dit, si le TOP 500 exerce à l'évidence une dictature sur les esprits, il n'en a pas moins le mérite d'exister, de permettre des comparaisons et, surtout, de permettre de mesurer les évolutions.

¹¹ Cette situation justifie l'existence de programmes incitatifs importants conduits par le Department of Energy (DOE), tel INCITE (<http://www.lbl.gov/CS/Archive/news073103.html>), dont les critères de sélection sont ainsi définis : *Successful INCITE proposals will describe high-impact scientific research and will be peer reviewed both in the area of research and also for general scientific review comparing them with proposals in other disciplines. Applicants must also present evidence that they can effectively use a major fraction of the 6,656 processors of the IBM SP supercomputer at the NERSC Center, which is the most powerful computer for unclassified research in the United States. Applicant codes must be demonstrably ready to run in a massively parallel manner on that computer.*

¹² <http://www.top500.org/>.

¹³ Selon certains interlocuteurs de la mission, certaines machines, comme la ferme de 2 200 processeurs Apple G5 du Virginia Polytechnic Institute auraient d'ailleurs été conçues avec le souci explicite d'optimiser le déroulement des programmes de test du TOP 500, de façon à figurer dans le haut du classement.

Dans le dernier classement (novembre 2004), la France ne place que 15 machines sur les 500 premières mondiales, la première étant 41^{ème} (CEA-DAM, 5,1 teraflops¹⁴). Les machines IBM de l'IDRIS n'apparaissent qu'au 175^{ème} rang (2,6 teraflop) et au 199^{ème} rang (2,6 teraflop). La machine vectorielle NEC SX-5 de l'IDRIS (214^{ème} en 2002) et les machines parallèles du CINES (349^{ème} en 2003) et de l'IN2P3 (167^{ème} en 2003) n'y figurent plus.

Si on regarde maintenant l'ensemble du classement :

- la première machine est américaine (Blue Gene, fruit d'une coopération entre IBM et le Department of Energy) avec une puissance de 70,7 teraflops, alors que la première machine française n'affiche que 5,1 teraflops (CEA-DAM) ;
- parmi les 20 premières machines mondiales, on en trouve 8 américaines, 2 japonaises (dont l'Earth Simulator, 3^{ème} au classement), 2 britanniques, une espagnole (centre de calcul de Barcelone, 2^{ème} au classement¹⁵) et une chinoise ;
- le Royaume-Uni compte 42 machines dans le TOP 500, dont 10 dans les 100 premières du classement¹⁶ ;
- l'Allemagne compte 35 machines dans le TOP 500, dont 5 dans les 100 premières du classement.

En matière de calcul scientifique, la puissance de la machine n'est évidemment pas tout, d'autant qu'elle reste difficile à mesurer dans l'absolu et qu'elle dépend largement de la façon dont on l'utilise. En outre, bien d'autres éléments entrent en ligne de compte dans la qualité de la recherche. C'est ainsi que l'Allemagne dispose de 2,5 fois la puissance de calcul de la France mais qu'il serait absurde d'en conclure que la science allemande est 2,5 fois meilleure que la française. Cela dit, il est inquiétant de constater que la diminution du nombre de machines française et le recul des machines restantes dans le classement s'accroissent depuis 2002. Alors que la France comptait 28 machines dans les 500 premières mondiales (5,6 %) en 2000, elle n'en a plus aujourd'hui que 15 (3,0 %). Alors qu'elle détenait 3,2 % de la puissance de calcul totale des 500 premières machines mondiales en 2000, elle n'en détient plus que 1,9 % aujourd'hui. Alors qu'en termes de puissance de calcul elle était 4^{ème} mondiale en 2002 et 5^{ème} en 2003, elle n'est plus que 6^{ème} en 2004. Les moyens français ont été bons jusque vers 2000. C'est la mise en service du supercalculateur japonais Earth Simulator qui a mis en évidence le retard français. Une simulation qui prend deux mois à l'IDRIS ne prend que quatre ou cinq jours sur l'Earth Simulator.

Or, qu'on le veuille ou non, l'environnement international du monde de la recherche se caractérise par une course à la puissance de calcul menée par le Japon et les Etats-Unis, mais dans laquelle s'inscrivent aussi nos voisins et partenaires, qui maintiennent ainsi leurs positions, alors que nous décrochons. De manière générale, les gouvernements américain, japonais, allemand et britannique sont proactifs en matière de calcul scientifique. Au-delà des seuls équipements, ces politiques ont un effet positif sur l'organisation des équipes de recherche et leur motivation à investir dans le calcul intensif.

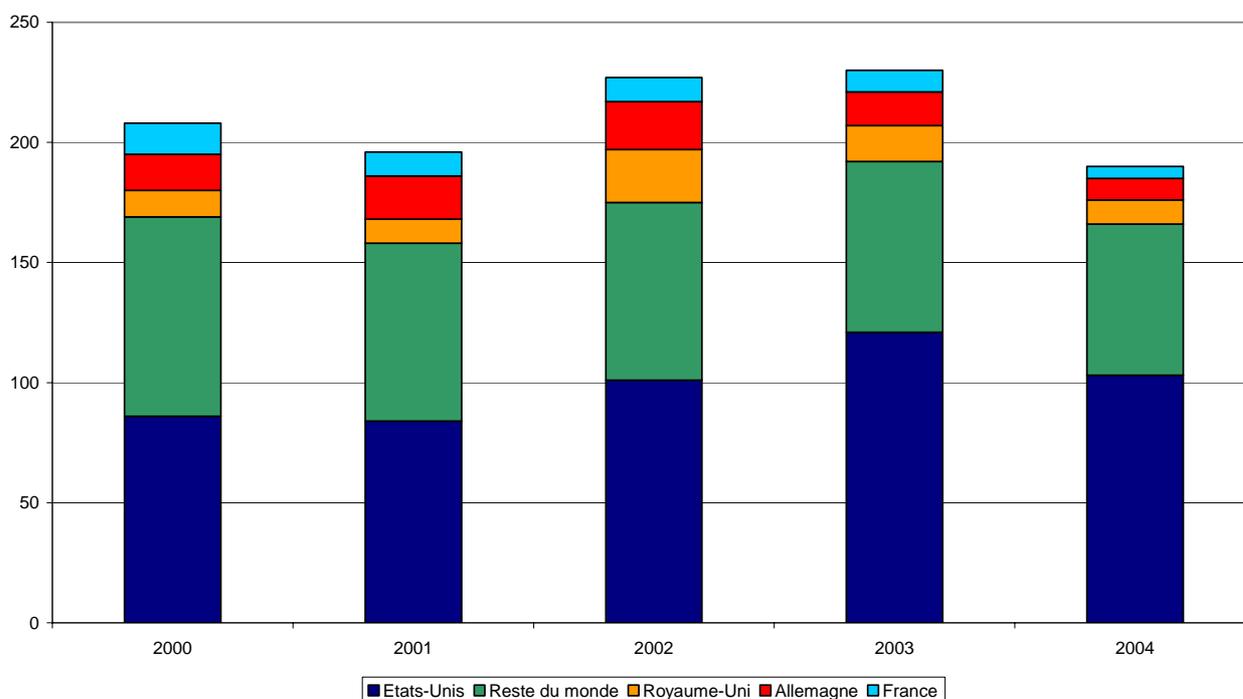
¹⁴ Cette machine, installée en 2001, doit être remplacée fin 2005 par une machine Bull NovaScale à 8 704 processeurs d'une puissance de 10 teraflops soutenus, soit de l'ordre de 60 teraflops crête. Toutes choses égales d'ailleurs, cette nouvelle machine se placerait au 2^{ème} ou au 3^{ème} rang du TOP 500 de novembre 2004. Ceci montre bien le caractère éminemment fugace de ce classement.

¹⁵ Le gouvernement espagnol a mis en œuvre une politique extrêmement volontariste en matière de calcul scientifique, avec l'installation à Barcelone d'un calculateur IBM de 40 teraflops, connu sous le nom de *Mare Nostrum* et destiné aux applications médicales, aux études climatologiques et à la recherche sur les nouveaux matériaux, pour un investissement de 70 M€ Reste à voir ce que donnera sur le long terme cette politique qui a temporairement hissé l'Espagne à la deuxième place du TOP 500.

¹⁶ Conséquence de l'importance de la place de Londres dans le monde des affaires, 29 machines rentrent dans la catégorie *Industry* qui, ici, recouvre essentiellement des banques. On y trouve aussi, dans le domaine pétrolier, trois machines de la Compagnie Générale de Géophysique, société française qui exploite des forages pétroliers en mer du Nord.

Si on extrait maintenant du TOP 500 les seuls calculateurs catalogués *academic* ou *research*¹⁷, soit un parc de 190 à 230 machines selon les années, pour obtenir des références plus pertinentes pour ce rapport, la France qui y figurait pour 13 en 2000 n'y figurait plus que pour 9 en 2003 et pour 5 en 2004. Dans le même temps, elle passait de 2,3 % de la puissance de calcul totale à seulement 1,3 %. Il est vrai que la montée en puissance des pays asiatiques, Japon, Corée et maintenant Chine, tend mécaniquement à réduire la part des pays occidentaux. Il est vrai aussi que l'Allemagne semble faiblir, passant entre 2000 et 2005 de 15 machines à 9 et de 7,1 % de la puissance de calcul totale à 2,9 %. Quant à l'apparente progression britannique, elle demande à être nuancée par le fait que la moitié de sa puissance de calcul (33 teraflops sur 65) est le fait des deux machines du *European Center for Medium term Weather Forecast* (ECMWF) de Reading, organisation internationale, donc non vraiment britanniques. En revanche, la progression américaine suit assez rigoureusement la loi de Moore¹⁸. Il en va au demeurant de même pour les pays classés *reste du monde* dont les moyens de calcul sont à plus de 50 % ceux du Japon, de la Corée, de Taiwan, de Hong Kong et de la Chine et qui tendent à se rapprocher globalement des Etats-Unis.

nombre de calculateurs dans le TOP 500 "research" + "academic"



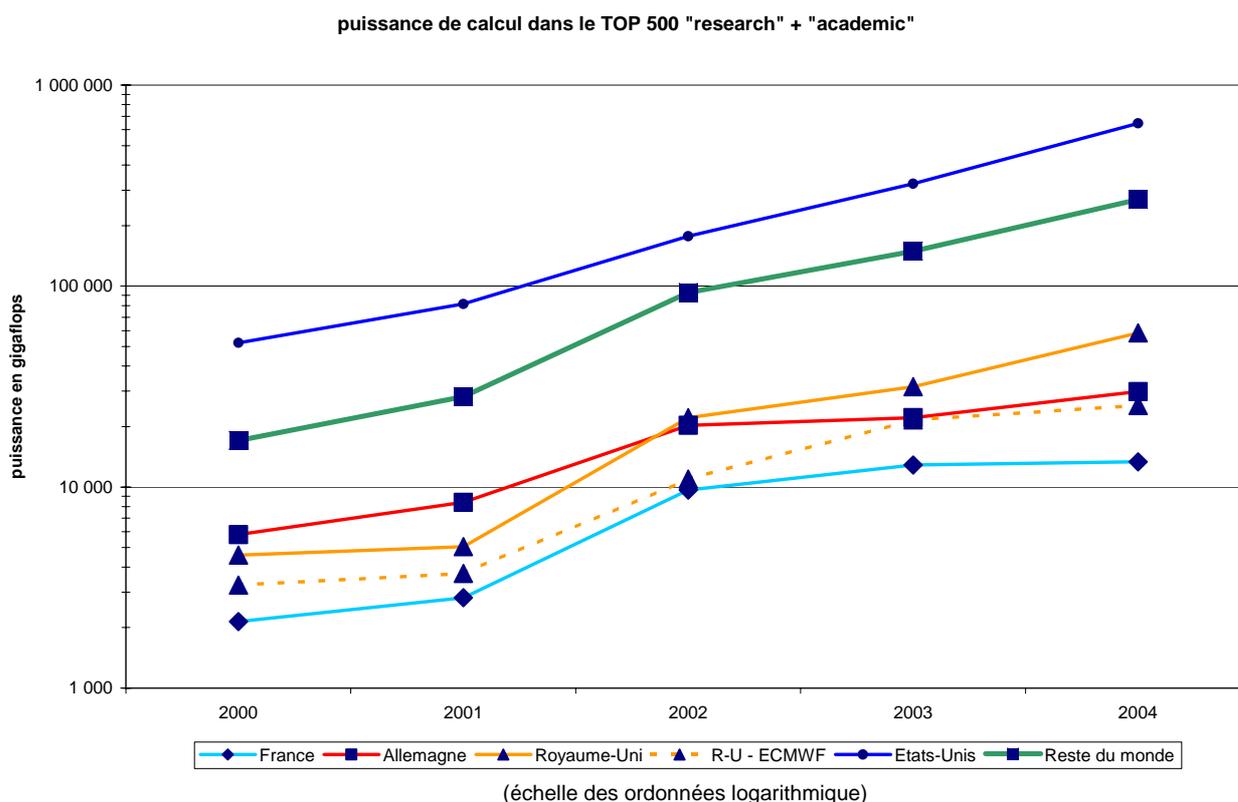
Cet état de choses n'aide évidemment pas nos chercheurs à bien se placer dans la compétition internationale, face à des équipes étrangères qui disposent de ressources supérieures. Cela obère leur capacité à participer en bonne place à des projets internationaux et européens et réduit encore un peu plus l'attrait de la recherche française. A l'inverse, il n'est pas indifférent de savoir que

¹⁷ Sont ainsi écartées les machines étiquetées *classified*, *government* et *industry* (au sens anglais du terme, c'est à dire non seulement l'industrie au sens manufacturier du terme, mais aussi les activités de services, comme les banques, les compagnies d'assurance, les opérateurs de télécommunications, etc.).

¹⁸ Loi empirique qui affirme que la puissance des calculateurs double environ tous les 18 mois à 2 ans. De fait, la puissance de calcul américaine a été multipliée par 12 entre 2000 et 2004, soit un doublement tous les 22 mois, alors que la puissance française n'a été multipliée que par 6 pendant le même laps de temps.

le Japon paye les frais de premier séjour de chercheurs européens pour qu'ils viennent utiliser gratuitement sur place l'Earth Simulator. Cette démarche est rien moins qu'innocente car elle vise bien à terme à assécher la recherche européenne, dans un domaine, la climatologie, où le Japon ne se situe pas aujourd'hui dans les meilleurs mondiaux. En encourageant par défaut de tels errements, on contribue de fait à délocaliser l'expertise scientifique nationale et à la transférer à d'autres.

Les statistiques publiées par l'organisation ARCADE¹⁹, qui ramènent l'effort des principaux pays européens en matière de calcul intensif à la taille de chacun d'eux, exprimée en termes de population ou de produit intérieur brut, donnent également une image attristante de la situation, dans laquelle notre pays apparaît systématiquement en avant-dernière position, loin derrière le Royaume-Uni ou l'Allemagne, mais aussi très loin derrière le Danemark ou la Suède.



Le CINES souffre à l'évidence de sa petite taille, tant vis-à-vis d'autres centres européens avec lesquels il pourrait envisager des partenariats, Barcelone notamment (40 teraflops), que vis-à-vis de l'IDRIS, lui-même à la marge par rapport à ses partenaires de DEISA²⁰. En outre, le statut d'EPA n'apparaît pas particulièrement bien adapté à sa situation. Enfin, pour universitaire qu'il soit, l'environnement montpelliérain ne constitue pas un terrain de choix pour le calcul intensif.

Quant au CNRS, avec l'IDRIS il se retrouve responsable d'une mission nationale de calcul scientifique qu'il n'a pas vraiment demandée et dont on ne l'a pas vraiment chargé. Le rattachement de l'IDRIS au département STIC du CNRS n'a d'ailleurs pas de sens. A tout le moins, s'il

¹⁹ <http://www.arcade-eu.info/index.html>. ARCADE est une organisation européenne non-gouvernementale à but non lucratif destinée à favoriser les échanges de savoir et d'informations sur les politiques et les infrastructures en matière de calcul intensif.

²⁰ Sur DEISA, voir ci-dessous p. 15.

devait rester dans le cadre du CNRS, il conviendrait de changer son statut d'unité propre du département STIC en celui d'unité mixte de service (UMS).

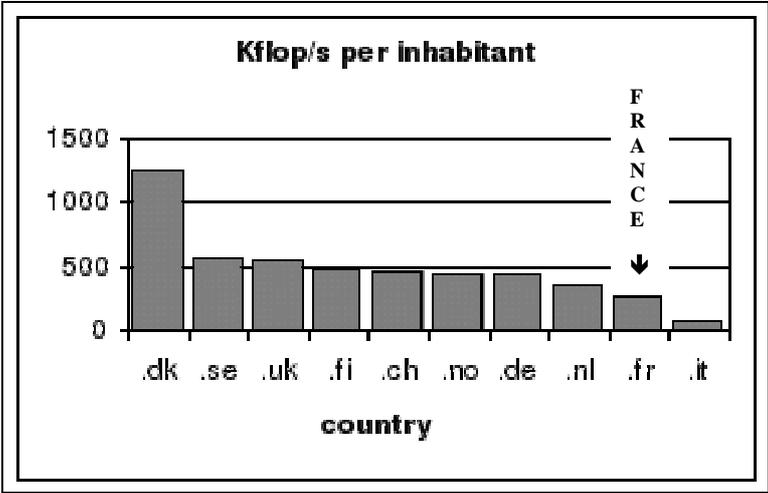


Figure 1 : puissance de calcul par habitant en Europe

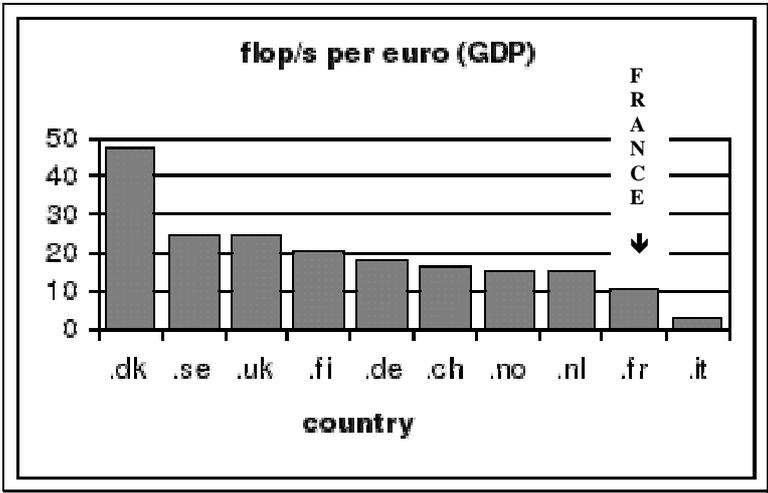


Figure 2 : puissance de calcul rapportée au PIB en Europe

Cela dit, même s'ils ont des statuts différents, des tutelles différentes et des gestions distinctes, le CINES et l'IDRIS ont une approche coordonnée face à la communauté scientifique, grâce à l'existence de comités thématiques communs. Au nombre de neuf²¹, ces comités thématiques couvrent les différents domaines des sciences qui utilisent le calcul intensif. Leur rôle consiste à évaluer les demandes de ressources informatiques des laboratoires et à les présenter aux deux conseils scientifiques du CINES et de l'IDRIS.

Cette approche commune sera complétée en mars 2005 par la mise en réseau des calculateurs du CINES et de l'IDRIS, qui fera que l'utilisateur ne les verra plus que comme un centre unique.

Pour le reste, le CINES et l'IDRIS se comportent essentiellement comme de simples prestataires de service, sans vraie valeur ajoutée complémentaire et sans activité de recherche propre. Ce choix, qu'il soit délibéré ou subi, leur est nuisible, tant il est vrai que les grands centres de calcul étrangers entretiennent autour d'eux une importante activité de recherche dans le domaine du calcul scientifique. Ils peuvent ainsi animer efficacement une activité de service aux utilisateurs scientifiques et les soutenir dans la mise en œuvre et la conception de leurs codes²². Le problème français semble donc largement structurel.

Le système est d'autant plus sclérosé que la rotation du personnel est faible. Elle est même carrément nulle au CINES. La moyenne d'âge y est de 50 ans et conduira à des départs massifs à la retraite entre 2007 et 2014, sans qu'on voie de piste sérieuse pour assurer le renouvellement du personnel. Au demeurant, le CINES et l'IDRIS se heurtent à des difficultés de recrutement du fait des niveaux de salaires qu'ils peuvent proposer dans un univers hautement concurrentiel, même s'ils bénéficient de l'effet de carte de visite de l'Université qu'ils procurent.

Au vrai, un certain nombre de communautés scientifiques françaises semblent manquer d'ambition en matière de calcul et se réfugier commodément derrière la persistance des contraintes budgétaires pour justifier l'absence de leur part de toute réflexion prospective et stratégique en la matière.

Des quatre grands centres français, le CEA apparaît finalement comme le seul à avoir une vraie gouvernance de ses moyens informatiques. Le CINES et l'IDRIS fonctionnent largement sur la base de la reconduction du passé, quand ils ne mènent pas leur propre politique. La transparence et la prise en compte des priorités gouvernementales ne semblent pas les qualités premières du système²³. L'organisation en comités thématiques tend d'ailleurs à conforter les situations acquises (climatologie, sciences de l'Univers, ...) et à ignorer les besoins émergents (biologie, matériaux, nanotechnologies, ...). De fait, le taux de renouvellement des utilisateurs ne dépasse pas 20 % par an. Quant à l'effort de prospective, il n'est bien développé qu'au CEA et à Météo -France, tous deux soumis à des contraintes fortes, de caractère militaire pour le premier, de caractère opérationnel pour le second.

Pour le reste, la réflexion sur les besoins à moyen ou long terme des différentes communautés scientifiques reste extrêmement limitée en dehors de l'effort ponctuel effectué à la

²¹ Environnement ; mécanique des fluides ; milieux réactifs ; astrophysique, géophysique, terre solide ; électromagnétisme et plasmas chauds ; mathématiques, mathématiques appliquées, systèmes modèles ; systèmes moléculaires organisés et biologie ; chimie quantique et modélisation moléculaire ; physique, chimie et propriété des matériaux.

²² Comme les services d'assistance et d'optimisation fournis par le Computer Services for Academic Research (CSAR) britannique (<http://www.csar.cfs.ac.uk/services/support/index.shtml>) ou ceux fournis par le CERN à ses utilisateurs (<http://services.web.cern.ch/services/>).

²³ C'est ainsi que le GIP Mercator, qui regroupe le CNES, le CNRS, l'IRD, l'IFREMER, Météo France et le SHOM, n'a pu obtenir pour l'année 2005 que 150 000 heures de calcul pour 410 000 heures demandées sur le calculateur IBM de l'IDRIS au titre du projet franco-allemand d'océanographie Drakkar. Dans le même temps la direction du centre a gelé des heures sur cette machine en vue d'une utilisation dans le cadre de DEISA.

demande des rapporteurs²⁴, alors qu'il pourrait utilement éclairer aujourd'hui les futurs choix de machines et l'orientation des travaux de développement de codes appelés à fonctionner sur d'autres générations de machines que celles d'aujourd'hui.

La multiplicité des sources de financement du calcul haute performance (Education nationale, CNRS, Défense, Industrie, Commission européenne, contrats extérieurs, financements industriels, ressources propres, prêts de personnel, ...) et la multiplicité des statuts juridiques (établissement public industriel et commercial pour le CEA, établissement public administratif pour le CINES, laboratoires du CNRS pour l'IDRIS et le CC-IN2P3), sans parler de celle des statuts des personnels, ajoutent à l'opacité du système.

Le CINES et l'IDRIS n'ont pas de système de facturation, même *pro forma*. Il est frappant de voir qu'on ne connaît pas le coût réel de l'heure de calcul en France. Malgré des recommandations anciennes sur les grands équipements, on se trouve face à une économie non monétaire, où ne sont jamais comptés les coûts d'un personnel qui relève de statuts et d'organismes divers. Ceci rend impossible toute comparaison sérieuse avec des solutions d'infogérance. Cela n'incite pas non plus les utilisateurs à calibrer leurs demandes au plus juste.

Au final, il est frappant de constater qu'en dehors du CEA-DAM, dont les exigences de la dissuasion nucléaire garantissent la pérennité des moyens de calcul, l'équipement des autres centres (CINES, IDRIS, IN2P3) a procédé sans planification sérieuse à moyen ou long terme et sans vraie continuité dans les budgets²⁵, dans un domaine où les machines sont obsolètes en 3 ou 4 ans, alors même que le développement des grands codes demande 5 ans de travail et restent utilisés pendant plus de 10 ans.

Si cette remarque est vraie pour chacun de ces trois centres pris individuellement, elle l'est a fortiori au niveau global. On ne voit pas en France d'instance organisée où se discutent les choix stratégiques à long terme en matière de calcul intensif. On voit encore moins d'instance qui appréhende le problème dans sa globalité et pas uniquement sous l'angle de l'augmentation de puissance des machines, mais qui tienne compte aussi des évolutions en matière d'ingénierie logicielle, de nouvelles applications (apparition de la simulation numérique, de la restitution graphique des résultats, ...), voire de l'émergence de nouveaux domaines d'utilisation tels que ceux déjà cités (biologie, nanotechnologies, ...). Dans un secteur d'activité en évolution aussi rapide, il est pourtant indispensable d'être à l'écoute de ce qui se passe dans le monde, de ne pas céder aux effets de mode, voire de ne pas tomber dans le piège d'annonces destinées uniquement à leurrer ou à induire en erreur des concurrents étrangers. Il est donc essentiel d'être vigilant, critique et réactif si quelque chose de nouveau se passe soudainement. En un mot, le développement du calcul scientifique en France ne peut faire l'économie d'une vraie démarche d'intelligence économique.

²⁴ C'est une raison supplémentaire pour saluer ici les initiateurs de l'atelier tenu au CERFACS (voir p. 19) le 1^{er} septembre 2004 sur le thème *Le climat du XXI^{ème} siècle et les simulations frontière*, ainsi que la direction de l'INSU qui a mis en place, pour la deuxième fois, un Groupe d'Etudes Prospectives sur le Calcul Intensif (GEPCI 2). Les travaux du CERFACS font ressortir que, dans la limite du thème retenu, les scientifiques ne pourront apporter aux politiques de réponses à un certain nombre de questions déterminantes pour l'avenir de l'humanité que si les puissances de calcul actuelles sont multipliées par un facteur de 10^2 à 10^5 à horizon de 10 à 20 ans, selon les thématiques. Ces chiffres n'ont au demeurant rien d'absurde puisque, selon la loi de Moore déjà évoquée, une croissance d'un facteur 10^4 est atteinte en 20 ans. Quant au rapport du GEPCI 2, il fait le point des évolutions attendues en matière de programmes de climatologie, d'océanographie et de météorologie sur la période 2005-2008.

²⁵ C'est l'occasion de souligner que le statut d'EPA du CINES et l'obligation qu'il lui crée d'avoir des comptes propres et de pratiquer des amortissements comptables lui assure, année après année, la constitution d'une réserve financière qui facilite grandement, le moment venu, le financement de machines de remplacement.

V- La France et l'Europe

Si la France se doit de combler son retard en matière de calcul scientifique et de mettre en œuvre une programmation nationale, elle ne peut pour autant éviter de passer à la dimension européenne si elle veut prétendre se hisser aux niveaux du Japon et des Etats-Unis. Au demeurant, dans ce contexte, l'adjectif *européen* ne vise pas nécessairement le seul cadre de l'Union européenne mais aussi bien des coopérations multilatérales. La thématique calcul scientifique en tant que telle n'existe d'ailleurs pas à Bruxelles.

La dimension européenne du calcul intensif est multiforme. Elle concerne :

- l'accord DEISA, promu par l'IDRIS, qui vise à échanger de la puissance de calcul mais qui, s'il limite la course à la puissance, ne la supprime pas complètement dans la mesure où chaque partenaire, tout à la fois pour des raisons de prestige et de pouvoir, cherche à préserver son poids relatif dans l'ensemble ;
- le projet EGEE, porté par le CERN et relayé en France par le CC-IN2P3, dans lequel l'internationalisation est consubstantielle à la nature même des projets de grilles de PC ;
- la préparation du 7^{ème} PCRD (Programme Commun de Recherche et de Développement) ;
- enfin, le projet européen d'infrastructure de calcul intensif en cours de négociation entre l'Allemagne, la France et le Royaume-Uni.

DEISA

Le projet DEISA (*Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications*) vise à créer, par interconnexion des moyens existants, un centre de calcul virtuel entre la France, l'Allemagne et l'Italie, avec un élargissement prévu à 11 partenaires, hors Royaume-Uni. Pour intéressante qu'elle soit tant du point de vue de l'europanisation que de l'optimisation de l'utilisation des machines, l'approche DEISA ne résoudra pas les problèmes de gros calculs couplés. Elle reste bornée par le fait qu'elle ne fournira jamais l'équivalent d'un supercalculateur comparable aux meilleures machines disponibles au Japon ou aux Etats-Unis. DEISA ne peut de fait offrir de puissance de calcul supérieure à celle qu'offre le calculateur le plus puissant du réseau. En revanche, DEISA permet une optimisation de la répartition des charges entre calculateurs. Ainsi, l'IDRIS n'affecte actuellement pas plus du quart d'une machine à une seule tâche. Avec DEISA, il sera possible d'envoyer des jobs banalisés en Allemagne ou en Italie et de libérer ainsi les 3/4 de la machine pour un seul utilisateur. Il faut signaler que dans DEISA les droits de vote dépendent de la puissance installée. Si la personnalité du directeur de l'IDRIS et promoteur du projet a permis jusqu'à présent à la France de jouer un rôle moteur dans ce projet, sa position pourrait s'effriter rapidement en l'absence de renouvellement de nos grands moyens de calcul.

En revanche, la démarche DEISA prendrait tout son sens dans le cadre du projet européen d'infrastructure de calcul intensif, détaillé ci-après (voir pp. 16 et 27), dans lequel elle devrait s'inscrire.

Les grilles

Pour sa part, le CC-IN2P3 participe aux projets européens de grilles²⁶ de calculateurs Datagrid et EGEE, avec l'objectif d'avoir une capacité de production académique et industrielle. Le développement des grilles présente un intérêt tout particulier pour le dépouillement des futures expériences menées au CERN sur le LHC dans le cadre du programme LCG (*LHC Computing Grid*), mais aussi potentiellement pour la biologie, les sciences de la Terre et, pourquoi pas, à terme pour la climatologie. Datagrid et EGEE (*Enabling Grids for E-science in Europe*) sont des projets de la Commission européenne. L'objectif de Datagrid est de bâtir une infrastructure de prochaine génération de calcul intensif et de partage de bases de données à grande échelle. EGEE de son côté rassemble les experts de 27 pays pour développer en Europe une infrastructure de grille de services accessibles en permanence aux scientifiques.

Le 7^{ème} PCRD

Le 7^{ème} PCRD européen est en cours d'élaboration. Le moment est donc opportun pour y faire prendre en compte les besoins du calcul scientifique. On peut se demander s'il ne serait pas intéressant d'y inclure le développement d'un calculateur de hautes performances qui, compte tenu de son coût, ne peut être développé qu'en coopération européenne et dont le marché est trop étroit pour permettre un financement purement industriel. L'ambition ne serait alors pas tant de se livrer à une course à la puissance avec les Etats-Unis ou le Japon que d'assurer à l'Europe le maintien de compétences en matériel et en logiciel, mais aussi une certaine indépendance technologique garante de son indépendance politique.

A cet égard l'annonce récente par le CEA du choix d'une machine Novascale de Bull pour son programme TERA 10 est peut-être un signe. Un regroupement au niveau européen des moyens de Bull avec ceux de Quadrics (Royaume-Uni²⁷) et de Scali (Norvège) en matière de réseaux, ainsi qu'avec ceux de PME allemandes du logiciel pourrait faire sens. En toute hypothèse, la préparation du 7^{ème} PCRD fournira à l'évidence une occasion de se prononcer sur ce type d'objectif.

L'initiative tripartite Allemagne - France - Royaume-Uni

Le projet d'infrastructure européenne de calcul intensif en cours de négociation entre l'Allemagne, la France et le Royaume-Uni paraît extrêmement intéressant, dans la mesure où ce n'est que par une approche et des financements multilatéraux qu'il sera possible de se procurer et d'exploiter des machines qui se situent dans les toutes premières mondiales par leur puissance. L'idée est que les trois pays achètent tous les deux ans un calculateur de très hautes performances qui serait installé à tour de rôle dans chacun des trois pays. Un pays donné verrait ainsi sa machine renouvelée tous les 6 ans, ce qui correspond *grosso modo* à la durée de vie normale de ce type de matériel. Selon

²⁶ Les termes *grille*, en français, ou *grid*, en anglais, désignent des réseaux d'ordinateurs qui peuvent se partager l'exécution d'une même tâche. En pratique, ils recouvrent des réalités extrêmement diverses qui vont de l'interconnexion de quelques grands calculateurs (DEISA) à celle de milliers d'ordinateurs personnels (*Personal Computers* ou PC), soit au travers de réseaux dédiés (RENATER, GEANT), soit par Internet.

²⁷ Quadrics est une société britannique, mais son capital est détenu par la holding publique italienne Finmeccanica.

les meilleures estimations actuelles, l'investissement se monterait à 200 M€ tous les deux ans et le fonctionnement à 20 M€/an les deux premières années, 40 M€/an les deux années suivantes, pour se stabiliser à 60 M€/an au-delà. Dans l'hypothèse d'un soutien à hauteur de 35 % de la Commission européenne et de 15 % d'autres entités, dont des industriels, ainsi que de l'utilisation du système par d'autres pays associés, le coût moyen annuel pour la France serait de 18 M€, ce qui paraît raisonnable au regard des enjeux.

La hiérarchie des centres de calcul pourrait ainsi se voir adjoindre un quatrième niveau, européen, dédié aux véritables très gros programmes, à qui ne suffiraient pas les trois niveaux nationaux. Comme indiqué plus haut, dans une telle perspective, l'initiative DEISA prendrait un sens nouveau, dans la mesure où elle préfigurerait l'interconnexion des trois centres de grande puissance installés dans chacun des trois pays.

Le rapport annexe, réalisé sur la base des contributions reçues par les rapporteurs, donne des indications sur les principales avancées scientifiques que rendrait possible cet accroissement significatif des moyens de calcul à la disposition de nos chercheurs.

VI- Les logiciels

Le rôle des logiciels dans la mise en œuvre des grands calculateurs scientifiques est fondamental. Il se situe à trois niveaux :

- les systèmes d'exploitation qui permettent au ordinateur de fonctionner et à l'utilisateur d'avoir accès aux services de base ;
- les compilateurs qui assurent la traduction du programme en langage machine, son implantation et son exécution ;
- les programmes d'application ou logiciels applicatifs qui permettent de résoudre le problème spécifique du chercheur (climatologie chimie quantique, ...).

Les couches d'*intergiciel* et de *run time* sont spécifiques du calcul scientifique (parallélisme dans les applications, systèmes de fichiers parallèles de grande taille, optimisation de la performance, fiabilisation du fonctionnement d'ensemble face à la défaillance de composants²⁸). Elles exigent une connaissance intime de la machine. Elles recourent très largement aux logiciels libres (MPI, systèmes de fichiers parallèles, ...). Ceci résulte en partie de l'étroitesse du marché, mais aussi de l'impulsion constante donnée par les grands utilisateurs publics. Toutefois l'optimisation et l'*industrialisation* (fiabilisation, robustesse, documentation, ...) de ces logiciels sont souvent réalisées avec l'aide d'équipes industrielles financées par les constructeurs.

Les logiciels système exigent une parfaite intégration avec le matériel, pour assurer le niveau requis de fiabilité. Pour autant, le logiciel libre Linux tend à se généraliser, à côté de logiciels très spécifiques réalisés en collaboration étroite entre certains grands utilisateurs et les constructeurs d'ordinateurs, qui s'entourent parfois d'une communauté travaillant selon le principe du logiciel libre.

Les compilateurs constituent un quasi-monopole des constructeurs américains et japonais d'ordinateurs (IBM, SGI, ...) et des fabricants de microprocesseurs (Intel, ...). En créant une

²⁸ Ce problème devient critique avec les architectures actuelles de calculateurs qui regroupent des milliers de processeurs. Si un processeur a un MTBF (*Mean Time Between Failure* ou temps moyen entre pannes) de 10^{-8} s^{-1} , c'est-à-dire environ une panne tous les 3 ans, un ordinateur à 1 000 processeurs connaîtra une panne de processeur toutes les 100 000 secondes, soit toutes les 28 heures. L'exécution d'un grand code qui nécessite plusieurs jours de calcul aura donc de fortes chances de se trouver confronté à une panne de processeur...

concurrence, l'apparition de la suite de logiciels libres GCC de la FSF a contribué à l'amélioration des performances et de la qualité mais aussi à l'extrême concentration du marché. C'est un bon exemple d'une communauté du logiciel libre qui a pu se créer et influencer la situation concurrentielle du marché, en mettant en œuvre les résultats scientifiques publiés et qui bénéficie de la coopération de nombreux acteurs industriels.

A ce niveau des systèmes d'exploitation et des compilateurs, les besoins techniques ne correspondent pas au marché visé par les constructeurs d'ordinateurs. Ceci conduit les grands centres de calcul, en particulier américains, d'une part, à préserver un savoir-faire important dans l'intégration de ces systèmes et, d'autre part, à s'appuyer sur une utilisation habile de développements en logiciels libres qui leur permettent d'intervenir à côté de constructeurs et d'intégrateurs. En France, le CEA-DAM conduit une série de projets de ce type pour s'assurer la maîtrise de logiciels clés, dans une perspective d'indépendance technologique.

A l'exception de rares secteurs comme la chimie quantique qui utilisent des codes commerciaux, les chercheurs développent les leurs. Cela correspond d'ailleurs bien à leur état d'esprit. Les équipes de recherche souhaitent conserver la maîtrise complète de la conception et du développement de leurs codes, ce qui se comprend, et ne voient les centres de calcul que comme des prestataires de service, ce qui se comprend moins. Les grands codes représentent le travail d'un groupe de chercheurs, pendant une période qui peut atteindre 5 ans et plus. Ainsi l'investissement dans la modélisation numérique ne peut se faire que dans l'optique de plans à moyen terme et les retards sont difficiles à combler.

Dans les domaines scientifiques où la simulation numérique est la mieux implantée, des méthodologies ont été mises en place pour garantir la bonne fin de la réalisation des codes et la possibilité de les exploiter suffisamment longtemps. La complexité croissante de ces développements devrait inciter à rapprocher le développement de ces grands logiciels de l'expertise en génie logiciel, ainsi qu'à une meilleure reconnaissance de ce type de travail dans la carrière des chercheurs.

Pour autant, beaucoup de secteurs scientifiques en France manquent de maturité en ingénierie des grands codes et ne disposent généralement pas des compétences informatiques nécessaires à leur optimisation et à leur industrialisation en vue de leur exploitation sur de très grosses machines et de leur portabilité sur d'autres machines que celles habituellement utilisées. Un chercheur seul, voire une équipe de recherche, ne peut plus développer ses codes par ses propres moyens. Il ne suffit pas d'intégrer quelques logiciels du commerce (simulation, visualisation, ...) à des éléments développés en interne. C'est pourquoi les équipes de recherche réclament des postes d'ingénieurs dédiés, mais n'envisagent ni mutualisation ni externalisation, dont elles ne comprennent pas vraiment l'intérêt. Il est significatif à cet égard que le CEA fasse un très gros effort sur l'ingénierie des codes. On ne peut d'ailleurs que déplorer l'absence de formation générale au calcul scientifique dans le système universitaire français.

Ces communautés communiquent certes sur le plan de l'architecture et de la meilleure utilisation des machines par le biais des comités d'utilisateurs mis en place par le CINES et l'IDRIS²⁹. En revanche, elles ne communiquent pas assez sur le plan des méthodes et des algorithmes, elles n'utilisent sans doute pas assez non plus les diverses bibliothèques qui existent en libre accès et ne participent du coup pas assez à leur développement. Le manque d'interdisciplinarité entre chercheurs, mathématiciens appliqués et informaticiens a frappé les rapporteurs.

A la notable exception près du CERFACS (une centaine de personnes) et de l'INRIA dans certains de ses projets, la France ne semble pas disposer d'organisations dédiées à ce que les Américains appellent les technologies algorithmiques et qu'ils estiment cruciales pour les progrès futurs du calcul intensif.

²⁹ Des structures similaires existent, avec un rôle encore plus important, pour la partie civile du CEA et à l'IN2P3.

Créé en 1987, le CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique) a pris en 1996 sa forme actuelle d'une société civile³⁰ dont les actionnaires sont EADS, SNECMA, EDF, le CNES et Météo France. Il s'est attaché au développement de la modélisation et à la formation des *computer scientists* pour la préparation des futurs outils de leurs actionnaires. Il reste donc dans le domaine de la mécanique des fluides au sens large. Il compte une centaine de personnes, chercheurs, ingénieurs, informaticiens et dispose d'un budget annuel de 6 M€ (salaires compris) provenant à 40 % de subvention de ses actionnaires et à 60 % de contrats externes. Il ne dispose pas de moyens de calcul propres importants, ce qui n'est d'ailleurs pas son objectif. Le positionnement du CERFACS est original dans le paysage français, alors qu'il est classique aux Etats-Unis ou en Allemagne (Fraunhofer). Le CERFACS essaye de nouer des relations avec le CINES et d'y placer ses produits.

La mission n'a en tout cas pas identifié de source de financement en matière d'ingénierie informatique pour le calcul scientifique en France. Au vrai, il ne semble pas exister en France de liaison entre les grands centres de calcul et le monde de la recherche en informatique, INRIA notamment. Pourtant le développement de codes optimisés, robustes, facilement portables et bien documentés procure une vraie valeur ajoutée qui résulte des gains de temps dans le développement des programmes, dans l'utilisation de la puissance de calcul et dans la transmission organisée du savoir.

A cet égard, il est intéressant de voir que le programme américain ASCI (*Accelerated Strategic Computing Initiative*) initié par le Department of Energy pour promouvoir la simulation numérique d'explosions atomiques comprend une forte composante informatique et calcul scientifique (*computer science*) qui confortera encore l'avance américaine en ce domaine. Le programme SciDAC³¹ destiné à satisfaire cet objectif dispose d'un financement de 60 M\$³². Il est tout aussi intéressant de voir que chez nous ce point n'a pas échappé à de bons esprits puisque le fait est rapporté dans le *Rapport scientifique 2003* de l'IDRIS³³. Ce thème de la nécessaire coopération entre chercheurs, spécialistes des mathématiques appliquées et *computer scientists*, de la création d'équipes multidisciplinaires et de la nécessaire formation d'informaticiens de haut niveau, est d'ailleurs lourdement récurrent dans les nombreux rapports américains récents consacrés au calcul intensif et qui y voient une des conditions d'un *leadership* des Etats-Unis en calcul de hautes performances³⁴.

En fait, c'est une approche nouvelle du problème qu'il faut envisager en recourant à un fonctionnement en équipe projet regroupant l'ensemble des compétences nécessaires, qu'elles soient scientifiques (climatologue, chimiste, biologiste, ...) ou informatiques (architecte, algorithmicien, programmeur, ...). Avec de gros moyens de calcul comme ceux d'aujourd'hui, il est indispensable de maîtriser la conception du logiciel. Un certain nombre de personnes rencontrées par la mission s'accordent d'ailleurs à dire que, rien qu'en soignant la conception d'un programme, il est possible de gagner un facteur 10 en efficacité dans son exécution. C'est d'ailleurs pourquoi le monde industriel qui développe de grands codes (télécommunications, aéronautique, défense, ...) recourt à des ateliers logiciels.

Une politique active pour participer aux développements des logiciels essentiels dans le cadre *open source* et pour rechercher le leadership sur certains des projets devrait conforter notre capacité à mettre en œuvre et intégrer des très grands systèmes. Elle permettrait également de soutenir l'offre industrielle, de matériels et de services. C'est la politique que met en œuvre le CEA autour de son projet TERATEC de pôle de compétences sur le calcul de hautes performances, en rassemblant

³⁰ Les ressources du CERFACS proviennent à 40 % de subventions de ses actionnaires et à 60 % de la vente de ses prestations à des tiers.

³¹ *Scientific Discovery through Advanced Computing* (<http://www.scidac.org/>).

³² Investissement pluriannuel (cf. http://www.sc.doe.gov/ascr/20040405_SciDAC_presentation.ppt).

³³ IDRIS, *Rapport scientifique 2003*, pp. 109 et 110.

³⁴ Notamment Office of Science, U.S. Department of Energy, *A science-based case for large-scale simulation*, 30 juillet 2003, disponible à l'adresse <http://www.pnl.gov/scales/>, et National Research Council of the National Academies, *Getting up to speed, the future of supercomputing*, 2004, disponible à l'adresse <http://www.nap.edu/books/0309095026/html/>.

scientifiques et industriels. La charte commune *logiciel libre* que viennent de signer l'INRIA, le CEA et le CNRS va dans le même sens. Il est possible d'intensifier les actions à partir de ces initiatives.

Il y a également nécessité absolue à dynamiser très fortement la recherche en logiciels en France et à travailler sur l'algorithmique. La solution pourrait consister à créer des structures analogues au CERFACS pour chacune des grandes thématiques de recherche.

Il paraît également souhaitable de prendre des mesures incitant les acteurs de la recherche publique à coopérer plus intensément avec les industriels français et européens (Bull, Scali) autour de plates-formes de calcul intensif.

VII- Besoins scientifiques et besoins industriels

Le calcul de haute performance est aujourd'hui largement utilisé dans l'industrie. Pour ne prendre qu'un exemple, mais on pourrait les multiplier dans les domaines de l'automobile, du pétrole ou des systèmes d'armes, les avionneurs utilisent déjà couramment des méthodes de calculs approchés pour améliorer le dessin de l'avion. Le nombre de maquettes testées par Boeing a ainsi été divisé par dix entre deux générations d'avions. Des méthodes approchées, comme la simulation des grandes échelles de la turbulence dans le domaine des moteurs, peuvent, de plus, donner des résultats intéressants avec une machine de 100 teraflops.

La position des grands industriels français utilisateurs de calcul intensif mérite d'être approfondie mais semble cependant dégager d'ores et déjà des caractéristiques intéressantes. Pour des raisons de sécurité et de confidentialité, ils ne sauraient les mutualiser sur de grosses machines ouvertes. Le fait de savoir qu'un industriel procède à des calculs sur un domaine ou un ensemble de domaines est déjà en soi une information qui relève de l'intelligence économique.

Par ailleurs, la brièveté de la durée de vie des machines utilisées pour le calcul scientifique (typiquement moins de cinq ans) induit des coûts de portage récurrents et élevés pour les industriels.

Pour toutes ces raisons, les industriels ne renonceront pas à leurs moyens propres. Ils mettent d'ailleurs en doute la mutualisation des moyens réalisée au CCRT comme principe global, même s'ils utilisent ce dernier à la marge. Ce qu'ils attendent surtout de la sphère publique est un accès facile à un réseau d'experts qui puisse les éclairer dans leurs choix de logiciels et de machines.

Cette vue d'ensemble suggère d'une part de promouvoir la simulation numérique de manière large pour qu'elle puisse être reprise en interne par les entreprises, d'autre part de promouvoir la coopération entre le monde de la recherche académique et celui de la R & D industrielle autour des modèles avancés.

En revanche, il faut éviter le travers de rendre la croissance des centres de calcul intensif destinés à la recherche publique dépendante de la clientèle industrielle. En effet une fois son projet mûr, une entreprise aura une tendance affirmée à internaliser l'exploitation informatique correspondante en son sein, en l'accompagnant éventuellement d'un déploiement au plan mondial calquée sur sa structure globale.

VIII- Externaliser le calcul scientifique ?

Les directeurs des grands centres de calcul français admettent qu'il serait certainement possible d'effectuer un certain nombre de calculs de bas niveau dans le commerce plutôt que de les laisser saturer les grosses machines.

Cela dit, la notion de *computing on demand*, telle que popularisée par IBM, correspond en général à la satisfaction d'un besoin à court terme (3 mois). IBM a indiqué au CINES l'ordre de grandeur de 1 €/heure/processeur. Cela situe le coût du teraflop aux alentours de 800 k€/an. Pour ce prix on dispose d'un calculateur "nu", seulement doté de son système d'exploitation et exploité par un opérateur, dans une usine IBM. Le prix n'inclut ni capacité de stockage, ni sauvegardes, ni licences logiciel. A cela, il faut ajouter le coût des liaisons nécessaires au raccordement de l'utilisateur au site IBM³⁵. Il en résulte incontestablement une grande complexité de gestion. Au vrai, l'offre d'IBM semble être encore embryonnaire et s'affiner au fur et à mesure des demandes du CINES. En tout état de cause, elle paraît chère³⁶. C'est en fait une offre d'écrêtage de charge basée sur l'utilisation de machines en attente de livraison au client. Il est sans doute un peu tôt pour la considérer sérieusement.

Un point important est toutefois qu'on ne peut pas prétendre sérieusement disposer d'un savoir-faire national si on n'a pas en propre de machine et qu'on se contente d'acheter du temps de calcul à des prestataires extérieurs. Ces équipes de haut niveau, indispensables pour faire un minimum de prospective et prévoir les tendances de l'informatique scientifique, ne peuvent en effet se créer qu'autour de machines.

Quant à l'infogérance, si elle est environ 20 % moins chère qu'un service informatique interne, elle ne marche bien que pour des applications informatiques standard, typiquement des programmes de gestion, mais pas pour des besoins très spécifiques comme ceux du calcul scientifique. Si la question ne se pose donc pas pour les grands centres, elle pourrait en revanche être examinées pour les mésocentres.

IX- Calcul vectoriel, calcul parallèle ou grilles ?

La nature des besoins en calcul intensif diffère selon les applications. *L'intensif* peut venir :

- du nombre important des données à gérer et à prendre en compte pour acquérir une bonne connaissance d'un phénomène et en tirer les conséquences, comme par exemple pour l'analyse des bases de données ; le rapport (quantité d'opérations et d'échange de données au cours du traitement)/(volume de données à traiter) est faible ;
- du nombre important de calculs à effectuer ; ce peut être le cas par exemple pour des calculs de moyennes statistiques, le nombre de données pouvant être très important. Le rapport (quantité d'opérations et d'échange de données au cours du traitement)/(volume de données à traiter) est modéré ;
- du nombre important d'inconnues, toutes interdépendantes, qui entrent dans la modélisation du phénomène, comme en climatologie ; le rapport (quantité d'opérations et d'échange de données au cours du traitement)/(volume de données à traiter) est grand.

³⁵ A titre indicatif, le coût d'une liaison entre le CINES et l'usine IBM de Montpellier (11 km seulement) est d'environ 100 k€/an.

³⁶ 2,5 teraflops tout montés à l'IN2P3 ont coûté 700 k€

Certaines architectures de calculateurs sont à l'évidence mieux adaptées au traitement de certains problèmes que d'autres. C'est notamment le cas des architectures dites *vectérielles*, très en vogue dans la dernière décennie et bien adaptées à certains programmes de climatologie.

Ces architectures sont apparues dans les années 1970 avec les premiers ordinateurs Cray. Elles consistent à manipuler des vecteurs de nombres en virgule flottante qui peuvent être chargés directement de la mémoire dans des registres vectoriels pour être traités ensuite par l'unité arithmétique du calculateur, au lieu de manipuler des nombres individuels, comme c'est le cas dans les calculateurs dits *scalaires*.

Une seule machine vectorielle figure aujourd'hui dans les dix premières du TOP 500, l'Earth Simulator japonais, et seule l'industrie japonaise, NEC notamment, pousse encore vraiment ce type d'architecture, très consommatrice d'électricité, de surfaces et de climatisation et très pointue en termes d'applications qu'elle peut traiter. En revanche, on note l'émergence dans le TOP 500 des machines massivement parallèles basées sur des architectures scalaires. La mode du calcul vectoriel, tel que l'ont illustré les machines Cray ou NEC, semble donc aujourd'hui passée. L'évolution future des architectures de grands calculateurs sera certainement déterminée par leur capacité à rentabiliser sur le marché les investissements considérables que requièrent leur développement. Même s'il est encore risqué d'annoncer sa disparition définitive, la généralisation du parallélisme paraît une tendance lourde de l'informatique, à laquelle il faut se préparer.

Cette évolution concerne essentiellement la communauté des climatologues dont les travaux, en France, reposent largement sur l'utilisation du NEC SX-5 de l'IDRIS. Pour autant, s'il n'y a pas aujourd'hui d'autre choix que de remplacer à brève échéance cette machine vieillissante, il convient aussi de se préparer dès maintenant à l'échéance suivante, vers 2010, où pourraient bien ne plus être disponibles que des machines parallèles à base de processeurs scalaires.

Le concept de *Grid Computing* ou de *grilles* se présente de façon totalement différente. Son heure de gloire est arrivée parce que la technologie a juste atteint le niveau de maturité où elle est plus ou moins utilisable dans certains contextes d'applications spécialisées. On sait que 40 % à 80 % de la puissance de traitement des ordinateurs en service aujourd'hui reste inutilisée. Construites autour de réseaux de télécommunications, les grilles devraient justement permettre une meilleure utilisation de cette puissance disponible. Mais la mise en œuvre de cette distribution de la capacité va de pair avec la distribution des traitements et du stockage et la circulation des données. L'idée est simple, voire séduisante, mais sa mise en œuvre concrète réclame des avancées spectaculaires dans de nombreux domaines car pour être accepté les grilles devront se montrer aussi fiable qu'un grand ordinateur individuel. C'est l'objectif du programme GRID 5000 que l'INRIA développe dans le cadre d'une action concertée incitative (ACI). Pour autant, une grille distribuée restera handicapée par la réalité physique pour ces types d'applications. En effet le temps de latence, c'est à dire celui qui sépare l'envoi d'une donnée de sa réception, est un facteur déterminant pour les performances d'un grand code scientifique unique. Des constructeurs de machines parallèles, comme SGI, se fixent ainsi pour objectif de le ramener à moins d'une microseconde entre deux processeurs d'ici 5 ans. Or en une microseconde, un signal électrique ne parcourt qu'environ 300 mètres, distance infime à l'échelle d'un réseau d'ordinateurs à l'échelle nationale, a fortiori paneuropéenne ou mondiale.

On peut toutefois penser que les *grilles* auront à terme un rôle structurant pour la recherche au niveau international, pour le calcul, les bases de données, le travail collaboratif et certaines activités expérimentales. Il convient donc de mettre en place et d'afficher une politique dans ce domaine, qui permette la satisfaction des besoins de la communauté scientifique par des projets pilotes et tire profit des résultats de la recherche dans les STIC. La réflexion stratégique doit également permettre de se préparer aux effets structurants de la mise en place de grilles sur l'organisation de la recherche, ce qui impliquera la constitution de communautés virtuelles internationales, la mise en réseau des connaissances et expertises, et la possibilité de délocaliser certains équipements mutualisables.

Le concept de grille paraît plus intéressant dans le monde de la gestion que dans celui de la performance. Il n'est pas adapté à la production lourde. Il n'y a d'ailleurs pas de grille dans le TOP 500. En fait, les projets de grilles apparaissent plus comme des projets de partage de données (décodage du génome, ...) que de vrais projets de calcul. Elles ne résolvent pas tout et en tout cas ne remplaceront jamais un grand centre de calcul. Cela dit, en tant que nouvelle technologie, elles méritent que la France s'y intéresse et il convient de soutenir les initiatives européennes et internationales du CC-IN2P3 dans ce domaine, notamment dans le cadre du programme EGEE.

X- Eléments d'une politique

Plusieurs arguments militent pour que, sans pratiquer systématiquement la course à la puissance, la France reste bien classée dans la communauté mondiale du calcul scientifique :

- la concurrence internationale est particulièrement vive dans le domaine de la recherche.
- derrière cette concurrence se cachent des enjeux de pouvoir³⁷ : des négociations internationales de grande envergure comme celle du protocole de Kyoto s'appuient sur les résultats de modélisations que les scientifiques mettent à la disposition des politiques ; peut-on imaginer un seul instant que les négociateurs européens s'en remettent entièrement à des données fournies par des experts américains ou japonais ? Il est donc essentiel, sinon pour la France du moins pour l'Europe, de garder une capacité autonome d'expertise, voire de contre-expertise, dans les domaines nécessitant de grands calculs (climatologie, nucléaire civil, biologie, nanotechnologies, ...).
- les progrès en théorie et en description des systèmes complexes suivent dans une large mesure ceux des ordinateurs ; ne pas mettre à disposition des chercheurs les outils le plus en pointe revient à les handicaper durablement dans la compétition internationale.
- le maintien d'équipes de classe internationale dans le domaine du calcul scientifique, aussi bien en matériel qu'en logiciel, n'est possible que si celles-ci peuvent se regrouper autour de machines qui figurent dans les dix ou vingt premières du TOP 500.
- enfin, la puissance de calcul reste toujours à la base du poids de chaque partenaire dans un accord international ; si donc on ne veut pas laisser marginaliser les centres de calcul français face à leurs homologues européens, il faut les équiper en conséquence.

Si la France veut compter parmi les principaux foyers mondiaux de recherche, elle doit impérativement, dans le domaine du calcul intensif, réformer son système pour mieux coordonner ses efforts au niveau national, développer la prospective et y consacrer des moyens financiers réguliers, étant précisé que les considérations de politique industrielle ne rentrent pas dans le cadre de cette mission.

Les rapporteurs estiment donc qu'il convient de lancer rapidement en France une action destinée à :

- mettre en place une coordination stratégique au plan national ;
- programmer le rattrapage du retard national vis-à-vis du Royaume Uni et de l'Allemagne au niveau des moyens de calcul intensif ;

³⁷ Même si les applications militaires se situaient en dehors du champ de la mission, il est intéressant de citer ce propos de M. D. Verwaerde (CEA/DAM) qui a bien exprimé la réalité des synergies entre les domaines civil et militaire dans son exposé au forum de l'ORAP en juin 2004 : *La pérennité de la simulation repose sur une stratégie en 3 points : 1) Diffuser le plus largement possible le recours à la simulation dans la recherche et l'industrie, 2) Développer avec l'Université, les formations et la recherche dans le domaine de la simulation, 3) Maîtriser toutes les briques technologiques du calcul à hautes performances via des collaborations avec des laboratoires universitaires et des industriels de l'informatique.*

- participer activement aux initiatives européennes en matière de calcul intensif ;
- développer les compétences nationales et à renforcer significativement les coopérations scientifiques interdisciplinaires, ainsi qu'entre recherche et industrie ;
- garantir un niveau de financement convenable et pérenne du calcul scientifique.

Il est clair que la nature des enjeux qui ressortent de cette liste, dépassent largement la stratégie d'équipement d'un centre isolé.

Recommandation 1 : mettre en place un comité stratégique du calcul scientifique

Il ressort des auditions effectuées par la mission un besoin ressenti par l'ensemble des acteurs de l'affirmation d'une véritable politique nationale du calcul scientifique qui donnerait un éclairage à moyen terme à la nécessaire évolution des capacités de calcul nationales. Toutes les personnes rencontrées mettent d'ailleurs en avant l'existence dans la plupart des grands pays d'une organisation, comité ou conseil scientifique, qui produit des analyses et des avis concernant le calcul scientifique, notamment au Royaume-Uni avec le *Council for Science and Technology*³⁸. Il semble que l'absence de ce type de structure explique largement le caractère chaotique de l'évolution de nos capacités de calcul. La proposition de mettre en place un processus de pilotage stratégique permet de prendre en compte le contexte en évolution rapide, la multiplicité des organismes concernés au plan national et le besoin de définir des plans pluriannuels. Le réalisme budgétaire indique qu'il faudra dans ce cadre prendre des décisions difficiles, et veiller au suivi des programmes.

Il est donc recommandé que le ministre délégué à la Recherche nomme un **comité stratégique du calcul scientifique**. La composition de ce comité stratégique est un point crucial en raison des conflits potentiels d'intérêt auxquels peuvent se trouver confrontés ses membres. Elle devra donc être soigneusement étudiée. Ce comité pourrait compter une quinzaine de personnes, dont trois étrangers et deux industriels utilisateurs de calcul intensif³⁹, nommées *intuitu personae* par le ministre sur des listes trois fois plus larges proposées par les grands organismes de recherche. Ce comité pourrait être renouvelé tous les trois ans.

Le comité stratégique du calcul scientifique pourrait aussi devenir un sous-comité du Haut conseil pour la recherche et l'innovation (HCRI). Il pourrait aussi conseiller l'Agence nationale de la recherche (ANR), avec laquelle il devra en toute hypothèse se coordonner étroitement. Il pourrait, enfin, en tant que de besoin, conseiller l'Agence pour l'innovation industrielle (AII).

Le secrétariat de ce comité serait assuré par la direction de la Recherche qui serait l'exécutif des décisions du ministre.

Ce comité aurait pour mission :

- de remettre tous les ans au ministre délégué à la Recherche un rapport de synthèse, scientifique et budgétaire, de ses travaux à une date permettant son intégration dans la nouvelle procédure budgétaire ; il devrait donc, dès son installation, définir les indicateurs de performance du programme national de calcul intensif et les diffuser auprès de l'ensemble des communautés scientifiques concernées.

³⁸ <http://www.cst.gov.uk/>.

³⁹ Il est difficile d'y intégrer des industriels constructeurs de moyens de calcul sans risquer d'introduire des distorsions de concurrence.

- d'instituer par discipline et par établissement⁴⁰ des **groupes permanents d'études prospectives** visant à faire un état des besoins actuels en calcul intensif et de leur évolution ; certaines disciplines, comme la biologie, répartie sur un grand nombre d'organismes, ou les nanosciences, de nature pluridisciplinaire, pourraient se voir doter d'une organisation particulière pour tenir compte de cette diversité et des spécificités des sous-disciplines face au développement des techniques de simulation⁴¹ ; le comité stratégique du calcul scientifique serait destinataire des études prospectives et chargé d'en établir une synthèse ;
- de transformer les orientations issues de la prospective en schéma directeur et en plan à moyen terme de renouvellement des équipements ;
- de conseiller l'administration de la recherche et de l'enseignement supérieur sur les mesures d'accompagnement nécessaires pour optimiser l'utilisation du calcul intensif par les disciplines (formation des doctorants des disciplines utilisatrices, modernisation des codes et des algorithmes, techniques de modélisation...) ;
- de donner un avis sur les cahiers des charges et le choix des fournisseurs dans les appels d'offres des centres de calcul intensif à vocation généraliste ;
- d'introduire en France une approche projet dans le domaine du calcul scientifique, comme cela se pratique aux Etats-Unis.

Recommandation 2 : combler le retard français en calcul intensif

La qualité de la recherche française exige une puissance de calcul intensif comparable à celle de ses homologues européennes. Il est indispensable et urgent que l'Etat prenne des décisions sur le financement nécessaire et le planifie dans la durée, de façon qu'il soit assuré, régulier et stable. Des opérations ponctuelles sont insuffisantes. La régularité et la stabilité sont d'ailleurs peut-être plus importantes que la valeur absolue des sommes affectées au calcul intensif.

Un objectif raisonnable est de rattraper nos voisins allemand et britannique qui d'après la loi de Moore, devraient disposer d'une puissance de calcul de l'ordre du petaflop vers 2011, alors qu'actuellement la nôtre n'est que la moitié de la leur⁴². A cet égard, il est urgent de laisser le CINES lancer son appel d'offres en suspens depuis deux ans et l'IDRIS renouveler son calculateur vectoriel, sous les réserves indiquées pp. 22 et 29. L'échéancier pourrait être le suivant :

⁴⁰ Une lettre du ministre aux instances dirigeantes des organismes de recherche montrerait l'intérêt que porte l'Etat à ce domaine.

⁴¹ Un tel comité existe déjà de manière permanente au CEA, ce qui permet de nourrir les plans glissants de l'organisme. Il faudrait l'instituer ou le relancer, et le rendre permanent, au CNRS, à l'INSERM, à l'INRA et dans tout autre organisme de recherche concerné par le calcul intensif.

⁴² Fin 2004 les calculateurs "academic" + "research" français comptaient pour 13 teraflops dans le TOP 500, les allemands pour 30 et les britanniques, hors ECMWF (voir p. 15) pour 25. La loi de Moore appliquée sur la base d'un doublement tous les 21 mois conduit alors exactement à 412 teraflops pour la France, 920 teraflops pour l'Allemagne et 785 teraflops pour le Royaume-Uni, toujours hors ECMWF, en 2010.

année	puissance (teraflops)
2004	13
2005	40
2006	80
2007	150
2008	250
2009	400
2010	650
2011	1000

Rattrapage du retard français en matière de puissance de calcul

L'effort financier pour atteindre cet objectif demeure modéré. La simple application de la loi de Moore au CINES et à l'IDRIS, *minimum minimorum* pour leur éviter de perdre toute visibilité sur la scène internationale, exige qu'ils disposent chacun d'un budget annuel régulier d'investissement de 5 M€ L'effort de rattrapage indiqué ci-dessus conduirait *grosso modo* à doubler cet effort et à passer de $2*5 = 10$ M€ à $2*5 + 10 = 20$ M€ par an.

La mission suggère de placer cet effort dans un cadre de TGE (Très Grand Equipement), ce qui facilitera la planification de son utilisation scientifique et permettra d'appuyer les réalisations sur les compétences d'exploitation et d'utilisation.

Recommandation 3 : la structuration des acteurs du calcul intensif

La mission ne trouve pas déraisonnable que la France dispose d'au moins deux grands centres de calcul généralistes physiquement distincts. La répartition en deux sites peut aussi se justifier pour éviter une paralysie en cas d'incidents majeurs mais surtout pour offrir des services complémentaires. Il semble en effet clair que pour répondre aux demandes variées des chercheurs en calcul scientifique plusieurs types machines doivent être proposées. Dans un paysage industriel et technologique en évolution permanente, il n'est pas raisonnable non plus de ne dépendre que d'un seul fournisseur. Les rapporteurs recommandent donc de ne pas modifier la répartition géographique actuelle des grands centres de calcul français.

En revanche, ils ne verraient que des avantages à les réunir dans une structure juridique unique⁴³ à commandement unifié. S'il n'est pas question de modifier l'organisation physique des différents centres et leur fonctionnement, il s'agit en revanche de produire une politique commune de développement et de fournir un interlocuteur unique aux pouvoirs publics, nationaux ou européens et de garantir ainsi la pérennité et l'excellence des moyens de calcul nationaux. Il est entendu que la vocation du CC-IN2P3 au service d'une communauté particulière, celle de la physique des particules, le laisse a priori à l'écart de cette structuration.

Il est important que la solution proposée concilie le besoin d'harmonisation nationale de la politique du calcul scientifique et l'efficacité de la gestion au quotidien des centres de calcul.

⁴³ Rappelons que, pour l'instant, le CCRT du CEA ne dispose pas de la personnalité juridique, pas plus que l'IDRIS, simple unité propre de service du CNRS. Seul le CINES dispose de cette personnalité, du fait de son statut d'EPA.

Dans cette direction, la mission propose, en ligne avec les conclusions du rapport de l'Inspection générale des Finances et de l'Inspection générale de l'administration de l'Education nationale et de la Recherche sur les grands équipements, de regrouper tout ou partie des acteurs du calcul scientifique 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 concernés⁴⁴. Ce schéma peut se concevoir selon deux variantes qui ne sont au demeurant pas neutres au regard de leurs implications exposées plus loin sur le projet européen (voir p. 29) :

- une version extensive qui regroupe l'ensemble des centres existants (CINES, IDRIS et CCRT) dans une structure juridique unique ;
- une version limitée qui tient compte des spécificités du CCRT : un fonctionnement coordonné avec la partie militaire du CEA, dont la compétence en matière de gestion de grosses machines de calcul est importante et la présence dans cette *coopérative* informelle de plusieurs industriels ; la structuration de l'ensemble français pourrait alors se faire par la création de deux sociétés civiles, l'une constituée autour du CINES et de l'IDRIS, l'autre autour du CCRT, ayant des participations croisées l'une dans l'autre, mais chacune gardant ses relations d'origine.

Il serait sans doute utile d'intégrer aussi les principaux mésocentres dans le dispositif de programmation générale en raison de leurs rôles de centres de mise au point des programmes qui s'exécutent ensuite sur les grands centres et aussi de nœuds de grilles, existants ou potentiels. La mission n'a pas eu le temps d'explorer en détail cette possibilité qui devrait faire l'objet d'un approfondissement par la direction de la recherche.

Recommandation 4 : renforcer la coopération européenne

Renforcer la coopération européenne, par la création et la gestion en commun d'un très grand calculateur est une opération nécessaire pour la recherche européenne.

Il faut cependant bien comprendre que les machines installées dans le cadre de la coopération européenne sont essentiellement destinées à des programmes qui ne pourraient pas être exécutés sur les capacités nationales même fortement accrues.

La demande en calculs (de toutes dimensions) va connaître une expansion très importante sans qu'il soit possible de la chiffrer de façon même approximative. Il faudra donc également faire croître les capacités nationales et mieux répartir l'exécution des programmes entre les divers niveaux de machines.

Le rapport annexe présente la prospective du calcul intensif pour la recherche française. Il en ressort clairement que la machine européenne ne sera sollicitée que par certains projets de très grande envergure. Mais même si la recherche française ne représente qu'une fraction de la recherche européenne, il est probable que la machine, a-priori au service de l'ensemble des pays de l'Union européenne, frôlera rapidement la saturation, sous l'effet des demandes d'exécution de grands challenges. Il est donc certain que les autres grands défis scientifiques à relever par la recherche française ne pourront pas tous s'exécuter sur la machine européenne. Ils ont donc besoin de capacités de calcul fortement accrues par rapport à la situation actuelle. Il n'y a donc pas substituabilité entre la machine européenne et les capacités nationales.

⁴⁴ La société civile, propriétaire des machines, pourrait les mettre à disposition des centres existants après un appel d'offre et la signature d'une convention d'utilisation conforme à un cahier des charges défini par la société.

Une mise en place rapide de l'organisation recommandée ci-dessus permettrait de gérer au mieux des intérêts nationaux, en particulier à l'occasion des négociations dans la phase actuelle de préparation du 7^{ème} PCRD. Il faut également soutenir les actions de coopération internationale de manière à maintenir la compétitivité des recherches françaises dans les domaines qui reposent sur le calcul, et à bien nous positionner dans les projets que mettent en place nos partenaires.

La mission recommande également de poursuivre les négociations tripartites entre l'Allemagne, la France et le Royaume-Uni sur la mise en place d'une infrastructure européenne de calcul de très grande puissance, financée pour partie par la Commission européenne dans le cadre du programme ERA-Net, avec la volonté d'aboutir. C'est la seule voie qui permette à nos chercheurs de disposer à terme et de façon durable de moyens de calcul comparables à ceux de leurs homologues américains ou japonais.

Ce pourrait alors être une mission du comité stratégique de définir une doctrine d'emploi des machines nationales d'un côté, de la machine européenne de l'autre, de façon à optimiser l'utilisations des unes et de l'autre. La ligne de partage pourrait être que seuls les très grands codes, une fois mis au point, auraient accès à la machine européenne. Leur mise au point et l'exécution de programmes moins gourmands en ressources se feraient, elles, sur les machines nationales.

Sur la base des indications données par la direction de la Recherche, les dépenses d'investissement monteraient à 200 M€ tous les 2 ans à partir de 2008 et seraient supportées pour 35 % par la Commission européenne, à 15 % par des industriels ou d'autres pays de l'Union européenne, à 25 % par le pays hôte et à 5 % par chacun des deux autres partenaires et trois autres pays associés. Les frais de fonctionnement sont évalués globalement à 20 M€ par an les deux premières années, 40 M€ par an les deux années suivantes et 60 M€ les deux années d'après, supportés à égalité entre tous les utilisateurs, soit a priori 1/6 pour la France. Cela dit, il est certainement possible pour la France de mutualiser au moins en partie ces coûts avec ceux de l'IDRIS ou du CEA, par exemple, notamment pour ce qui est du personnel d'exploitation. Si on se limite à l'aspect investissement, l'échéancier envisagé dans le cadre des négociations en cours entre les trois pays est donc le suivant :

(M€)	2008	2009	2010	2011	2012	2013	Total	Moyenne
Investissement	200		200		200		600	100
Commission (35 %)	70		70		70		210	35
Industriels (15 %)	30		30		30		90	15
Pays A⁴⁵	50		10		10		70	11
Pays B	10		50		10		70	11
Pays C	10		10		50		70	11
Associés D, E, F	30		30		30		90	15
Total	200		200		200		600	100

Si la France veut donc jouer cette carte, c'est 17 ou 18 M€ dont 12 M€ d'investissements, qu'elle doit consacrer annuellement à ce projet à partir de 2008.

Dans sa configuration actuelle, le projet tripartite a notamment pour ambition de satisfaire les besoins de la communauté climatologique et donc de rendre sans objet le projet ENES d'ordinateur européen dédié à la climatologie, sur le modèle de l'Earth Simulator. Cela suppose toutefois que soient adoptées rapidement les mesures recommandées par ailleurs en matière de parallélisation des grands codes de climatologie, tant il est vraisemblable que, si le projet tripartite voit le jour, il recourra à des machines parallèles.

⁴⁵ A, B et C désignent globalement l'Allemagne, la France et le Royaume-Uni, aucune discussion n'ayant encore eu lieu pour déterminer l'ordre dans lequel les calculateurs seraient installés dans chacun de ces trois pays. D, E et F désignent les autres pays utilisateurs de ces moyens de calcul.

Pour ce qui est des structures d'accueil au plan français, les deux possibilités évoquées à la recommandation 3 (voir p. 27) présentent des différences quant à l'articulation avec le projet européen. La version extensive accueillerait facilement la partie française du projet européen. Il appartiendrait alors au conseil d'administration de la société de définir les modalités précises de son intégration dans l'ensemble national. Comme la structure juridique européenne serait vraisemblablement de droit privé, l'articulation se ferait probablement par prise de participation de la société civile française dans la société européenne. Dans la version limitée, l'Etat devrait procéder lui-même aux arbitrages pour décider lequel des deux centres français (structure commune CINES-IDRIS ou CCRT) accueillerait la machine européenne, ce qui au demeurant peut se faire par appel d'offre. Une seule des deux sociétés prendrait alors une participation dans l'ensemble européen, ce qui risque de marginaliser l'autre.

Enfin, en ce qui concerne les grilles, la mission suggère de confier au comité stratégique le soin de suivre les progrès de la recherche et le développement des technologies, en particulier en évaluant les projets DEISA et EGEE, et de proposer des déploiements pilotes, correspondant à des communautés ciblées dans le monde de l'enseignement supérieur et de la recherche.

Recommandation 5 : faire face à la possible disparition du calcul vectoriel

Il faut aider la communauté des climatologues à se préparer à l'éventualité de la disparition de machines vectorielles, en commençant par une analyse scientifique de la question. Cette mission pourrait être confiée à des experts reconnus (CERFACS, CEA-DAM, EDF études et recherches, ORAP, EADS) chargés de faire l'état des lieux sur le passage du vectoriel au parallèle, d'en évaluer le coût, la durée et de proposer des sources de financement. Elle devrait également regarder la possibilité de renforcer temporairement les équipes scientifiques concernées par du personnel en sous-traitance pour mener à bien la parallélisation des codes vectoriels existants, de façon à soulager les chercheurs et leur permettre de poursuivre leurs travaux. Il est d'autant plus urgent d'agir que l'effet d'une telle mesure ne se fera sentir qu'à moyen terme, typiquement 3 ou 4 ans plus tard, dont peu avant l'échéance de 2010.

Si la décision est prise d'abandonner la voie des calculateurs vectoriels, il faudra alors annoncer clairement et rapidement la couleur : l'IDRIS sera autorisé à remplacer en 2005 sa machine vectorielle NEC SX-5 qui date de 2000, de façon à laisser le temps nécessaire à l'adaptation des grands codes vectoriels entre maintenant et 2009 ou 2010, mais ce sera la dernière machine vectorielle à usage scientifique achetée en France.

Cette réflexion stratégique et technique sur l'évolution des architectures de calculateurs mériterait d'ailleurs d'être pérennisée tant il est difficile de l'appréhender longtemps à l'avance, en raison de l'imbrication forte entre considérations techniques et commerciales.

Recommandation 6 : développer les synergies en matière de logiciels

Le calcul scientifique est une activité qui requiert des machines mais aussi des algorithmes et des logiciels. Sur ces deux aspects, malgré la qualité exceptionnelle de ses équipes, la communauté française souffre. La situation exige un effort urgent.

Il faut pousser les feux sur les technologies algorithmiques. Le CERFACS pourrait servir de cristal de base d'autant qu'il possède une structure de société civile à laquelle il serait facile que les organismes de recherche ou même le ministère puissent adhérer. Faut-il en créer une filiale (pour profiter de son savoir-faire unanimement reconnu) en région parisienne et l'inclure dans un pôle de compétitivité à créer en Ile-de-France Sud ? La question est à examiner. En tout cas, le CERFACS pourrait participer à une organisation du calcul scientifique méditerranéen, de Barcelone à Cineca (Bologne) en Italie en passant par le CINES, et ITER qui aura des besoins en calcul très importants, s'il est implanté à Cadarache.

Plus précisément, il faut :

- améliorer la méthodologie de développement des grands codes, notamment par le développement de bibliothèques de logiciels et d'ateliers de génie logiciel et le développement de logiciels de base, notamment en capitalisant sur l'expérience du CEA en matière de logiciels libres ; il s'agit de consolider les résultats de la recherche dans des codes mutualisés fiables, optimisés et éventuellement susceptibles de valorisation industrielle ; la bonne conduite de ces opérations passe par la coopération avec des chercheurs et ingénieurs de recherche en mathématiques appliquées et informatique ; par la sélection rigoureuse des projets à mener vers ce niveau ;
- favoriser le développement de nouvelles applications dans des domaines tels que ceux des nanotechnologies et des biotechnologies et, plus généralement, dans tous les nouveaux domaines d'utilisation du calcul scientifique ;
- expérimenter et valider, dans des conditions d'utilisation réalistes, des architectures de calculateur innovantes et compétitives ; les logiciels concernés pourront comprendre une infrastructure de grille et de communications rapides, la gestion et la manipulation de données, des logiciels de base de compilation avancée et de gestion de données distribuées.

La mission estime notamment qu'il est possible de tirer un meilleur parti de l'exceptionnel regroupement de compétences en Ile-de-France Sud autour de l'université de Versailles-Saint-Quentin-en-Yvelines, de l'INRIA, du plateau de Saclay (CEA, Ecole Polytechnique, Ecole Supérieure d'Electricité, Ecole Supérieure d'Optique, université Paris XI Orsay), de l'IDRIS, et des activités civiles du CEA à Bruyères-le-Châtel (CCRT, TERATEC, ainsi que des industriels qui ont déjà des habitudes de travail avec le CEA : HP, Bull, CS, SNECMA, EDF, auxquels pourraient s'adjoindre l'ONERA, Simulog et Dassault Aviation. Les rapporteurs voient également bien un axe Lyon-Grenoble autour de l'IN2P3 et du CERN.

Recommandation 7 : développer un réseau d'experts

Si le calcul scientifique est une activité qui requiert des machines et des logiciels, il exige aussi des hommes. Les grands projets de calcul intensif requièrent la mise en œuvre de compétences pluridisciplinaires. En dehors du domaine d'application, il faut maîtriser certains aspects de génie logiciel, d'algorithmique et d'analyse numérique. Il faudra poursuivre les actions entreprises, en particulier pour la formation des chercheurs, et les compléter dans les domaines de la réalisation de grands codes et du génie logiciel.

La France doit disposer d'experts dans le domaine du calcul intensif pour répondre à trois types de besoins :

- un besoin de veille technologique et de prospective sérieuses, voire d'intelligence économique, dans un domaine industriel et technologique en mutation extrêmement rapide ;

- un besoin de disposer d'experts en architecture de systèmes informatiques, dans la mesure où la notion de supercalculateur universel qu'on a connue (Cray, Fujitsu, ...) a quasiment disparu au profit de solutions bâties plus ou moins au coup par coup à base de briques du commerce (processeurs, réseaux d'interconnexion, unités de stockage) en fonction des besoins exprimés par l'utilisateur ;
- un besoin de disposer d'experts en programmation capables de développer les outils informatiques nécessaires à une exploitation efficace des machines et de les mettre à la disposition de la communauté des utilisateurs qui n'est plus en mesure de développer seule ses grands codes (ateliers logiciels) ; ces développements se font souvent en coopération internationale sur la base de logiciels libres.

Le volet de la coopération entre recherche fondamentale et recherche d'intérêt technologique devra également être développé. Il convient de s'appuyer sur l'expérience du CEA, notamment autour du CCRT.

Cette politique doit donc également faire émerger un réseau d'experts destiné à accroître la réactivité du système, à rendre efficace la veille technologique et l'intelligence économique du dispositif. Ceci demandera un effort supplémentaire d'investissement constant au cours du temps, en raison de l'évolution rapide de la technologie, qui fait que les matériels se périment au bout de 4 ans environ.

Ce réseau permettrait de mieux valoriser les investissements individuels dans le logiciel libre. Pour cela, le pilotage des communautés de logiciel libre sélectionnées pourrait se faire en concentrant sur elles les contributions techniques du meilleur niveau. Cela suppose évidemment de valoriser l'activité des chercheurs impliqués. Au demeurant, des politiques de ce type sont déjà mises en œuvre aux Etats-Unis, par exemple dans le cadre du plan OSSODA⁴⁶, ou par des firmes privées comme IBM⁴⁷. En France, le CEA et Bull⁴⁸ recourent aussi à une telle approche, et ont déjà obtenu des succès sensibles dans des projets internationaux.

Plus généralement, il est essentiel que le système de l'Education nationale favorise la formation au calcul intensif, y compris dans les disciplines utilisatrices. Il est fondamental en effet que les jeunes diplômés et les jeunes chercheurs apprennent à voir grand en matière d'informatique et ne raisonnent pas uniquement en termes d'ordinateur personnel comme solution à leurs besoins de calcul.

Recommandation 8 : accroître et pérenniser les moyens financiers du calcul intensif

Le tableau ci-dessous résume les investissements nécessaires dans les grands centres de calcul généralistes. Il n'inclut ni le CCRT, faute de données suffisamment précises de la part du CEA, ni les mésocentres, pour les raisons indiquées plus. Il ne tient pas compte non plus du CC-IN2P3, dont le caractère généraliste ne paraît pas suffisamment affirmé. En revanche il inclut les mesures d'accompagnement. Ces dernières comprennent notamment le financement de la parallélisation des grands codes de climatologie, indispensable pour faire face à la possible disparition des calculateurs vectoriels à l'horizon 2010. Le tableau tient compte également une estimation du projet tripartite sur la base de ce qu'on en sait aujourd'hui. Il est toutefois probable que certaines économies d'échelle sont envisageables, par exemple en hébergeant le calculateur français au CEA ou à l'IDRIS. On peut ainsi bénéficier d'infrastructures (bâtiments, climatisation) existantes, voire de personnel d'exploitation.

⁴⁶ *Open Source Software Development Acceleration.*

⁴⁷ <http://www-128.ibm.com/developerworks/opensource/library/os-welcome.html>.

⁴⁸ <http://www.clusterfs.com/pr/2004-11-11.html> et <http://www.clusterfs.com/partners.html>.

Opération (M€)	2005	2006	2007	2008	2009	2010
CINES	5	5	5	5	5	5
IDRIS	5	5	5	5	5	5
rattrapage	10	10	10	10	10	10
Accompagnement	4	4	4	4	4	4
Projet D-F-UK ⁴⁹				18	18	18
Total (M€)	24	24	24	42	42	42

Besoins en investissements 2005-2010

Il convient de voir que, d'une part, ce tableau ne constitue pas une demande entièrement nouvelle et que, d'autre part, il n'est pas entièrement à charge du budget du ministère délégué à la Recherche. Sur le premier point, il faudra de toute façon bien assurer les investissements indispensables dans les centres de calcul et dans les réseaux (RENATER). D'autre part, le financement de l'IDRIS et celui du CC-IN2P3 sont en principe assurés entièrement sur le budget du CNRS.

Ce que le tableau veut souligner, ce sont les investissements à consacrer au calcul intensif⁵⁰, si la France prétend jouer dans la cour des grands et mettre à la disposition de ses scientifiques des moyens de calcul comparables à ceux de leurs homologues des autres grands pays. **En ordre de grandeur, il n'y aura pas de politique française ambitieuse en matière de calcul intensif si on n'y investit pas 25 M€ par an, cette somme montant à 40-45 M€ par an, quand le projet de grand calculateur européen, auquel la France se doit de participer, aura vu le jour.**

⁴⁹ Y compris les coûts de fonctionnement.

⁵⁰ Il est clair que si la solution proposée dans la recommandation 3 est adoptée, il faudra globaliser l'ensemble de ces sommes dans le budget de la société civile de calcul intensif et ajouter (dans l'hypothèse d'une solution extensive) la quote-part du CCRT.

Annexes

Annexe 1 : Lettre de mission

Annexe 2 : Liste des personnes rencontrées



*Ministère de l'Éducation nationale,
de l'Enseignement supérieur et de la Recherche*

Le Ministre délégué à la Recherche

Réf. : Cab/CHL/VP/n° 49.04

Paris, le 21 SEP. 2004

Monsieur l'Inspecteur Général,

Notre politique nationale dans le domaine du calcul scientifique constitue un élément important témoignant de la capacité de la France à produire une recherche moderne, innovante et de très haut niveau. A ce stade, plusieurs rapports rédigés pour le compte du Ministère de la Recherche ont fait le constat de l'importance de mener dans les prochaines années une action soutenue en faveur du calcul scientifique.

Les acteurs du calcul scientifique français, qui développent actuellement sur financement public des moyens de calculs au service de la communauté scientifique, apparaissent nombreux. Je citerai de manière non exhaustive le CNRS, Météo-France, le CEA, le CINES, l'INRIA, ou encore les universités au travers des « meso-centres ».

Dans l'optique de mener une action forte en faveur du calcul scientifique, il devient donc plus que jamais nécessaire de réfléchir à la coordination à mettre en place entre ces différents centres, ainsi qu'aux avantages ou inconvénients qui pourraient résulter d'une mise en commun accrue de nos moyens de calculs.

Par ailleurs, les coopérations public-privé à l'initiative d'institutions publiques, ou les initiatives privées au services des communautés scientifiques sont des approches novatrices, que je souhaite encourager dans le cadre de la mise en œuvre de la politique française en matière de calcul scientifique. Nous disposons sur ce point d'exemples intéressants, comme le projet TERATEC du CEA, les services « à la demande » proposés par les constructeurs informatiques, ou encore le CERFACS qui associe Météo-France, le CNES, EADS et la SNECMA.

Monsieur Thierry BOSSARD
Chef du Service de l'Inspection
Générale de l'Administration de
l'Éducation nationale et de la Recherche
107 rue de Grenelle
75007 PARIS

.../...

21, rue Descartes - 75231 Paris cedex 05 - Tél. : 01 55 55 90 90

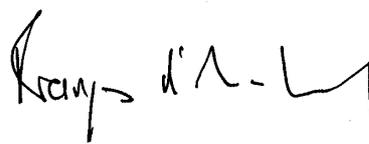
Afin de définir et d'organiser concrètement la politique française dans ce domaine et rationaliser nos choix budgétaires, un groupe de travail sera mis en place, associant les services du ministère chargé de la recherche (Direction de la Recherche et Direction de la Technologie) et les organismes concernés. Je souhaite que le pilotage de ce groupe soit assuré par un membre de l'Inspection générale de l'administration de l'éducation nationale et de la recherche et un membre du Conseil général des technologies de l'information.

Les travaux de ce groupe de travail devront permettre de définir et de préfigurer les structures de concertation et de décision nécessaires à la mise en œuvre de notre politique. Elle devra aborder cette problématique sur le plan de l'identification des besoins, la définition des moyens, leur répartition géographique, et leurs modalités de financement. Le cadre et les attendus du travail du groupe porteront notamment sur les éléments fournis en annexe. Je souhaite être informé mensuellement, et chaque fois que nécessaire, des propositions et des préconisations du groupe afin de pouvoir décider de leur mise en œuvre.

Alors que le gouvernement travaille à la définition de pôles d'excellences, je souhaite que vous portiez une attention particulière à la possibilité de faire émerger en France un pôle de visibilité mondiale dans le domaine du calcul scientifique et de la recherche dans cette discipline.

Un courrier similaire est adressé à Monsieur le Vice-Président du Conseil général des technologies de l'information (CGTI).

Je vous prie de bien vouloir agréer, Monsieur l'Inspecteur Général, l'expression de mes sentiments les meilleurs.

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'François d'Aubert', written in a cursive style. The signature is positioned above a horizontal line.

François d'AUBERT

ANNEXE

Le groupe de travail que vous coordonnez établira d'ici la fin du mois de novembre :

- Un inventaire technique et financier (en coûts complets) des moyens existants, avec une visibilité pluriannuelle sur les financements identifiés et les communautés utilisatrices ;
- Une analyse des besoins actuels et futurs, classés par thématique scientifique ;
- Une préconisation de stratégie de développement des moyens, sur le plan géographique (concentration des moyens) et financier (partenariat public-privé pouvant aller d'un co-financement jusqu'à l'achat de services, financement public, modalités de facturation aux équipes scientifiques). Cette préconisation sera argumentée par une analyse comparative des stratégies adoptées par les principaux acteurs mondiaux (Etats-Unis, Japon, Allemagne, Royaume-Uni, Espagne, Italie). Cette préconisation devra envisager le recours à des capacités de calculs localisées hors de France, et intégrer la politique de l'Union européenne dans ce domaine (6^{ième} et 7^{ième} PCRD) ;
- Une analyse des investissements découlant de cette stratégie, conduisant à un « plan d'affaires » pluriannuel ;
- Un plan de travail sur 6 mois afin de mettre en œuvre vos recommandations.

Ces travaux me seront présentés pour approbation. Une fois validés, le groupe de travail sera chargé de mettre en place le plan de travail.

Liste des personnes rencontrées

Académie des technologies

Paul Caseau

Bull

Gérard Roucairol

CEA

Bernard Bigot

Jacques David

Alain Dechatre

Jean-Pierre Genin*⁵¹

François Gounand

Pierre Leca

François Robin

Jean-Claude Sabatier

CERFACS

Jean-Claude André

CINES

François Daumas

Thierry Porcher*

CNRS

François Etienne

Sylvie Joussaume*

Bernard Larrouturou

Antoine Petit

Serge Petiton*

⁵¹ le signe * indique les membres du groupe de travail animé par les rapporteurs.

Conférence des présidents d'université

Eric Espéret

EADS

Eric Duceau

EDF

Yves Bamberger
Jean-François Hamelin*

IBM

Luigi Brochard
Gilles Lesage
Eric Petit
Michel Teyssède

IDRIS

Victor Alessandrini*

IN2P3

Denis Linglin*

INRIA

Gilles Kahn
Stéphane Lanteri*

INSERM

Hervé Douchin
Florent Soubrier

INSU

Patrick Mascart

INTEL

Marc Dollfus

IPSL

Pascale Braconnot
Marie-Alice Foujols*
Claire Lévy
Olivier Marti

LPT Orsay

Olivier Pène

Mercator

Philippe Bahurel

Météo France

Alain Beuraud
Jean-Pierre Beysson
Eric Brun
Alain Ratier

Ministère de l'Education nationale, de l'enseignement supérieur et de la recherche

Claude Jolly
Jean-Marc Monteil

Ministère délégué à la Recherche

Michel Bidoit
Jean-Michel Dion
Jean-Jacques Gagnepain
Elisabeth Giacobino
Frédéric Gruet*
Alain Kavenoky*
Alain Lichnewsky*
Antoine Masson

Ministère délégué à l'Industrie

Emmanuel Neuville*

Laurent Rojey*

ORAP

Claudine Schmidt-Lainé

RENATER

Alain Quéré*

Dany Vandromme*

SGI

Guy Chesnot

Benoît Hallez

Hervé Oheix

Jean-Pierre Panziera

Michael Woodacre