



Prospective sur le calcul intensif : la vision de l'INRIA

21 février 2005

STÉPHANE LANTERI, Directeur de Recherche INRIA
Responsable permanent du projet CAIMAN (UR Sophia Antipolis)

Table des matières

1	Introduction	1
2	L'INRIA et le calcul intensif aujourd'hui	3
3	La stratégie de l'INRIA vis-à-vis des moyens de calcul intensif	5
3.1	Les moyens de calcul des centres nationaux CINES et IDRIS	5
3.2	Les mésocentres	5
3.3	Les clusters de PC	5
3.4	Les grilles informatiques	6
4	La prospective sur l'accompagnement par la recherche	7
5	Synthèse	8

Préambule. Ce texte a été rédigé en collaboration avec un ensemble de responsables scientifiques et membres de projets de l'INRIA dont les activités ont à voir avec le calcul intensif¹ et plus particulièrement, avec la résolution sur plate-formes de calcul parallèles et distribuées de problèmes issus du calcul scientifique².

1 Introduction

Nous débutons cette analyse par un bref rappel historique concernant l'implication de l'INRIA dans le domaine du calcul intensif. Depuis le début des années 80, l'INRIA a toujours joué un rôle de précurseur dans ce domaine. L'INRIA, soutenait notamment la création de projets comme CAPRAN (calcul parallèle numérique), CALCPAR (calcul parallèle) et API (architectures parallèles intégrées) dont les activités étaient centrées sur les architectures et l'algorithmique des calculateurs parallèles. Néanmoins, à cette époque, le calcul vectoriel représentait la seule

¹Par *calcul intensif*, on entend ici la résolution sur ordinateur de problèmes nécessitant de grandes capacités de traitement (puissance de calcul, capacité mémoire et capacité de stockage sur supports fixes). Suivant les architectures de plate-forme, le calcul intensif fait appel au *calcul vectoriel* (en voie de disparition), au *calcul parallèle* qui repose sur l'association de plusieurs entités de calcul autour d'un réseau local (LAN - Local Area Network/SAN - System Area Network) et au *calcul distribué* qui repose sur l'association de plusieurs entités de calcul, éventuellement hétérogènes, distribuées géographiquement (réseau WAN - Wide Area Network).

²Dans ce document, le terme *calcul scientifique* fait référence à l'utilisation d'un ordinateur en tant qu'outil de travail dans une discipline scientifique quelconque. Il sert une démarche scientifique visant à l'élaboration d'une théorie ou à la confrontation avec la réalité. Il sert parfois à retrouver numériquement des résultats d'expériences. Une activité de calcul scientifique type combine des aspects de modélisation physique et mathématique, d'analyse numérique, de conception et dévaluation d'algorithmes et de programmation informatique, tout ceci dans le contexte de la résolution d'une problématique scientifique donnée.

alternative viable pour la résolution des grands défis posés par le calcul scientifique. Les industriels de l'informatique qui proposaient des solutions matérielles aux utilisateurs concernés étaient essentiellement l'Américain Cray et les Japonais Fujitsu, Nec et Hitachi. En France, la principale ressource de calcul vectoriel était fournie et administrée par le CCVR. Plusieurs projets de calcul scientifique de l'INRIA comptaient parmi les principaux utilisateurs des machines Cray du CCVR. Dans le même temps, l'INRIA s'intéressait de près aux nouvelles architectures de calcul parallèle comme une alternative aux calculateurs vectoriels. Plusieurs sociétés Américaines proposaient des machines de ce type et un petit nombre de systèmes furent installés en France, pour la majeure partie à l'INRIA. Il s'agissait de la CM-2/CM-200 de la société Thinking Machines Corporation (à l'INRIA Sophia Antipolis, machine SIMD comprenant 65536 processeurs 1 bit), la KSR-1/KSR-2 de la société Kendall Square Research (à l'INRIA Rocquencourt, machine MIMD disposant d'un système de mémoire virtuelle partagée tout à fait innovant) et les iPSC et Paragon produites par la division Super Computing d'Intel (à l'IRISA, machines à mémoire distribuée basées sur le processeur Intel i860). La grande diversité de ces architectures et le manque de standardisation des environnements logiciels et outils de programmation parallèle sont les deux causes principales dans la disparition prématurée de ces acteurs (et d'autres encore qui ne sont pas cités ici pour faire court) de l'industrie du calcul haute-performance. Par exemple, le concept SIMD à la base des calculateurs parallèles mis au point par la société TMC était dans les faits bien adapté à une classe relativement limitée de problèmes dont la majeure partie des applications du calcul scientifique ne faisait pas partie. De même KSR était en avance sur son temps avec une solution matérielle ad-hoc. Enfin, au milieu des années 90, la division Super Computing d'Intel disparaissait avec la montée en puissance des PC et l'apparition des premières grappes de PC.

Par la suite (milieu des années 90), le paysage du calcul haute-performance a largement bénéficié de plusieurs initiatives de standardisation tant au niveau de la programmation parallèle (l'exemple le plus frappant est la définition du standard de programmation par échange de messages MPI) que de celui des architectures des calculateurs (abandon du SIMD au profit du MIMD, conception de systèmes basés sur des processeurs non propriétaires, etc.). Des constructeurs comme Cray, SGI et IBM ont alors proposé des architectures qui ont vraiment stabilisé le domaine du calcul intensif. Cependant, ces super-calculateurs parallèles restent des systèmes onéreux à l'acquisition comme à la maintenance. Les centres nationaux IDRIS (successeur du CCVR) et CINES ont permis aux projets de calcul scientifique de l'INRIA de maintenir un haut niveau de réalisations dans leurs domaines d'activité respectifs. Néanmoins, certaines de ces activités et celles de projets de l'INRIA travaillant dans d'autres domaines pas forcément liés au calcul scientifique, supposent des conditions d'accès aux ressources qui ne sont généralement pas compatibles avec les règles de bon fonctionnement des centres nationaux. Les mésocentres sont apparus comme une alternative possible d'autant plus que l'INRIA est devenue partenaire du Centre Charles Hermite équipé d'une machine SGI Power Challenge Array (plus tard remplacée par une SGI Origin 2000 suivie d'une Origin 3800).

Parallèlement à l'accès aux super-calculateurs des centres nationaux et des mésocentres³, l'INRIA a largement investi (en moyens et en activités de recherche) dans une approche architecturale du calcul intensif (parallèle) complètement différente et prometteuse : les clusters (ou fermes, grappes) de PC. Ces plate-formes de calcul parallèles sont bâties autour de processeurs standards fabriqués en grandes séries (Intel Pentium et Itanium, AMD Athlon et Opteron) et de réseaux rapides (Gigabit Ethernet, Myrinet, SCI, etc.). Plusieurs plate-formes de ce type ont été installées à l'INRIA avec des configurations allant de quelques dizaines à quelques centaines de processeurs. Là encore, l'institut a joué un rôle moteur et de nombreux projets ont produit des résultats qui ont grandement contribué à promouvoir l'adoption de ce type de plate-forme (y compris dans le milieu industriel).

Globalement, ces différentes expériences ont permis à l'INRIA d'acquérir un haut niveau d'expertise dans différentes thématiques qui couvrent tout le spectre du calcul intensif, de l'informatique parallèle et distribuée, depuis les couches logicielles les plus basses (systèmes d'exploitation, protocoles réseaux, exécutifs pour les langages parallèles, gestionnaires de ressources, etc.) jusqu'aux applications (du calcul scientifique ou d'autres domaines) en passant par les langages de programmation parallèle, l'algorithmique numérique parallèle, les intergiciels pour l'aide au développement, à l'optimisation et à l'exploitation d'applications de calcul intensif, etc. De plus, l'INRIA a toujours veillé à porter son attention sur des architectures de calcul parallèles et distribuées innovantes. L'illus-

³Auxquels s'ajoutent des accès à d'autres ressources en France (au CEA notamment) et aux Etats-Unis dans le cadre de collaborations entre équipes de différents organismes.

tration la plus récente est sans aucun doute la participation active de l'institut au programme national GRID'5000 sur les grilles informatiques.

Dans la suite de ce document, on présente dans un premier temps la situation actuelle quant aux activités de l'INRIA en liaison avec le calcul intensif (section 2). Dans cette section, on s'est volontairement concentré sur les développements et applications traditionnelles du calcul scientifique. D'autres disciplines représentées à l'INRIA et utilisatrices de moyens de calcul intensif sont néanmoins mentionnées car elles sont susceptibles de requérir dans un avenir proche des capacités de traitement de tout premier ordre. Ces disciplines émergentes du calcul intensif sont de nouveau discutées dans la section 3 où l'on précise la stratégie de l'institut vis-à-vis des moyens de calcul intensif et plus généralement, des plate-formes de calcul parallèles et distribuées. La section 4 constitue la contribution de l'INRIA à la prospective sur l'accompagnement par la recherche dans l'utilisation des moyens de calcul intensif. Enfin, la section 5 résume cette analyse et en particulier les positions et propositions de l'INRIA vis-à-vis de la prospective sur le calcul intensif.

2 L'INRIA et le calcul intensif aujourd'hui

Plusieurs projets de l'INRIA sont concernés par le calcul intensif. Il s'agit en premier lieu des projets du thème **Num** (Systèmes Numériques) et en particulier, des projets des sous-thèmes **Num B** (grilles et calcul haute-performance) et **Num D** (modélisation, simulation et analyse numérique). Les projets concernés sont :

Num B : GRAND-LARGE (calcul parallèle et distribué à grande échelle), GRAAL (algorithmique et ordonnancement pour plates-formes hétérogènes distribuées), PARIS (programmation des systèmes parallèles et distribués pour la simulation numérique à grande échelle), SAGE (simulations et algorithmes sur des grilles de calcul appliqués à l'environnement), SCALAPPLIX (schémas et algorithmes hautes performances pour les applications scientifiques complexes).

Num D : CAIMAN (calcul scientifique, modélisation et analyse numérique), CALVI (calcul scientifique et visualisation), ESTIME (estimation de paramètres et modélisation en milieu hétérogène), MACS (modélisation, analyse et contrôle pour le calcul des structures), MICMAC (méthodes et ingénierie du calcul multi-échelle de l'atome au continuum), ONDES (modélisation et simulation de phénomènes de propagation d'ondes), OPALE (optimisation et contrôle, algorithmiques numériques et intégration de systèmes complexes multi-disciplinaires régis par des EDP⁴), SMASH (simulation, modélisation, analyse de systèmes hétérogènes).

Le projet IDOPT (identification et optimisation de systèmes physiques) du sous-thème **Num C** (modélisation et résolution de problèmes inverses en stochastique ou en grande dimension) est aussi un utilisateur du calcul intensif pour des applications du calcul scientifique. Les problématiques scientifiques qui intéressent ce projet (mais aussi le projet OPALE) nécessitent la réalisation de plusieurs simulations qui concourent toutes à la résolution d'un même problème. Il peut s'agir d'un problème d'optimisation (par exemple, la recherche de la forme optimale d'une aile d'avion en fonction de critères portant sur ses performances aérodynamiques) ou la résolution d'un problème inverse à des fins d'identification de valeurs de paramètres caractérisant le phénomène physique sous-jacent. On conçoit aisément que la résolution de ces problèmes peut requérir des durées de simulation très conséquentes dès lors que l'on traite de problèmes définis en 3 dimensions d'espace. Il est alors opportun de se demander si la mobilisation induite de ressources de calcul, nécessairement haute-performance, est compatible avec les règles de bon fonctionnement de centres nationaux comme l'IDRIS et le CINES.

Il convient par ailleurs de noter que plusieurs projets de l'INRIA (en nombre régulièrement croissant), associés à d'autres thèmes, font eux aussi appel au calcul intensif. Parmi eux, nous citerons un certain nombre de projets du thème **Bio** (systèmes biologiques) : ANUBIS (outils de l'automatique pour le calcul scientifique, modèles et méthodes en bio-mathématique), EPIDAURE (imagerie et robotique médicale), ODYSSEE (vision algorithmique et biologique), REO (simulation numérique d'écoulements biologiques) et SYMBIOSE (systèmes et modèles biologiques, bio-informatique et séquences). Mentionnons notamment qu'une des activités du projet SYMBIOSE concerne la parallélisation des traitements coûteux en génomique pour en accélérer fortement l'exécution. La mise

⁴Equations aux Dérivées Partielles.

en oeuvre des algorithmes développés dans ce projet vise les super-calculateurs parallèles mais aussi les grilles de calcul voire les architectures spécialisées. Le projet EPIDAURE fait appel au calcul parallèle et distribué dans la mise au point d'algorithmes performants pour la comparaison d'images médicales à des fins, par exemple, de planification d'interventions en neurochirurgie. Le projet ANUBIS a des activités de modélisation en dynamique des populations pour lesquelles des outils de simulation parallèles sont développés en étroite collaboration avec le projet SCALAPPLIX. Les activités du projet ODYSSEE touchent au domaine des neurosciences. Ce projet s'intéresse notamment à des questions liées à la modélisation de l'activité corticale. L'ensemble de ces projets représentent des disciplines émergentes du calcul intensif et deviendront à coup sûr, dans un avenir proche, des utilisateurs de tout premier ordre du calcul intensif.

Suivant les projets, les activités en relation avec le calcul intensif portent sur :

- la simulation numérique parallèle et distribuée pour traiter d'applications dimensionnantes (ceci recouvre des aspects de modélisation physique et mathématique, mise au point et analyse de méthodes numériques, programmation parallèle et distribuée, visualisation scientifique),
- l'algorithmique haute-performance (algèbre linéaire parallèle pour la résolution de systèmes denses ou creux, décomposition de domaine, méthodes multi-grilles parallèles, couplage de modèles, couplage de méthodes numériques),
- les intergiciels pour le calcul haute-performance et les grilles de calcul (outils et langages de programmation pour le calcul parallèle et distribué, exécutifs pour les langages parallèles, techniques et outils pour la distribution/régulation des calculs sur plate-formes hétérogènes).

Les principaux domaines scientifiques dont relèvent les applications dimensionnantes considérées par les projets des thèmes Num B et Num D mentionnés plus haut sont : la mécanique des fluides (aérodynamique, écoulements complexes multi-fluides et multi-phasiques) et des biofluides (écoulements dans le système cardiovasculaire), l'électromagnétisme (furtivité, compatibilité électromagnétique, bio-électromagnétisme), l'acoustique, l'aéroacoustique (propagation du bruit dans un écoulement), la géophysique (terrestre et sous-marine, endommagement des structures), la mécanique des structures (stabilité des structures), l'hydrogéologie (transport de contaminants dans le sous-sol, déplacement d'hydrocarbures), la physique des plasmas et des faisceaux de particules (fusion thermo-nucléaire, nanophysique), la chimie quantique moléculaire, la dynamique moléculaire.

Ces applications concernent essentiellement la simulation numérique de phénomènes physiques complexes, nécessitant la manipulation de grands volumes de données. Il s'agit de plus en plus souvent de considérer des problèmes en 3 dimensions d'espace (ou plus dans le cas du couplage EDP/faisceaux de particules) portant sur des géométries réalistes (dans certains cas, d'intérêt industriel) et des milieux hétérogènes. La multi-disciplinarité est une caractéristique quasi-récurrente des études sous-jacentes dont la mise en oeuvre est souvent facilitée par la proximité, au sein de l'INRIA, de différentes communautés. Il s'agit par exemple de collaborations entre :

- numériciens spécialistes de la mécanique des fluides et de la de la mécanique des structures, spécialistes du traitement d'images médicales et spécialistes de la modélisation géométrique pour diverses applications touchant au biomédical (modélisations numériques de l'activité électro-mécanique du coeur, de l'activité corticale, de l'écoulement du sang dans le système cardio-vasculaire) et au biohasard (modélisation numérique de l'interaction entre un champ électromagnétique issu d'un téléphone mobile et les tissus de la tête de l'utilisateur).
- numériciens spécialistes de la mécanique des fluides des milieux poreux et informaticiens spécialistes du calcul distribué pour des applications liées à l'environnement, en hydrologie.
- physiciens spécialistes des plasmas, numériciens spécialistes du couplage entre champs électromagnétiques et faisceaux de particules et informaticiens spécialistes du calcul distribué pour des applications touchant à la fusion thermo-nucléaire.

Il est instructif de noter que la majeure partie des ces collaborations multi-disciplinaires ont été initiées dans le cadre d'actions spécifiquement destinées à les promouvoir : ARC (Actions de Recherche Coopératives de l'INRIA) et ACI (Actions Concertées Incitatives) GRID du Ministère de la Recherche. Notons enfin qu'outre des projets INRIA, certaines des ces études impliquent aussi des équipes extérieures à l'INRIA (du CNRS et de l'INSERM notamment, suivant les études).

3 La stratégie de l'INRIA vis-à-vis des moyens de calcul intensif

Les projets de l'INRIA dont il est question à la section 2 font actuellement appel à différents moyens de calcul intensif que l'on peut décliner comme suit :

- les super-calculateurs parallèles à mémoire distribuée ou partagée des centres nationaux CINES et IDRIS,
- les machines parallèles de certains mésocentres (Centre Charles Hermite à Nancy, Université Bordeaux 1, Pôle de Calcul Intensif de l'Ouest),
- des clusters de PC des différentes UR (INRIA Rhône Alpes, INRIA Sophia Antipolis, IRISA, INRIA Lorraine, INRIA Futurs).

L'utilisation de ces différentes plate-formes de calcul est précisée dans les 3 paragraphes qui suivent. Dans le dernier paragraphe de cette section, nous proposons une vision prospective sur ce que devrait être la plate-forme de calcul idéal pour traiter les applications de calcul intensif du futur.

3.1 Les moyens de calcul des centres nationaux CINES et IDRIS

Il y a deux raisons principales qui motivent l'utilisation des moyens de calcul des centres nationaux CINES et IDRIS par des projets de l'INRIA :

- la réalisation de simulations numériques sur des cas de calcul réalistes afin d'obtenir des résultats de référence pour la problématique scientifique sous-jacente,
- l'évaluation des performances parallèles d'algorithmes haute-performance.

Les demandes de ressources correspondantes portent sur quelques milliers d'heures CPU ; les projets SCALAPPLIX (16000 heures en 2003 et 2004, 30000 heures demandées pour 2005) et SMASH (16000 heures en 2004 et 30000 heures demandées pour 2005) sont actuellement le plus gros consommateurs. Les utilisateurs de l'INRIA apprécient la stabilité des supercalculateurs gérés par les centres nationaux, la qualité de l'administration et du support assurés par le personnel de ces centres et, bien-sûr, les capacités de traitement offertes par ces systèmes. Il n'est cependant pas toujours aisé d'accéder à des configurations d'exécution de l'ordre de la centaine de processeurs compte tenu du grand nombre d'utilisateurs de ces systèmes et des politiques de gestion des ressources adoptées par les centres nationaux.

3.2 Les mésocentres

La difficulté soulevée en fin du paragraphe précédent n'est en général pas rencontrée sur les machines des mésocentres dont la haute disponibilité est une des raisons qui motivent leur utilisation. Ces systèmes, aux configurations plus modestes (de quelques dizaines de processeurs), sont alors utilisés pour valider les développements et obtenir des résultats préliminaires sur des cas de calcul intermédiaires.

3.3 Les clusters de PC

Les plate-formes de calcul les plus utilisées par les projets de l'INRIA consistent en des clusters de PC ou de systèmes multi-processeurs à base de processeurs standards (Intel Pentium ou Itanium, AMD Opteron) disponibles dans presque toutes les UR. Il y a plusieurs raisons qui expliquent cette situation :

- tout d'abord, ce type de plate-forme rassemble une bien plus large communauté de chercheurs que simplement ceux appartenant aux projets des thèmes Num B et Num D. Des projets impliqués dans des thématiques autres que celles qui relèvent du calcul scientifique sous sa forme la plus traditionnelle⁵ ont déjà été mentionnés à la section 2. Ces projets, comme ceux du thème **Bio** par exemple, visent des applications du calcul intensif pour lesquelles il est nécessaire de traiter de larges volumes de données à l'aide

⁵Rappelons ici les intitulés des comités thématiques des centres nationaux IDRIS et CINES : 1. environnement, 2. mécanique des fluides, 3. milieux réactifs, 4. astrophysique, géophysique et terre solide, 5. électromagnétisme et plasmas chauds, 6. mathématiques, mathématiques appliquées et systèmes mobiles, 7. systèmes moléculaires organisés et biologie, 8. chimie quantique et modélisation moléculaire, 9. physique, chimie et propriétés des matériaux.

d'algorithmes (pas forcément numériques) parallèles et distribués. D'autres projets travaillent sur des aspects plus bas niveau de l'utilisation de ce type de plate-forme (systèmes d'exploitation, protocoles réseaux, exécutifs pour les langages parallèles, gestionnaires de ressources, etc.) ou sur conception d'intergiciels pour l'aide au développement, à l'optimisation et à l'exploitation d'applications de calcul intensif. D'autres enfin se concentrent sur la mise au point, l'analyse et l'évaluation d'algorithmes numériques parallèles pour la résolution de certains problèmes génériques du calcul scientifique (résolution de systèmes linéaires denses ou creux, etc.).

- le transfert vers d'autres communautés d'utilisateurs, du milieu académique ou du privé, est une composante importante de valorisation des travaux réalisés par les projets de l'INRIA.. Si l'on se limite aux activités des projets mentionnés à la section 2, il est instructif de noter que peu d'acteurs du privé (grands organismes, PME/PMI, etc.) exploitent des supercalculateurs parallèles intégrés tels que ceux des centres nationaux. Au contraire, les plate-formes de type ferme de PC (en particulier les clusters de machines SMP) sont souvent adoptées en remplacement de systèmes multi-processeurs classiques, souvent plus onéreux. Cette tendance résulte, d'une part, de l'apparition dans le paysage du calcul haute-performance de sociétés spécialisées, de plus en plus nombreuses, proposant des fermes de PC clés en mains (noeuds de calcul, réseaux rapides, systèmes d'administration et de gestion de ressources, compilateurs, etc.) et, d'autre part, de la disponibilité (sous forme libre ou payante) de nombreux outils et environnements logiciels dédiés au calcul intensif⁶, résultant de travaux de recherche dont certains ont été ou sont actuellement menés à l'INRIA ou impliquant des projets de l'INRIA ⁷.

A l'avenir, l'INRIA continuera à utiliser ces trois types de plate-forme de calcul qui répondent clairement à des besoins différents. En particulier, l'institut reste très concerné par la question d'avoir accès dans un avenir proche à des capacités de calcul et de manipulation de données téraflopiques tels que celles que pourraient offrir les centres nationaux CINES et IDRIS.

3.4 Les grilles informatiques

S'il est clair qu'il est indispensable de préserver l'accès à des moyens de calcul et des services comme ceux offerts par les centres nationaux CINES et IDRIS, nous n'en sommes pas moins convaincus que ceux-ci ne couvrent qu'une partie des besoins actuels et futurs en calcul intensif. Il nous semble notamment que les ressources informatiques de ces centres et les modes d'utilisation de ces ressources ne sont pas compatibles ou ne fournissent pas de réponse satisfaisante aux problématiques suivantes (pour nommer les principales) :

- l'interactivité : le mode d'utilisation des moyens de calcul des centres nationaux ne permet pas une interaction avec le calcul comme par exemple, le couplage quasi-temps réel entre la simulation et la visualisation des résultats. Or, un tel couplage a une utilité évidente lorsqu'il s'agit de simuler et visualiser des phénomènes physiques fortement instationnaires en évitant de stocker sur disques des volumes conséquents de données correspondant à des instantanés du calcul.
- la disponibilité : les applications faisant appel à un processus d'optimisation (calcul optimal de formes) ou nécessitant la résolution de problèmes inverses (identification de paramètres) impliquent de mobiliser les ressources de calcul sur des durées conséquentes qui peuvent facilement dépasser les limites garantissant un bon fonctionnement des centres nationaux (au sens d'une exploitation équitable des ressources par tous les utilisateurs accueillis).
- le stockage : bon nombre d'applications traditionnelles (physiques des particules) ou émergentes du calcul intensif (traitement d'images pour des applications médicales ou vidéo) nécessitent de manipuler de très grands volumes de données. Pour ces applications, il est préférable de faire appel à des serveurs spécialisés combinant capacité de stockage téraoctique (au minimum) et accès rapides aux données.

⁶Par exemple, il existe aujourd'hui plusieurs environnements logiciels ou bibliothèques dédiés à la résolution numérique parallèle d'EDP et disponibles dans le domaine publique. PETSc (Portable Extensible Toolkit for Scientific Computing) développé au Argonne National Laboratory est l'exemple le plus remarquable.

⁷Comme MUMPS (a MULTifrontal Massively Parallel sparse direct SolverSL) et PaStiX (Parallel Sparse matrix package).

En somme, la plate-forme de calcul idéale devrait combiner des ressources de calcul haute-performance, de visualisation et de stockage. En toute généralité, ces ressources n'ont pas vocation à être localisées sur le même site géographique. Idéalement, ces ressources sont distribuées sur plusieurs sites géographiques interconnectés par des réseaux WAN (Wide Area Network). Par ces quelques lignes, nous venons de décrire les ingrédients et caractéristiques d'une grille informatique. Plusieurs projets de l'INRIA, appartenant aux thèmes **Num** (systèmes numériques), **Com** (systèmes communicants), plus précisément du sous-thème **Com A** (systèmes distribués et architectures réparties) et **Bio** (systèmes biologiques), ont des activités qui visent l'utilisation de grilles de calcul. L'exploitation efficace de ce type de plate-forme soulève de nombreuses questions liées à l'hétérogénéité des ressources (noeuds de calcul et réseaux d'interconnexion), la multi-localisation, la volatilité des ressources, la sécurité des données, l'algorithmique (numérique ou non) parallèle et distribuée, etc. auxquelles s'attaquent ces projets. La grille informatique au coeur du programme national GRID'5000, initié et soutenu par le Ministère de la Recherche, constitue un instrument quasi-unique en son genre, support essentiel aux activités de recherche des projets concernés et qui préfigure peut-être ce que sera la plate-forme de calcul massivement parallèle du futur. Même si GRID'5000 est une grille de calcul expérimentale et en aucun cas une plate-forme de calcul intensif, elle reste éventuellement reconfigurable pour permettre, par exemple, l'évaluation de performances d'algorithmes numériques parallèles et distribués. De ce point de vue, GRID'5000 est aussi une plate-forme qui permet de valider et évaluer en grandeur nature les algorithmes et outils du calcul scientifique intensif du futur.

4 La prospective sur l'accompagnement par la recherche

Une des questions à l'origine de la mise en place du groupe de travail coordonné par messieurs Héon et Sartorius concerne la stratégie à mettre en oeuvre pour doter la recherche française de moyens de calcul intensif comparables à ceux des grandes nations européennes et éventuellement capables de concurrencer (dans le cadre d'une structure alliant au minimum l'Allemagne, la France et le Royaume Uni) les configurations téraflopiques des Etats-Unis et du Japon. Il est clair que cette mise à niveau des moyens de calcul devra s'accompagner de réalisations logicielles et applicatives permettant de tirer les meilleurs profits de ces nouvelles capacités de traitement. Bien que dotée de nombreuses équipes très actives dans le domaine du calcul intensif, notamment pour ce qui concerne la réalisation d'outils et d'environnements logiciels pour le calcul parallèle et distribué ou encore la mise au point d'algorithmes numériques adaptés aux plate-formes de calcul intensif, la recherche française souffre d'un certain retard dans la résolution des grands défis scientifiques qui nécessitent des capacités de traitement téraflopiques voire pétaflopiques. La position de l'INRIA sur cette question peut se décliner en plusieurs remarques et propositions :

- notre expérience dans ce domaine montre une demande croissante du monde académique (et du monde industriel) pour des outils et environnements logiciels permettant la résolution de problèmes de plus en plus gourmands en puissance de calcul et en capacité mémoire. A titre d'exemple, citons la résolution, itérative ou directe, des grands systèmes linéaires résultant de la discrétisation de systèmes d'EDP modélisant des phénomènes physiques complexes. La réponse à cette demande passe par la mise au point d'algorithmes adaptés aux plate-formes de calcul parallèles (prise en compte aussi fine que possible de caractéristiques architecturales telles que la hiérarchisation et l'organisation de la mémoire, le réseau d'interconnexion, etc. tout en garantissant la portabilité) et par des développements informatiques s'appuyant sur des couches logicielles capables de gérer ces plates-formes. Ces développements informatiques (incluant des activités de portage sur différentes plate-formes, de validation, de support aux utilisateurs et de documentation) doivent être réalisés par des ingénieurs de recherche et développement, en étroite collaboration avec les chercheurs concernés. La possibilité de recruter de tels personnels est une composante essentielle de la réussite de cette mission. Ce recrutement doit pouvoir se faire sur la base de postes en CDD ou ingénieurs associés (accueil de jeunes diplômés au sein des projets) en charge des principales phases de développement, et de postes statutaires (partagés par plusieurs projets au sein d'une UR) pour garantir la pérennité des développements en question.
- la résolution des grands défis scientifiques posés par notre société nécessitent des actions de recherche et développement multi-disciplinaires associant physiciens, mathématiciens appliqués et informaticiens sur le modèle de celles entreprises aux Etats-Unis dans le cadre du programme SciDAC (Scientific discovery

through Advanced Computing)⁸⁹, s'inscrivant sur une durée de 3 à 5 ans. A cet égard, les ACI (Actions Concertées Incitatives) GRID (Globalisation des Ressources Informatiques et des Données) du Ministère de la Recherche sont de parfaits exemples d'actions multi-disciplinaires dans le domaine des grilles de calcul. Il conviendrait sûrement de s'inspirer des principes à la base de ces actions. Quelques actions de ce type pourraient être initiées chaque année. L'identification de ces actions devrait être de la responsabilité d'un conseil scientifique en charge de la prospective pour le calcul intensif, épaulé par quelques comités de prospectives couvrant un ensemble de thématiques scientifiques identifiées en veillant à ne pas se limiter aux thématiques des comités des centres nationaux (autrement dit, en prenant en compte des disciplines émergentes comme celles discutées à la section 2). Ces actions devraient être dotées de moyens assurant une masse critique suffisante en termes de personnels et permettant une diffusion des résultats dans les principales conférences internationales. En particulier, il serait très souhaitable de flêcher des allocations de recherche en soutien à ces actions ce qui permettrait d'inscrire les travaux dans la durée. Ici, l'INRIA pourrait apporter des contributions significatives sur le plan de l'algorithmique parallèle, numérique ou non, comme sur celui des développements informatiques, à l'image de sa participation active dans plusieurs ACI GRID.

- la recherche française dans le domaine du calcul scientifique intensif gagnerait en visibilité avec l'organisation annuelle de journées nationales dans ce domaine. Il pourrait s'agir de 2 ou 3 journées consécutives, organisées sous l'égide de l'ORAP, articulées autour d'exposés de représentants d'équipes françaises actives dans ce domaine et d'interventions de quelques personnalités étrangères invitées. Ces journées pourraient aussi être l'occasion de présenter en un même lieu l'état d'avancement des travaux menés dans les actions multi-disciplinaires discutées au point précédent. Enfin, chaque instance de ces journées pourrait voir l'édition d'un ouvrage intégrant des articles suffisamment détaillés (de l'ordre de la douzaine de pages pour ne pas se limiter à un survol des activités et résultats), rédigés en anglais et soumis à un comité de relecture.

5 Synthèse

Dans un avenir proche, le calcul intensif ne concernera plus seulement les applications traditionnelles du calcul scientifique (prévisions météorologiques, modélisation de l'atmosphère, de l'océan et du climat, aérodynamique, milieux réactifs, astrophysique, géophysique, etc.) mais verra la montée en puissance de nouvelles disciplines. Nous pensons plus particulièrement aux disciplines qui traitent de problématiques liées à la **modélisation du vivant** (génomique, neurosciences, modélisation du système cardio-vasculaire, etc.) mais aussi à des disciplines plus technologiques (vidéo tout numérique, nanotechnologies, etc.) pour certaines sans relation directe avec le calcul scientifique. L'émergence de ces nouvelles applications s'accompagnera d'une évolution du mode d'utilisation des moyens de calcul intensif : il ne s'agira plus seulement de calculer sur ordinateur mais aussi de **stocker et manipuler de très grands volumes de données**, et d'**interagir sur le déroulement du calcul** via une visualisation quasi-temps réel de son déroulement et la modification de données d'entrée pour des raisons d'optimisation ou d'identification de paramètres. De plus en plus souvent ces grands défis scientifiques seront abordés dans le cadre d'actions impliquant **des équipes et des ressources multi-localisées** (plate-formes de calcul haute-performance, serveurs de visualisation, unités de stockage) . Dans ce contexte, les grilles informatiques répondront au mieux d'une part, aux besoins en capacité de traitement et stockage requises par ces applications et, d'autre part, à la nécessité d'offrir aux chercheurs impliqués des moyens de collaborer activement en dépit d'une multi-localisation géographique. L'INRIA, par son implication forte dans l'initiative GRID'5000, sera à même d'offrir à ses chercheurs un accès à une infrastructure unique. Sa capacité de reconfiguration, notamment en **grille de calcul scientifique intensif**, la variété des équipements, que ce soit pour les aspects calculs, stockage et réseaux, permettront aux chercheurs de réaliser des **expérimentations** dans des conditions excellentes à même de leur permettre d'être au meilleur niveau mondial. Il faudra cependant bien veiller à ce que la pérennité de cette infrastructure soit assurée afin d'offrir aux chercheurs un accès aux technologies les plus avancées. Ce faisant, il

⁸URL :<http://www.scidac.org/>

⁹Voir aussi les rapports de l'initiative américaine SCaLeS (Science Case for Large-scale Simulation)
URL :<http://www.pnl.gov/scales/index.stm>

sera essentiel de préserver le caractère expérimental de cette grille de façon à éviter tout amalgame avec les grilles de production telles que celles qui impliquent les centres nationaux IDRIS et CINES. Clairement, ces deux types de grille ne desservent pas les mêmes besoins et activités scientifiques.

Dans un tel contexte, l'interconnexion entre les ordinateurs joue un rôle central. A cet égard, pour l'INRIA, le grand équipement qui est le plus important, le plus critique pour comprendre l'avenir, est le réseau RENATER. Sa capacité à être un réseau de pointe, permettant outre un fonctionnement de qualité industrielle de l'interconnexion des établissements de recherche et d'enseignement supérieur comme c'est le cas aujourd'hui, mais aussi la capacité à mettre en place des expérimentations réseau véritablement *state of the art* pour des projets comme GRID'5000, nous est cruciale. L'INRIA n'hésite pas en particulier à contribuer au budget de RENATER au delà de ce qu'une analyse purement utilitaire du rapport qualité/prix conduirait à demander, pour être sûr d'avoir accès à cette possibilité.

De nombreux chercheurs de projets de l'INRIA, informaticiens et mathématiciens appliqués, ont collaboré dans un passé récent, ou collaborent actuellement, avec des chercheurs d'équipes extérieures (notamment du CNRS et de l'INSERM) dans le cadre d'actions multi-disciplinaires propres à l'institut (ARC) ou à l'initiative du Ministère de la Recherche (ACI GRID). Les moyens de calcul intensif et les grilles de calcul sont souvent au coeur de ces actions. Les grands défis, actuels et futurs, du calcul scientifique intensif (ou du calcul intensif tout court) nécessiteront des **actions multi-disciplinaires de grande envergure**, s'inspirant par exemple des ACI GRID ou des projets dans le cadre du programme SciDAC, inscrites sur des durées de 3 à 5 ans, associant physiciens, mathématiciens appliqués et informaticiens. Les centres nationaux devront être des participants incontournables des ces actions. Ces actions devront être dotées de moyens suffisants et en particulier, d'**allocations de recherche fléchées**. L'INRIA pourrait sans aucun doute jouer un rôle important dans de telles actions sur la base du savoir faire de ses projets dont les activités touchent au calcul intensif, qui couvre de multiples aspects depuis les couches logicielles les plus basses (systèmes d'exploitation, protocoles réseaux, exécutifs pour les langages parallèles, gestionnaires de ressources, etc.) jusqu'aux applications (du calcul scientifique ou d'autres domaines) en passant par les langages de programmation parallèle, l'algorithmique numérique parallèle, les intergiciels pour l'aide au développement, à l'optimisation et à l'exploitation d'applications de calcul intensif, etc.