PROJET EXASCALE FRANCE

Les applications françaises face à l'exascale

PROJET EXASCALE **FRANCE**

Les applications françaises face à l'exascale













SOMMAIRE

Sommaire 5

Résumé 8

Présentation du projet 12

PRÉSENTATION DU SP3

..... **14**

France BOILLOD-CERNEUX 14

Michel DAYDÉ 14

Céline LOSCOS 14

Jean ROMAN 14

OBJECTIFS DU RECENSEMENT DES APPLICATIONS

..... **15**

PRÉSENTATION DES GROUPES DE TRAVAIL

..... **16**

Énergie 20

DOMAINES APPLICATIFS

..... **21**

Codes relevant de la recherche fondamentale utilisés dans tous les domaines du GT-E : 21

Codes utilisés spécifiquement en production d'énergie : 21

Sciences et Usages du numérique transverse au GT-E 22

CHIFFRES CLÉS DU GT-E

..... **24**

Parité et organismes 24

Communauté des codes 25

Maturité des codes pour une architecture exascale 25

Besoins humains pour le passage à l'exascale 29

Conclusion du GT-E 31

Recherche Fondamentale 33

DOMAINES APPLICATIFS

..... **34**

Matériaux du futur 34

Interfaces Réactives 36

Systèmes Homogènes 37

Systèmes Biologiques et Bio-inspirés 38

Systèmes Fortement Corrélés, États Excités, Méthodes 39

CHIFFRES CLÉS DU GT-E

..... **40**

Parité et organismes 40

Communauté des codes 41

Maturité des codes pour une architecture exascale. 41

Besoins en ressources humaines pour le passage à l'exascale 44

Conclusions du GT-RF 45

Sciences de l'Univers 47

DOMAINES APPLICATIFS

..... **48**

Physique des hautes énergies et physique nucléaire 48

Astrophysique et cosmologie 49

Sciences de la Terre 50

Climat et Environnement 51

Recherche Fondamentale transverse au GT-SDU 52

Besoins du GT-SDU identifiés dans le GT Sciences et Usages du numérique 53

CHIFFRES CLÉS DU GT-SDU **54**

Parité et organismes présents dans le groupe de travail Sciences de l'univers 54

Communauté des codes 55

Maturité des codes 56

Besoins humains pour le passage à l'exascale 59

ASTROPHYSIQUES ET COSMOLOGIE 59

ENVIRONNEMENT 59

PHYSIQUE DES HAUTES ÉNERGIES ET PHYSIQUE NUCLÉAIRE 60

SCIENCES DE LA TERRE 61

Sciences du Vivant 63

DOMAINES APPLICATIFS **64**

Modélisation du vivant 64

Bio-Santé-Pharmacologie 67

Environnement 67

Recherche Fondamentale transverse au Groupe de Travail Sciences du Vivant 68

Sciences et Usages du numérique transverse au Groupe de Travail Sciences du Vivant 68

CHIFFRES CLÉS DU GT-SDV **69**

Parité et organismes présents dans le Groupe de Travail Sciences du Vivant 69

Communauté des codes 69

Maturité des codes 70

VUE SYNTHETIQUE DES BESOINS RHs (LES SCIENCES DU VIVANT)

..... **73**

MATURITE DES CODES POUR UNE ARCHITECTURE EXASCALE

..... **75**

Industrie du Futur & Transition Numérique 79

DOMAINES APPLICATIFS

..... **81**

Recherche Fondamentale 81

Sciences et Usages du numérique 81

APPLICATIONS

..... **82**

POINTS SAILLANTS

..... **84**

Jumeaux numériques 84

Logistique des données, intégration dans les workflows 84

Accessibilité des ressources 84

Articulation avec les infrastructures Cloud 84

Architecture des codes et *vendor* lock-in 85

Utilisation de l'IA et HPDA 85

Time-to-market, solutions spécialisées 85

CONCLUSION

..... **86**

Sciences et Usages du Numérique 89

LES MODÈLES DE PROGRAMMATION ET LES SUPPORTS D'EXÉCUTION

..... **90**

Langages à base de directives 90

Extensions de langages 91

Supports d'exécution & Back-ends de compilateurs 92

Programmation distribuée 92

LES OUTILS DE DÉVELOPPEMENT

..... **94**

Simulation d'exécution et du comportement des plateformes de calcul 94

Profilage, génération et analyse de traces d'exécution 94

LES BIBLIOTHÈQUES DE SOLVEURS D'ALGÈBRE LINÉAIRE, DE PARTITIONNEMENT ET DE GESTION DE MAILLAGES

..... **96**

LES BIBLIOTHÈQUES DE TRAITEMENT DE DONNÉES, DE VISUALISATION ET LES OUTILS D'APPRENTISSAGE

..... **98**

LES SOLUTIONS DE DÉPLOIEMENT DE PILES LOGICIELLES ET DE GESTION DE DONNÉES **100**

Conclusion 102

..... **102**

RECOMMANDATIONS TRANSVERSES AUX 6 GTS **102**

Conclusion de cette étude **110**

Remerciements..... 113

ANNEXES..... **117**

Annexe de la conclusion.....117

Groupe de travail Energie.....118

Groupe de travail Sciences de l'Univers.....123

Groupe de travail Sciences du Vivant.....132

Groupe de travail Recherche Fondamentale.....134

RÉSUMÉ

La France prépare une réponse au prochain appel à manifestation d'intérêt (AMI) d'EuroHPC[1] en vue d'héberger et opérer l'une des machines européennes exaflopiques prévues en Europe à l'échéance de 2024 au sein d'un consortium dont GENCI est la "Hosting Entity" et le TGCC au CEA le " Hosting Site ". Ce rapport présente une vision de l'état actuel des applications des organismes impliqués dans le Projet Exascale France et le dimensionnement des besoins techniques et humains relatifs à ces applications qui leur permettront de s'exécuter sur des machines exaflopiques, afin de rester compétitif dans le paysage mondial du numérique et de mieux dimensionner la réponse française à l'AMI d'EuroHPC. Le SP3 propose quatre recommandations majeures, transverses à toutes les communautés de recherche concernées par l'exascale et un focus particulier sur les ressources humaines nécessaires pour les applications recensées.

Pour répondre à l'AMI d'EuroHPC prévu en 2022 pour un calculateur exascale, le Projet Exascale France (PEFR), porté par GENCI (Grand Équipement National de Calcul Intensif) et ses associés, a été mis en place en 2019. Il est constitué de trois sous-projets (SP) : SP1 – Management, SP2 – Machine/infrastructures, SP3 – Applications. Ce projet fédère les compétences d'experts français provenant du CEA, du CNRS, des Universités (représentées par France Université (FU), d'Inria et de GENCI.

Le Sous-Projet 3 (SP3) du Projet Exascale France est en charge de recenser les domaines applicatifs et applications prioritaires qui figureront dans la réponse française à l'AMI et / ou qui bénéficieront des moyens d'accompagnement (ingénieurs support utilisateur, appels à projets (AAP) spécifiques, soutien des organismes eux-mêmes, etc...) qui devraient être déployés autour de cette initiative.

Le SP3 a pour cela mené un travail de recensement des besoins des communautés scientifiques, ce qui a impliqué la participation de plus de 200 chercheurs organisés en groupes de travail autour de 6 piliers (Sciences de l'Univers, Énergie, Sciences de la Vie, Industrie du Futur et Transition Numérique, Sciences et Usages du Numérique, Recherche Fondamentale) chacun avec ses domaines applicatifs. Plus de 70 applications ont ainsi été recensées et détaillées. Le SP3 s'est focalisé sur les applications de Calcul Haute Performance (HPC), Intelligence Artificielle (IA) et Analyse de Données Haute Performance (HPDA) majoritairement. En effet, Les machines exascales cofinancées par EuroHPC devront permettre des usages IA et HPDA. Les machines exascales d'EuroHPC devront également considérer le traitement des données réelles et observationnelles. Ces changements de paradigmes impliquent de nouveaux usages et de nouveaux modèles pour les applications scientifiques.

Le recensement des applications présenté dans ce document a pour but de donner une vision précise de l'état actuel des connaissances des applications des

[1] The European High Performance Computing Joint Undertaking (EuroHPC JU) est une initiative conjointe entre l'UE, les pays européens et des partenaires privés pour développer un écosystème de supercalculateurs de classe mondiale en Europe.

organismes impliqués dans le Projet Exascale France et également de donner le dimensionnement des besoins techniques et humains relatifs à ces applications qui leur permettront de s'exécuter sur des machines exaflopiques.

SYNTHESE | **Domaines applicatifs par pilier et animateurs des GTS**



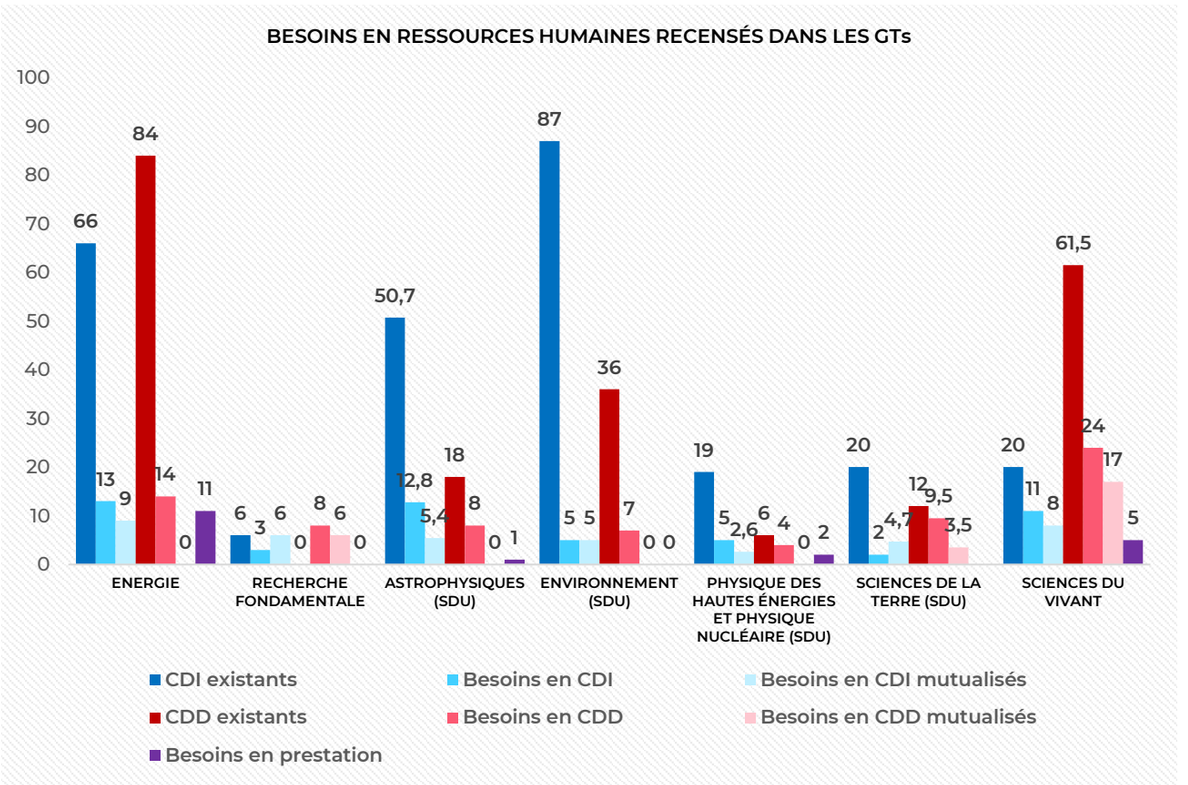
Ce rapport pourra être enrichi, dans la mesure où les membres du SP3 sont conscients de ne pas avoir recensé l'intégralité des applications à ce jour utilisées et/ou développées. En particulier, la communauté des applications plus orientées IA et/ou HPDA est sous représentée dans le recensement effectué par le SP3.

Ce recensement devra être poursuivi et ce, de façon interactive et itérative, afin de permettre aux communautés plus récentes ou moins structurées de se manifester et ainsi de :

- Contribuer à la visibilité des applications françaises ;
- Anticiper les évolutions technologiques pouvant impacter les applications scientifiques ;
- Porter leurs applications vers des architectures massivement parallèles ;
- Prendre en compte la problématique de la donnée.

Les données graphiques présentées dans ce document peuvent comporter une marge d'erreur due aux problèmes de compréhension, de retranscription, de projection, etc...

SYNTHESE | **Des ressources humaines existantes et identifiées comme nécessaires pour l'exascale**



PRESENTATION DU PROJET

La France se positionne pour répondre au prochain appel à manifestation d'intérêt (AMI) d'EuroHPC en vue d'héberger l'une des deux machines européennes exaflopiques prévues en Europe à l'échéance de 2024. Viser des performances très nettement supérieures à celles des machines existantes impose d'opter pour un calculateur massivement accéléré. De plus, les machines EuroHPC ouvrent la voie à l'exploitation des données réelles/observationnelles. De tels changements de paradigmes ne sont pas sans conséquences pour les applications scientifiques.

Pour se faire, le Projet Exascale France, porté par GENCI (Grand Équipement National de Calcul Intensif) et ses associés, a été mis en place en 2019 et est constitué de trois sous-projets (SP) : SP1 – Management, SP2 – Machine, SP3 – Applications. Ce projet rallie les compétences d'experts français provenant du CEA, du CNRS, de France Universités, d'Inria et de GENCI.

L'exploitation par les chercheurs académiques et industriels de ce supercalculateur de pointe, souverain, avec son potentiel d'innovation et de compétitivité, nécessite un gros travail d'adaptation, de portage et de réécriture des codes de calcul à cause de la nature majoritairement accélérée de l'architecture et de la nécessité d'obtenir une scalabilité sans précédent.

Il faut aussi prendre en compte l'intégration de nouveaux modèles de calcul tels que ceux utilisés en analyse de données à haute performance et en IA (analyse de données, implantation de modèles Machine Learning et Deep Learning, etc.). Les communautés tendent à coupler ces différents paradigmes de calcul, menant à des simulations (et donc des contraintes au niveau du supercalculateur) de plus en plus complexes. Le couplage calcul haute performance et analyse de données est maintenant devenu critique pour mener à bien des simulations complexes en vraie grandeur avec des coûts maîtrisés en temps et en espace de stockage. Un travail sur l'accompagnement des équipes est donc indispensable (depuis la chaîne de développement jusqu'à la formation des équipes).

Ces efforts de développement et de formation ne peuvent être réalisés que par des spécialistes informaticiens, numériciens, mathématiciens appliqués, scientifiques du domaine métier applicatif et peuvent nécessiter de quelques mois à quelques années de travail d'intégration et de validation.

Il convient de garder à l'esprit que la concurrence européenne (comme en Suisse et en Allemagne) et mondiale (aux États-Unis, en Chine et au Japon notamment) a, dans une très large mesure déjà apporté à ses propres actions un soutien fort aux applications.

Il est également important de noter que les investissements dans les applications permettent de capitaliser un savoir et une expertise sur le long terme, au-delà de la durée de vie d'un supercalculateur. Aussi, **la souveraineté scientifique passe d'abord par la souveraineté technologique mais également par la maîtrise des applications et des diverses piles logicielles qu'elles requièrent.**

ENJEUX HUMAINS

La France s'est donc engagée à répondre au prochain appel à candidature EuroHPC en vue d'héberger l'une des deux machines européennes de niveau exaflopique prévues en Europe à horizon 2024. Viser de telles performances très nettement supérieures à celles des machines existantes installées, tout en limitant la consommation électrique de la machine exascale à un maximum de 20 MW, est indispensable pour la crédibilité du dossier porté par la France. Cela impose d'opter pour un calculateur qui sera massivement accéléré avec des processeurs de calcul du type GPU (Graphic Process Unit) au sens large qui sont par ailleurs aussi utilisés en Intelligence artificielle (IA).

Afin d'évaluer plus finement les besoins, le SP3 du Projet Exascale France a travaillé avec les communautés nationales scientifiques, académiques et industrielles, et a examiné les plans de soutien dans certains pays européens et au niveau international (Chine, Japon, USA).

La communauté scientifique française souligne la nécessité absolue d'investir dans un support humain d'accompagnement pour éviter une possible sous-utilisation de la future machine et le décrochage de nos chercheurs. Pour que ces efforts soient pérennisés dans le temps et puissent contribuer efficacement à un renforcement des compétences et des connaissances au niveau national au-delà de l'exascale, il est indispensable que ces équipes s'appuient sur des postes installés dans la durée (CDI) et non uniquement sur des postes temporaires (CDD).

LES TRAVAUX DU SP3

Afin d'avancer sur la définition et la forme que cet accompagnement pourrait prendre, il convient d'établir un état des lieux concernant les applications dans le secteur de la simulation numérique au sein de l'écosystème Français (académique et industriel).

Pour ce recensement (non exhaustif), le SP3 a considéré les applications Calcul Haute Performance (HPC), Analyse de Données Hautes Performances (HPDA), High Throughput Computing (HTC) et Intelligence Artificielle (IA). Le Calcul Quantique (QC) sera intégré dans la suite des travaux du SP3 au fur et à mesure de son évolution et de son utilisation par les communautés scientifiques et industrielles.

PRÉSENTATION DU SP3

Le sous-projet 3 (SP3) du Projet Exascale France est en charge des applications, depuis l'identification des applications jusqu'à l'accompagnement en formation des communautés scientifiques.
Le SP3 est constitué de 4 animateurs, présentés ci-après.



France BOILLOD-CERNEUX

Docteur en informatique (calcul haute performance), chargée de mission numérique haute performance à la Direction de la Recherche Fondamentale du CEA.
Auparavant, France a travaillé au sein de ATOS-Bull dans l'équipe de benchmarking et de support applicatif. France est activement impliquée dans des collaborations internationales, européennes et nationales couvrant les domaines du SP3 (HPC, IA, HPDA et QC).



Céline LOSCOS

Professeure en informatique à l'Université de Reims Champagne-Ardenne depuis 2010. Elle exerce au laboratoire d'informatique en calcul intensif et image pour la simulation (LICIIS) où elle met en œuvre des solutions temps réel pour l'imagerie 3D. Céline enseigne l'informatique à l'IUT de Reims et dans le Master Calcul Haute Performance et Simulation.



Michel DAYDÉ

Directeur adjoint scientifique au CNRS INS2I après avoir été directeur de l'Institut de Recherche en Informatique de Toulouse (IRIT) jusqu'en décembre 2020. Il est professeur à Toulouse INP affecté à l'ENSEEIHT. Ses centres d'intérêts en recherche portent sur le calcul et l'analyse de données à haute performance, les noyaux de calcul et le Cloud.



Jean ROMAN

Docteur d'état en informatique avec une expertise en algorithmique parallèle et en simulation numérique en vraie grandeur, il est actuellement membre de la DGD-S Inria comme Chargé de Mission HPC. Membre du Groupe Miroir France EuroHPC où il représente Inria, il siège aussi au Conseil Scientifique du CEA DAM.

OBJECTIFS DU RECENSEMENT DES APPLICATIONS

Le SP3 a la responsabilité d'identifier les applications exascales, tout en considérant au sein des organismes CEA, CNRS, France Universités, Inria et leurs partenaires, les domaines scientifiques et applicatifs amenés à s'exécuter sur la future machine exascale. Cette identification est déterminante pour évaluer les besoins de chacune de ces applications, et ainsi mieux définir les caractéristiques et l'architecture de la future machine exascale.

Le SP3 donne ci-dessous les hypothèses de travail considérées pour le recensement des applications.

Sont considérées les exécutions suivantes pour un cas applicatif :

- Une exécution unique ;
- Un ensemble d'exécutions ;

qui tirent parti de la majorité des capacités de la future machine exascale.

Les exécutions citées ci-dessus pouvant être des exécutions :

- De Calcul Haute Performance (HPC) ;
- D'Intelligence Artificielle (IA) ;
- D'Analyse de Données Haute Performance (HPDA) ;
- Traitement de flux haute performance (HTC).

Une exécution peut comporter des workflows uniques ou différents, et ainsi mixer (ou non) des exécutions HPC, IA, HPDA et HTC. Dans ce document, le SP3 ne considère pas la composante Calcul Quantique (QC), faute de temps et de moyens mis à disposition pour ce recensement applicatif. Le QC sera considéré dans la poursuite des travaux du SP3, dans un cadre annexe au Projet Exascale France.

Le périmètre de cette étude est limité aux traitements, mouvements de données et communications internes à la machine exascale et aux données qui y sont produites et/ou stockées et/ou analysées.

Cela exclut donc (par exemple) :

- Les problématiques d'acquisition de données via des systèmes expérimentaux ou des plateformes d'observation ;
- Les traitements et applications ne relevant pas de l'exascale ou n'y étant pas candidates dans un futur proche (moins de 5 ans).

En partant de ce postulat, le SP3 a établi un recensement des applications auprès des organismes CEA, CNRS, France Universités, Inria et ses partenaires, afin d'aider les organismes à définir :

- Les domaines scientifiques prioritaires qui vont être amenés à s'exécuter sur la future machine exascale ;
- Les applications prioritaires pour le Projet Exascale France.

Le SP3 a pour but, à travers ce document, de

- **Mobiliser les organismes associés au Projet Exascale France ;**
- **D'alerter sur les besoins techniques et humains qu'une ambition exascale impose ;**
- **D'accompagner les communautés identifiées (et restant à identifier) vers une meilleure structuration de la communauté du numérique haute performance (IA, HPC, HPDA et HTC).**

PRÉSENTATION DES GROUPES DE TRAVAIL

Le SP3 a effectué le recensement des applications via la constitution de groupes de travail associés à des piliers applicatifs ou transverses. Ces groupes de travail sont essentiellement composés de membres permanents des organismes associés de GENCI.

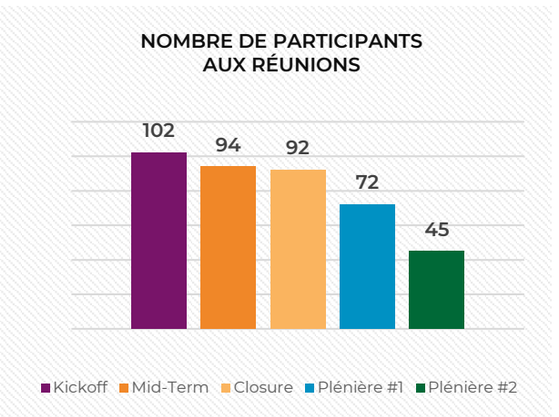
Le SP3 a créé 6 Groupes de Travail (appelés GT dans la suite) :

- Énergie (E)
- Industrie du Futur et Transition Numérique (IFTN)
- Recherche Fondamentale (RF)
- Sciences de l'Univers (SDU)
- Sciences du Vivant (SDV)
- Sciences et Usages du Numérique (SUN).

Les piliers SUN et RF sont considérés comme des piliers transverses. Il était demandé aux participants de favoriser l'interaction entre ces piliers transverses et les piliers applicatifs.

Pour chacun des GTs, un binôme d'animateurs a été chargé de mobiliser les participants de leur GT en s'assurant que les participants remplissent bien les informations demandées sur leurs applications dans le temps imparti.

Le SP3 avait fixé une période de 3 mois pour ces GTs, ponctuée par 3 sessions plénières (démarrage, mi-parcours puis clôture).



Afin de maintenir les participants informés et impliqués, le SP3 a également organisé des réunions plénières d'information avec un premier bilan le 14 Juin 2021, et la dernière réunion plénière ayant eu lieu le 30 septembre 2021. La figure « Nombre de participants aux réunions » présente le nombre de participants pour chacune de ces réunions, sachant qu'à ce jour, environ 230 personnes ont contribué au recensement des codes pour l'exascale.

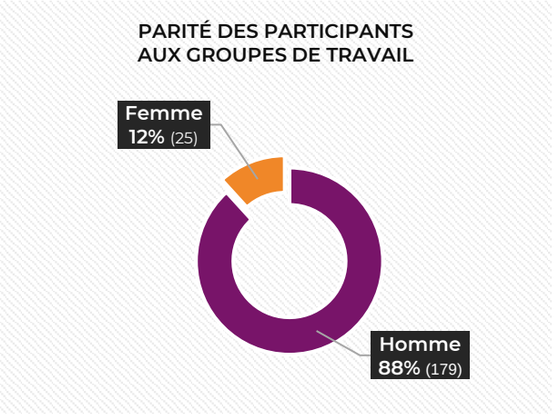
Les GTs ont transmis leurs besoins au SP3 sous les formes suivantes :

- Fiches détaillées pour chaque code recensé : Énergie, Recherche Fondamentale (RF), Sciences de l'Univers (SDU), Sciences du Vivant (SDV)
- Rapport synthétique sur les grands axes à développer pour l'exascale : Industrie du Futur et Transition Numérique (IFTN)
- Rapport de recensement sur les outils numériques et informatiques devant permettre un passage efficace vers l'exascale : Sciences et Usages du Numérique (SUN).

Chiffres clés

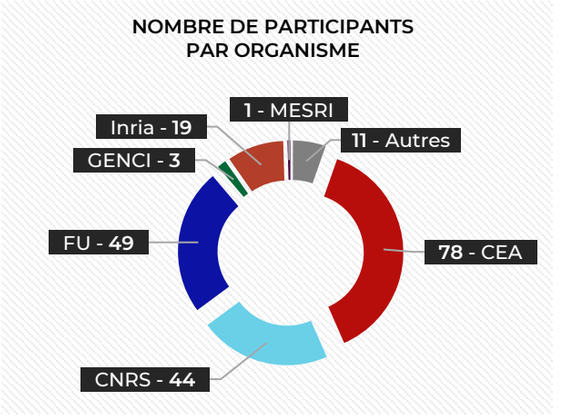
Le paragraphe ci-après présente quelques chiffres clés des 6 GTs. Ces chiffres donnent une vue synthétique sur les membres des organismes ayant participé aux GTs, sur le nombre de participants par GT ou encore sur le nombre de codes recensés.

PARITÉ DES PARTICIPANTS AUX GTS



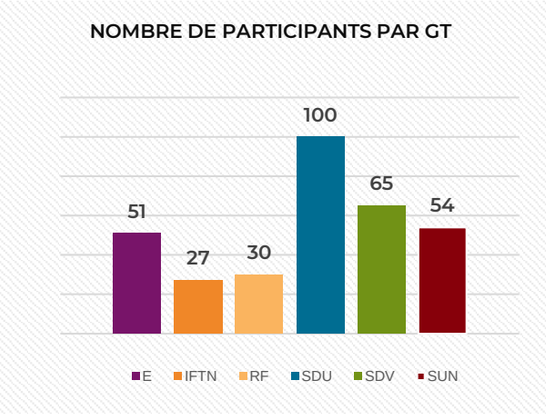
La répartition genrée (homme/femme) respecte la répartition disciplinaire dans les différents organismes ayant contribué à ce travail. On retrouve au global 12% de femmes réparties sur tous les GTs. Le SP3 est conscient de l'importance de la parité dans le numérique et a considéré ce point dans tous ses travaux. Un focus sur la parité sera donc donné pour chaque GT dans les chapitres qui suivront.

PARTICIPATION DES DIFFÉRENTS ORGANISMES AUX GTS



Les participants des GTs proviennent de différents organismes, mais restent principalement des chercheurs du CEA, CNRS, France Université et Inria. Cela s'explique par le fait que les chercheurs des associés GENCI se sont largement mobilisés pour ce travail. Les partenaires industriels, privés ou autres entités impliqués dans la recherche avec les associés GENCI ont également contribué à ce travail : ils représentent environ 6% des participants.

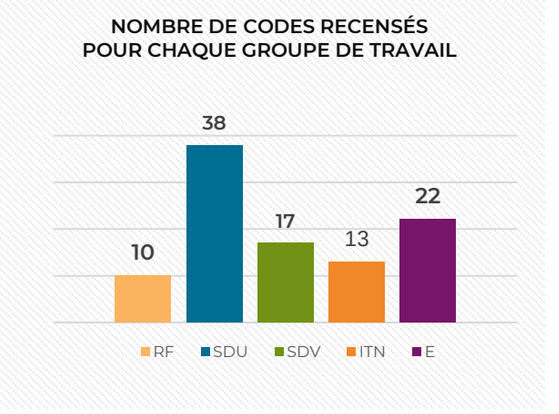
NOMBRE DE PARTICIPANTS PAR GT



Les participants (rappel : ~230 au total) se sont répartis par affinité disciplinaire. La figure « Nombre de participants par GT » montre une plus grande participation dans le GT SDU (qui est l'une des grosses communautés utilisatrices du HPC avec des besoins dimensionnant et des engagements internationaux tels le GIEC). L'implication malgré tout suffisante dans les autres GTs a permis une bonne représentation des différentes expertises dans tous les piliers. Certains chercheurs ont participé à plusieurs GTs car à cheval sur plusieurs thématiques. Nous avons aussi incité les collègues du GT SUN à participer aux GTs applicatifs pour mieux comprendre les besoins des GTs dits « applicatifs ».

Une analyse des différents codes (HPC, HPDA, HTC et IA) existants a été menée par les GTs. Les résultats sont illustrés dans les figures qui suivent.

NOMBRE DE CODES PAR GT



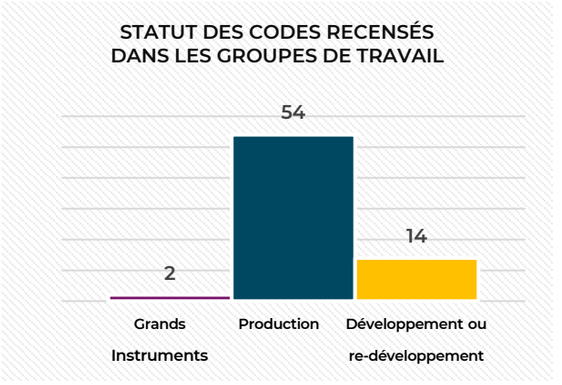
Ce graphique présente le nombre de codes cité pour chaque pilier. Il faut considérer que certains codes sont transverses (cités dans plusieurs piliers).

Nous faisons également une distinction entre les codes cités et les codes pour lesquels nous possédons une fiche détaillée de renseignements. Au total sont cités environ 85 codes, tandis que nous comptabilisons environ 70 fiches détaillées.

Cet écart s'explique majoritairement par le GT IFTN dans lequel les industriels ont fait plus spécifiquement un recensement des pratiques communes (plutôt que des codes eux-mêmes et de leurs usages, ce qui s'explique par des contraintes de confidentialité).

Pour les codes possédant une fiche détaillée, le SP3 a demandé aux rédacteurs plusieurs caractéristiques, qui doivent aider à la décision de secteurs et codes prioritaires.

STATUT DES CODES RECENSÉS

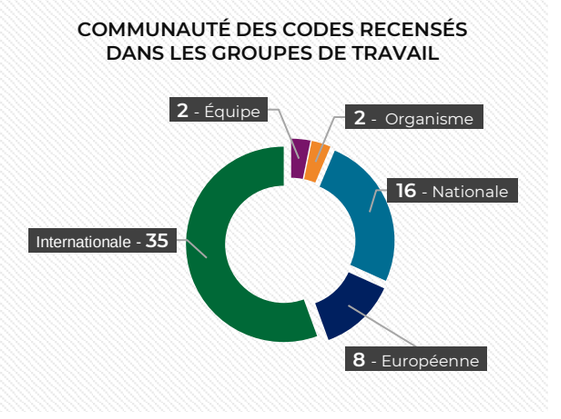


Il était important de savoir si le code recensé est en lien avec des grands instruments de recherche (afin de prendre en compte la contrainte de la donnée : volume et mouvement), en production ou en (re)-développement.

Pour ce dernier point, les codes en redéveloppement sont majoritairement des codes actuellement en production mais en cours de refonte (totale ou partielle) afin de permettre un passage à l'exascale (d'un point de vue architecture et/ou algorithmique).

Pour les codes en développement, il s'agit de codes adressant de nouveaux challenges scientifiques venant compléter des anciens codes ou étant totalement novateurs dans le paysage scientifique. Ces nouveaux codes prennent également en compte le challenge algorithmique et architectural de l'exascale.

COMMUNAUTÉ DES CODES RECENSÉS



Le SP3 a demandé aux rédacteurs d'indiquer la taille de la communauté (développeurs et utilisateurs) correspondant aux codes qu'ils portent. Cela permet de connaitre la portée du code et également de donner un indicateur macroscopique sur la compétitivité du code recensé.



ÉNERGIE

Groupe de travail animé par
Ansar CALLOO (CEA) **et Denis VEYNANTE** (CNRS)



Ansar CALLOO est ingénieur-chercheur au CEA en simulation numérique du transport de neutrons au Service d'Études des Réacteurs et de Mathématiques Appliquées (SERMA) à la DES. D'abord doctorant au CEA Cadarache, puis ingénieur-chercheur à EDF R&D, Ansar se consacre depuis 2009 aux schémas avancés pour la physique des réacteurs (méthodes numériques pour les solveurs de neutronique, couplage multiphysique, programmation parallèle). En 2018,
il rejoint le SERMA et travaille principalement sur le développement des codes déterministes pour la neutronique. Depuis 2020, il est correspondant HPC DES auprès du programme Simulation.



Les travaux de **Denis VEYNANTE,** directeur de recherche CNRS au laboratoire EM2C (CentraleSupélec) portent sur la combustion turbulente, le plus souvent en liaison avec les industries aéronautiques et automobiles. Il enseigne la combustion à CentraleSupélec, Centrale de Nantes et dans diverses écoles de printemps. Avec Thierry Poinsot, il est co-auteur d'un livre « Theoretical and Numerical Combustion » (troisième édition en 2011) et lauréat du Grand Prix Institut Français du Pétrole de l'Académie des Sciences en 2003. Parallèlement, il a été chargé de mission au département des Sciences pour l'Ingénieur (2003 - 2005), puis Directeur Adjoint Scientifique à l'Institut des Sciences de l'Ingénierie et des Systèmes (INSIS) du CNRS (2007-2012). Sensible aux questions de modélisation et de simulation numérique, il a représenté l'INSIS au Comité d'orientation du calcul intensif (COCIN) du CNRS puis créé et animé la Mission calcul-données auprès de la Direction générale déléguée à la science (2015-2020). Depuis 2020, il est directeur-adjoint en charge des infrastructures numériques de la nouvelle Direction des données ouvertes de la recherche, fusion de la mission calcul-données et de la Direction de l'information scientifique et technique.

DOMAINES APPLICATIFS

Le groupe de travail Énergie (GT-E) a structuré son travail autour quatre domaines applicatifs : la production d'énergie, le stockage, la combustion et la récupération d'énergie. Ces quatre domaines ont de multiples codes en commun.

Codes relevant de la recherche fondamentale utilisés dans tous les domaines du GT-E :

- ABINIT permet d'effectuer des calculs ab initio pour les propriétés de la matière dense et se retrouve utilisé dans les domaines d'applications du pilier Énergie.
- AVBP est utilisé en production d'énergie, stockage et combustion : c'est un code parallèle de mécanique des fluides qui résout les équations de Navier-Stokes dans les modes laminaires et turbulents compressibles. Ses applications principales aujourd'hui concernent la simulation des écoulements réactifs dans des configurations complexes.
- BigDFT fait la simulation ab initio de la structure atomique.
- GIBBS est destiné à calculer les propriétés à l'équilibre de systèmes décrits à l'échelle moléculaire (gaz, liquides, solides, polymères, métaux), en utilisant une méthode de Monte-Carlo dans des boites de simulation orthorhombiques ou tricliniques.
- KineCluE permet de calculer les coefficients de diffusion et de transport à l'échelle atomique (les éléments de la matrice d'Onsager) des espèces chimiques et des défauts cristallins dans un composé à l'état solide. Ces propriétés sont des données essentielles pour modéliser l'évolution de la microstructure du matériau pendant fabrication et sous irradiation, ce qui est directement lié à la prédiction des propriétés structurales à l'échelle macroscopique (dureté, fragilité, etc.). Il peut être appliqué à une vaste gamme de matériaux car il peut prendre en compte tous types de structures cristallines.
- LAMMPS est un code classique de dynamique moléculaire qui modélise des ensembles de particules dans des états liquides, solides, or gazeux.
- MetalWalls est utilisé en production d'énergie et en stockage : c'est un code classique de dynamique moléculaire pour la simulation des systèmes électrochimiques.
- VASP permet d'effectuer des simulations ab initio de dynamique moléculaire en mécanique quantique à base de fonctions de densité.
- YALES2 est utilisé en production d'énergie, combustion et récupération d'énergie : c'est un code de mécanique des fluides qui vise à résoudre les équations de Navier-Stokes 3D sous l'hypothèse de faible nombre de Mach. Il est principalement dédié à la résolution des écoulements turbulents réactifs et/ou multiphasiques. Pour les écoulements non réactifs, il résout l'équation de Poisson qui découle naturellement des équations de Navier-Stokes incompressibles avec un haut niveau de précision et d'efficacité. Les domaines applicatifs sont les écoulements multi-physiques dans les moteurs aéronautiques, le sillage des éoliennes offshore, les écoulements dans les turbines hydro-électriques, les écoulements biologiques, etc...

Codes utilisés spécifiquement en production d'énergie :

- Coupleurs (MEDCoupling/C3PO) s'applique en fission : La bibliothèque open-source SALOME MEDCoupling permet, la manipulation avancée de maillages et de champs. C3PO est une librairie python open-source qui offre des services génériques pour la réalisation de couplages de codes de calcul disposant d'une interface ICoCo en python. Parmi les services proposés, il y a une aide à la gestion du parallélisme MPI entre les codes couplés.

- DIOGENes est une suite logicielle dédiée à la nano-photonique computationnelle organisée autour d'une librairie cœur comportant toutes les briques de base à la construction de méthodes éléments finis d'ordre élevé de type Galerkin discontinu ; de solveurs implantant des méthodes de type Galerkin discontinu d'ordre élevé pour la résolution des équations de Maxwell tridimensionnelles en domaine temporel et fréquentiel couplées à des modèles comportementaux de matériaux métalliques ou semiconducteurs ; d'une librairie de modules de modélisation géométriques pour la définition de configurations de calcul mettant en jeu des nanostructures ou des matériaux nanostructurés et d'un composant passerelle entre les solveurs, les modules de modélisation géométrique et des algorithmes d'optimisation numérique pour la conception inverse de nanostructurations.
- GYSELA (GYrokinetic SEmi-LAgrangian) est développé à l'IRFM/CEA depuis 15 ans à travers des collaborations nationales et internationales avec une forte interaction entre physiciens, mathématiciens et informaticiens pour la simulation de plasmas gyrocinétiques turbulents.
- JOREK : traite d'instabilités liées à la Magnéto-hydrodynamique (MHD) dans des plasmas de Tokamak.
- MANTA est un code de fission pour la simulation de la mécanique des structures (et couplage avec les fluides) des centrales nucléaires actuelles et futures en régime nominal et accidentel.
- PATMOS a pour l'objectif la démonstration de faisabilité de calculs de suivi de cycle d'un réacteur de type REP, avec prise en compte de l'évolution à l'échelle de la pastille de combustible et prise en charge d'une distribution de température et densité détaillée dans le contexte des contre-réactions physiques (thermo-hydraulique et thermique).
- Trust/TrioCFD est un logiciel de simulation en mécanique des fluides dédié au calcul numérique d'écoulements turbulents monophasiques incompressibles, en particulier mais pas uniquement, pour des applications d'ingénierie nucléaire.

MOTS CLÉS :

ÉOLIEN, ÉNERGIE MARINE, BIOMASSE (BIOCARBURANTS, ALGUES, ETC.), PILES A COMBUSTIBLE, FISSION, FUSION, BATTERIES, STOCKAGE PHYSICO-CHIMIQUES, RÉSERVOIRS, HYDROGENE, OPTIMISATION, POLLUANTS, COMBUSTIBLES (FOSSILES, HYDROGÈNE, ETC.), PIEGEAGE (CO2), GAZ BRULÉS ISSUS DE COMBUSTION, RÉCUPERATION DE L'ÉNERGIE ÉVACUÉE D'UN SUPERCALCULATEUR, PROPULSION, TRANSPORT D'ENERGIE, THERMO-HYDRAULIQUE, ENERGIE MARINE ET HYDRAULIQUE...

Sciences et Usages du numérique transverse au GT-E

Un seul code du domaine SUN est mentionné dans le pilier Énergie.

- URANIE : il s'agit d'un outil de supervision de code de calcul afin de réaliser des propagations d'incertitudes, des analyses de sensibilité, des optimisations (recherche de design, calibration de paramètres) ou la construction de méta-modèles.

Parmi les liens avec le Pilier SUN, on relève les éléments donnés dans le tableau ci-dessous.

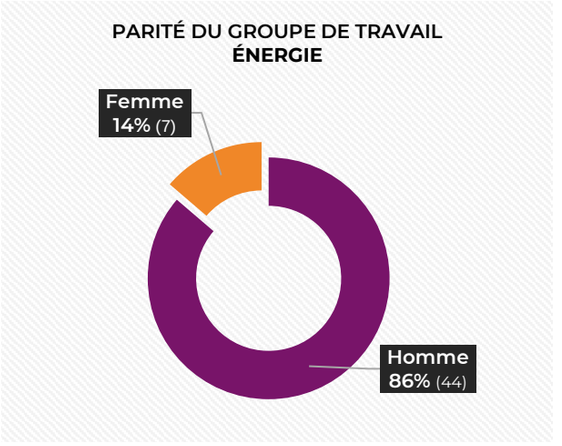
	PRODUCTION D'ÉNERGIE	STOCKAGE	COMBUSTION	RECUPERATION D'ÉNERGIE
DATA ANALYTICS	■ Préparation des observations: simulations pour préparer des observations ■ Assimilation de données ■ Plateformes de stockage / exploitation des données ■ Algorithmes d'analyse de données			
IA	■ Analyse de données et IA ■ Explicabilité ■ Plateformes de stockage / exploitation des données ■ Chaînes de traitement globalement scalables, couplage de codes HPC et HPC/HPDA			
HPC	Préparation des observations **:** simulations pour préparer des observations		Urgent computing	
	■ Réseaux - smart grid ■ Calcul temps réel ■ Profiling/programming énergétique, simulation éco-responsable ■ Plateformes de stockage / exploitation des données ■ Simulations pour constituer les bases de données d'apprentissage pour ML ou émulateurs ■ Quantification des incertitudes			
HIGH THROUGHPUT COMPUTING	■ Plateformes de stockage / exploitation des données ■ Entrée des données			
WORKFLOW COMPLEXES	■ Chaînes de traitement globalement scalables, couplage de codes HPC et HPC/HPDA, visualisation et pilotage de simulations ■ Parallélisation par graphe de tâches (scheduler, runtime, équilibrage, ...) ■ Plateformes de stockage / exploitation des données			

CHIFFRES CLÉS DU GT-E

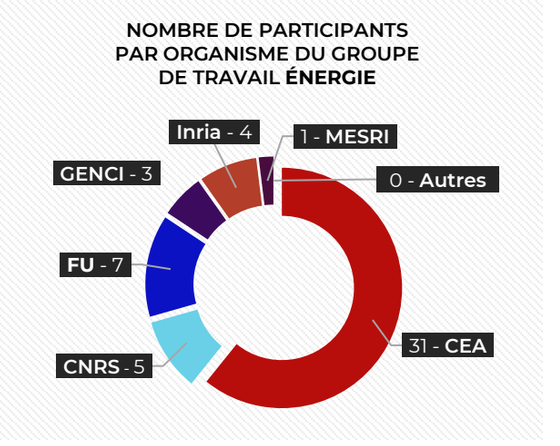
Le SP3 présente ci-après des chiffres clés concernant les codes recensés au sein du GT-E. Les graphiques permettront d'identifier, pour chaque organisme concerné, l'état actuel des codes, les besoins (techniques et humains) nécessaires pour le passage à l'exascale.

Parité et organismes

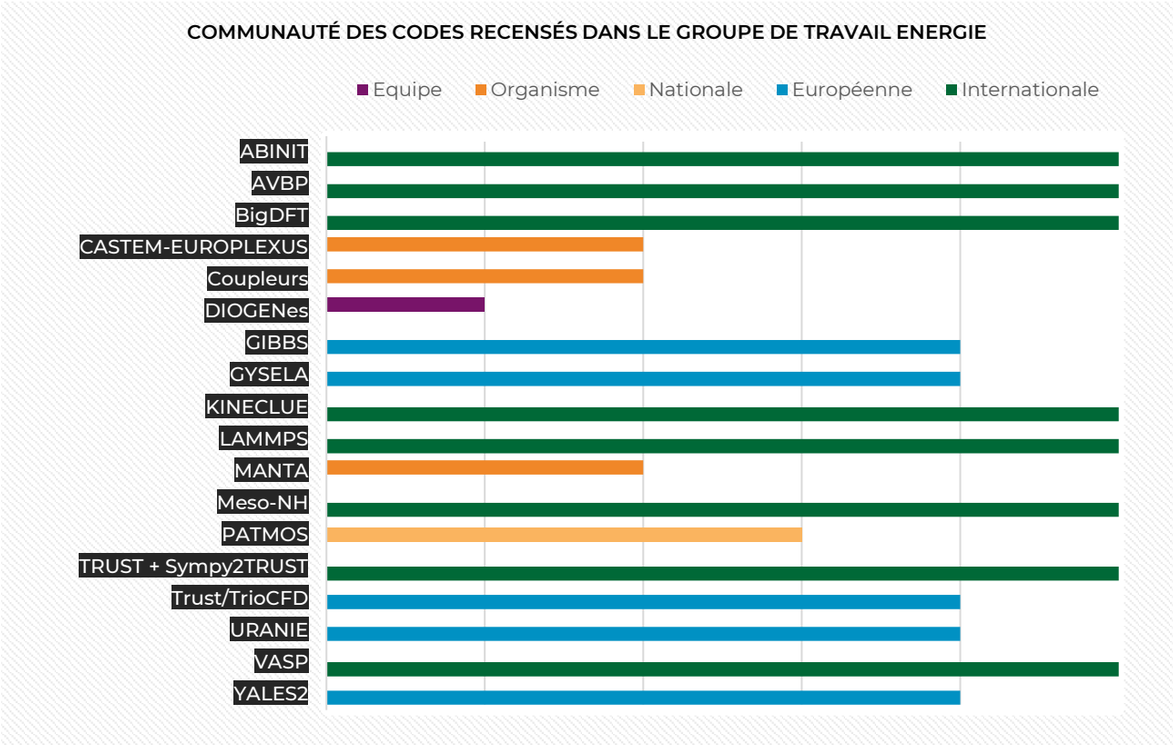
La parité au sein du GT-E est faible mais probablement représentative de cette communauté au sein des organismes participants. Dans le GT-E, les femmes représentent environ 16% des participants.



Dans ce GT-E, le CEA représente 60% des participants tandis que les autres associés GENCI représentent 31% des participants. Il convient de rappeler que les équipes ayant contribués à ce GT-E sont pour la majorité inter-organismes, aussi ce GT-E est bien représentatif de la communauté Énergie au sein des associés GENCI.



Communauté des codes



Les participants du GT-E ont fourni (pour chacun des codes possédant une fiche détaillée) la taille de la communauté de leur code. Ici, nous considérons la communauté des développeurs et des utilisateurs. Une analyse plus fine peut être faite en parcourant les fiches détaillées des codes, fiches accessibles à tous les participants de ce GT-E. On note que la majorité des codes recensés ont une communauté associée Européenne ou internationale. Seuls 5 codes (CASTEM-EUROPLEXUS, Coupleurs (MEDCoupling/C3PO), DioGENes, MANTA et PATMOS) ont une communauté à l'échelle nationale, de l'organisme ou simplement de l'équipe.

Pour les codes ne figurant pas sur ce graphique, cela signifie uniquement que l'information n'a pas été renseignée.

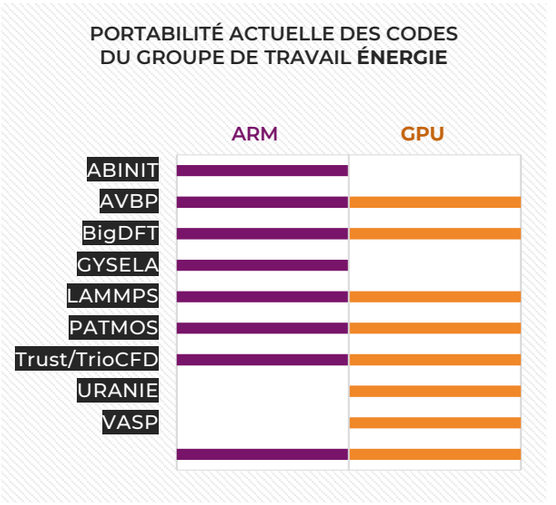
Maturité des codes pour une architecture exascale

La figure « Portabilité des codes du GT-E » représente la portabilité des codes sur des architectures accélérées GPU et de type scalaire CPU ARM telles que celles qui pourraient équiper les machines Exascale EuroHPC en 2024.

Il faut savoir que toutes les applications présentées ici sont aussi déjà portées sur architecture x86 (Intel, AMD) qui constituent une grande partie des moyens de production actuels.

Pour les architectures accélérées GPUs, nous considérons les cartes GPU de NVIDIA, celles-ci étant présentes sur la plupart des calculateurs nationaux et quasiment les seules disponibles sur le marché jusque fin 2021.

Pour l'architecture scalaire CPU ARM, nous considérons deux implémentations de puces : les processeurs ARM Thunderx2 de Marvell ou le processeur ARM A64fx de Fujitsu, co-designé par RIKEN.

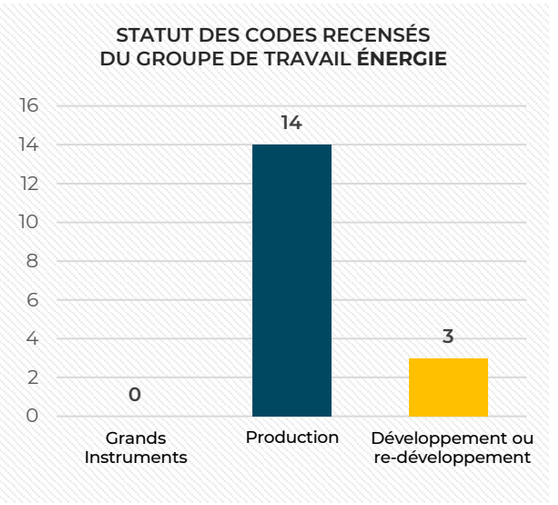


Sur ce graphique, nous ne représentons que ces deux architectures dans la mesure où le calculateur exascale est pressenti pour être équipé d'accélérateurs (type GPU) et de processeurs scalaires qui pourraient être basés sur une microarchitecture ARM co-designée notamment par la société SiPearl et par le consortium européen EPI (European Processor Initiative).

Pour ce graphique, nous considérons les hypothèses suivantes :

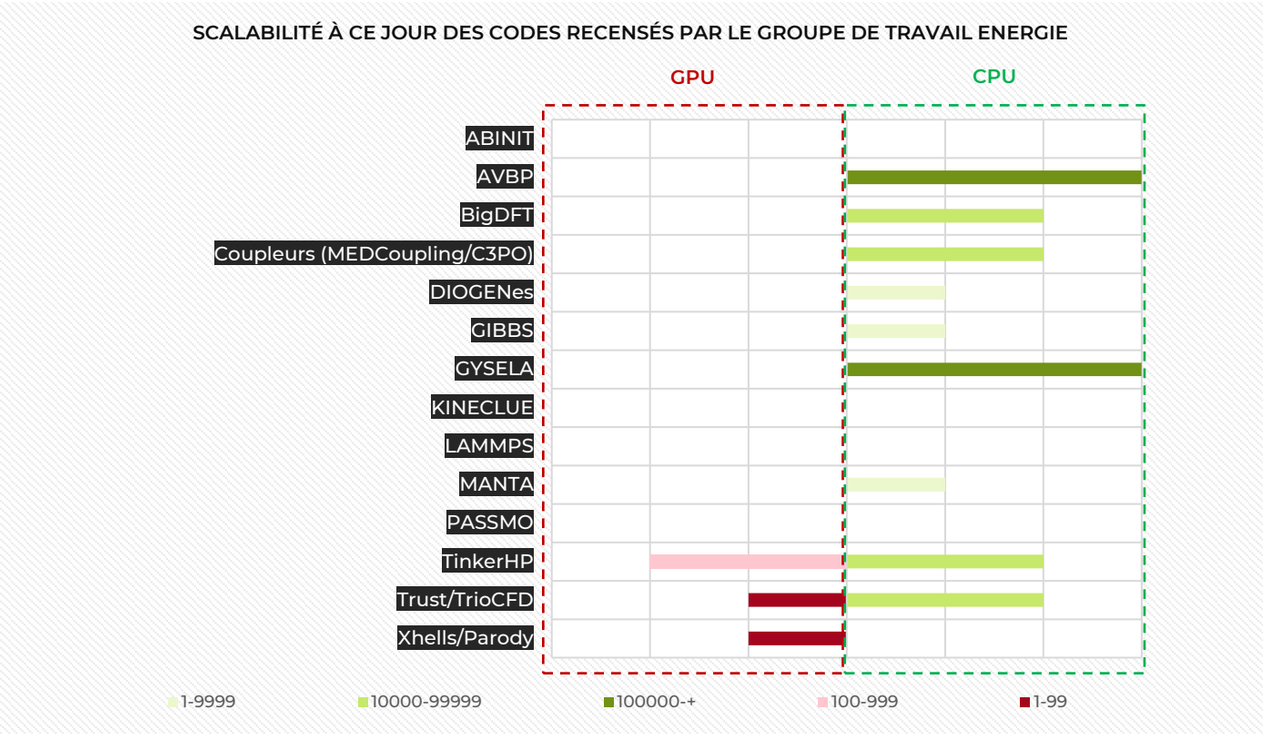
- Un code est porté sur CPU ARM s'il s'exécute sur cette architecture, même si cette exécution n'est pas optimisée. Pour les codes identifiés comme des « couplages » de simulation, on peut considérer que seule une partie de la chaine d'exécution s'effectue sur architecture ARM.
- Un code est porté sur GPU si une partie de l'application s'exécute sur un GPU. Ici, on considère donc tous les codes ayant de 1% à 100% de leur chaine s'exécutant sur GPU. La maturité du portage GPU est renseignée pour les codes dans les fiches détaillées. Cette information étant variable et très homogène, elle n'est donc pas représentée dans ce document.

Pour les codes ne figurant pas sur ce graphique, cela signifie uniquement que l'information n'a pas été renseignée.



La figure « Statut des codes recensés du Groupe de Travail Energie » donne une vision de l'état des codes dans ce groupe de travail : sont-ils en production, s'agit-il de codes en cours de développement, ou de redéveloppement afin de supplanter un code actuellement en production, ou bien s'agit-il d'un code lié à un grand instrument (et donc avec une problématique forte liée à la donnée).

Pour le GT-E, aucun code n'est lié aux grands instruments. 3 codes recensés font l'objet d'un redéveloppement ou d'un développement en cours (Castem-europlexus, Diogenes et Manta). 14 des codes recensés par le GT-E s'exécutent en mode production.

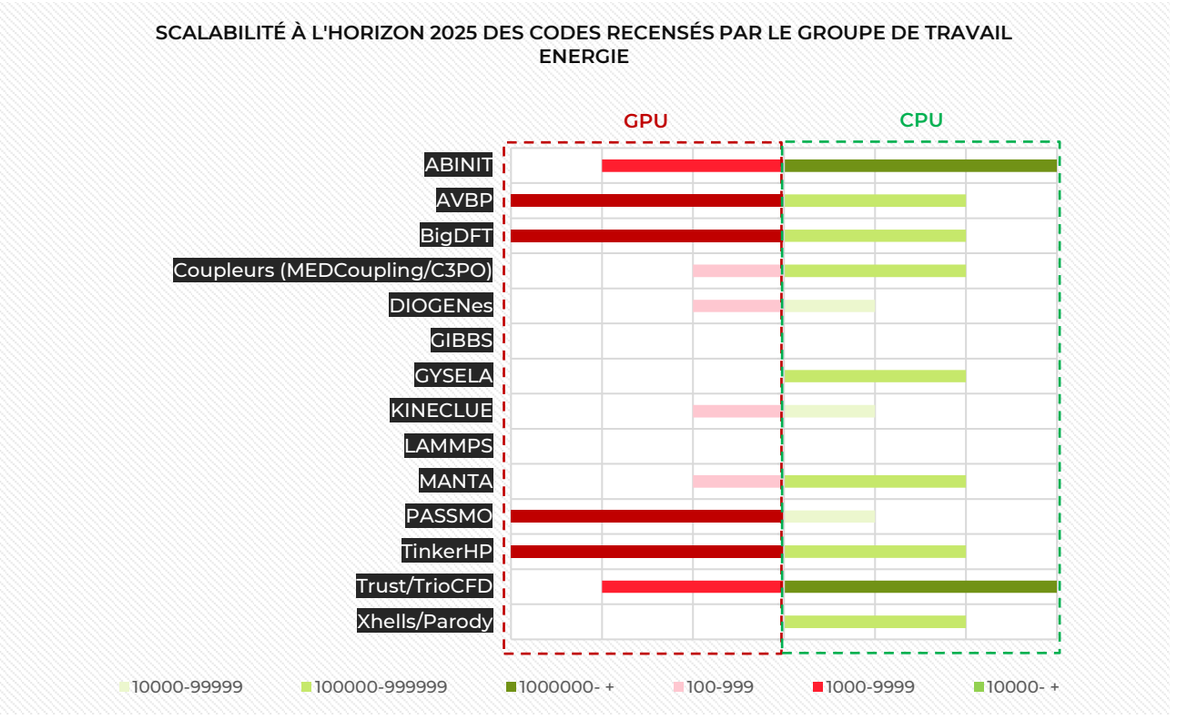


Le SP3 a demandé aux participants du GT-E d'estimer la scalabilité actuelle et à horizon 2025 des codes recensés. Cette scalabilité est donnée à la fois sur CPU et sur GPU, car il nous faut prendre en compte la maturité des codes vis-à-vis des architectures accélérées, celles-ci étant incontournables dans le cadre de l'exascale.

Il faut également considérer l'écosystème des architectures accessibles aujourd'hui, à savoir que le parc de supercalculateurs nationaux GENCI, européens Prace et EuroHPC disposent d'une partition accélérée.

On constate qu'actuellement, la majorité des codes du GT-E (ceux pour lesquels nous disposons de l'information) s'exécutent sur CPU entre 10 000 et 100 000 cœurs, avec deux d'entre eux qui s'exécutent sur plus de 100 000 cœurs. En revanche la scalabilité sur les GPU à ce jour est très réduite pour les codes du GT-E (toujours pour ceux qui ont fourni l'information).

Pour les codes ne figurant pas sur ce graphique, cela signifie uniquement que l'information n'a pas été renseignée.



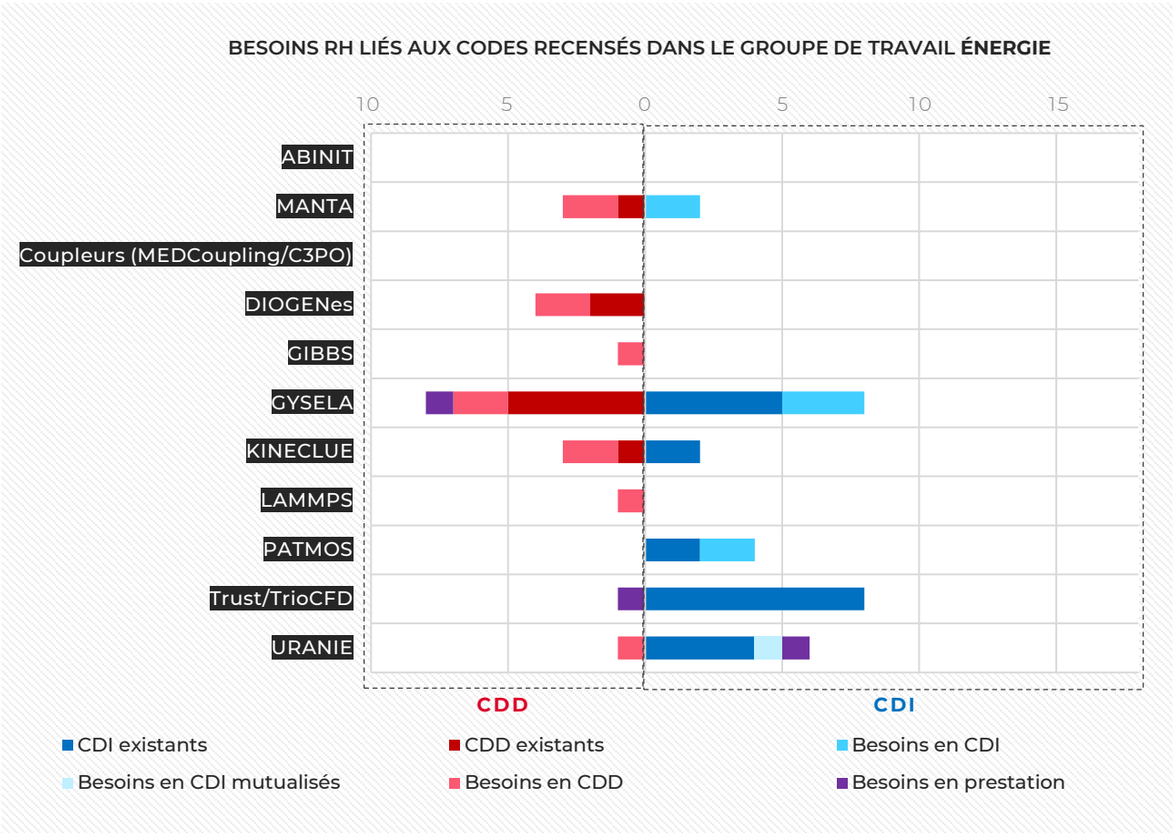
La projection pour les équipes de la scalabilité des codes a horizon 2025 montre l'ambition effective pour 6 codes de :

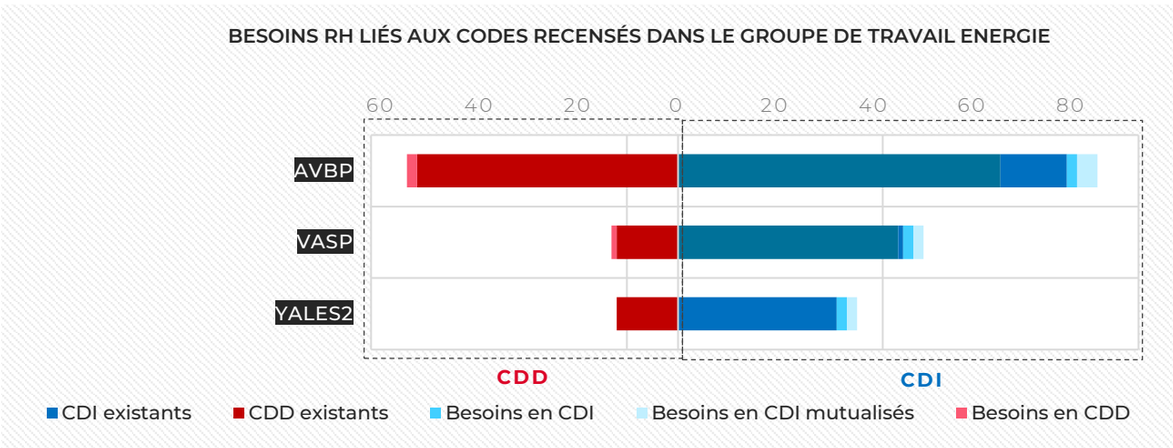
- Passer en mode production avec une large scalabilité sur architecture accélérée ;
- Maintenir ou améliorer aussi la scalabilité des codes sur architecture CPU. Cette projection sur une partition CPU « classique » n'est pas contradictoire avec les projections sur architecture accélérée car toutes les simulations n'ont pas vocation par défaut à s'exécuter sur architecture accélérée. Il faut également remarquer que, bien que minoritaire au sein du futur calculateur exascale, la partition classique CPU sera en nette augmentation comparée à ce qui est disponible actuellement sur les calculateurs accessibles dans les centres en particulier nationaux.

Pour les codes ne figurant pas sur ce graphique, cela signifie uniquement que l'information n'a pas été renseignée.

Besoins humains pour le passage à l'exascale

Le GT-E a fourni un recensement des ressources humaines actuellement déployées sur les codes recensés ainsi que des forces que les chercheurs jugent nécessaires afin de tendre vers une mise en production de ces codes sur une machine exascale. Le SP3 rappelle ici la complexité du challenge exascale : une architecture accélérée, des technologies plus en plus massivement parallèle, des usages nouveaux et complexes (imbrication de paradigmes HPC, IA, HTC, HPDA, etc...)





Les besoins humains par code du GT-E ont été divisés en deux graphiques distincts, afin de permettre une meilleure lisibilité (il s'agit essentiellement d'un problème d'échelle et de visuel).

Sur la partie gauche du graphique (en rouge), nous présentons l'existant et la demande des équipes en termes de CDD ; Tandis que sur la partie droite du graphique, nous présentons les mêmes données pour les CDI (en bleu).

Le SP3 a choisi une distinction CDD versus CDI car les CDD peuvent par exemple être obtenu via des appels à projets spécifiques, tandis que les CDI relèvent d'une implication explicite des organismes.

Dans la figure « Besoins RH liés aux codes recensés dans le Groupe de Travail Energie » , il est aussi fait mention de CDI mutualisés : il s'agit ici d'une ressource en CDI, au sein d'un organisme, qui pourrait contribuer à plusieurs codes à la fois, sous la forme d'un support applicatif avancé (par exemple).

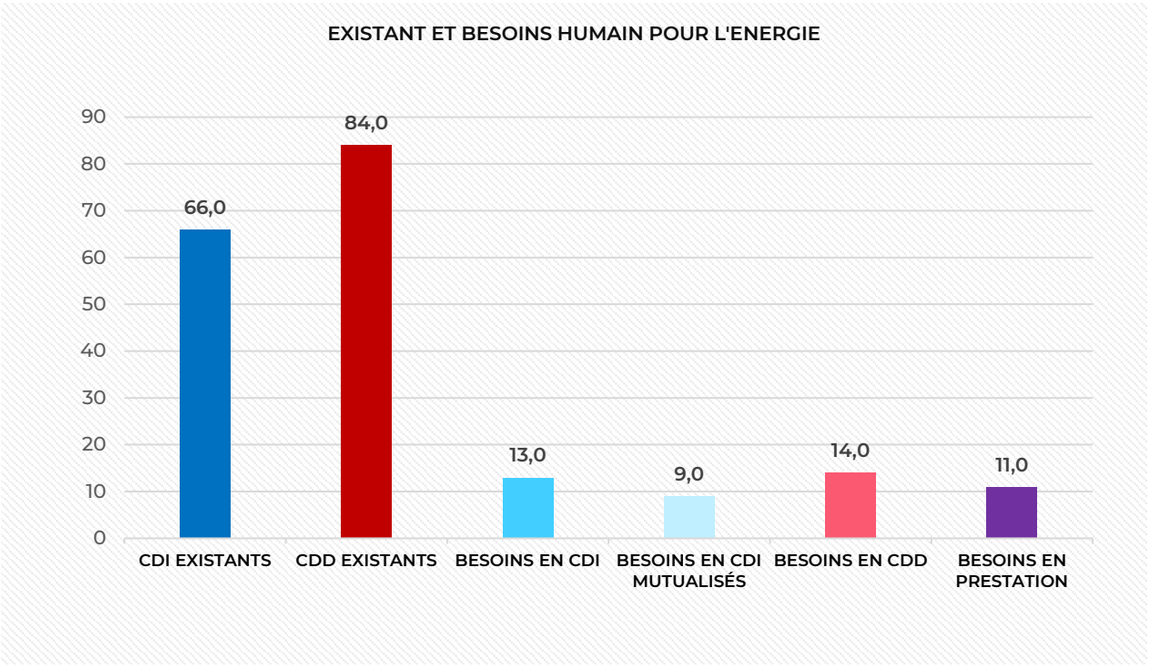
La ressource travaillerait en lien étroit avec les équipes, sous forme de missions courtes durées (en général, entre 6 mois et un an et demi). Ce modèle s'inspire des contrats de progrès actuellement en place, de la mise à disposition d'équipes support dans les centres de calcul nationaux et à la Maison de la Simulation ou encore d'équipes support applicatifs dans le cadre de projets européens (HLST PRACE ou EuroFusion).

Pour les codes de statut privé (non développés par des organismes académiques), il convient de considérer les demandes en ressources humaines d'un point de vue montée en compétence sur le code en question, ce qui est pertinent et indispensable dans l'exécution d'une chaine de simulation en vraie grandeur.

Pour les codes ne figurant pas sur ce graphique, cela signifie uniquement que l'information n'a pas été renseignée.

Conclusion du GT-E

Le graphique « **Existant et besoins humains pour l'énergie** » propose une vue d'ensemble, pour tous les codes recensés (et pour lesquels nous avons des données chiffrées) des ressources humaines existantes et des ressources humaines demandées.



La demande d'augmentation en CDI (comprenant donc les CDI et les CDI mutualisés) est de de l'ordre de 33%, tandis que la demande d'augmentation pour les CDD (comprenant donc les besoins en CDD et les besoins en prestation) est de l'ordre de 30%. En conclusion, le GT-E (d'un point de vue global) nécessite, d'après l'étude du SP3, une augmentation d'environ 30% des ressources humaines afin d'assurer un passage à l'exascale des applications de cette communauté.

Le GT-E a mentionné au total dans son travail de recensement et d'identification des codes, 17 codes se répartissant sur 4 domaines applicatifs : la production d'énergie, le stockage, la combustion et la récupération d'énergie.

La majorité de ces codes peuvent être qualifiés de codes « HPC » (voir les tableaux en annexe). Quelques codes, à savoir Trust/TrioCFD, YALES2, AVBP et URANIE sont aussi concernés par la composante HPDA.

Seuls MILADY et URANIE sont mentionnées dans la thématique IA, tandis que YALES2, AVBP et MEDCoupling/C3PO se retrouvent également sur la thématique de High Throughput Computing (HTC).

Le SP3 estime que le recensement du GT-E sur le domaine HPC est relativement complet, modulo quelques données chiffrées (notamment sur les ressources humaines et la scalabilité) qui sont à compléter par chaque organisme. **Il conviendra de poursuivre ce travail de manière pérenne et interactive afin d'identifier et de mobiliser au mieux les communautés IA, HPDA et HTC relatives au GT-E. Toutes ces communautés sont des cibles d'utilisateurs des machines exascales EuroHPC. Enfin, le SP3 continuera de travailler avec les chercheurs et les organismes concernés afin d'identifier les secteurs scientifiques estimés prioritaires par les organismes, dans le cadre de l'exascale.**



RECHERCHE FONDAMENTALE

Groupe de travail animé par
Thierry DEUTSCH (CEA) **et David LOFFREDA** (CNRS)



Thierry DEUTSCH est directeur du laboratoire modélisation et Exploration de la Matière (MEM) au CEA-Grenoble regroupant simulation et caractérisation avancée.au CEA. Spécialiste en physique du solide, il a développé plusieurs logiciels de calcul de structure électronique dont BigDFT qui permet, dans l'approximation de la théorie de la fonctionnelle de la densité, le calcul de l'énergie totale de systèmes moléculaires ou de matériaux. Ces codes sont massivement parallèles et adaptés aux architectures hybrides à base de GPU.



David LOFFREDA est directeur de recherche au CNRS, en poste au Laboratoire de Chimie de L'École Normale Supérieure de Lyon depuis 2004.
Il a débuté sa carrière à l'Institut de Recherches sur la Catalyse et l'Environnement de Lyon (IRCELYON). Il est expert de la description de structure électronique de systèmes chimiques et d'interfaces réactives complexes, à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité en condition périodique (DFT-PBC), notamment dans le cadre de l'utilisation de bases d'ondes planes (logiciel VASP). Au début de sa carrière il a développé un code de calcul nommé Phonon permettant de calculer les phonons métalliques, les vibrations moléculaires et les spectres infra-rouge de surface pour des systèmes d'interfaces réactives d'intérêt en chimie-physique et plus particulièrement dans le domaine de la catalyse. Ce code a été interfacé au logiciel VASP. Depuis quelques années, il développe des modèles de nanoparticules métalliques en tout DFT pour des systèmes allant de 1 à 1500 atomes lourds pour diverses applications couvrant les domaines de la chimie, physique, catalyse, radiothérapie etc...

DOMAINES APPLICATIFS

Le groupe de travail Recherche Fondamentale couvre différents domaines de recherche relatifs à la physique, à la chimie, à la biologie, avec un ensemble de sous-domaines applicatifs concernant les matériaux du futur et leurs propriétés (notamment via l'interaction rayonnement matière), les interfaces réactives au sens général (chimie-physique des interfaces comme en catalyse, électrocatalyse hétérogène), les systèmes homogènes en chimie (organique, organométallique ou de coordination) et la description de leurs propriétés électroniques, thermodynamiques, optiques, spectroscopiques etc., les systèmes chimiques d'intérêt en biologie appelés parfois systèmes bio-inspirés (bases des nucléotides, protéines modèles, enzymes, inhibiteurs etc.), les systèmes à corrélation électronique forte, les états excités dans les molécules et dans la matière, et d'une manière plus méthodologique, le calcul quantique et ses développements.

Matériaux du futur

Parmi les domaines d'application porteurs en recherche fondamentale, il existe une communauté de chercheurs physiciens et chimistes, experts de la théorie de la matière condensée, qui développent depuis plusieurs décennies des codes de calcul dits ab initio et basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) avec différentes bases mathématiques pour décrire les orbitales et la densité électronique (localisées de type Gaussienne, délocalisées de type onde plane ou hybrides comme les ondelettes). Les domaines d'application sont très vastes et ils concernent l'énergie, l'environnement, les nanotechnologies, le nucléaire, etc.

Depuis quelques années, la conception des matériaux est basée sur un couplage de plus en plus fort entre la simulation et les expériences avec un besoin croissant en analyse de données expérimentales importants. Ainsi, les outils de simulation sont de plus en plus utilisés lors de l'analyse dans des workflows (flux de calcul) de plus en plus complexes.

Les propriétés des matériaux notamment nouveaux sont souvent obtenues par simulation ce qui permet d'avoir des valeurs utilisables pour la modélisation à plus hautes échelles. Le criblage haut débit est un outil utilisé pour trouver de nouveaux matériaux avec une ou des propriétés spécifiques visées. Parmi les propriétés, on peut noter les efforts de recherche concernant l'Interaction rayonnement matière (laser/matière), les matériaux sous irradiation et photovoltaïques, et l'influence du rayonnement électromagnétique sur le corps humain.

Dans ce domaine de recherche, il existe un grand nombre de codes de calcul développés par différents groupes de théoriciens et méthodologistes, essentiellement en Europe pour des raisons historiques, mais d'autres pays tels que la Chine, les États-Unis etc. commencent à proposer des codes alternatifs.

Les codes principalement utilisés dans la communauté « Matériaux du futur » en France sont les suivants :

- ABINIT est une suite logicielle open source permettant de calculer les propriétés

électroniques, optiques, mécaniques, vibrationnelles et autres propriétés observables des matériaux. En partant des équations Kohn-Sham de la théorie fonctionnelle de la densité, il est possible de développer des applications avancées avec des théories des perturbations basées sur la DFT et les fonctions de Green à plusieurs corps (GW et DMFT). Ce programme permet de calculer l'énergie électronique totale, la densité de charge et la structure électronique de matériaux en utilisant des pseudo-potentiels et une base d'ondes planes. Il permet d'optimiser leur géométrie en calculant les dérivées premières de l'énergie ou forces, ou d'effectuer des simulations de dynamique moléculaire à température finie en utilisant ces forces, ou encore de calculer des phonons, des charges effectives de Born et des tenseurs diélectriques, à l'aide de la théorie perturbative de la fonctionnelle de la densité. Les états excités et les spectres peuvent être calculés dans le cadre de la théorie de la perturbation à plusieurs corps (l'approximation GW et l'équation de Bethe-Salpeter). L'approche DFT+U et d'autres théories en champ moyen sont également disponibles notamment pour les matériaux fortement corrélés.

- BigDFT est un code open source pour physiciens et chimistes théoriciens permettant de calculer l'énergie électronique totale, la densité de charge et la structure électronique de systèmes moléculaires et de matériaux cristallins. Il utilise pour cela la théorie de la fonctionnelle de la densité, des pseudo-potentiels et des bases de type ondelettes. Il a l'avantage de pouvoir calculer avec un temps de calcul proportionnel au nombre d'atomes d'un système au lieu d'un temps variant au cube ce qui lui permet de simuler des systèmes composés de dizaines de milliers d'atomes. Ces dernières années, il est appliqué aux problèmes liés à la biologie et la santé pour fournir des estimateurs de l'énergie de liaisons entre les protéines, ou entre protéines et inhibiteur à la recherche de nouveaux médicaments.
- CP2K est un code open source de chimie quantique et de physique de l'état solide qui peut effectuer des simulations atomistiques de systèmes à l'état solide, liquide, moléculaire, cristallin périodique et biologique. CP2K propose un cadre général pour différentes méthodes de calcul avec principalement la DFT utilisant des approches mixtes pour les bases en Gaussiennes et ondes planes (GPW et GAPW). Les niveaux théoriques disponibles incluent DFTB, LDA, GGA, MP2, RPA, les méthodes semi-empiriques (AM1, PM3, PM6, RM1, MNDO, ...) et les champs de force classiques (AMBER, CHARMM, ...). CP2K peut effectuer des simulations de dynamique moléculaire, de méta-dynamique, de Monte Carlo, de dynamique d'Ehrenfest, d'analyse vibrationnelle, de spectroscopie au niveau central, de minimisation d'énergie et d'optimisation de l'état de transition à l'aide de la méthode NEB ou du dimère.
- Quantum Espresso est code open source permettant également de calculer la structure électronique des matériaux, notamment à l'échelle nanométrique. Il est aussi basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité utilisant des bases d'ondes planes et des pseudopotentiels. Il permet de prédire diverses propriétés physico-chimiques comme les autres codes équivalents. Il peut cependant être utilisé pour calculer des spectres de résonance magnétique nucléaire appliquée au solide.
- VASP est un code non open source permettant de calculer la structure électronique des matériaux (systèmes solides périodiques cristallins), de molécules, de systèmes liquides et d'interfaces complexes à diverses échelles de travail et de simuler par dynamique moléculaire ab initio de nombreuses propriétés à partir des premiers principes. Il calcule une solution approximative de l'équation de Schrödinger à plusieurs corps, soit à partir de la théorie de la fonctionnelle de la densité, en résolvant les équations Kohn-Sham, soit dans l'approximation de Hartree-Fock (HF), en résolvant les équations de Roothaan. Des fonctionnelles hybrides qui mélangent l'approche Hartree-Fock avec la DFT sont également implémentées. De plus, les méthodes des fonctions de Green (quasi-particules GW et ACFDT-RPA) et la théorie des perturbations à N corps (Møller-Plesset d'ordre 2) sont également disponibles. Dans ce logiciel les outils essentiels, comme les orbitales à un électron, la densité de charge électronique et le potentiel local sont exprimés dans des bases d'ondes planes. Les interactions entre les électrons et les ions sont décrites en utilisant des pseudopotentiels (en particulier de type PAW). Pour déterminer l'état fondamental électronique, il utilise des

techniques efficaces de diagonalisation matricielle itérative, comme la méthode de minimisation résiduelle avec inversion directe du sous-espace itératif (RMM-DIIS) ou l'algorithme robuste de Davidson. Ceux-ci sont couplés à des schémas itératifs de mélange de densité (Broyden et Pulay) très efficaces pour accélérer les cycles de minimisation électronique.

Il existe d'autres codes équivalents développés en Europe tels que CRYSTAL, CASTEP, DACAPO, SIESTA, etc...

MOTS CLÉS :

THÉORIE DE LA FONCTIONNELLE DE LA DENSITÉ (DFT), MÉTHODES AB INITIO, MODELES ATOMISTIQUES, CALCUL DE LA STRUCTURE ÉLECTRONIQUE, PROPRIÉTÉS THERMODYNAMIQUES, CINÉTIQUES DES MATÉRIAUX OU SYSTÈMES SOLIDES

EN RÉSUMÉ

Tous ces codes calculent l'énergie électronique totale d'un système représenté par un modèle atomistique (matériaux, molécules, surfaces...) en se basant sur les équations de la mécanique quantique dans l'approximation de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Plus de 50 000 personnes utilisent pour leurs recherches académiques ou privées la DFT pour avoir une compréhension de la structure des matériaux, de leurs propriétés et aussi de la dynamique de ces matériaux. Ces méthodes ont un pouvoir prédictif fort mais elles nécessitent des temps de calcul et des ressources informatiques très importants.

Interfaces Réactives

De nombreux chimistes et physiciens théoriciens développent depuis de nombreuses années des modèles atomistiques, au niveau quantique ou ab initio, permettant de décrire des Interfaces de type solide/liquide, solide/gaz, liquide/liquide, avec différents domaines d'applications, depuis la chimie, à la physique et à la biologie. En particulier de nombreuses applications concernent les domaines de la catalyse et de l'électro-catalyse hétérogènes avec un impact fort pour l'énergie, l'environnement, l'industrie pétrolière, pharmaceutique, la chimie verte et la chimie fine, l'agroalimentaire etc.

Dans ce domaine de recherche tout aussi porteur, la réactivité chimique des matériaux en surface ou à l'interface d'un gaz, d'un solvant, d'un électrolyte, etc., est souvent étudiée en considérant les propriétés thermodynamiques et cinétique des molécules adsorbées (en tant que réactifs, intermédiaires réactionnels et produits de transformation). Par des approches statiques ou dynamiques, les chercheurs déterminent les propriétés catalytiques des matériaux au niveau performance (activité, sélectivité), mais également leur durabilité (dégradation, désactivation, frittage, passivation, oxydation etc.). Une composante importante dans ce domaine de recherche est la description réaliste de tout l'environnement chimique ayant une influence sur les propriétés du catalyseur (température, pression partielle des réactifs, solvant ou électrolyte, champ électrique, support catalytique, ligands de synthèse et préparation du catalyseur etc.). Afin de concevoir des matériaux toujours plus performants, moins chers et plus stables, les chercheurs déterminent les actes élémentaires de transformation des réactifs à ces interfaces afin de comprendre quels sont les actes élémentaires déterminants pour les réactions considérées et donc de pouvoir moduler les propriétés catalytiques en modifiant la composition chimique des matériaux et des catalyseurs.

Pour mener à bien ces études, les codes de calcul principalement utilisés sont ceux présentés dans la section précédente, à savoir BigDFT, CP2K, Quantum Espresso, VASP, en particulier pour déterminer les propriétés thermodynamiques à ces interfaces complexes. Pour calculer les propriétés cinétiques, certains codes se sont spécialisés avec l'implémentation d'outils de recherche plus systématiques comme la méthode dite de bande élastique (CI-NEB), du dimère etc. Afin de prédire les propriétés cinétiques au-delà des approches atomistiques, des développements complémentaires sont menés avec des approches champ moyen ou Monte Carlo (Metropolis ou cinétique). Une activité importante en aval de toutes ces prédictions théoriques est la confrontation avec la mesure expérimentale à tous les niveaux (microscopies, spectroscopies, diffraction, caractérisation RMN, RPE, XPS, XANES etc.). Ce dialogue théorie-expérience est non seulement fondamental pour progresser dans la connaissance et l'interprétation de la mesure, mais il est aussi essentiel pour valider les modèles théoriques et les méthodes de calcul proposés pour ces systèmes. À l'heure actuelle, les progrès dans ce

domaine de la recherche théorique sont tels qu'il est possible de nos jours, dans certains cas, de concevoir de nouveaux catalyseurs plus performants voire plus stables par rapport à ceux utilisés dans l'industrie et donc, de guider le design de nouveaux matériaux en amont de la mesure expérimentale.

Certaines interfaces réactives impliquant des liquides (solvant, électrolyte notamment) requièrent des simulations de dynamique moléculaire ab initio à température finie, afin d'explorer l'espace configurationnel de la couche d'adsorption à l'interface entre le matériau catalytique et le milieu liquide, et de déterminer la stabilité des réactifs et de produits en calculant leur énergie libre par diverses approches (intégration thermodynamique, métadynamique, approches ABF etc.).

Tout comme la description des propriétés des matériaux, l'exploration de ces interfaces réactives est très coûteuse en temps de calcul et en ressources informatiques. Celle-ci souffre de nombreuses limites à l'heure actuelle en tout DFT, notamment au niveau des temps de trajectoire des dynamiques, taille des systèmes considérés, etc. Ces limites ont incité de nombreux chercheurs à envisager des approches de plus bas niveau (semi-empiriques, champs de force classique ou autres), paramétrées à partir de calculs ab initio ou en tout DFT, en vue de réduire les temps de calcul et les ressources informatiques nécessaires. Malheureusement, ce compromis implique souvent une dégradation significative du pouvoir prédictif des approches théoriques, plus particulièrement au niveau quantitatif par comparaison avec les mesures expérimentales (erreur systématique).

MOTS CLÉS :

THÉORIE DE LA FONCTIONNELLE DE LA DENSITÉ (DFT), MÉTHODES AB INITIO, MODÈLES ATOMISTIQUES D'INTERFACES COMPLEXES, RÉACTIVITE EN CATALYSE, CALCUL DE LEUR STRUCTURE ÉLECTRONIQUE, PROPRIÉTÉS THERMODYNAMIQUES DE L'ADSORPTION, CINETIQUES DES INTERFACES ENTRE LES MATÉRIAUX ET LES SYSTÈMES ORGANIQUES, BIOLOGIQUES, LIQUIDES, ETC. SIMULATIONS DE DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE AB INITIO.

Systèmes Homogènes

À l'échelle de l'atome et en parallèle des codes utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité, il existe une communauté de chimistes théoriciens développant des méthodes de chimie quantique basée sur la théorie de la fonction d'onde (WFT). Les domaines d'application concernent essentiellement les systèmes homogènes principalement moléculaires d'intérêt pour la chimie organique, chimie inorganique ou chimie de coordination et des complexes organométalliques ou des agrégats métalliques manométriques, mais également de la chimie atmosphérique et interstellaire. Les méthodes développées permettent d'une part d'étudier l'état fondamental de ces édifices moléculaires et d'autre part les états excités, avec une très bonne précision et cela, en développant des approches mono et multi-références pour décrire la fonction d'onde électronique des systèmes. Au niveau des méthodes les plus sophistiquées telles que Møller-Plesset d'ordre élevé et Coupled Cluster, les prédictions théoriques atteignent la précision chimique (de l'ordre de la kJ.mol-1). Les bases utilisées sont de type orbitales localisées (de type Gaussienne, Slater ou numérique) et le calcul des intégrales 3D bi-électroniques à deux centres rend difficile le portage des codes (tels que Gaussian) en environnement massivement parallèle. Ainsi une communauté parallèle de chimistes théoriciens ont proposé d'étudier ces systèmes moléculaires au moyen de la théorie de la fonctionnelle de la densité en complément des méthodes basées sur la théorie de la fonction d'onde (codes ADF, TurboMole, ORCA, Jaguar, deMon2k, GAMESS, NWChem, QChem etc.). Parmi les approches les plus sophistiquées, on recense particulièrement deux codes développés en France dans la communauté des chimistes théoriciens œuvrant avec les approches WFT :

- EXACORR (DIRAC) est un nouveau code Coupled Cluster open source capable d'exploiter efficacement les supercalculateurs de dernière génération à architecture hybride (CPU/GPU). Il permet d'étudier des systèmes moléculaires contenant un ou plusieurs éléments lourds (actinides, lanthanides) et super lourds (au-delà de l'élément 103 du tableau périodique) avec des méthodes qui prennent en compte les effets de la relativité et la corrélation électronique très précisément. Ce code fait également partie du programme DIRAC qui calcule les propriétés moléculaires à l'aide de méthodes de chimie quantique relativiste.
- Quantum Package (QMC) est un environnement de programmation open source pour la chimie

quantique spécialement conçu pour les méthodes basées sur la théorie de la fonction d'onde. Son objectif principal est le développement de méthodes d'interaction de configuration sélectionnée (sCI) et de théorie des perturbations de second ordre multi-références (PT2). Il permet au développeur d'inclure n'importe quel ensemble arbitraire de déterminants dans l'espace de référence, offrant ainsi de plus grandes libertés méthodologiques. La méthode sCI implémentée dans Quantum Package est basée sur l'algorithme CIPSI (Configuration Interaction using a Perturbative Selection made Iteratively) qui complète l'énergie variationnelle sCI avec une correction PT2. Des plugins externes supplémentaires ont été récemment ajoutés pour effectuer des calculs avec la théorie Coupled Cluster multi-références et la théorie de la fonctionnelle de densité séparée par des intervalles.

À une échelle plus macroscopique, il existe une communauté de physiciens théoriciens qui s'intéresse à l'écoulement des fluides, mais aussi à la production d'énergie, son stockage et à la combustion.

- AVBP est un code parallèle de mécanique des fluides qui résout les équations de Navier-Stokes dans les modes laminaires et turbulents compressibles. Ses applications principales concernent la modélisation des écoulements réactifs. Un modèle de chimie réduite suivant la loi d'Arrhenius permet d'aborder l'étude des écoulements réactifs dans le domaine de la combustion pour les configurations complexes.

MOTS CLÉS :

THÉORIE DE LA FONCTION D'ONDE (WFT), MÉTHODES AB INITIO, ÉQUATION DE HARTREE-FOCK, MØLLER-PLESSET, COUPLED CLUSTER, INTÉRACTION DE CONFIGURATION, FULL CI, CALCULS MULTI-RÉFÉRENCES, MODÈLES ATOMISTIQUES MOLÉCULAIRES, MÉCANIQUES DES FLUIDES, ÉQUATION DE NAVIER-STOKES.

Systèmes Biologiques et Bio-inspirés

Parmi les chimistes théoriciens, une partie de cette communauté s'intéresse à des domaines d'application frontière à la chimie et à la biologie, en proposant des modèles théoriques atomistiques de plus bas niveau que les approches WFT ou DFT, afin de pouvoir étudier des systèmes d'intérêt pour la biochimie (protéines, enzymes, inhibiteurs, ADN, ARN etc). Bien que les méthodes dites « champ de force » et « Coarse-Grained » soient largement exploitées dans les Sciences du Vivant (notamment dans la communauté des membranes cellulaires), de nombreux chimistes proposent des modèles simplifiés des systèmes biologiques réels afin de pouvoir décrire les propriétés à l'échelle de l'atome (catalyse enzymatique etc.).

La paramétrisation de ces champs de force permet ensuite de développer des méthodes mixtes entre mécanique quantique et mécanique moléculaire (approches dites QM/MM) visant à décrire des systèmes bio-inspirés complexes à deux niveaux : un haut niveau de calcul pour décrire au niveau quantique les interactions clés mises en jeu dans les systèmes étudiés et un bas niveau de calcul pour décrire au niveau classique l'environnement chimique avoisinant, de manière approximative et donc moins coûteuse.

Il existe de nombreux codes de calcul de type « champ de force » dans cette communauté et en voici les principaux :

- LAMMPS est un logiciel de dynamique moléculaire basé sur des champs de forces pour le calcul de l'énergie libre des systèmes moléculaires afin d'avoir des informations sur la dynamique ou la stabilité en température. Au contraire des codes DFT, il utilise des champs de force paramétrés et basés sur la position des atomes uniquement. Il est essentiellement utilisé pour les liquides ou en biochimie pour le calcul de l'énergie des protéines en fonction de la température. Des simulations de millions d'atomes sont courantes au contraire des codes de DFT qui dépasse rarement le millier d'atomes.
- GROMACS est un logiciel open source de dynamique moléculaire classique. Il est principalement utilisé dans la modélisation des systèmes biologiques. Il fait partie de la distribution Ubuntu-linux.

- AMBER est une suite open source de programmes de simulation biomoléculaire. Il s'agit plus précisément d'un ensemble de champs de force de type mécanique moléculaire permettant la simulation de biomolécules (ces champs de force sont du domaine public et sont utilisés dans une variété de programmes de simulation).
- CHARMM est une suite logicielle comprenant des champs de force largement utilisés en dynamique moléculaire pour décrire les protéines, l'ADN, l'ARN et les lipides. Elle offre un large choix pour la production et l'analyse de simulations moléculaires (minimisation d'énergie d'une structure donnée et dynamique moléculaire). Elle propose aussi des techniques plus élaborées, telles que les calculs de perturbation d'énergie libre (FEP), l'estimation d'entropie par approximation quasi-harmonique, les analyses de corrélation et les méthodes combinées de mécanique quantique et moléculaire (QM/MM).

MOTS CLÉS :

MÉCANIQUE MOLÉCULAIRE, CHAMPS DE FORCE, PARAMÉTRISATION, APPROCHES MIXTES OU COUPLES QM/MM, MODÈLES ATOMISTIQUES BIOLOGIQUES.

Systèmes Fortement Corrélés, États Excités, Méthodes

Dans la communauté des physiciens et chimistes théoriciens, une partie des forces vives dédie les efforts de recherche aux développements méthodologiques. Ceux-ci couvrent tout le spectre des approches citées auparavant (théorie de la fonction d'onde, théorie de la fonctionnelle de la densité etc.).

S'agissant de la DFT, de nombreux méthodologistes développent de nouvelles fonctionnelles d'échange et de corrélation électronique au-delà des approximations standard telles que GGA (fonctionnelles non locales corrigées de la dispersion, fonctionnelles hybrides, fonctionnelles à séparation de portée). D'autres travaillent sur des approches DFT allant au-delà de la description de l'état fondamental, afin de décrire les systèmes fortement corrélés et les états excités dans les matériaux et dans les systèmes moléculaires (approches DFT+U, GW, ACFDT-RPA, TD-DFT etc). Ces développements sont progressivement implémentés dans les codes académiques cités auparavant (notamment BigDFT, VASP, etc...).

Concernant à présent les approches WFT, une partie significative des chercheurs experts en développement de méthodes met en œuvre des approches multi-références ou de type Monte Carlo quantique afin de décrire de la manière la plus fine possible les propriétés électroniques et thermodynamiques de systèmes moléculaires complexes (atomes lourds, systèmes relativistes, équation de Dirac à deux ou quatre composantes etc.). En particulier la recherche d'états excités est une activité nécessitant des développements méthodologiques importants. Parmi les codes cités dans les sections précédentes, il est important de noter EXACORR et Quantum Package.

Ces développements méthodologiques en Recherche Fondamentale sont complémentaires aux développements plus techniques de portage de codes, interfaçage, optimisation en fonction des architectures informatiques visées (massivement parallèle, HPC etc.). Ceux-ci concernent la majeure partie des codes cités précédemment.

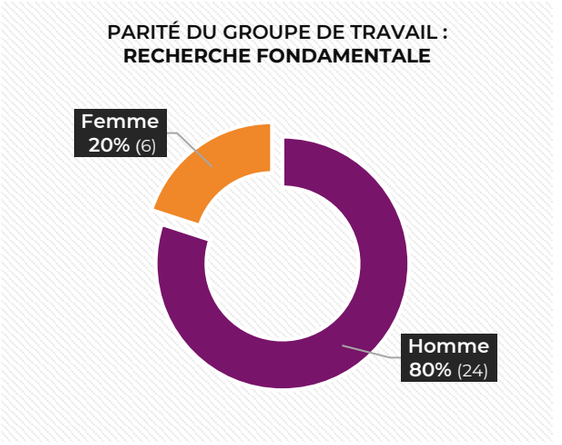
MOTS CLÉS :

DÉVELOPPEMENTS MÉTHODOLOGIQUES, PORTAGE DE CODES, PERFORMANCE, OPTIMISATION

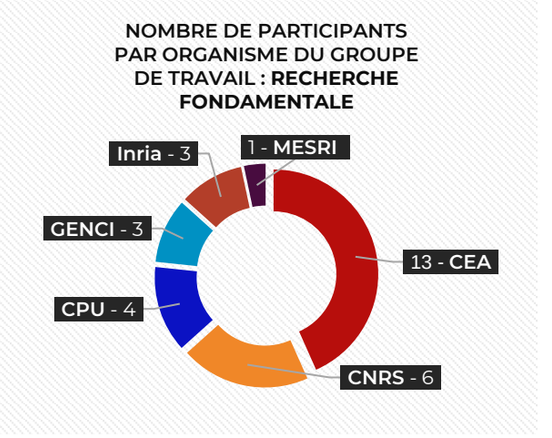
CHIFFRES CLÉS DU GT-E

Le SP3 présente ci-après des chiffres clés concernant les codes recensés au sein du GT-RF. Les graphiques permettront d'identifier, pour chaque organisme concerné, l'état actuel des codes, les besoins (techniques et humains) nécessaires pour le passage à l'exascale

Parité et organismes

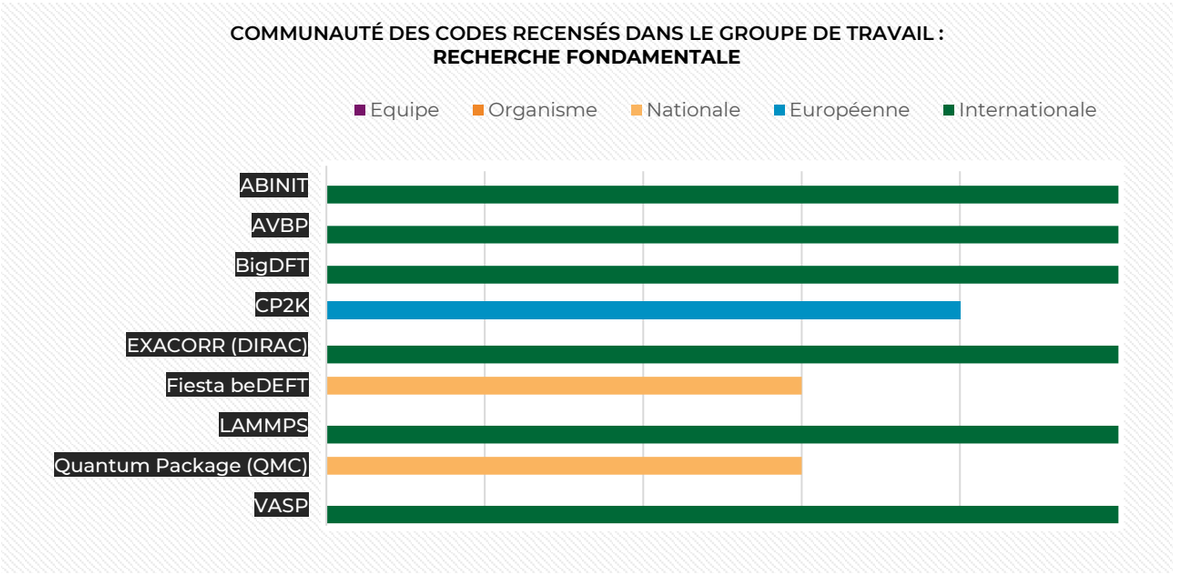


Dans ce GT-RF, la majorité des participants est issue du CEA : cet organisme représente presque la moitié des participants. Il faut néanmoins rappeler que le GT-RF a démarré plus tardivement que les 5 autres GT. Le second organisme le plus présent dans ce GT est le CNRS, suivit de près par les universités.



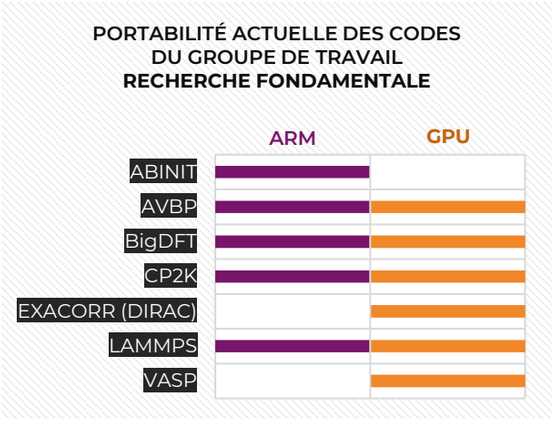
Concernant la parité du GT-RF, les femmes représentent environ 20% des participants.

Communauté des codes



La majorité des codes recenses dans le GT-RF ont une communauté utilisatrice a minima européenne. 2/3 des codes recensés sur la figure « **Communauté des codes** » sont à portée internationale. La recherche fondamentale se situe à la frontière de plusieurs domaines applicatifs, cela explique en partie pourquoi les codes recensés ont une communauté internationale. Pour les codes ne figurant pas sur ce graphique, cela signifie uniquement que l'information n'a pas été renseignée.

Maturité des codes pour une architecture exascale



La figure « **Portabilité actuelle des codes du Groupe de Travail Recherche Fondamentale** » représente la portabilité des codes sur des architectures accélérées GPU et de type scalaire CPU ARM telles que celles qui pourraient équiper les machines Exascale EuroHPC en 2024.

Il faut savoir que toutes les applications présentées ici sont aussi déjà portées sur architecture x86 (Intel, AMD) qui constituent une grande partie des moyens de production actuels.

Pour les architectures accélérées GPUs, nous considérons les cartes GPU de NVIDIA, celles-ci étant présentes sur la plupart des calculateurs nationaux et quasiment les seules disponibles sur le marché jusque fin 2021.

Pour l'architecture scalaire CPU ARM, nous considérons deux implémentations de puces : les processeurs ARM Thunderx2 de Marvell ou le processeur ARM A64fx de Fujitsu, co-designé par RIKEN.

Sur ce graphique, nous ne représentons que ces deux architectures dans la mesure où le calculateur exascale est pressenti pour être équipé d'accélérateurs (type GPU) et de processeurs scalaires qui pourraient être basés sur une microarchitecture ARM co-designée notamment par la

société SiPearl et par le consortium européen EPI (European Processor Initiative).

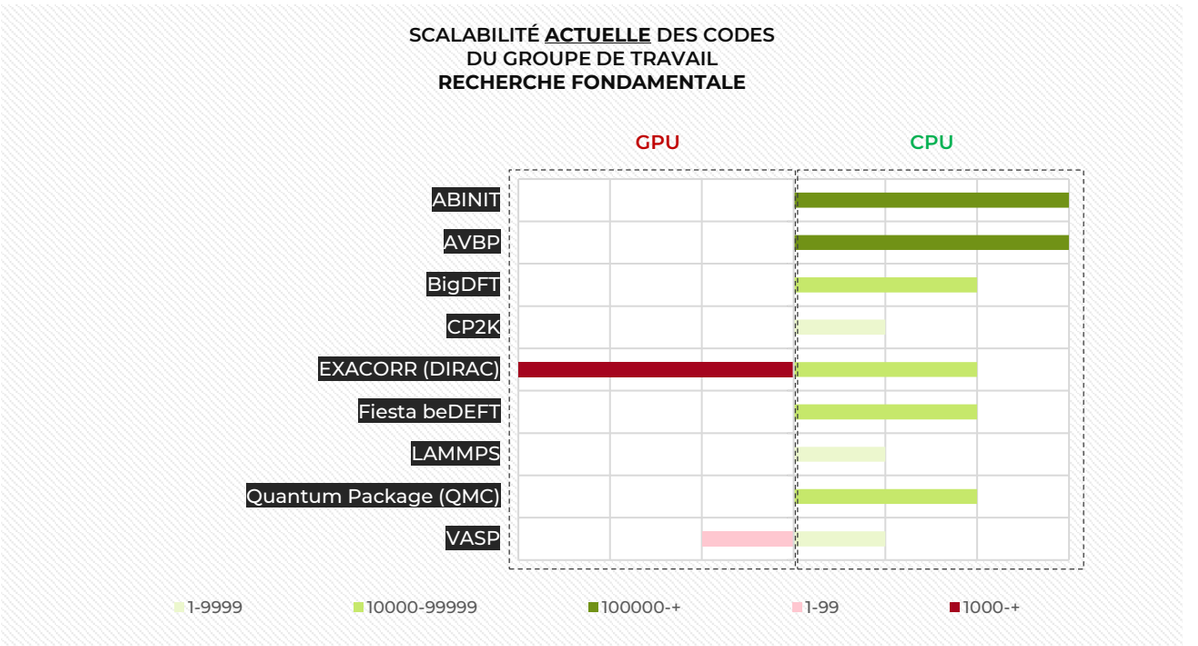
Pour ce graphique, nous considérons les hypothèses suivantes :

- Un code est porté sur CPU ARM s'il s'exécute sur cette architecture, même si cette exécution n'est pas optimisée. Pour les codes identifiés comme des « couplages » de simulation, on peut considérer que seule une partie de la chaine d'exécution s'effectue sur architecture ARM.
- Un code est porté sur GPU si une partie de l'application s'exécute sur un GPU. Ici, on considère donc tous les codes ayant de 1% à 100% de leur chaine s'exécutant sur GPU. La maturité du portage GPU est renseignée pour les codes dans les fiches détaillées. Cette information étant variable et très homogène, elle n'est donc pas représentée dans ce document.

Pour les codes ne figurant pas sur ce graphique, cela signifie uniquement que l'information n'a pas été renseignée.

Le GT-RF est relativement très avancé en ce qui concerne la portabilité des codes sur architecture ARM et GPU. 5 codes sur 7 sont actuellement exécutables sur architecture ARM, tandis qu'un seul code (abinit) n'est pas exécutable sur GPU. Pour les codes ne figurant pas sur ce graphique, cela signifie uniquement que l'information n'a pas été renseignée.

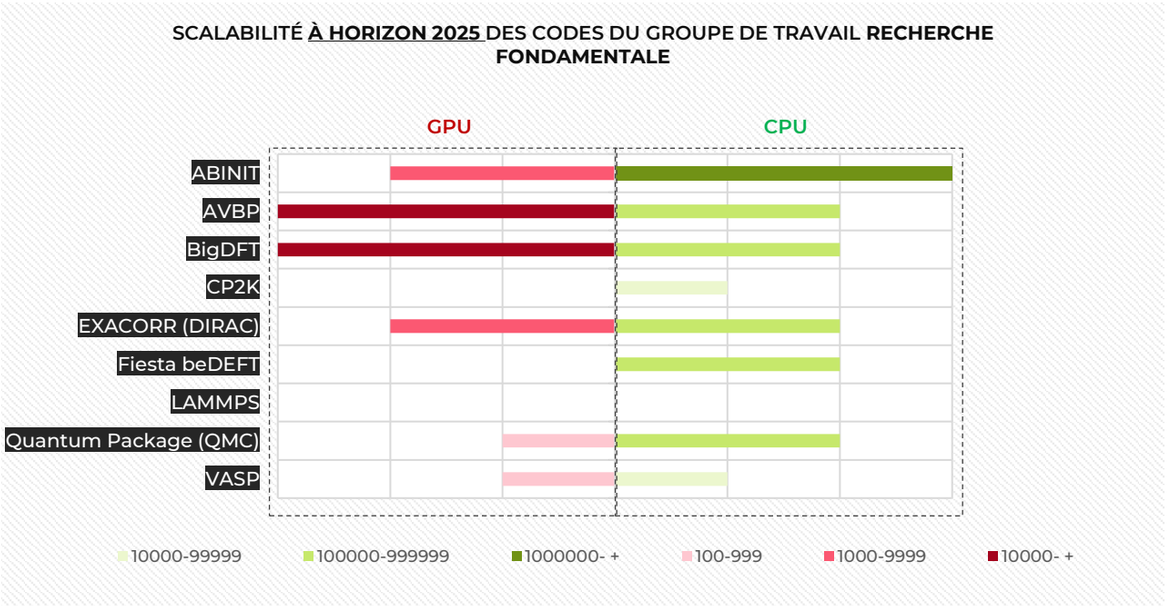
Tous les codes recensés par le GT Recherche Fondamentale sont des codes en production.



Le SP3 a demandé aux participants du GT-RF d'estimer la **scalabilité actuelle et à horizon 2025 des codes recensés**. Cette scalabilité est donnée à la fois sur CPU et sur GPU, car La maturité des codes vis-à-vis des architectures accélérées doit être prise en compte, celles-ci étant incontournables dans le cadre de l'exascale.

Il faut également considérer l'écosystème des architectures accessibles aujourd'hui, à savoir que le parc de supercalculateurs nationaux GENCI, européens Prace et EuroHPC disposent d'une partition accélérée.

On constate qu'actuellement, la majorité des codes du GT-RF (ceux pour lesquels nous disposons de l'information) s'exécutent sur CPU entre 10 000 et 100 000 cœurs, avec deux d'entre eux qui s'exécutent sur plus de 100 000 cœurs. On constate en revanche que la scalabilité sur les GPU à ce jour est très réduite pour les codes du GT-RF (toujours pour ceux qui ont fourni l'information).



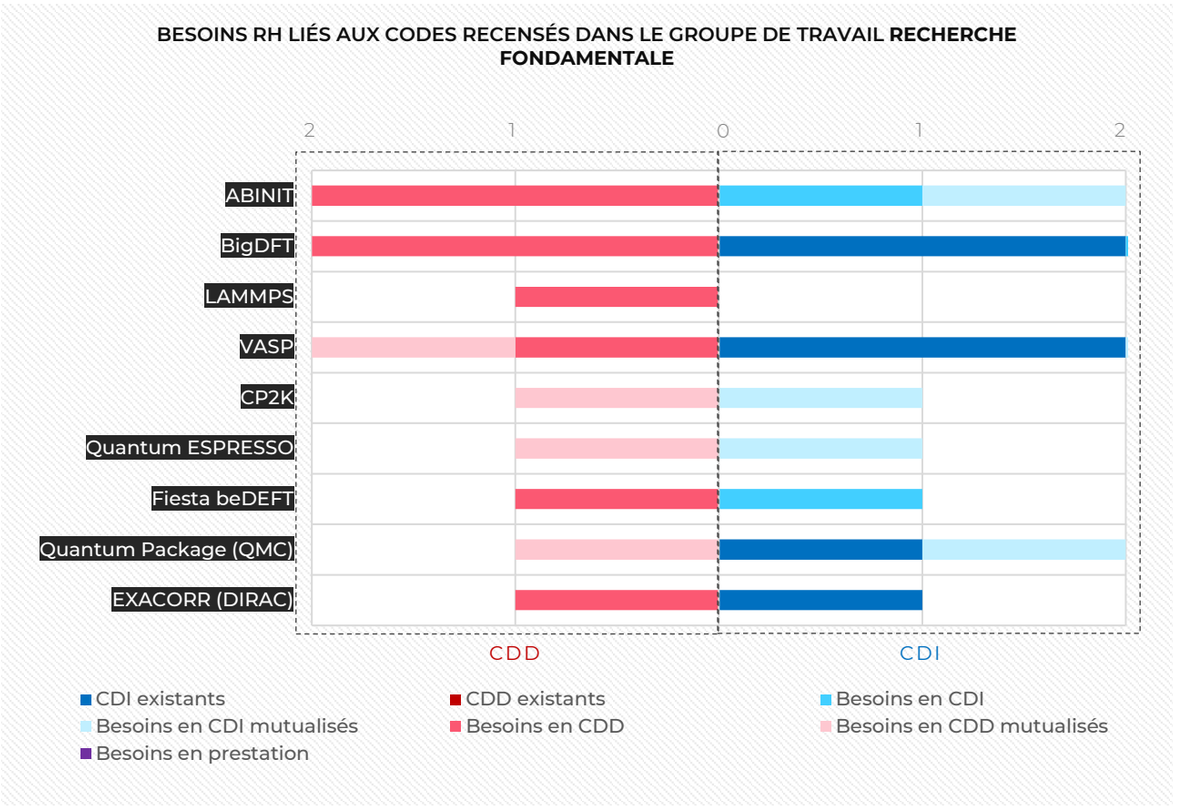
La projection pour les équipes à horizon 2025 montre l'ambition effective de cette communauté a :

- Passer en mode production avec une forte scalabilité sur architecture accélérée ;
- Maintenir ou améliorer aussi la scalabilité des codes sur architecture CPU. Cette projection sur une partition CPU « classique » n'est pas contradictoire avec les projections sur architecture accélérée car toutes les simulations n'ont pas vocation par défaut à s'exécuter sur architecture accélérée. Il faut également remarquer que bien que minoritaire au sein du futur calculateur exascale, la partition classique CPU sera en nette augmentation par rapport à ce qui est disponible actuellement sur les calculateurs accessibles dans les centres en particulier nationaux.

Pour les codes ne figurant pas sur ces graphiques, cela signifie uniquement que l'information n'a pas été renseignée au moment de la rédaction de ce document.

La plupart des codes listés sur cette figure se retrouvent dans d'autres GT (comme l'Énergie ou les Sciences du vivant), ce qui explique aussi une telle projection des codes à l'horizon 2025. Il est évident que ces codes « transverses » à plusieurs domaines applicatifs auront un impact fort sur les simulations exaflopiques.

Besoins en ressources humaines pour le passage à l'exascale



En moyenne, les codes pour lesquels le SP3 a collecté les données demandent entre 1 et 2 CDI (mutualisés ou non), ainsi que 1 à 2 CDD (également, mutualisés ou non). Ces chiffres seront à consolider, au sein de chaque organisme, avec les équipes concernées. Notamment, les communauté IA et HPDA liées à la recherche fondamentale sont peu (ou pas) représentées dans ce graphique.

Conclusions du GT-RF

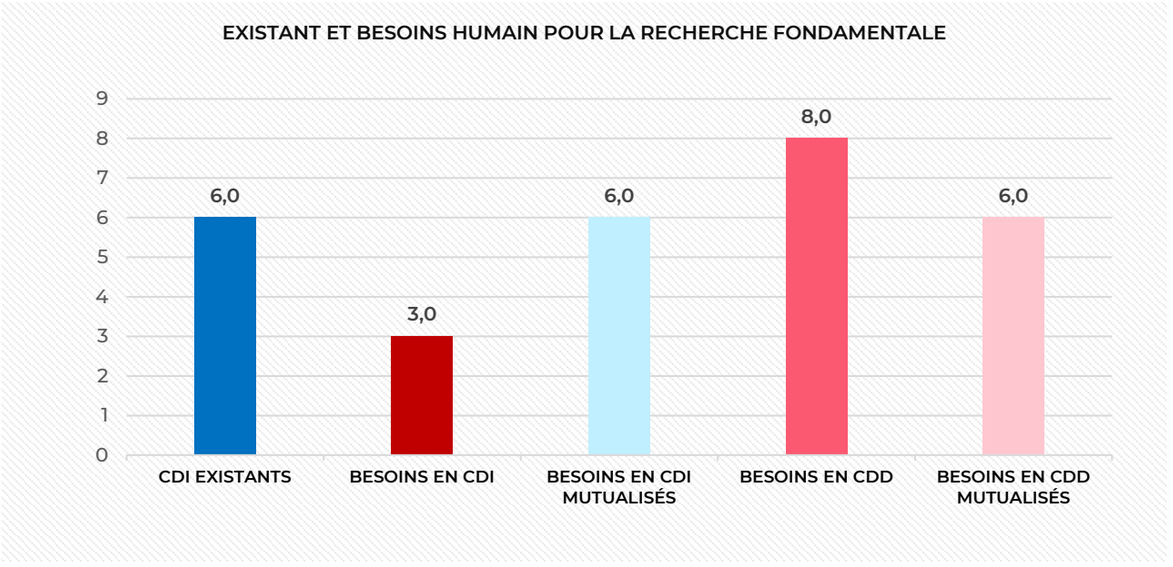
Il n'existe à l'heure actuelle que très peu de codes de calculs utilisés dans le groupe de travail Recherche Fondamentale qui ont été portés et testés sur des machines pré-exaflopiques avoisinant la performance théorique des machines exascale.

Il faut noter toutefois deux actions en cours relatives aux codes :

1 EXACORR (DIRAC) qui a déjà été porté et testé sur la machine pré-exascale SUMMIT aux Etats-Unis.

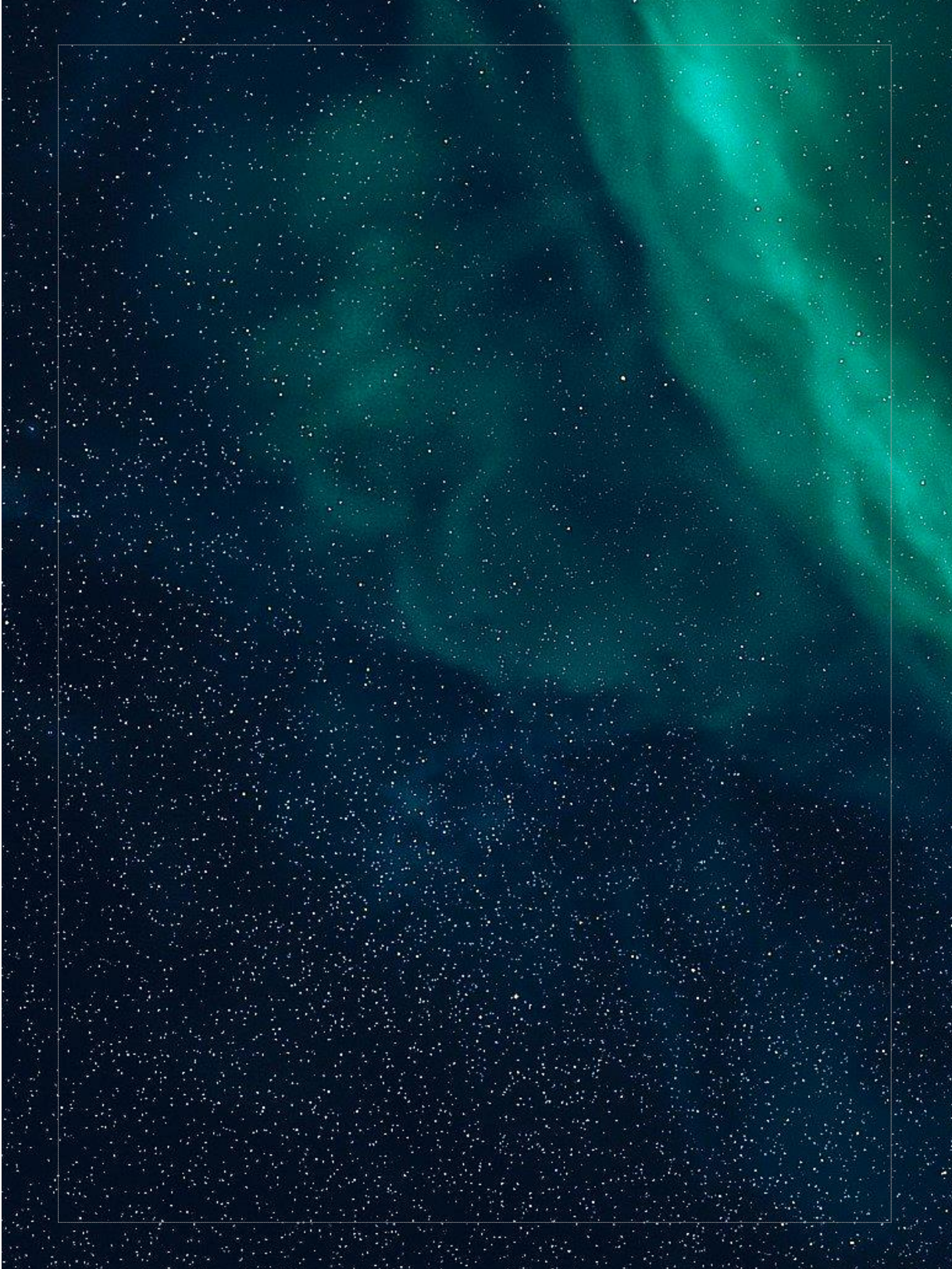
2 Quantum Package (QMC) dont les développeurs participent depuis peu au centre d'excellence TREX financé pour 3 ans par le H2020.

3 AVBP est également développé dans le cadre du Centre d'Excellence Européen (CoE) Excellerat.



Le GT-RF a essentiellement recensé des besoins en termes de CDD, ou sous la forme de CDI mutualisés. La figure ci-dessus montre qu'en moyenne, 6 ressources supplémentaires sont nécessaires pour les CDD, les CDI et les CDIs mutualisés. Ceci est à mettre en confrontation avec les chiffres donnés sur les CDIs et CDDs existants : le GT-RF estime donc qu'il faut une augmentation en moyenne de 100 à 200% des ressources humaines afin de permettre une pérennisation des codes à l'échelle exaflopique.

Il conviendra de poursuivre ce travail de manière pérenne et interactive afin d'identifier et de mobiliser au mieux les communautés IA, HPDA et HTC relatives au GT-RF. Toutes ces communautés sont des cibles d'utilisateurs des machines exascales EuroHPC. Enfin, le SP3 continuera de travailler avec les chercheurs et les organismes concernés afin d'identifier les secteurs scientifiques estimés prioritaires par les organismes, dans le cadre de l'exascale.



SCIENCES DE L'UNIVERS

Groupe de travail animé par
Marie-Alice FOUJOLS (CNRS) et **Sylvie JOUSSAUME** (CNRS)



Marie-Alice FOUJOLS, Ingénieur de recherches CNRS, ingénieure de formation en informatique et mathématiques appliquées, a travaillé dans plusieurs centres de calcul nationaux au service de la communauté académique française. Elle a rejoint en 1996 l'Institut Pierre Simon Laplace où elle a participé au développement technique de plusieurs générations du modèle climat de l'IPSL. Elle dispose de plus de 30 ans d'expérience en calcul intensif au service de différents domaines scientifiques puis plus particulièrement en modélisation du climat.



Sylvie JOUSSAUME est directrice de recherche au CNRS dans le domaine de la modélisation du climat, au sein du Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement de l'Institut Pierre Simon Laplace. Ex-directrice de l'INSU, elle est investie depuis de nombreuses années sur les enjeux du calcul intensif au niveau national et européen. Actuellement, elle préside le Comité d'Évaluation des moyens de calcul nationaux de GENCI et le Comité scientifique de l'ORAP.

DOMAINES APPLICATIFS

Le groupe de travail Sciences de l'Univers couvre quatre domaines applicatifs : la physique des hautes énergies et la physique nucléaire, l'astrophysique et la cosmologie, les sciences de la Terre, le climat et l'environnement.

Physique des hautes énergies et physique nucléaire

La physique des hautes énergies et la physique nucléaire couvrent un large champ de recherche qui vise à étudier les constituants fondamentaux de la matière (particules, noyaux atomiques) et leurs interactions via des approches théoriques et expérimentales.

Ces approchent nécessitent la mise en place de codes pour les développements théoriques et la simulation, le développement et l'opération des expériences et de grands instruments (accélérateurs de particules, expériences LHC, etc.), ainsi que le traitement et l'analyse des données qui en sont issues.

Ce domaine applicatif regroupe les codes suivants :

- Chromodynamique Quantique (QCD) : CHROMA-WM, openQCD-saveurs. La chromodynamique quantique sur réseau utilise plusieurs codes internationaux. CHROMA-WM vise à étudier la structure des hadrons et openQCD-Saveurs la physique des saveurs, notamment la physique de la saveur B (Beauté) des quarks. Les besoins de ces deux codes sont représentatifs d'autres codes de QCD tels Janos et DynQCD non décrits ici. Leurs besoins sont très liés aux coopérations internationales nécessitant de faciliter l'ouverture des machines.
- **Noyau atomique** : FUSIoN-AbINS, FUSIoN et AbINS sont deux ensembles de codes numériques développés pour l'étude de la structure et des réactions du noyau atomique en traitant le problème à N-corps à partir d'interactions microscopiques issues de la théorie des champs effectifs.
- **Lasers et plasmas :** PICSAR, SMILEI, WarpX.
  Le code SMILEI permet la simulation cinétique des plasmas. Ses domaines d'application sont larges allant des interactions laser-plasmas, de la fusion inertielle à la physique en lumière extrême, aux plasmas spatiaux. Le code WarpX aide à préparer une nouvelle génération de lasers intenses en optimisant les paramètres et en corrigeant les aberrations. Il s'appuie sur la librairie PICSAR.
- Physique des particules expérimentales : OuroborosBEM, LHC, LHCb
  Les expériences de physique des particules ont besoin de la simulation pour étudier les détecteurs et analyser les grands jeux de données issus des grands instruments. OuroborosBEM permet de simuler le transport de charges dans des milieux gazeux en présence de champs électrique afin de concevoir et optimiser des détecteurs de particules.

  Les expériences du CERN produisent une quantité importante de données qui nécessite de fortes capacités de traitement pour les analyser. La 3ème phase d'exploitation du Large Hadron Collider (LHC) du CERN commencera en 2022 et collectera davantage de données que les phases précédentes. À partir de 2027, le volume atteindra 1 exaoctet par an. L'exemple de l'expérience LHCb est proposé comme candidat pour utiliser la machine exascale pour traiter et réduire ses données en temps quasi-réel. L'exploitation de la machine exascale pourra certainement être envisagée pour d'autres phases de traitement des données des expériences LHC.

MOTS CLÉS :

DÉVELOPPEMENT DE NOUVEAUX ACCÉLÉRATEURS POUR LA RECHERCHE FONDAMENTALE ET LES APPLICATIONS, SIMULATIONS DE DÉTECTEURS, TRAITEMENTS DES DONNÉES MASSIVES DE GRANDS INSTRUMENTS, CALCULS AB INITIO POUR LA RECHERCHE DE NOUVELLE PHYSIQUE FONDAMENTALE, PHYSIQUE NUCLÉAIRE AB INITIO POUR LA RECHERCHE FONDAMENTALE ET LES APPLICATIONS,

...MOTS CLÉS

SIMULATIONS DE LA FORMATION D'ÉTOILES À NEUTRONS, DE LEUR PROPRIETES ET DE LEURS POSSIBLES COLLISIONS, EXPLORATION DES ÉTATS EXTRÊMES DE LA MATIERE (SUB-NUCLÉAIRE, INTERACTION LASER MATIÈRE, PHYSIQUE DES PLASMAS, CONNAISSANCE DE L'INFINIMENT PETIT ET DES LOIS QUI LE RÉGISSENT

Astrophysique et cosmologie

Les codes de simulations numériques recensés en astrophysique et cosmologie visent à comprendre la formation de l'Univers et de ses structures façonnées par la gravité à de multiples échelles. De par le caractère structurant de la gravité, les plasmas étudiés sont compressibles, et associés à des phénomènes de haute énergie induisant des couplages multi-échelles complexes.

Ces enjeux scientifiques, ainsi que les volumes de données produites par les grands systèmes d'observation, poussent la modélisation et simulation numérique, l'analyse et la caractérisation des observations, et les jumeaux numériques pour la conception et la calibration des grands instruments vers l'exascale.

- **Structures :** RAMSES, Dyablo-Ginea

  Le code RAMSES est aujourd'hui utilisé par une large communauté et permet d'aborder la formation des étoiles, des galaxies jusqu'aux milieux interstellaires et des grandes structures cosmologiques de l'univers. La taille et la viscosité du code RAMSES soulève des questions sur le coût et les efforts nécessaires pour exploiter l'exascale.

  Le code Dyablo-Ginea, à l'état de prototype, est une initiative de la communauté autour de RAMSES qui vise à développer architecture de code modulaire apte à exploiter les machines exascale en s'appuyant sur la bibliothèque kokkos permettant une utilisation flexible de différents types de parallélisation et de technologies. Les 2 codes RAMSES et Dyablo vont donc cohabiter pendant une longue période (5-10 ans) durant laquelle les modules physiques les plus complexes de RAMSES seront progressivement réécrits et intégrés dans Dyablo-Ginea. La durée de transition dépend de la vitesse de développement de Dyablo, de ses performances, ainsi que des performances/développements HPC de RAMSES.

- **MHD :** MagIC, Pluto et idefix, Dyablo-Whole-Sun

  Pour les écoulements dans des disques autour d'étoiles ou d'objets compacts, la communauté utilise le code italien PLUTO qui traite des fluides fortement compressibles magnétisés. Ce code n' étant pas open source, la communauté française a développé un nouveau code ouvert IDEFIX avec la bibliothèque kokkos. Le code Dyablo-Whole-Sun est comme son homologue Dyablo-Ginea basé sur la bibliothèque kokkos et vise à permettre les premières simulations globales du Soleil à l'horizon 2025.

  Le code MagIC de simulation des écoulements et des champs magnétiques à l'intérieur des étoiles et des planètes est utilisé non seulement en astrophysique mais également en sciences de la Terre et en physique des hautes énergies.

- **Plasmas :** mPIC-AMRVAR, Zeltron, Phare, SMILEI

  Une autre thématique couvre les plasmas spatiaux. Plusieurs codes basés sur des méthodes numériques différentes sont utilisés dans différents champs d'applications. Le code ZELTRON (approche PIC « Particle In Cell ») simule l'accélération de particules dans les écoulements relativistes astrophysiques. SMILEI est un autre code suivant l'approche PIC utilisé pour différentes études de plasmas spatiaux et astrophysiques.

  Le code mPIC-AMRVAR, couplant magnétohydrodynamique et PIC, est développé avec la physique des hautes énergies et permet de produire des observations synthétiques électromagnétiques d'environnements proche de trous noirs.

  Le code PHARE, en cours de développement, traite la population ionique du plasma de manière cinétique pour modéliser des environnements plasmas (vent solaire, magnétosphères planétaires etc.) et s'appuie sur des bibliothèques standards qui faciliteront son utilisation sur machines exascales.

- **Analyse de données :** MAPPRAISER et WST-WPH

Les deux codes recensés sont dédiés à l'analyse statistique et/ou à la préparation d'observations et assez distincts.

Le code MAPPRAISER est une chaine dédiée à l'analyse (incluant des méthodes d'IA) du fond diffus cosmologique pour l'inférence des paramètres cosmologiques. Le code est massivement parallèle et résout de très grands systèmes d'équations linéaires de taille adaptées aux expériences à venir.

Le code WST-WPH est une chaine d'analyse, (incluant méthodes d'AI et transformées en ondelettes) qui permet de caractériser la statistique de n'importe quel type de champ multidimensionnel de données. Son importance stratégique est son intégration dans le traitement des données du fond diffus cosmologique de l'instrument SKA., ou encore issues de simulations numériques.

MOTS CLÉS :

MODELISATION DE L'UNIVERS, DETECTION DE CORPS CELESTES, DECHETS SATELLITAIRES, COSMOLOGIE, PHYSIQUE STELLAIRE, MODELISATION DES ASTEROÏDES, SCIENCES DES TROUS NOIRS, PLANETOLOGIE, PLASMAS SPATIAUX / ASTROPHYSIQUES, PHYSIQUES SOLAIRE ET HELIOSPHERIQUE, METEOROLOGIE DE L'ESPACE

Sciences de la Terre

Le domaine Sciences de la Terre couvre un large champ de recherche qui adresse des questions scientifiques fondamentales sur les structures et la dynamique de la Terre en interaction avec ses enveloppes fluides (océan, atmosphère), ainsi que de nombreux enjeux environnementaux et socio-économiques avec en particulier l'évaluation des aléas et la mitigation des risques naturels (e.g. tremblement de terre) et anthropogéniques.

La complexité des phénomènes physiques et des couplages multi-échelles, la quantification des incertitudes, et les volumes croissants de données poussent la modélisation et la simulation numérique, l'inversion et l'assimilation d'observations, l'analyse statistique d'observations vers l'exascale.

- **Sismique :** EFISPEC3D-UC, SEM3D, SPECFEM3D-INV, PASSMO, SEISMICAI, SEM4Exascale

  La modélisation et la simulation numérique dans ce domaine vont depuis la simulation de la propagation des ondes sismiques (acoustique, élastique, hydroacoustique, infrasons) en milieux complexes, la dynamique des tremblements de terre et l'estimation de l'aléa sismique (EFISPEC3D-UC, SPECFEM3D, SEM3D, PASSMO) et la réponse des structures (PASSMO, SEM3D) jusqu'à l'imagerie des milieux (SPECFEM3D-INV).

  Certaines applications nécessitent également d'accéder à des moyens de calcul de façon urgente (« Urgent Computing ») lors d'événements sismiques afin de mieux estimer sur une base physique les mouvements du sol associés (dynamique de la rupture, effets de la géologie locale notamment sur la réponse des structures et infrastructures, etc.). Cela implique une chaîne de calcul, d'accès et de traitement de données au travers d'un continuum de ressources, au sein duquel le système exascale est un nœud important, pour la gestion de crise dans un cadre opérationnel (EFISPEC3D-UC) et pour la prévention et la préparation à des crises potentielles (EFISPEC3D-UC, SEM3D, PASSMO).

  Face aux enjeux des systèmes exascale, la communauté nationale des développeurs entend profiter du projet Exascale pour accélérer le développement d'une plateforme et de bibliothèques communes à l'ensemble des applications basés sur un solveur en éléments spectraux. Cette plateforme SEM4Exascale, est nécessaire pour que l'ensemble des applications scientifiques des différents instituts porteurs puissent exploiter efficacement la puissance exascale.

  Une nouvelle approche de type analyse de données est également développée basée sur l'IA (SEISMICAI) dans le cadre d'une ERC visant à la détection précoce d'événements sismiques.

- **Bibliothèque :** SHTns

  Cette bibliothèque de calcul des transformées en harmoniques sphériques (SHTns) est utilisée dans plusieurs sous-domaines d'expertise et en particulier dans le domaine de la dynamique des fluides géologiques et de la MHD.

- **MHD et géo-dynamo :** XSHELLS/Parody
  Des codes de magnétohydrodynamique (XSHELLS/Parody) permettent également d'étudier la dynamique du noyau, la génération du magnétisme terrestre et de son évolution, d'assimiler les observations du champ magnétique (terre, spatial) et/ou de simuler des expériences de laboratoire.

MOTS CLÉS :

TERRE SOLIDE ET SES COUPLAGES AVEC LES ENVELOPPES FLUIDES EXTERNES, GÉODYNAMIQUE, GÉOPHYSIQUE, PHYSIQUE DES MATÉRIAUX HAUTES TEMPÉRATURES - HAUTES PRESSION, GÉOMAGNETISME ET MÉTÉOROLOGIE SPATIALE, PLANÉTOLOGIE, RÉSERVOIRS ET STOCKAGE GÉOLOGIQUES (CO2, DÉCHETS, ETC.), RISQUE COTIER, ALÉAS ET RISQUES TSUNAMI, ALÉAS ET RISQUES SISMIQUE, ALÉAS ET RISQUES VOLCANIQUES

Climat et Environnement

Les applications du domaine Climat et Environnement visent à comprendre les interactions physiques, chimiques, biogéochimiques et biologiques des composantes superficielles du système Terre, atmosphère, océans, surfaces continentales et glaces, et à prévoir leur évolution sous différentes conditions, naturelles ou perturbées par les activités humaines. Ces applications sont au cœur de la compréhension des enjeux environnementaux du changement climatique et de la pollution des milieux.

L'exascale est un enjeu pour améliorer notre compréhension du fonctionnement du système Terre et mieux faire face à ces défis sociétaux. Monter en résolution spatiale, améliorer la représentation des processus pris en compte, mieux intégrer la complexité du système, augmenter la taille des ensembles de simulation pour mieux appréhender la dimension chaotique du système, simuler le système sur de plus longues périodes de temps, sont autant d'enjeux pour réduire les défauts des modèles et mieux quantifier les risques et leurs incertitudes. Si plusieurs applications du domaine ont commencé à porter certaines parties des codes sur GPU, porter l'ensemble des codes, en particulier toutes les chaînes couplant différents codes, reste un défi pour la communauté. L'exascale devrait également permettre des traitements intensifs de données massives d'observation.

- **Modèles globaux de climat :** IPSL-CM, LMDZ-dynamico, NEMO, ORCHIDEE

  Le modèle de climat IPSL-CM, utilisé par une large communauté, représente le système Terre à l'échelle globale. Il couple les modèles communautaires des composantes atmosphère (LMDZ-Dynamico), océans (NEMO) et surfaces continentales (ORCHIDEE). Ses différentes composantes sont utilisées séparément ou en mode couplé. Elles représentent les milieux dans leurs dimensions physiques, biogéochimiques et biologiques. Certains de ces codes, comme le code NEMO ou des logiciels de couplage et d'entrées-sorties d'IPSL-CM, font également partie du modèle de climat de Météo-France. Le modèle de climat IPSL-CM permet d'étudier les mécanismes de variabilité du climat de la saison aux cycles glaciaires. Le modèle participe aux expériences internationales, dont les projections de l'évolution future du climat sont à la base des rapports du groupement intergouvernemental d'experts sur l'évolution du climat.

- **Modèles régionaux :** Meso-NH, CROCO, Elmer/ice

  D'autres modèles concernent l'étude de l'environnement à des échelles plus fines limitées à des configurations régionales, comme le code d'atmosphère MESO-NH, utilisé en météorologie et sur des enjeux de pollution atmosphérique, ou celui de l'océan littoral CROCO, pour étudier les aspects physiques, biogéochimiques et biologiques des régions côtières. Le modèle Elmer-Ice concerne la modélisation des calottes de glace, utilisé pour des applications glaciologiques ou couplé avec un modèle d'océan.

- **Observations :** LMDZ-inversion, SPECFEM3D, Data Terra

  Certains codes visent également à interpréter des jeux d'observations par des méthodes d'inversion, comme le code LMDZ-inversion pour l'atmosphère, s' appuyant sur le code d'atmosphère LMDZ-Dynamico, et SPECFEM3D pour l'étude des ondes acoustiques marines. Le domaine environnement inclut également le traitement massif de données d'observations, en particulier provenant de données satellitaires, représenté par l'infrastructure Data Terra,

qui concerne également le domaine Sciences de la Terre. Si Data Terra est encore très peu utilisatrice des moyens nationaux, des besoins émergent qui nécessiteront d'avoir accès à des moyens de traitement massif de données d'observations.

MOTS CLÉS :

CLIMATS, VARIABILITÉS ET MÉCANISMES, OCEANS PHYSIQUE, BIOGÉOCHIMIQUE ET BIOLOGIQUE, ATMOSPHÈRE PHYSIQUE, CHIMIQUE, CYCLES BIOGÉOCHIMIQUES, POLLUTIONS DES MILIEUX, SURFACES CONTINENTALES, SOLS, HYDROLOGIE ET VÉGÉTATION, LITTORAL-CÔTIER, CRYOSPHÈRE : GLACE DE MER ET GLACES CONTINENTALES

Recherche Fondamentale transverse au GT-SDU

Le pilier Sciences de l'Univers repose sur des avancées scientifiques dans certains sujets fondamentaux :

- Connaissance et modélisation multi-échelles des mécanismes physiques et chimiques qui régissent l'évolution de l'état des différents milieux ;
- Connaissance et modélisation multi-échelles des mécanismes de couplage entre les différents phénomènes et/ou entre les différents milieux en présence ;
- Connaissance et modélisation des émissions de gaz et de particules liées aux activités humaines ;
- Codes radiatifs ;
- Méthodes spectrales ;
- Grilles adaptatives (en modélisation mathématiques).

Les liens entre le pilier Sciences de l'Univers et Sciences et Usages du Numériques sont multiples et s'articulent autour de besoins en analyse de données, intelligence artificielle, calcul haute performance, traitements intensifs de données et déploiement de chaînes de traitements complexes. Ils sont explicités dans une section ci-dessous.

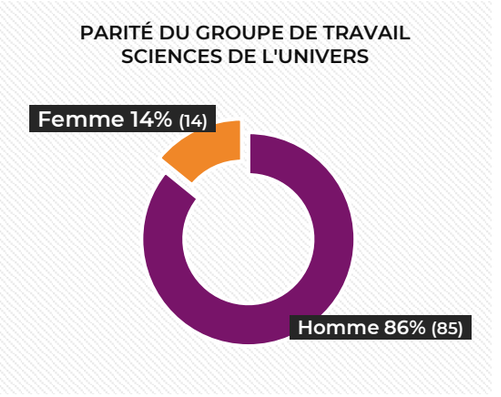
Besoins du GT-SDU identifiés dans le GT Sciences et Usages du numérique

IA	HPC	HIGH THROUGHPUT COMPUTING	WORKFLOW COMPLEXES
Physics-driven : ■ Émulation de codes physiques ; ■ Modélisation multi-échelles ; ■ Construction de modèles empiriques. **Data-driven :** ■ Analyse (classification, détection d'anomalies, relations de causalité) de données multi-sources ■ Assimilation de données ■ Interprétabilité et quantification des incertitudes	■ Simulation de phénomènes physiques complexes et couplages ■ Haute résolution spatiale, voire exploitation multi-échelle des observations ■ Calcul temps réel (nécessité de rapidité) ■ Profiling/programming énergétique, simulation éco-responsable ■ Plateformes de stockage / exploitation des données ■ Simulations pour constituer les bases de données d'apprentissage pour ML ou émulateurs ■ Quantification des incertitudes (simulations d'ensembles, etc.) ■ Préparation des observations : simulations pour préparer des observations ■ Urgent computing	■ Chaines de traitement opérationnelles ■ Exploitation de mesures satellitaires en temps quasi-réel ■ Plateformes de stockage / exploitation des données ■ Entrée des données	■ Chaînes de traitement globalement scalables, couplage de codes HPC et HPC/HPDA, visualisation et pilotage de simulations ■ Parallélisation par graphe de tâches (scheduler, runtime, équilibrage, ...) ■ Plateformes de stockage / exploitation des données

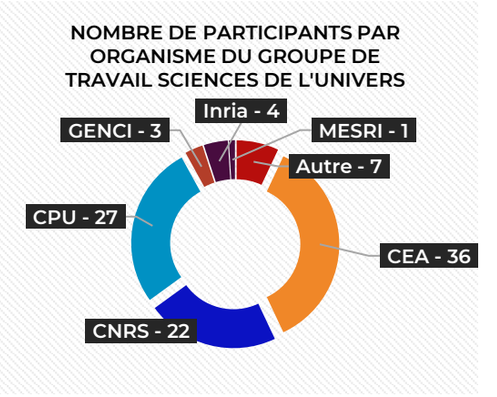
CHIFFRES CLÉS DU GT-SDU

Le SP3 présente ci-après des chiffres clés concernant les codes recensés au sein du GT-E. Les graphiques permettront d'identifier, pour chaque organisme concerné, l'état actuel des codes, les besoins (techniques et humains) nécessaires pour le passage à l'exascale.

Parité et organismes présents dans le groupe de travail Sciences de l'univers

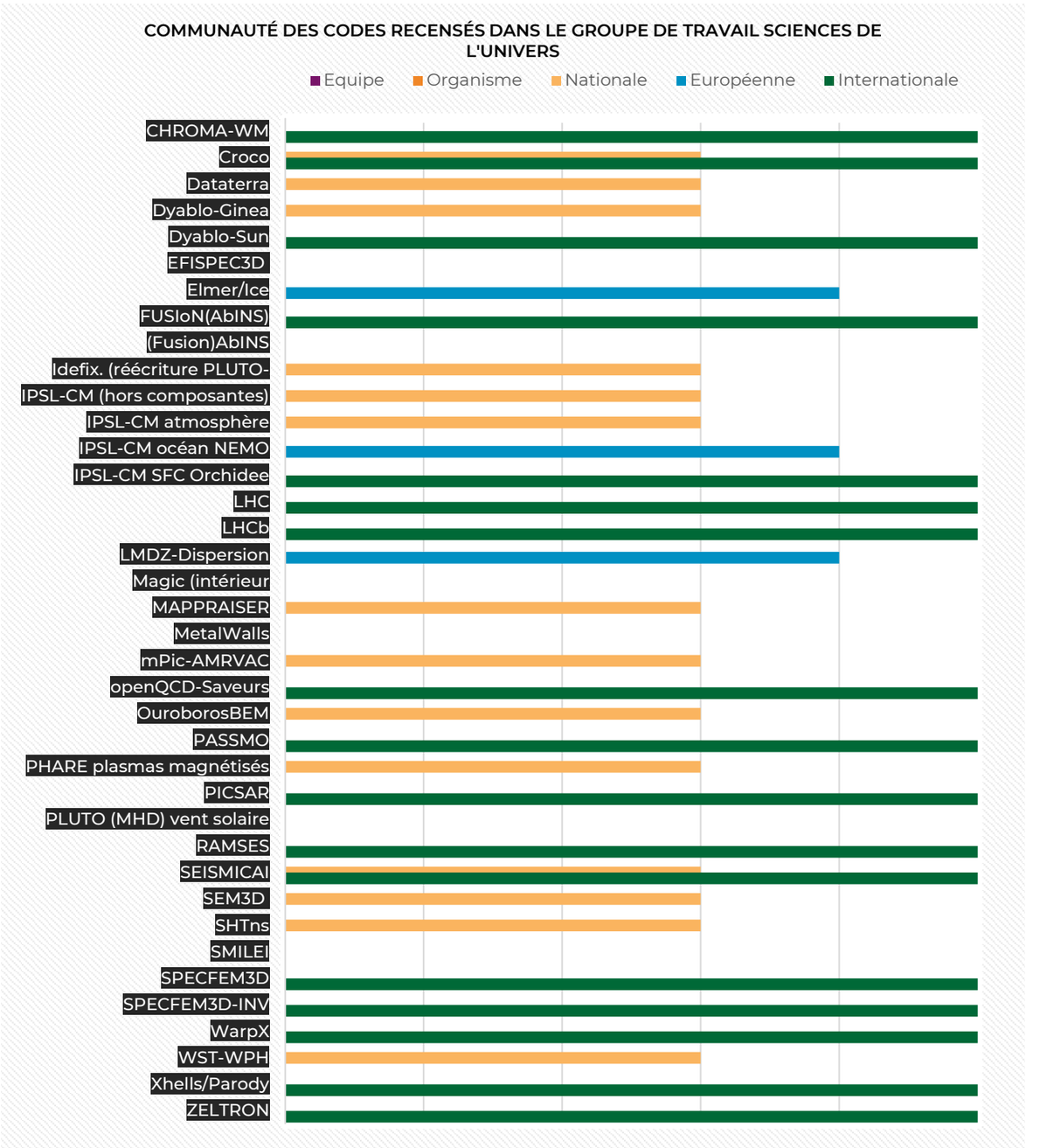


La parité au sein du GT-SDU est faible : 14% de femmes pour 86% d'hommes.



En ce qui concerne le nombre de participants par organisme, les trois gros contingents de participants viennent du CEA (36%), des universités (27% pour la CPU) et du CNRS (22%).

Communauté des codes



Les participants du GT-SDU ont fourni pour chacun des codes possédant une fiche détaillée, la taille de la communauté de leur code. Ici, nous considérons la communauté des développeurs et des utilisateurs. Une analyse plus détaillée peut être faite en parcourant les fiches détaillées des codes, fiches accessibles à tous les participants de ce GT.

On note que tous les codes affichent une dimension nationale (sans doute illustration de la forte structuration de la communauté française en sciences de l'univers) et que la majorité des codes recensés à une dimension européenne ou internationale.

Pour les codes ne figurant pas sur ce graphique, cela signifie uniquement que l'information n'a pas été renseignée.

Maturité des codes



La figure « **Portabilité actuelle des codes recensés dans le Groupe de Travaill Sciences de l'univers** » représente la portabilité des codes sur des architectures accélérées GPU et de type scalaire CPU ARM telles que celles qui pourraient équiper les machines Exascale EuroHPC en 2024.

Il faut savoir que toutes les applications présentées ici sont aussi déjà portées sur architecture x86 (Intel, AMD) qui constituent une grande partie des moyens de production actuels.

Pour les architectures accélérées GPUs, nous considérons les cartes GPU de NVIDIA, celles-ci étant présentes sur la plupart des calculateurs nationaux et quasiment les seules disponibles sur le marché jusque fin 2021.

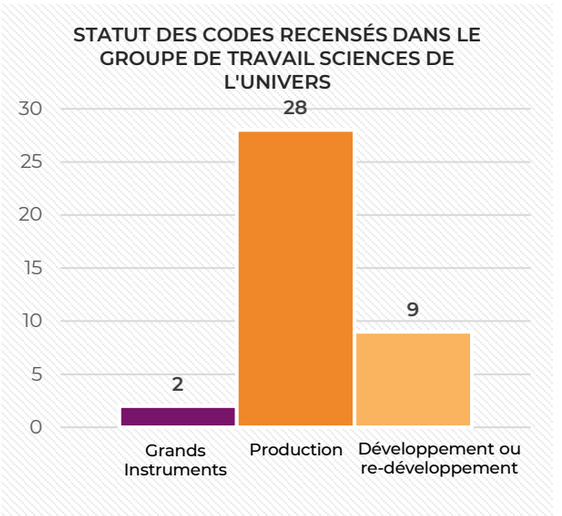
Pour l'architecture scalaire CPU ARM, nous considérons deux implémentations de puces : les processeurs ARM Thunderx2 de Marvell ou le processeur ARM A64fx de Fujitsu, co-designé par RIKEN.

Sur ce graphique, nous ne représentons que ces deux architectures dans la mesure où le calculateur exascale est pressenti pour être équipé d'accélérateurs (type GPU) et de processeurs scalaires qui pourraient être basés sur une microarchitecture ARM co-designée notamment par la société SiPearl et par le consortium européen EPI (European Processor Initiative).

Pour ce graphique, nous considérons les hypothèses suivantes :

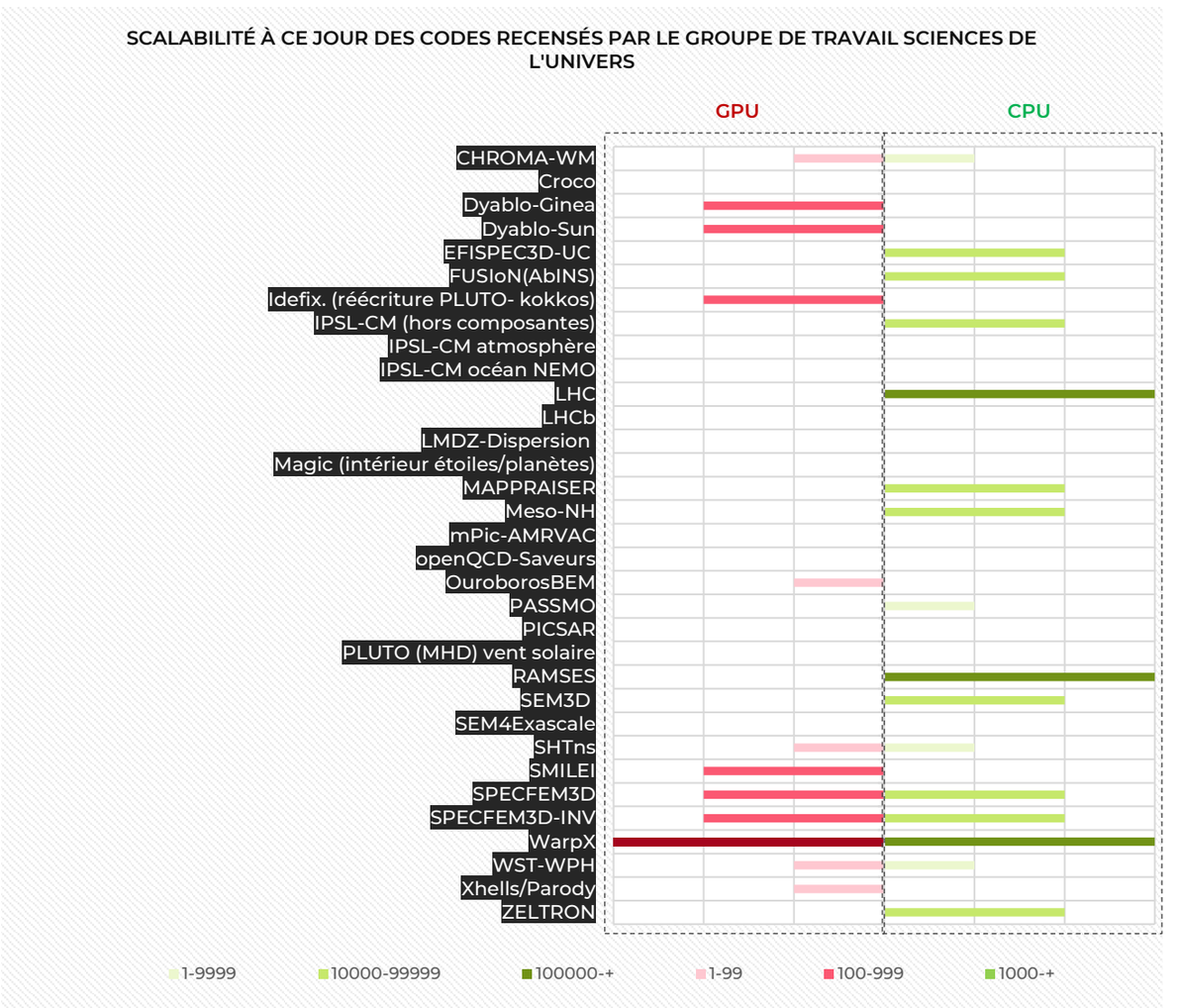
- Un code est porté sur CPU ARM s'il s'exécute sur cette architecture, même si cette exécution n'est pas optimisée. Pour les codes identifiés comme des « couplages » de simulation, on peut considérer que seule une partie de la chaine d'exécution s'effectue sur architecture ARM.
- Un code est porté sur GPU si une partie de l'application s'exécute sur un GPU. Ici, on considère donc tous les codes ayant de 1% à 100% de leur chaine s'exécutant sur GPU. La maturité du portage GPU est renseignée pour les codes dans les fiches détaillées. Cette information étant variable et très homogène, elle n'est donc pas représentée dans ce document.

Pour les codes ne figurant pas sur ce graphique, cela signifie uniquement que l'information n'a pas été renseignée.



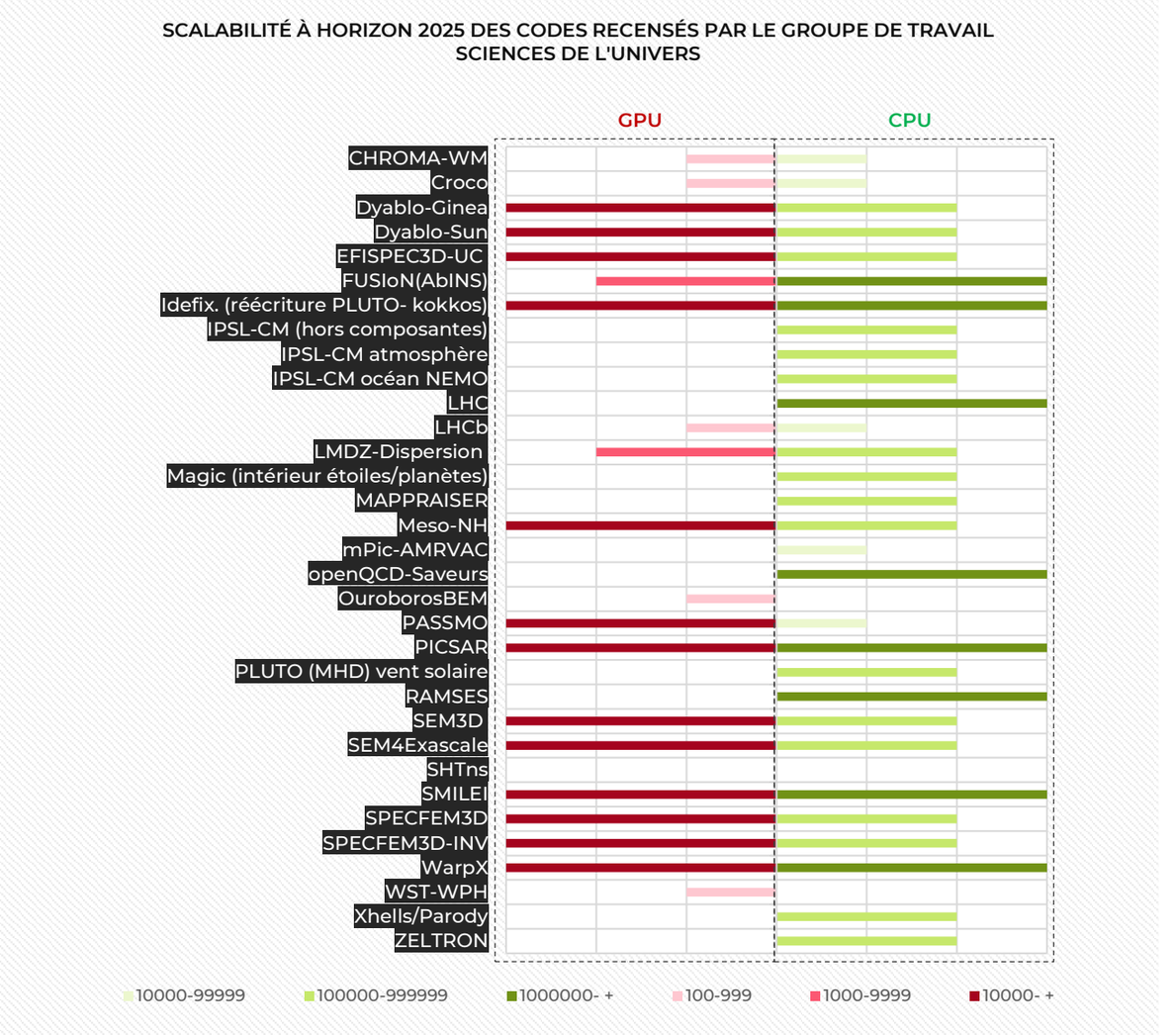
Peu des codes référencés sur la figure « **Statut des codes recensés dans le Groupe de Travail Sciences de l'univers** » sont liés à de grands instruments et la plupart des codes sont en production. Quelques-uns sont en développement ou en cours de redéveloppement pour, par exemple, une meilleure scalabilité ou une adaptation aux GPUs.

En ce qui concerne la **scalabilité actuelle des codes** qui figurent dans le graphique ci-dessus :



- À 4 exceptions près, tous les codes sont capables d'exploiter plusieurs dizaines de milliers de cœurs et 3 affichent un scalabilité supérieure à 100 000 cœurs.

Pour ce qui concerne l'utilisation de GPUs, la scalabilité est bien évidemment inférieure à celle des CPUs, mais une bonne moitié des codes est capable d'exploiter plusieurs centaines de GPUs voire plus d'un millier pour WarpX.

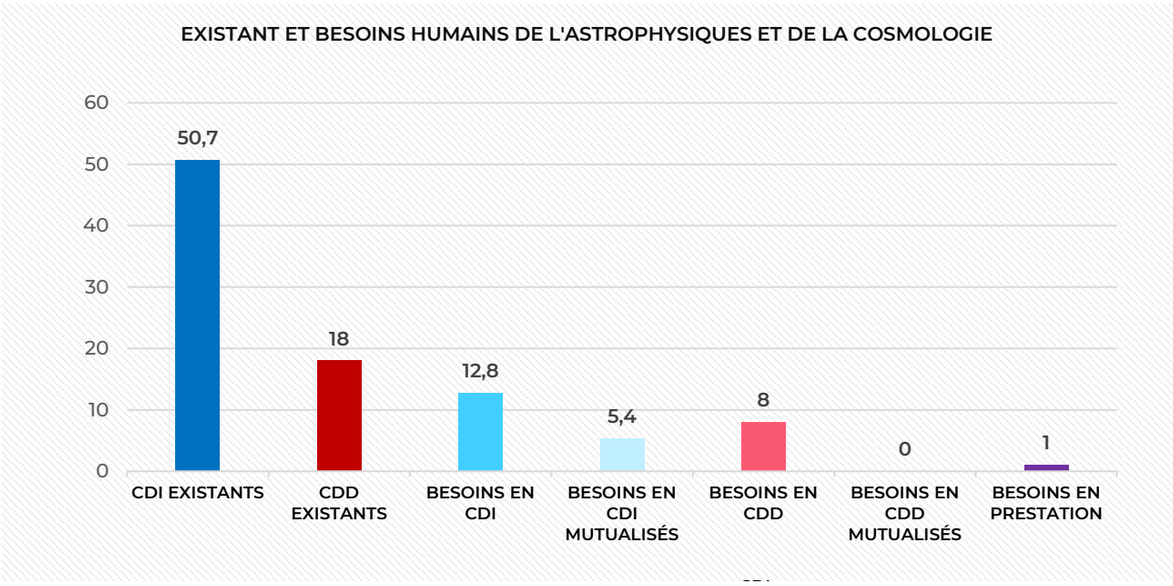


La projection de la **scalabilité à l'horizon 2025** démontrent la très bonne prise de conscience de l'importance d'améliorer le passage à l'échelle des codes, puisque la plupart des codes affichent une volonté d'amélioration d'un ordre de magnitude. Cependant, et surtout en ce qui concerne l'utilisation performante des GPUs qui constitueront l'essentiel de la puissance de calcul sur la future machine exascale, il faudra sans doute un effort d'adaptation et d'optimisation très important des codes.

Besoins humains pour le passage à l'exascale

Le GT-SDU a fourni un recensement des ressources humaines actuellement déployées sur les codes recensés ainsi que des forces que les chercheurs jugent nécessaires afin de tendre vers une mise en production de ces codes sur une machine exascale. Le SP3 rappelle ici la complexité du challenge exascale : une architecture accélérée, des technologies plus en plus massivement parallèle, des usages nouveaux et complexes (imbrication de paradigmes HPC, IA, HTC, HPDA, etc...)

ASTROPHYSIQUES ET COSMOLOGIE

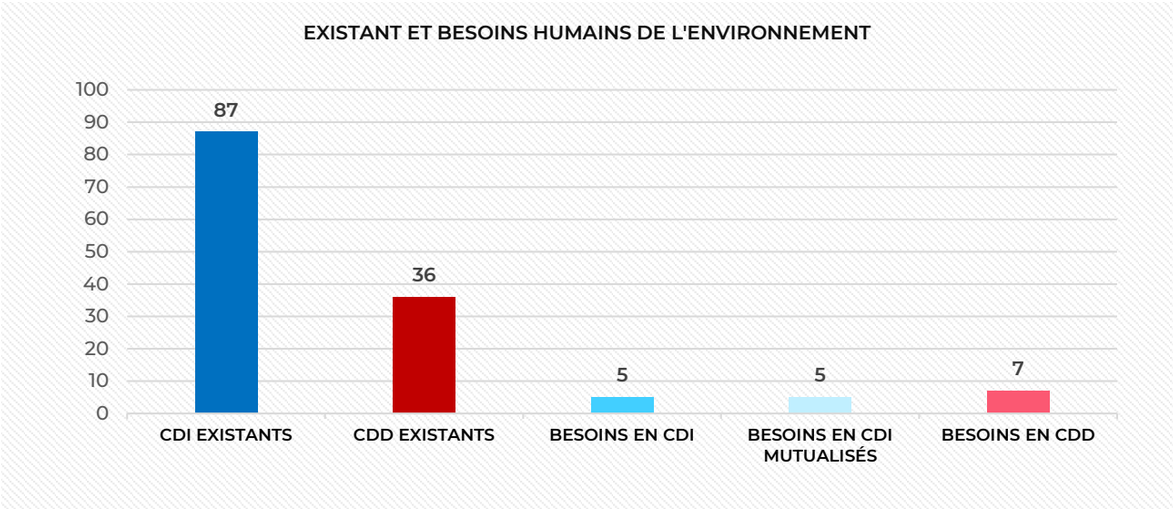


Les besoins humains remontés par les équipes travaillant sur les codes du GT-SDU – Astrophysique et Cosmologie mettent en lumière un besoin plus accentué de type CDI (2/3) par rapport à des moyens de type CDD (1/3) en comptant aussi les besoins mutualisés dans les deux cas. Le nombre d'ETP et de CDI existants est conséquent par rapport aux CDD existants (à peu près 3/4 pour 1/4), ce qui met en évidence déjà une bonne force de frappe dans cette communauté et l'ensemble des besoins représentent à peu près 29% de l'existant. Il faut noter cependant que cette analyse factuelle est à pondérer du fait de l'hétérogénéité des chiffres récoltés à cause de ceux relatifs au code RAMSES qui sont fortement prédominants par rapport à ceux des autres codes.

ENVIRONNEMENT

Les besoins humains exprimés pour les codes dans le GT Sciences de l'Univers sont reportés à part pour les codes IPSL-CM et Meso-NH pour faciliter la lecture du graphique regroupant les autres codes (la taille des équipes mobilisées autour de ces deux écrasant les autres chiffres si nous les reportions à la même échelle).

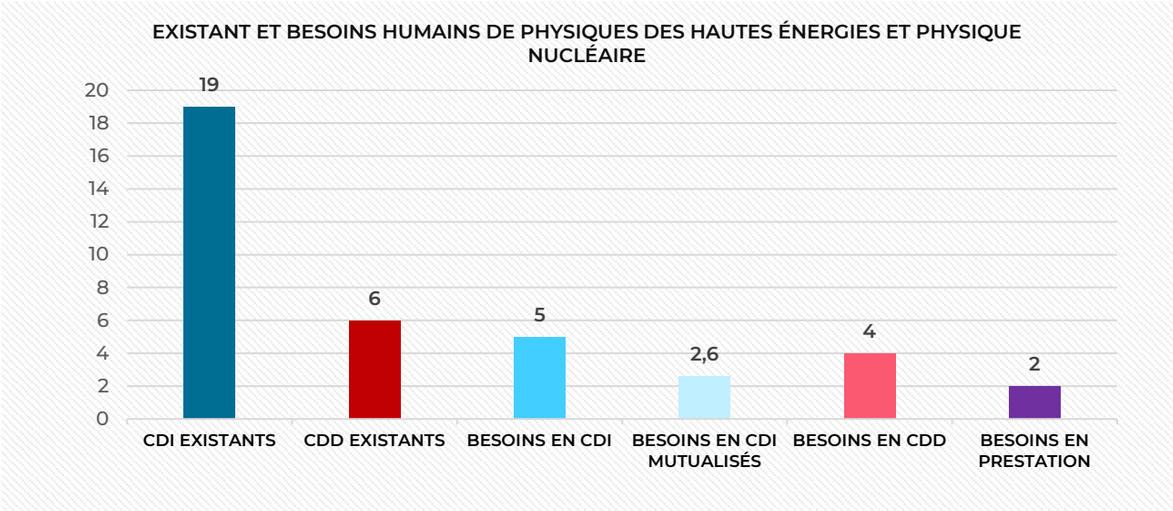
Dans les codes autour d'IPSL-CM, les équipes existantes sont assez musclées en ETP existants, CDI et CDD. Les besoins exprimés se limitent à quelques CDD, CDI mutualisés sans prestation. Le même constat peut être fait pour les autres codes, même si la taille des équipes est plus faible.



Ainsi que le montre le graphique « **Existant et besoins humains de l'Environnement** », la structuration des communautés autour des codes a permis le déploiement d'équipes de développement fortes et les besoins en personnels supplémentaires représentent moins de 10% des effectifs déployés sans besoin en prestation.

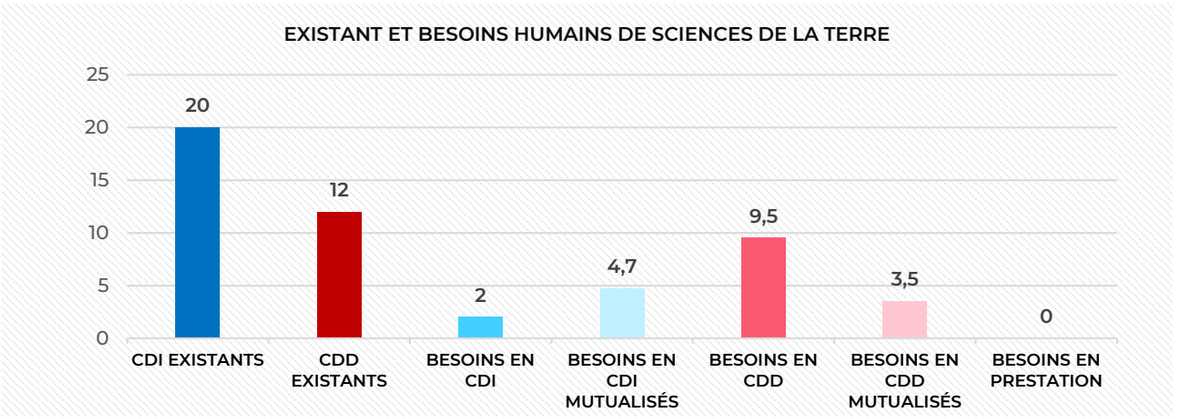
PHYSIQUE DES HAUTES ÉNERGIES ET PHYSIQUE NUCLÉAIRE

Les besoins humains remontés par les équipes travaillant sur les codes du GT-SDU – Physique des hautes énergies et physique nucléaire mettent en lumière un besoin plus accentué de type CDI (2/3) par rapport à des moyens de type CDD (1/3) en comptant aussi les besoins mutualisés dans les deux cas. A noter un besoin en termes de prestation externe bien identifiée pour 2 des codes (FUSIoN-AbNS et WarpX). Le nombre d'ETP et de CDI existants est conséquent par rapport aux CDD existants (à peu près 6/7 pour 1/7), ce qui met en évidence déjà une bonne force de frappe dans cette communauté.

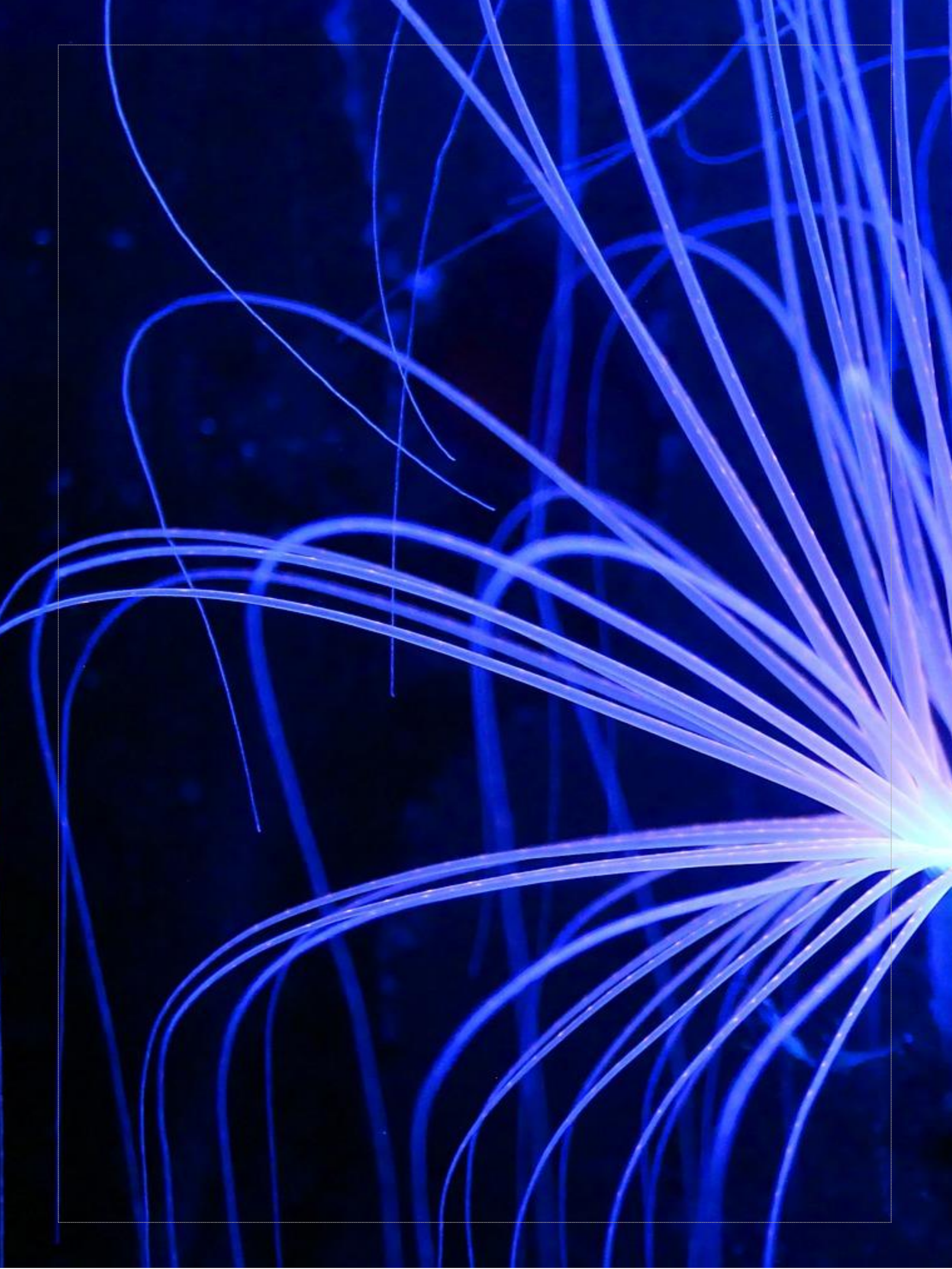


L'ensemble des besoins représente à peu près 33% de l'existant. Il faut noter cependant que, comme pour Astrophysique et Cosmologie, cette analyse factuelle est à pondérer du fait de la disparité des chiffres récoltés.

SCIENCES DE LA TERRE



Le domaine des Sciences de la Terre affiche 2 fois plus de demandes en CDD (mutualisés ou non) que de de CDI et aucun besoin en prestation. En pourcentage, ces besoins supplémentaires représentent un accroissement d'environ 30% des effectifs autour des codes.



SCIENCES DU VIVANT

Groupe de travail animé par
Marc BAADEN (CNRS) et **Alexandra CARBONE** (UPMC)



Marc BAADEN est Directeur de Recherche au CNRS. Il travaille dans le domaine de la caractérisation des protéines membranaires par le calcul haute performance. Il simule numériquement des phénomènes membranaires liés à diverses pathologies et s'intéresse à l'association de la bioinformatique, du calcul haute performance et de la visualisation scientifique avec la recherche biomédicale expérimentale.



Alessandra CARBONE est professeur émérite d'informatique à l'UPMC et elle dirige l'équipe de génomique analytique depuis 2003 et est directrice du département de biologie computationnelle et quantitative depuis 2009. Son groupe travaille sur des problèmes informatiques concernant le fonctionnement et l'évolution des systèmes biologiques. Des méthodes mathématiques issues de la statistique et de la combinatoire, ainsi que des outils algorithmiques (optimisation et Deep Learning) sont employés pour étudier les principes fondamentaux du fonctionnement cellulaire à partir de données génomiques. Les projets visent tous à comprendre les principes de base de l'évolution et de la co-évolution des structures moléculaires dans la cellule. Ils concernent l'évolution des séquences de génomes entiers ainsi que l'évolution des protéines. Alessandra Carbone a reçu le Prix Joliot-Curie en 2010 du Ministère de la Recherche et de l'Enseignement Supérieur et de la Fondation EADS, et elle a été distinguée en 2012 du Prix Grammaticakis-Neuman de l'Académie des Sciences pour la « Biologie intégrative » . Elle est membre honoraire senior de l'Institut Universitaire de France (2013-18).

DOMAINES APPLICATIFS

Le groupe de travail Sciences du Vivant couvre trois sous-domaines applicatifs : la modélisation du vivant, la bio-santé pharmacologie et l'environnement.

Modélisation du vivant

Le domaine de la modélisation du vivant couvre un champ large de communautés, structurées aujourd'hui par type de données et mécanismes biologiques étudiés. Le paysage est parfois fragmenté et un effort de certaines communautés peut être nécessaire pour dégager la synergie nécessaire au passage à l'exascale.

Une communauté historiquement bien organisée se retrouve autour des approches de dynamique moléculaire, dont les codes - souvent des projets communautaires au niveau international - sont parmi les mieux préparés à l'usage des GPUs. Cela se ressent d'ailleurs dans la pression des demandes notamment du Comité Technique « Modélisation moléculaire appliquée à la biologie » (en charge de l'attribution des heures de calcul pour cette thématique scientifique) de GENCI pour les moyens en GPU. Ci-après une liste non-exhaustive de codes qui sont utilisés par la communauté française et (co)développés en partie par des équipes françaises.

- Amber : Amber est une des références dans le domaine avec une portée internationale. Il offre des caractéristiques très intéressantes pour une utilisation sur une infrastructure exascale. De nombreuses améliorations ont été apportées depuis sa création à la fin des années 70. De fait, ce logiciel bénéficie d'une forte communauté de développeurs principalement situés à l'université de Californie à San-Francisco (USA). La dernière version d'AMBER 20 est particulièrement stable et permet de réaliser la plupart des calculs sur GPUs. Amber permet aussi les simulations hybrides de type QM/MM avec un nombre important de méthodes quantiques. Pour donner un exemple, un calculateur à l'échelle exascale permettrait de faire significativement grandir cette zone QM.
- DeepMD est développé à l'international (USA et Chine notamment) et permet d'entraîner des potentiels de réseaux de neurones dans le but de reproduire la surface d'énergie potentielle à partir de méthodes haut niveau (DFT hybride par exemple). Ces réseaux de neurones sont ensuite utilisés comme un champ de force réactif pour de la dynamique moléculaire classique grâce à son intégration dans LAMMPS (voir ci-dessous) ou pour de la dynamique moléculaire quantique par intégrale de chemin grâce au module « dp_ipi » qui est un client pour i-PI. Le gain de performances pour une dynamique moléculaire DFT est de plusieurs ordres de grandeur (entre 3000 et 5000 pour de l'eau B3LYP). Un portage à l'échelle exascale permettrait sans doute d'atteindre des échelles de temps, de taille et de complexités des réseaux encore plus importantes afin d'explorer de nombreux systèmes (par exemple biologiques) à un niveau de description quantique inédit.
- Gromacs est développé principalement dans l'UE, avec des contributions importantes de groupes de recherche en dehors de l'UE (États-Unis). Il s'agit d'un code phare avec une large base d'utilisateurs que ce soit dans le monde ou en France. Ce code implémente 3 intégrateurs MD, 2 intégrateurs de dynamiques stochastiques, 3 méthodes de minimisation d'énergie, et peut effectuer des calculs QM-MM (la partie QM du calcul est gérée par l'un des codes suivants: ORCA, Mopac7, Gaussian0x ou GAMESS-UK). L'optimisation des performances de GROMACS n'est pas anodine en raison de nombreuses options de parallélisation. Un grand nombre de noyaux de calculs ont été fortement optimisés, notamment à des niveaux très bas jusqu'à l'optimisation des instructions machine en fonction du type de processeur. Le logiciel est également très réputé dans le domaine des simulations de systèmes membranaires et dans les approches dites à gros-grain.
- LAMMPS est un code de dynamique moléculaire classique qui modélise des ensembles de particules à l'état liquide, solide ou gazeux. Il peut modéliser des systèmes atomiques, polymériques, biologiques, à l'état solide (métaux, céramiques, oxydes), granulaires, à gros grains ou macroscopiques en utilisant une variété de potentiels interatomiques (champs de force) et des conditions aux limites. Il peut modéliser des systèmes 2D ou 3D avec seulement quelques particules jusqu'à des millions ou des milliards. Même si LAMMPS est particulièrement populaire dans le domaine des

matériaux, il est aussi utilisé en sciences de la vie notamment pour la modélisation gros grains de protéines intrinsèquement désordonnées et la simulation d'environnements biologiques complexes (par exemple organites non membraneux).

- Muphy est un code co-développé en France et en Italie qui se positionne en particulier sur les aspects multi-échelle et l'approche Lattice-Boltzmann. La description des biomolécules peut être simplifiée en utilisant des modèles à gros grains et l'effet dynamique du solvant (implicite) peut être complété par une technique hydrodynamique en réseau.
  Cette combinaison ouvre la possibilité d'étudier une grande variété de systèmes et de processus biologiques où l'interaction entre le mouvement des fluides et les particules est essentielle: de l'interaction des protéines dans les cellules aux processus de coagulation dans les artères, au flux de particules dans les voies respiratoires. Ainsi, Muphy déplace la simulation du système biologique du niveau moléculaire simple vers des échelles mésoscopiques dans un cadre unique.
- NAMD est un code de dynamique moléculaire parallèle américain conçu pour la simulation haute performance de grands systèmes biomoléculaires. Basé sur des objets parallèles Charm ++, NAMD évolue vers des centaines de cœurs pour des simulations typiques et au-delà de 500 000 cœurs pour les plus grandes simulations.
- Le logiciel Tinker-HP a pour but de modéliser à haute résolution (champs de forces polarisables ou réseaux neuronaux) des systèmes complexes de grande taille sur des temps longs de simulation. Sa spécificité réside dans sa capacité à utiliser, outre les approches usuelles de la discipline telles que les champs de forces classiques, les nouvelles méthodes de champs de forces polarisables ainsi que les méthodes hybrides classiques-quantiques de type QM/MM. Les objectifs centraux de l'application sont situés dans le domaine de la biologie et de la pharmacologie. Le code permet actuellement d'effectuer de longues simulations de dynamique moléculaire sur des milliers de cœurs de calcul et/ou des cartes graphiques (GPUs). Le code est développé principalement en France mais aussi aux États-Unis et bénéficie d'un groupe important de développeurs au sein de la communauté Tinker.
- BigDFT est un code conçu pour la simulation ab initio de la structure électronique et peut être utilisé sur des architectures massivement parallèles. Il prend en charge efficacement les accélérateurs matériels tels que les GPU et dispose d'un algorithme de mise à l'échelle linéaire permettant le traitement de systèmes de plusieurs milliers d'atomes. BigDFT permet de partitionner automatiquement les grands systèmes en fragments et d'évaluer les quantités associées aux fragments telles que les charges, les dipôles ou les forces d'interaction. Le code peut fournir des estimateurs de l'énergie de liaisons entre les protéines, ou entre protéines et inhibiteur, qui sont précieux pour la recherche de nouveaux médicaments.

Dynamique moléculaire

Les travaux autour de la dynamique moléculaire génèrent également de grands ensembles de données dont le traitement et l'analyse requiert une part croissante de l'investissement afin de suivre cette tendance. On voit ainsi un nouveau besoin apparaitre afin d'analyser efficacement toutes les données générées, qui nécessitent une combinaison de fouille de données, apprentissage profond et analyses mathématiques et statistiques qui dépassent le niveau actuel. L'intelligence artificielle figure en première place pour assister à ce nouveau travail d'analyse de grande échelle afin d'identifier, en post-production, les évènements les plus intéressants de la trajectoire de dynamique moléculaire. Pour ne donner qu'un seul exemple concret des défis pour les logiciels de la partie post-production: la visualisation des trajectoires de dynamique moléculaire reste une étape indispensable, mais les outils dont nous disposons reposent encore sur l'hypothèse que cette dernière puisse être intégralement chargée en mémoire vive. Il faudra donc redévelopper et redéployer toute une batterie d'outils d'analyse qui eux aussi devront passer à l'échelle, tant au niveau du volume de données traités qu'au temps nécessaire à obtenir des réponses.

La dynamique moléculaire se nourrit typiquement de données de la biologie structurale dont certaines techniques comme la Cryo-EM peuvent également nécessiter des ressources de calcul importantes. Cette communauté en pleine effervescence ne s'est pas encore saisie des thématiques au cœur du présent rapport, mais au vu de son évolution exponentielle il parait évident qu'elle s'y intéressera dans un proche avenir. Ces données des bases de données de la biologie structurale, comme la Protein Data Bank (PDB) servent également à d'autres approches de modélisation comme le criblage (virtual screening) de banques de molécules et leur assemblage (docking). Par

construction trivialement parallèle, ces techniques souvent utilisées en conception de médicaments (drug design) peuvent également recourir aux centres de calcul, comme par exemple Quick Vina qui fait partie des logiciels demandés au Comité Technique « Modélisation moléculaire appliquée à la biologie ».

- Quick Vina 2 est un outil d'amarrage moléculaire rapide et précis, conçu pour accélérer avec précision le logiciel de référence AutoDock Vina. Il atteint une accélération jusqu'à 20 fois sur Vina. Il a été conçu pour un criblage virtuel à haut débit tout en restant suffisamment précis. Cela apporte à son tour une grande valeur à la conception de médicaments assistée par ordinateur basée sur des fragments.
- On constate également une activité de développement d'algorithmes dans ce domaine de la modélisation des relations structure-fonction des biomolécules. On pourrait donner comme exemple la bibliothèque de logiciel libre Structural Bioinformatics Library, dont le portage des algorithmes à l'échelle exaflopique constitue une cible à moyen terme afin de traiter des échelles de temps biologiquement pertinentes.

Génomique

En quittant le monde structural, la **génomique** forme également une communauté active avec des besoins importants et croissants en ressources de calcul. Les modèles évolutionnaires en sont un premier exemple et le code Aevol sera discuté dans la section sur l'environnement ci-dessous, mais il comporte également une dimension purement génomique. Il existe de fait des pétaoctets de données brutes qui « dorment » dans des référentiels tels que les archives de lecture de séquences faute de pouvoir être traités efficacement.

- Assemble-All-DNA est un projet en bioinformatique d'analyse de données, visant à reconstruire tous les génomes d'espèces présentes dans les bases de données de séquençage publiques, en particulier microbiennes et virales. Des péta-octets de données brutes « dorment » dans d'énormes bases de données telles que le « Sequence Read Archive » aux USA, sans qu'il soit possible de chercher des séquences dans ces données, car un index est impossible à créer à cause de leur volume. Les ressources informatiques nécessaires pour effectuer une telle reconstruction de génomes à l'échelle globale sont gigantesques; elles sont de l'ordre de l'exascale et le stockage des résultats de l'ordre de dizaines de péta-octets. Les résultats attendus d'un tel projet sont la découverte de millions de nouveaux génomes à travers l'ensemble de l'arbre de la vie, une véritable mine d'or pour les biologistes du monde entier. Un projet pilote avait montré qu'on pouvait décupler le nombre d'espèces de virus à ARN connues, et découvrir de nouvelles espèces de coronavirus.

Bio imagerie

Parmi les champs de ces communautés, la **bio imagerie** couvre les aspects d'études des grandes fonctions cellulaires, de suivi de molécules uniques, d'organisation spatiale à l'échelle cellulaire et tissulaire, et de leur prise en compte multi échelles en se focalisant sur la génération de données d'observation, notamment via le développement des instruments de mesures, et leur analyse numérique. Les codes développés dans le domaine de la bio imagerie correspondent à des besoins d'extraction d'information à partir des données d'observation obtenues principalement par imagerie microscopique, mais également à la création de données d'imagerie par l'amélioration numérique des mesures ou de données de validation ou d'apprentissage pour l'IA. Un autre grand pan du domaine correspond à la modélisation numérique des phénomènes, nourrie ou comparée aux mesures par imagerie. Ce dernier pan est particulièrement développé pour la dynamique et les interactions moléculaires ou cellulaires. Comme dans les autres domaines, les méthodes d'apprentissage profonds prennent une place de plus en plus prépondérante.

MOTS CLÉS :

BIOLOGIE STRUCTURELLE (CRYO-EM, ETC.), ASSEMBLAGE MOLÉCULAIRE & CELLULAIRE, PHYSIQUE & MÉCANIQUE DES FLUIDES BIOLOGIQUES, IMAGERIE, TISSUS VIVANTS, BIOLOGIE ÉVOLUTIVE, GÉNOMIQUE, GÉNÉTIQUE, BIOMATHÉMATIQUES, (BIOMIMETISME, HOMME AUGMENTÉ)

Bio-Santé-Pharmacologie

Ce domaine applicatif se nourrit en grande partie de méthodes et approches déjà décrites pour le domaine de la modélisation du vivant. Par exemple, la recherche de médicaments innovants utilise la dynamique moléculaire et le criblage (docking/screening) de banques de molécules. Beaucoup d'approches dans le domaine de la conception des médicaments (drug design) se basent également de manière importante sur les calculs, mais pas forcément à grande échelle et scalable - à part des approches massivement et trivialement parallèles. L'imagerie médicale partage un tronc commun avec l'imagerie décrite ci-dessus.

Donnons ici un exemple pour la dynamique moléculaire. L'établissement de longues trajectoires de dynamique moléculaire offre de nouvelles perspectives pour la conception de médicaments. En effet, lorsque l'on s'intéresse à l'interaction d'un ligand au sein d'un récepteur biologique son temps de résidence est un élément critique car si ce dernier est trop faible l'intérêt thérapeutique du ligand est fatalement limité. Dès lors, la prédiction des constantes cinétiques qui quantifient l'association et dissociation du ligand à sa cible, permettrait d'éviter qu'une molécule soit abandonnée en phase de tests cliniques. Dans ce cadre, la production de dynamiques moléculaires sur de longues trajectoires représente une approche séduisante qui a été récemment identifiée comme accessible sur une architecture exascale.

MOTS CLÉS:

MÉDICAMENTS INNOVANTS, IMAGERIE MÉDICALE, CANCÉROLOGIE, ÉPIDEMIOLOGIE, GÉNOMIQUE POUR LA SANTÉ, BIOCHIMIE, MÉTABOLOMIQUE, GÉNÉTIQUE POUR LA SANTÉ

BIOCHIMIE, METABOLOMIQUE, GENETIQUE POUR LA SANTE

Environnement

Ce domaine applicatif est en phase avec des enjeux sociétaux actuels. Nous n'avons recensé qu'une seule initiative s'inscrivant dans le périmètre de ce groupe de travail.

Aevol : il s'agit d'une plateforme expérimentale d'évolution *in silico* développée et maintenue par l'équipe projet Inria Beagle. Sa raison d'être est que la structure du paysage de fitness d'une population en évolution est fortement déterminée par la structure du codage de l'information biologique. Par conséquent, Aevol imite précisément la structure du génome biologique et le décodage multi-échelle de génotype à phénotype. En outre, ces structures sont intégrées dans une boucle évolutive qui comprend des opérateurs de sélection typiques et de nombreux opérateurs de mutation. À ce jour, Aevol est la seule plateforme multi-échelle qui simule l'évolution aux niveaux génétique, phénotypique et démographique et utilise à la fois un modèle de génome réaliste et des processus de mutation comprenant des mutations locales (substitutions et InDels), des événements à grande échelle et un transfert horizontal de gènes. Aevol est donc idéale pour explorer la prévisibilité de l'évolution, car elle peut étudier directement les interactions entre ces différents événements.

MOTS CLÉS:

RÉPONSE ET ADAPTATION AUX CONTRAINTES DÉVELOPPEMENTALES OU ENVIRONNEMENTALES, GÉNOMIQUE ENVIRONNEMENTALE, BIOCHIMIE, MÉTABOLOMIQUE

Recherche Fondamentale transverse au Groupe de Travail Sciences du Vivant

Le tableau ci-dessous donne une vue synthétique des thèmes de recherche fondamentale relatifs aux domaines applicatifs étudiés dans le groupe de travail « Sciences du Vivant ».

MODÉLISATION DU VIVANT	BIO-SANTÉ-PHARMACOLOGIE	ENVIRONNEMENT
■ Bio-informatique ■ Biologie computationnelle ■ Science des matériaux (structure électronique) ■ Dynamique moléculaire ■ Chimie ■ Médecine personnalisée	■ Bio-informatique ■ Biologie computationnelle ■ Couplage dynamique moléculaire pour affiner modèle de docking ■ Criblage/Docking	■ Bio-informatique ■ Biologie computationnelle

Sciences et Usages du numérique transverse au Groupe de Travail Sciences du Vivant

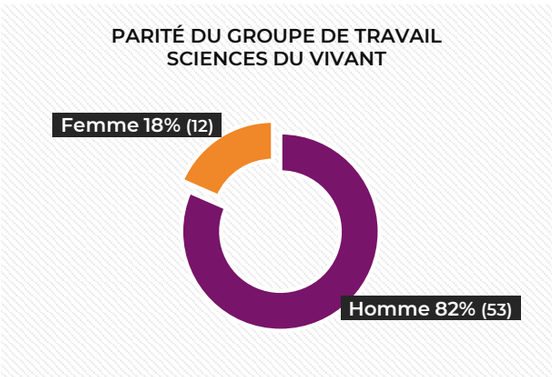
Parmi les liens avec le Pilier SUN on relève les éléments donnés dans le tableau ci-dessous.

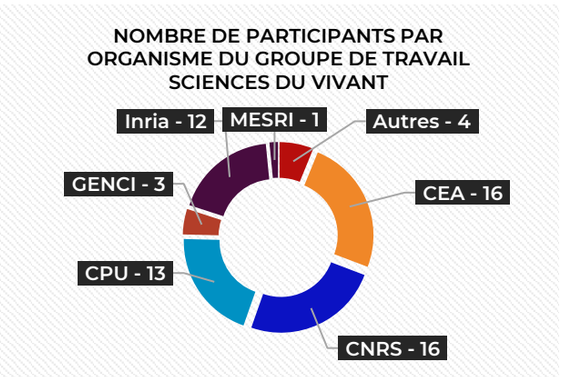
	MODÉLISATION DU VIVANT	BIO-SANTÉ-PHARMACOLOGIE	ENVIRONNEMENT
DATA ANALYTICS	■ Chaînes de traitement scalables, plateformes stockage / exploitation des données ■ Sécurité ■ Algorithmes d'analyse de données		
IA	■ IA pour la biologie, la santé, l'environnement		
HPC	■ Plateformes de stockage / exploitation des données ■ Simulations pour constituer les bases de données d'apprentissage pour ML ou émulateurs		
HIGH T HROUGHPUT COMPUTING	■ Chaines de traitement opérationnelles ■ Exploitation de mesures satellitaires en temps quasi-réel ■ Plateformes de stockage / exploitation des données ■ Entrée des données		
WORKFLOW COMPLEXES	■ Chaînes de traitement globalement scalables, couplage de codes HPC et HPC/HPDA, visualisation et pilotage de simulations ■ Parallélisation par graphe de tâches (scheduler, runtime, équilibrage, ...) ■ Plateformes de stockage / exploitation des données		

CHIFFRES CLÉS DU GT-SDV

Le SP3 présente ci-après des chiffres clés concernant les codes recensés au sein du GT-SDV. Les graphiques permettront d'identifier, pour chaque organisme concerné, l'état actuel des codes, les besoins (techniques et humains) nécessaires pour le passage à l'exascale

Parité et organismes présents dans le Groupe de Travail Sciences du Vivant

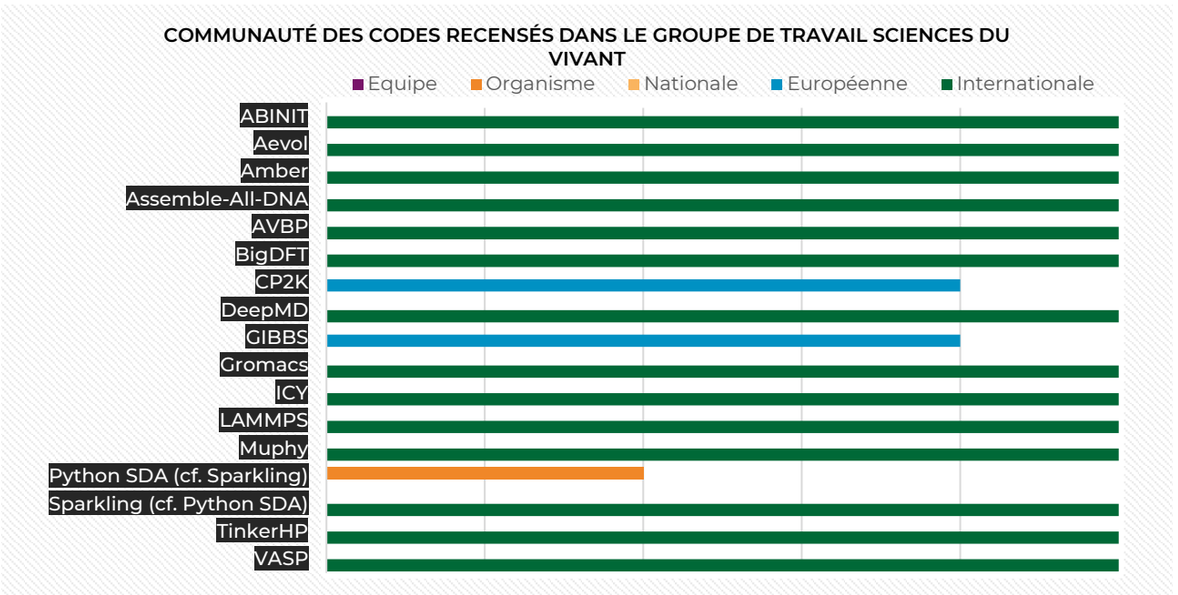




Sur le graphique « **Parité du Groupe de Travail Sciences du Vivant** », les femmes ne représentent que 14% des participants du GT-SDV.

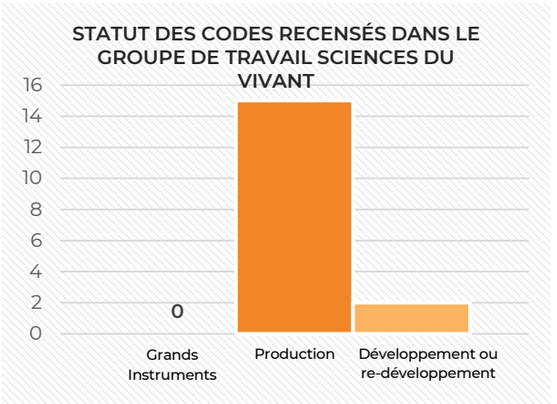
Les organismes CEA, CNRS, CPU et Inria sont représentés équitablement dans le GT-SDV. Globalement ils représentent chacun environ un quart des participants.

Communauté des codes

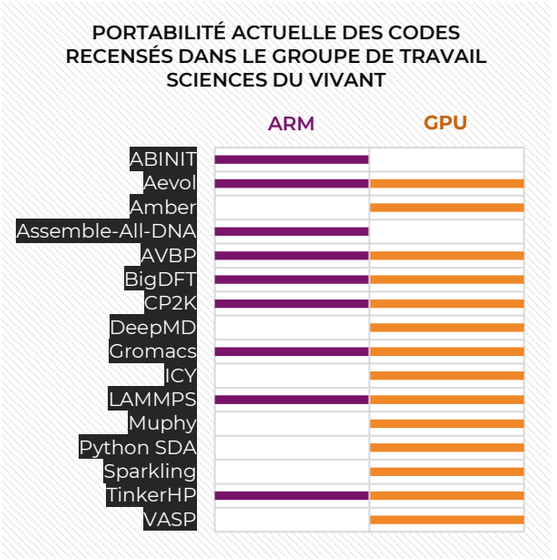


La majorité des codes recensés dans le GT-SDV sont développés et/ou utilisés à l'échelle internationale. La communauté du GT-SDV est assez hétérogène : on retrouve dans ce GT-SDV des participants du GT-RF notamment. Cette hétérogénéité s'explique notamment une utilisation internationale des codes recensés dans le GT-SDV.

Maturité des codes



Parmi les codes recensés dans ce GT (graphique « **Statut des codes** »), seuls 2 d'entre eux sont considérés comme étant en développement ou en redéveloppement. Il s'agit des codes Aevol et Assemble-All-DNA. Tous les autres codes sont en production, ce qui signifie qu'ils sont tous actuellement utilisés sur les calculateurs nationaux de GENCI. Le GT-SDV n'a pas recensé de codes liés aux « grands instruments », cependant il ne faut pas négliger l'aspect données dans le cadre du GT-SDV. Tout d'abord, les données peuvent venir de sources multiples. De plus, une partie des données utilisées par le GT-SDV sont considérées comme sensibles, puisqu'elles relèvent du parcours thérapeutique de patients.



La figure « **Portabilité des codes du GT-SDV** » représente la portabilité des codes sur des architectures accélérées GPU et de type scalaire CPU ARM telles que celles qui pourraient équiper les machines Exascale EuroHPC en 2024.

Il faut savoir que toutes les applications présentées ici sont aussi déjà portées sur architecture x86 (Intel, AMD) qui constituent une grande partie des moyens de production actuels.

Pour les architectures accélérées GPUs, nous considérons les cartes GPU de NVIDIA, celles-ci étant présentes sur la plupart des calculateurs nationaux et quasiment les seules disponibles sur le marché jusque fin 2021.

Pour l'architecture scalaire CPU ARM, nous considérons deux implémentations de puces : les processeurs ARM Thunderx2 de Marvell ou le processeur ARM A64fx de Fujitsu, co-designé par RIKEN.

Sur ce graphique, nous ne représentons que ces deux architectures dans la mesure où le calculateur exascale est pressenti pour être équipé d'accélérateurs (type GPU) et de processeurs scalaires qui pourraient être basés sur une microarchitecture ARM co-designée notamment par la société SiPearl et par le consortium européen EPI (European Processor Initiative).

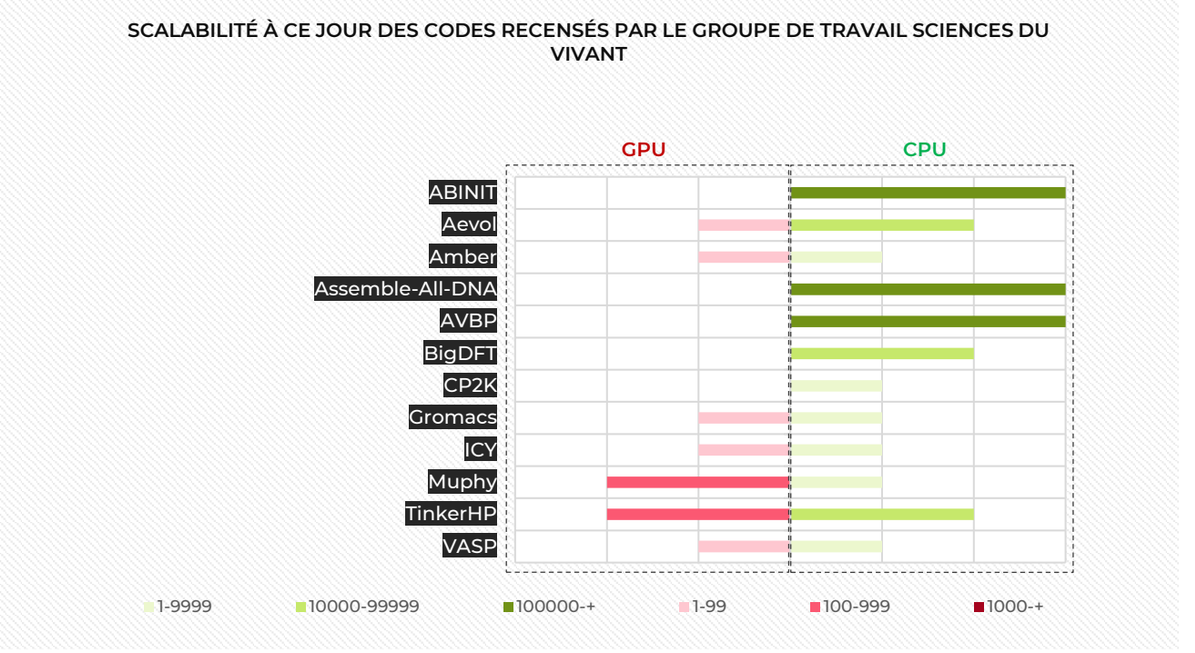
Pour ce graphique, nous considérons les hypothèses suivantes :

- Un code est porté sur CPU ARM s'il s'exécute sur cette architecture, même si cette exécution n'est pas optimisée. Pour les codes identifiés comme des « couplages » de simulation, on peut considérer que seule une partie de la chaine d'exécution s'effectue sur architecture ARM.
- Un code est porté sur GPU si une partie de l'application s'exécute sur un GPU. Ici, on considère donc tous les codes ayant de 1% à 100% de leur chaine s'exécutant sur GPU. La maturité du portage GPU est renseignée pour les codes dans les fiches détaillées. Cette information étant variable et très homogène, elle n'est donc pas représentée dans ce document.

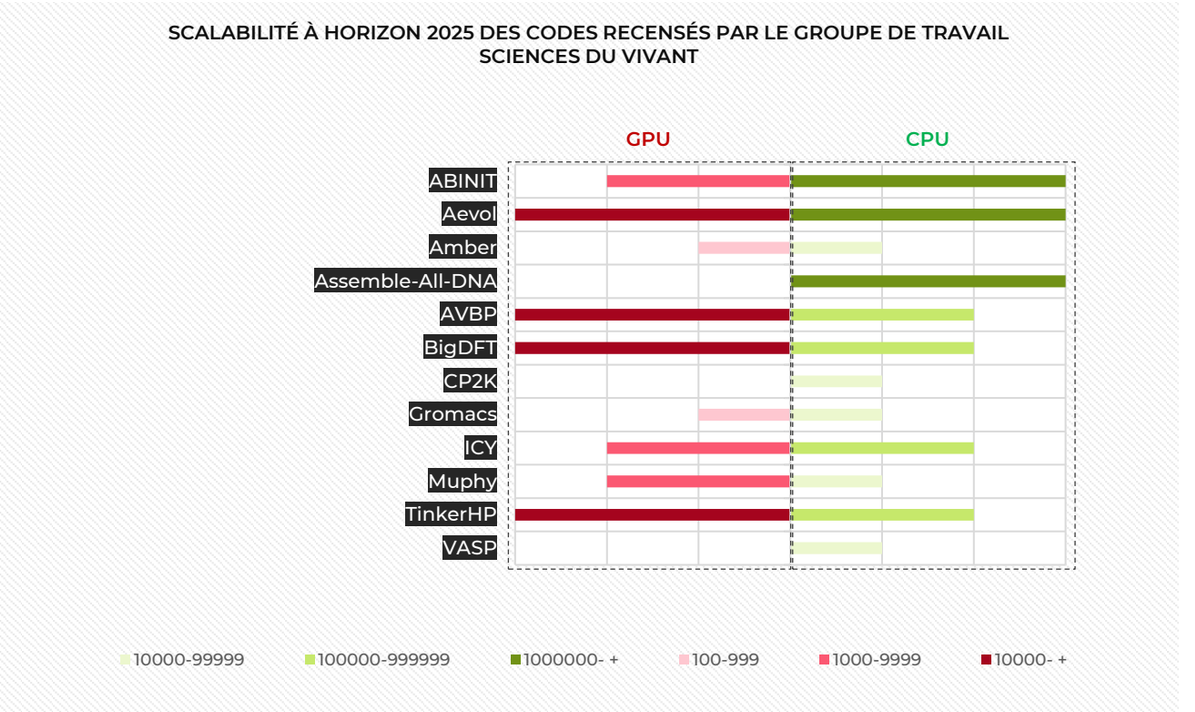
Pour les codes ne figurant pas sur ce graphique, cela signifie uniquement que l'information n'a pas été renseignée.

Pour le GT-SDV, un peu plus de la moitié des codes recenses par le GT-SDV s'exécutent sur architecture ARM. Seuls deux codes (abinit et Assemble-All-DNA) ne s'exécutent pas (à ce jour) sur architecture accélérée. Cela s'explique notamment par l'usage de framework récent (et déjà portables) par la communauté SDV.

Le SP3 a demandé aux participants du GT-SDV d'estimer la **scalabilité actuelle et à horizon 2025 des codes recensés**. Cette scalabilité est donnée à la fois sur CPU et sur GPU, car il nous faut prendre en compte la maturité des codes vis-à-vis des architectures accélérées, celles-ci étant incontournables dans le cadre de l'exascale. Il faut également considérer l'écosystème des architectures accessibles aujourd'hui, à savoir que le parc de supercalculateurs nationaux GENCI, européens prace et EuroHPC disposent d'une partition accélérée.



On constate qu'actuellement, la majorité des codes du GT-SDV (ceux pour lesquels nous disposons de l'information) s'exécutent sur CPU entre 1 et 10 000 cœurs. On constate en revanche que la scalabilité sur les GPU à ce jour est très réduite pour les code du GT-SDV (toujours pour ceux qui ont fourni l'information), qui s'exécutent entre 1 à 99 GPUs.



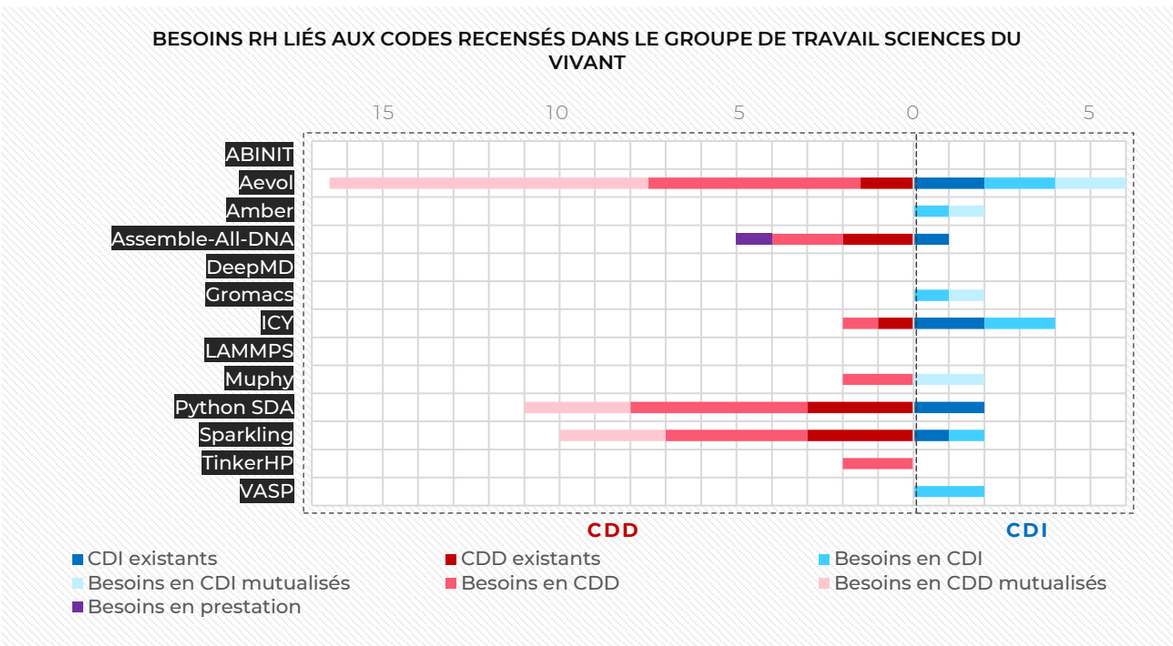
Les projections à horizon 2025 montrent en revanche que le GT-SDV est une communauté qui requiert une machine exascale. Une partie des codes présentés sur la figure ci-dessus font partie d'un workflow intégrant intelligence artificielle et data analytics.

VUE SYNTHETIQUE DES BESOINS RHs (LES SCIENCES DU VIVANT)

Il y a des besoins spécifiques pour plusieurs logiciels avec une composante de développement importante voire exclusive en France. Il s'agit des codes Aevol, Assemble-All-DNA, Muphy et Tinker-HP. Ces besoins ont été explicités en détail pour ces logiciels. Sur les deux codes communautaires Amber et Gromacs, largement utilisés en France, il y a davantage besoin de compétences pour accompagner les utilisateurs afin d'utiliser efficacement ces logiciels pour chaque cas d'application, ce qui pourrait être réalisé par une seule et même personne.

Besoins humains liés aux codes recensés dans le groupe de travail sciences du vivant

Le GT-SDV a fourni un recensement des ressources humaines actuellement déployées sur les codes recensés ainsi que des forces que les chercheurs jugent nécessaires afin de tendre vers une mise en production de ces codes sur une machine exascale. Le SP3 rappelle ici la complexité du challenge exascale : une architecture accélérée, des technologies plus en plus massivement parallèle, des usages nouveaux et complexes (imbrication de paradigmes HPC, IA, HTC, HPDA, etc...).



Sur la partie gauche du graphique (en rouge), nous présentons l'existant et la demande des équipes en termes de CDD. Sur la partie droite du graphique, nous présentons les mêmes données pour les CDI (en bleu). Le SP3 a choisi une distinction CDD versus CDI car les CDD peuvent par exemple être obtenu via des appel à projets spécifiques, tandis que les CDI relèvent d'une implication explicite des organismes.

Dans le graphique, il est aussi fait mention de CDI mutualisés : il s'agit ici d'une ressource en CDI, au sein d'un organisme, qui pourrait contribuer à plusieurs codes à la fois, sous la forme d'un support applicatif avance. La ressource travaillerait en lien étroit avec les équipes, sous forme de missions courtes durées (en général, entre 6 mois et un an). Ce modèle s'inspire des contrats de progrès actuellement en place, de la mise à disposition d'équipes support dans les centres de calcul nationaux ou à la maison de la simulation ou encore d'équipes support applicatifs dans le cadre de projets européens.

Pour les codes non développés par des organismes académiques, il convient de considérer les demandes en ressources humaines d'un point de vue montée en compétence sur le code en question, ce qui est pertinent et indispensable dans l'exécution d'une chaine de simulation en vraie grandeur.

Pour les codes ne figurant pas sur ce graphique, cela signifie uniquement que l'information n'a pas été renseignée.

MATURITE DES CODES POUR UNE ARCHITECTURE EXASCALE

Les codes du domaine de la dynamique moléculaire ont été historiquement parmi les applications ayant reçu un support important pour tirer parti des cartes GPU, notamment à travers des programmes de constructeurs comme Nvidia ou des initiatives internationales. La technique passe également raisonnablement à l'échelle jusqu'à des centaines de processeurs, parfois des milliers. Pour aller au-delà, des nouvelles approches se développent (marcheurs multiples, approche par répliques...) et l'envergure des études est également fortement croissante avec la simulation d'ensembles de systèmes (toute une classe de protéines par exemple) plutôt que des molécules isolées. Il s'agit là d'approches pratiquées par quelques groupes en France et un accompagnement est nécessaire afin que la communauté entière complète cette transition et passage à l'échelle.

Conclusion du GT-SDV

Les codes de dynamique moléculaire sont arrivés à une quasi-maturité pour le passage à une architecture exascale. Certains logiciels en font d'ailleurs leur fer de lance et visent explicitement ce défi, alors que d'autres restent dans une optique d'optimisation de ressources telles que celles présentes au niveau de laboratoires ou mésocentres. Il a été démontré que la technique peut tout à fait passer à l'échelle, mais reste à chaque équipe de développement d'en faire la déclinaison nécessaire pour leur implémentation. Des ressources humaines sont critiques pour le portage exascale de ces logiciels. Certains des logiciels présentent également des particularités, par exemple DeePMD se base sur TensorFlow pour la partie ML, sa portabilité exascale est ainsi liée à la portabilité de ce dernier.

Il y a également des freins particuliers déjà identifiés. Mis en évidence avec le logiciel GROMACS, il y a un problème majeur de parallélisation sur plusieurs GPU : les calculs GPU sont rapides sur les petits systèmes moléculaires (moins de 1 million de particules), mais la vitesse n'augmente pas beaucoup sur les systèmes plus grands, et la parallélisation pure au niveau du CPU est beaucoup plus efficace qu'au niveau du GPU sur ces grands systèmes (>10M particules). Le problème a été mis en évidence par des bancs d'essais effectués à l'IDRIS. Il parait impératif d'améliorer les performances de la parallélisation hybride CPU/GPU des codes de dynamique moléculaire.

Le problème en ce moment n'est évident que pour les plus grands systèmes simulés au niveau CG, mais, comme indiqué ci-dessus, la taille des systèmes simulés augmentera au cours des 5 à 10 prochaines années pour la grande majorité des utilisateurs, donc le problème sera général. Un autre défi général concerne la gestion exascale des communications comme par exemple pour les FFTs.

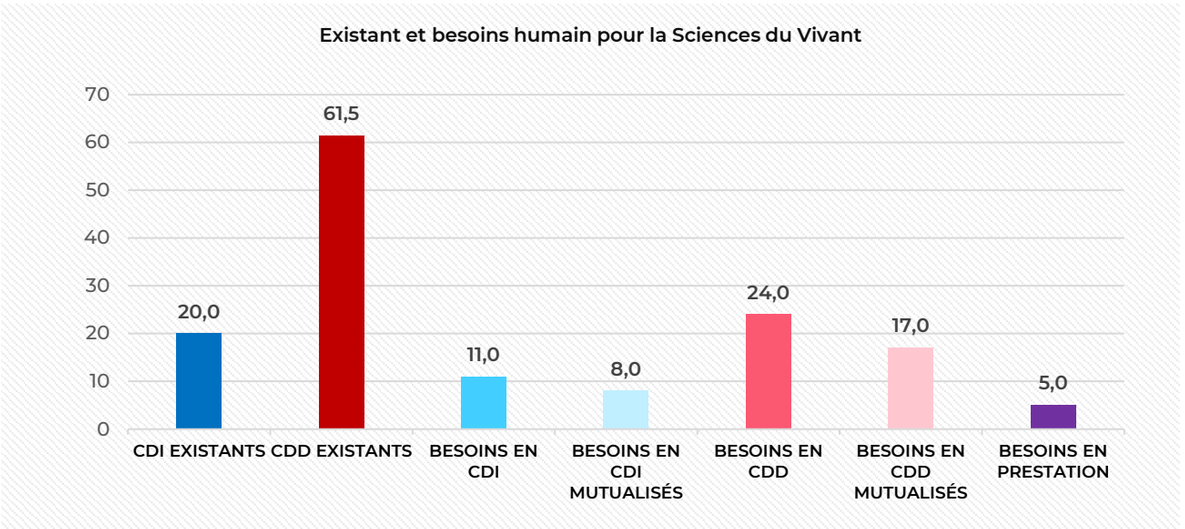
En plus de tels défis globaux, des défis spécifiques existent pour bon nombre des logiciels de dynamique moléculaire. Prenons l'exemple du code Muphy, qui doit encore passer le cap de rendre la dynamique particulaire efficace sur GPU, alors que la partie dynamique de fluide est déjà massivement parallélisée.

D'autres codes, comme Aevol par exemple, sont clairement engagés sur une trajectoire vers l'exascale.

La plupart des codes en bio-imagerie sont aujourd'hui développés de manière indépendante et spécifique à un questionnement donné, ce qui rend difficile l'identification de codes dits communautaires à passer à l'échelle exaflopique. Leur développement est également très focalisé sur l'utilisabilité par des biologistes non informaticiens de ces codes, et porte

ses efforts actuels sur l'explosion de la taille des données produites et l'adaptation des codes, avec des besoins de moyens humains jugés insuffisants mais identifiés. La communauté bioimagerie s'approprie actuellement le passage des données et des traitements des sites producteurs de données à des datacentres et centre de calcul mutualisés, à l'échelle des mésocentres régionaux (NNCR porté par l'institut Français de bioinformatique) ou des supercalculateurs nationaux comme Jean Zay, avec un focus sur la simplification des accès et la structuration des données.

Le passage d'échelle du pétaflopique à l'exaflopique semble prématuré dans les quelques années à venir, car la communauté est en pleine structuration sur le passage au pétascale.



La demande d'augmentation en CDI (comprenant donc les CDI et les CDI mutualisés) est de de l'ordre de 23%, tandis que la demande d'augmentation pour les CDD (comprenant donc les besoins en CDD et les besoins en prestation) est de l'ordre de 75%.

Le GT-SDV a mentionné au total dans son travail de recensement et d'identification 17 codes se répartissant sur 3 domaines applicatifs : modélisation du vivant, bio-sante-pharmacologie et environnement. La majorité de ces codes peuvent être qualifiés de codes HPC, HPDA, HRC et également IA. Cette répartition est cohérente avec les usages que nous connaissons de la simulation dans le GT-SDV.

Le SP3 estime que le recensement du GT-SDV sur le domaine HPC est relativement complet, modulo quelques données chiffrées (notamment sur les ressources humaines et la scalabilité) qui sont à compléter par chaque organisme. Il conviendra de poursuivre ce travail de manière pérenne et interactive afin d'identifier et de mobiliser au mieux les communautés IA, HPDA et HTC relative au GT-SDV.

Toutes ces communautés sont des cibles d'utilisateurs des machines exascale EuroHPC.



INDUSTRIE DU FUTUR & TRANSITION NUMÉRIQUE

Groupe de travail animé par
François BODIN (Université de Rennes 1) et **Bart LAMIROY** (Université de Reims Champagne-Ardenne)





François BODIN, Université de Rennes 1. Ses premières contributions scientifiques incluent de nouvelles approches pour l'exploitation de processeurs haute performance dans le calcul scientifique et les applications embarquées. Depuis, il s'intéresse aux questions liées à l'IoT et la logistique des données.

Bart LAMIROY, Professeur à l'Université de Reims Champagne-Ardenne effectuant sa recherche au CReSTIC. Auparavant, il était rattaché à l'École Nationale Supérieure des Mines de Nancy de l'Université de Lorraine et au LORIA, dont il est encore membre associé. Ses domaines d'expertise sont fortement liés à l'apprentissage automatique et l'analyse de grandes masses de données, notamment appliqués à l'interprétation de documents et à l'évaluation de performance de classificateurs.

Ce groupe de travail a sollicité des représentants de l'Industrie Française pour :

- Établir une cartographie des applications importantes actuelles exploitant le HPC/HPDA ;
- Avoir des indicateurs de maturité pour le passage des codes applicatifs au niveau exascale ;
- Identifier les verrous à lever pour une mise en œuvre efficace de ces applications sur les futures architectures.

Il ressort de cette consultation que :

- L'industrie Française dispose d'une large gamme d'usages effectifs et de besoins en HPC/HPDA, mais en revanche les niveaux de maturité en termes de projection ou d'expression de besoins de puissance exascale sont très variables ;
- Dans beaucoup de cas, la R&D concernant le HPC/HPDA est partenariale dans des consortiums publics/privés, et une partie des applicatifs relèvent donc également des cartographies thématiques abordées dans d'autres groupes de travail ;
- Les entreprises ayant une expérience avérée dans le HPC/HPDA considèrent leur savoir-faire en termes d'exploitation des architectures de calcul, de capacité de modélisation et d'optimisation des codes applicatifs comme un avantage compétitif stratégique et expriment des besoins de protection ou de confidentialité spécifiques pour les usages et le déploiement sur des infrastructures partagées ;
- Dans certains cas, la complexité des procédures liées à l'ensemble de l'exploitation et l'échange de données entre les centres de R&D industriels et les infrastructures de calcul, combinée aux besoins et exigences propres en termes de confidentialité, constituent un vrai enjeu ;
- La mise à jour des codes existants ("legacy", héritage des développements passés) pour une machine de niveau exascale représente un effort significatif, en particulier lorsque l'architecture des codes (et pire le modèle numérique sous-jacent) doit être repensée. Cet effort (résorption de la dette technique) est généralement sous-estimé : Cependant, dans le cadre de ce GT, l'estimation des efforts ayant un impact sur la compétitivité d'un secteur industriel s'est avéré particulièrement complexe car les aspects stratégiques sont généralement confidentiels ;
- La question de l'articulation avec les infrastructures Cloud (dans notre contexte essentiellement dans une logique orientée données) commerciales (e.g. OVH) ou publiques (e.g. Gaia-X - France) doit aussi faire partie de la réflexion pour définir l'environnement de l'infrastructure exascale ;
- Le support de pipelines intégrés (et donc de solutions de bout-en-bout), avec des flux massifs de données issus de capteurs et/ou de grands instruments, représente un enjeu important pour le dimensionnement de la machine exascale. Ce support implique de nombreuses évolutions dans les accès, les usages et la gestion des ressources ;
- Une problématique potentiellement bloquante pour une nécessaire articulation entre données (e.g. Data Terra/Gaia Data) et infrastructure de calcul exascale est celle de la cyber sécurité au niveau globale/système. Il ne s'agit pas ici de considérations au sens système informatique, mais d'une question tant du point de vue de la gouvernance de la sécurité que des évolutions des conditions d'accès et d'usages. Les infrastructures HPC sont particulièrement en retard sur cette problématique même si on comprend bien que les enjeux de sécurité sont d'autant plus importants que la puissance de calcul proposée est conséquente.

Il est à souligner que le travail du groupe ne cadre pas directement avec une analyse des besoins sur des codes existants, car la future architecture s'inscrit d'une part dans la continuité des activités HPC/HPDA mais aussi dans une extension de l'usage du HPC/HPDA à des thématiques émergentes telles que, par exemple, les jumeaux numériques qui combinent l'exploitation de grands volumes de données et la simulation via des modèles de plus en plus précis et complexes.

DOMAINES APPLICATIFS

Le groupe de travail Industrie du Futur et Transition Numérique couvre quatre sous-domaines applicatifs. Ces domaines applicatifs utilisent des méthodologies qui émargent naturellement dans les deux groupes de travail transverses que sont Recherche Fondamentale (RF) et Sciences et Usages du Numérique (SUN). On donne ci-dessous les thématiques concernées pour chacun de ces deux groupes de travail.

VILLE DU FUTUR	PROCÉDÉS INDUSTRIELS	SYSTÈMES COMPLEXES	TRANSPORTS
■ IOT ■ Objets connectés ■ Domotique ■ Villes végétales ■ Bâtiments basse énergie ■ Villes numériques (accès au numérique)	■ Génie des procédés ■ Sécurité industrielle ■ Robotique ■ Automatisation ■ Industries du futur	■ Design / Contrôle / Optimisation multidisciplinaire ■ Fiabilité / Vérification / Certification ■ Vieillissement / Fonctionnement en mode dégradé ■ Biomimétisme	■ Aéronautique ■ Transports terrestres ■ Spatial ■ Transport (sous)maritime

Recherche Fondamentale

- Science des matériaux ;
- Modélisation et couplage entre phénomènes, aspects multi-physiques et multi-échelles.

Sciences et Usages du numérique

- Sécurité ;
- Big data et IA ;
- Plateformes de stockage et exploitation des données ;
- Chaînes de traitement globalement scalables, couplage de codes HPC et HPC/HPDA, visualisation et pilotage de simulations ;
- Algorithmes d'analyse de données ;
- Reproductibilité, explicabilité.

Le reste de ce document est divisé en deux parties : la première partie reprend les principales caractéristiques des codes applicatifs en lien avec les domaines indiqués ci-dessus et remontées par les équipes de contributeurs, la deuxième partie fait une synthèse rapide des éléments techniques saillants plus ou moins communs à ces codes.

APPLICATIONS

Cette section donne une liste non exhaustive de codes applicatifs ainsi que leurs principales caractéristiques relativement aux attendus en termes d'architecture du futur calculateur du projet Exascale. Cette liste de par sa diversité montre aussi qu'un véritable enjeu de compétitivité existe et que l'acquisition d'une plateforme HPC/HPDA de niveau exascale est tout à fait pertinente. Au-delà d'un catalogue d'initiatives et de réalisations, on peut souligner qu'il existe pour beaucoup d'industriels soit une vraie *roadmap* intégrée dans leur stratégie R&D pour aller vers l'exascale, soit une prise de conscience forte de sa valeur ajoutée par des expressions de besoins clairs. La liste fait également ressortir qu'une grande partie des initiatives se fait au sein de consortia public-privé et académique-industrie.

CODE	CARACTÉRISTIQUES	SOURCE	INDUSTRIEL UTILISATEUR
ABINIT	Code de calcul de structure électronique ab initio.	École Centrale Nantes	Michelin
AVBP	Code qui résout le modèle CFD Navier-Stokes compressible tridimensionnel sur des grilles non structurées et hybrides. Applications en design et en combustion. Évolution vers l'usage des GPUs.	CERFACS, EM2C, IMFT, IFPEN	Renault, Safran, GE Renewable
CEDRE	Code de CFD pour la propulsion aérobie, la propulsion solide, la propulsion liquide. Grand défi pour le calcul d'un moteur complet (aérobie et propulsion fusée). Nombreux aspects multiphysiques avec couplages externes. Besoin en scalabilité et de version GPU des solveurs, besoin de post-traitement à la volée. Création de bases de données pour l'apprentissage.	ONERA	ArianeGroup, DGA, MBDA
CODA	Code d'aérodynamique pour le calcul d'un avion complet tout régime de vol, optimisation de forme. Besoins en capabilité et capacité, en développement.	ONERA, DLR, Airbus	Airbus
CODE_SATURNE	Code de CFD intégrant de nombreux modèles de turbulence pour la résolution des équations de Navier-Stokes. Applications allant de la sûreté des centrales nucléaires à la recherche sur le futur mix énergétique.	IMFT, EDF	EDF

DATA-TERRA ET GAIA-DATA	Codes HPDA et utilisation de workflows complexes. Services climatiques et hydrauliques, jumeaux numériques, surveillance des risques naturels, environnementaux et évènements extrêmes. Le développement de ces nouveaux services n'est possible que si les flux de données satellitaires peuvent être transférés, de préférence en temps réel et en volume, dans le système exascale qui pourrait être un maillon de la chaîne de traitement et d'analyse.	IRD, CNES	Dassault Systèmes, CNES, CS Group, Airbus DS, Thales Alenia Space
DIVA	Code CFD basé sur une méthode DNS pour la dynamique de vaporisation et d'atomisation, utilisant des mailles structurées 2D, 2D-axi et 3D avec un solveur multi-grille.	IMFT	EDF, Airbus, Safran
ELSA	Code d'aérodynamique permettant de simuler des écoulements autour de configurations complexes et variées d'avions, hélicoptères, turbomachines, missiles, lanceurs, dirigeables, éoliennes, etc, du régime bas-Mach au régime supersonique.. Lancement du développement d'un successeur SONICS.	ONERA	MBDA, Airbus, Safran
EXASTAMP	Framework pour la dynamique moléculaire.	CEA	
GEOSX	Code multi-physiques et multi-échelles pour le transport et le stockage CO2, pour le design des sites de production d'énergies renouvelables (éolien, solaire) et pour le design et l'optimisation des moyens de stockage d'énergie (batteries).	Lawrence Livermore National Laboratory, Stanford University, Total	Total
GROMACS	Framework pour la dynamique moléculaire appliquée aux sciences du vivant. Prédiction de la morphologie des cristaux formés et comportement rhéologique des dispersions solide / liquide de corps gras. Simulation optique de films cosmétiques.		L'Oréal
JADIM	Code pour simuler les écoulements di- et triphasiques via des techniques de suivi des interfaces sans reconstruction, bien adapté pour capturer des phénomènes rapides.	IMFT	EDF, Airbus, Safran
NEPTUNE-CFD	Code de CFD pour des écoulements multi-phasiques instationnaires pour les circuits des réacteurs nucléaires.	IMFT, EDF	EDF
OUTILS ISV	Outils certifiés ISV (Independant Software Vendor) comme ANSYS.		Peugeot, Renault
VASP	Code de simulation des propriétés électroniques de la matière condensée qui repose sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et l'utilisation de conditions 3D-périodiques. Les fonctions d'onde sont développées sur une base d'ondes planes et les électrons de cœur sont représentés par des pseudopotentiels de type PAW (*Plane Augmented Waves*).		EDF
YALES2	Code de CFD qui vise à résoudre les équations de Navier-Stokes 3D sous l'hypothèse de faible nombre de Mach. Il est principalement dédié à la résolution des écoulements turbulents réactifs et/ou multiphasiques. Évolution vers l'usage des GPUs.	CORIA	GE Hydro, Renault, Airbus, Safran
YALES2HYDRO	Version de YALES2 spécialisée pour des simulations de très hautes résolutions de configurations réelles de turbines hydroélectriques. Couplage en cours avec des approches machine learning pour assurer la synergie entre simulations et essais réels (mise en œuvre d'un jumeau numérique).	CORIA, LEGI (Grenbole)	GE Hydro

POINTS SAILLANTS

Cette section synthétise les principaux éléments qualitatifs remontés par les institutions contactées. Ces aspects sont structurants et devront être pris en compte si la machine Exascale se positionne comme élément de compétitivité.

Jumeaux numériques

Le développement de jumeaux numériques est l'une des thématiques émergentes importantes tant dans le domaine des systèmes industriels complexes que dans celui des réseaux et des villes intelligentes. Ces jumeaux numériques ne sont pas encore une réalité mais la génération des machines exascale devra soutenir ces développements. La caractéristique principale, du point de vue des codes, est de combiner les modèles numériques, le HPDA, l'IA et les données multi-sources issues de capteurs réels (sol, air, mer, espace), de simulateurs ou d'une hybridation des deux. La mise en œuvre de ces jumeaux pose autant la question de la parallélisation (et de l'utilisation des accélérateurs), de l'IA, du HPDA que celle de la logistique des données multi-sources au travers d'un continuum de ressources, de la portabilité des workflows et des conditions d'exploitation de la machine exascale.

Logistique des données, intégration dans les workflows

Une partie des usages de la future machine exascale s'inscrira dans l'utilisation de workflows applicatifs. Les thématiques telles que les jumeaux numériques, la ville intelligente, l'analyse de données expérimentales et provenant de grands instruments, etc. reposent sur la composition de traitements et d'analyses de données et de modèles numériques. Les données et produits d'observation utilisés dans ce cas sont exogènes à la simulation et issues d'équipements scientifiques (satellites, systèmes d'observation, etc.) ou encore de réseaux de capteurs.

Les masses de données issues des jumeaux numériques doivent pouvoir être réinjectées et distribuées dans des environnements périphériques à la machine exascale de manière à alimenter des processus de R&D pour accélérer l'innovation ou pour constituer un élément d'aide à la décision. La manière dont ces flux de données seront accessibles et exploitables par la future machine influencera largement son utilisation.

Par ailleurs, certains industriels ont fait remarquer que les prétraitements des données (sélection, conditionnement, assemblage…) deviennent de plus en plus souvent plus coûteux que l'étape de calcul (simulation, optimisation, Machine Learning…) à proprement dit.

Accessibilité des ressources

Du point de vue de l'usage industriel, la machine exascale devra être accessible dans des conditions d'exploitation en adéquation avec les pratiques de l'industrie. En particulier :

- Mettre en place des conditions d'accès qui respectent les enjeux de sécurité des industriels tout en permettant un usage optimisé des ressources.
- Le transfert et la logistique de données entrant et sortant du système doit être facilité en particulier en autorisant la mise en œuvre d'Application Programming Interface. Il s'agit aussi de répondre à des contraintes temps-réels ou de flux de données.

Articulation avec les infrastructures Cloud

La question de l'articulation avec les infrastructures Cloud (dans notre contexte essentiellement dans une logique orientée données) commerciales (e.g. OVH) ou publiques (e.g. Gaia-X - France) doit aussi faire partie de la réflexion pour définir l'environnement de l'infrastructure exascale.

Architecture des codes et *vendor* lock-in

Les codes d'importance pour l'industrie ne sont pas architecturés pour faciliter la migration vers la nouvelle génération de systèmes hautes performances. Les besoins en personnel maîtrisant les techniques d'optimisation de code sur architectures accélérées sont sur le chemin critique. Cependant, si des connaissances génériques sur l'optimisation de code sont nécessaires, elles doivent s'articuler avec les compétences métiers.

Par ailleurs, dans des contextes industriels contraints, il n'est pas rare d'être dépendant de solutions provenant d'éditeurs de certaines briques logicielles, limitant alors leur déploiement sur certaines architectures spécifiques.

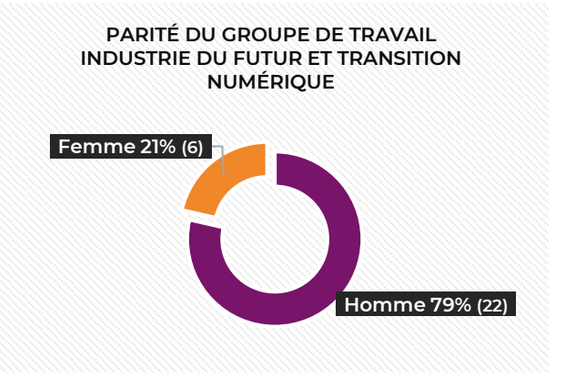
Utilisation de l'IA et HPDA

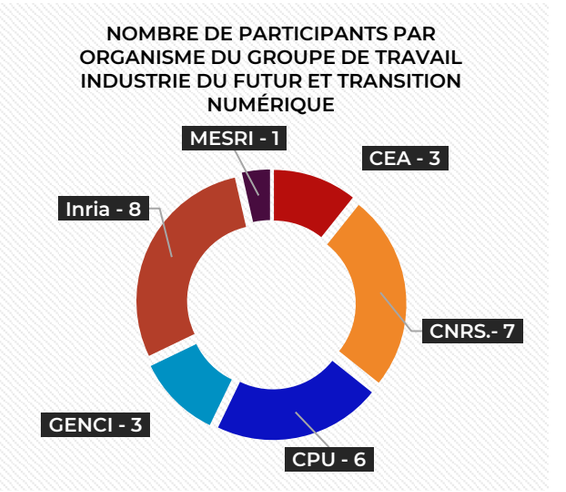
L'IA est amenée à jouer un rôle grandissant dans l'inférence de modèles de turbulence (*e.g.* elsA, CODA, AVBP, YALES2, CEDRE). De plus, il est attendu des usages de la machine exascale comme support à l'analyse et la réduction de très gros volumes de données qui, entre autres, sont issues de flux continus et/ou temps réel (*e.g.* Data-Terra et Gaia-Data).

Time-to-market, solutions spécialisées

Pour certaines applications (*e.g.* YALES2HYDRO), le temps (temps écoulé entre la demande d'accès et l'accès effectif au calculateur) est un facteur fondamental au besoin d'utilisation d'une machine de niveau exascale, par exemple pour produire tout en respectant les contraintes de « time-to-market ». C'est particulièrement vrai lorsque que les simulations sont spécifiques à un développement (*e.g.* turbine hydro-électrique) et les temps d'exploration courts. Cela vaut également pour des contextes industriels où chaque conception ne donne lieu qu'à une seule réalisation, sans production en série, et pour lesquels les temps de développement ne peuvent pas être rentabilisés sur une durée de vie de production longue.

Parité et organismes présents dans le groupe de travail Industrie du Futur et Transition Numérique





- Les femmes représentent 27% des participants du GT-IFTN.
- Le CNRS, la CPU et l'Inria sont majoritairement présents dans le GT-IFTN. Il faut cependant noter que les noms des participants au GT-IFTN issus de partenaires privés (EDF, Renault, etc...) ne sont pas pris en compte dans cette figure ci-dessus. Elle ne se limite qu'aux associes GENCI.

Dans ce GT, nous ne présentons pas de figure sur la scalabilité des codes recenses, ni leur portabilité. Cela vient de la structure même du GT-IFTN, où la plupart des participants sont issus d'entreprises, et une grande partie des données qui nous intéressent pour ce travail ne peut être divulguée publiquement.

CONCLUSION

La future machine exascale est un élément de compétitivité pour l'industrie si celle-ci peut s'inscrire dans un usage moderne compatible avec les objectifs applicatifs. En effet, peu de codes se présentent comme des codes HPC en tant que tels, mais plutôt comme des composants de workflows complexes visant à mettre en œuvre des traitements (*e.g.* jumeaux numériques) alimentés par des données multi-sources issues de capteurs ou de grands instruments.
La sécurité des accès et des données est une demande forte des industriels pour utiliser de grande capacité de calcul. Pour autant la souplesse dans les modes d'accès est également nécessaire.
La machine exascale est l'opportunité de repenser l'approche adoptée. Ceci est d'autant plus critique que des offres alternatives (partielles ou complètes) dans le secteur privé existent, ne cessent de se développer (OVH, CloudFerro ou les GAFAM) et sont d'ores et déjà directement exploitables.

L'autre grande évolution nécessaire est celle de la ré-architecturation des codes. En effet, l'utilisation d'accélérateurs de calcul, l'intégration de HPDA ou d'IA ne peuvent être accomplies de manière efficace sans une refonte de grande ampleur des codes legacy. L'ampleur de l'effort est en général sous-estimée par les équipes elles-mêmes. La collaboration industrie-recherche doit être au centre de cette réflexion pour s'assurer que la vision stratégique de l'ensemble des acteurs est correctement alignée. Le corollaire direct est qu'au-delà des investissements matériels, un accompagnement en ressources humaines conséquent et pérenne est nécessaire.

Une dimension potentiellement bloquante à l'articulation entre données (*e.g.* Data Terra/Gaia Data) et l'infrastructure exascale est celle de la cybersécurité au niveau global / système. Il ne s'agit pas ici de considérations de niveau système d'informations, même si évidemment chaque système doit mettre en œuvre les techniques de protection à l'état de l'art, mais d'une question d'articulation entre infrastructures de données et de calculs tant du point de vue de la gouvernance de la cybersécurité que des évolutions des conditions d'accès et d'usages. Les infrastructures HPC sont particulièrement en retard sur cette dimension.

Anticiper les besoins en matière de flux de données à la hauteur de la capacité de traitement exascale a été clairement identifié par plusieurs partenaires. Il y a un risque d'avoir de vrais goulots d'étranglement dans la capacité d'acheminement des données. De façon duale, la capacité de stockage au plus proche des nœuds de calcul est indispensable, mais pas nécessairement en adéquation avec la totalité des modes d'utilisation. Elle convient pour le traitement batch de données préparées en amont et à acheminer avant traitement ou pour des données générées on-line par le calculateur, mais pas pour des données off-line à traiter en flux continu sans capacité d'acheminement autre qu'en temps réel. Cette problématique est par ailleurs transversale aux points évoqués en lien avec le cloud, les pipelines et la cybersécurité.



SCIENCES ET USAGES DU NUMÉRIQUE

Groupe de travail animé par
Raymond NAMYST (Université de Bordeaux) **et Bruno RAFFIN** (INRIA)



Raymond NAMYST, professeur à l'Université de Bordeaux depuis 2002, où il est directeur-adjoint de l'unité de formation informatique et responsable du Master 2 « Calcul Intensif et Sciences des Données. » Il est par ailleurs conseiller scientifique auprès de la direction du CEA/DAM. Raymond Namyst est membre du projet Inria STORM, dédié à la conception de supports d'exécution et de techniques de génération de code pour architectures parallèles. Ses principaux thèmes de recherche concernent les langages parallèles, l'ordonnancement de tâches en contexte hétérogène et hiérarchique et l'équilibrage dynamique de charge. Il a contribué au développement de nombreux supports d'exécution (MPI, OpenMP) et tout particulièrement l'environnement StarPU.



Bruno RAFFIN, directeur de recherche chez Inria dans le centre Grenoble Rhône-Alpes et responsable de l'équipe DataMove. Il effectue des recherches sur les middlewares pour l'analyse de données à haute performance, le traitement in situ, le pilotage de simulations, ce qui a conduit à la conception et à la réalisation de frameworks comme FlowVR et Melissa. Il a également travaillé sur les algorithmes parallèles et les structures de données parallèles efficaces du point de vue de l'utilisation des caches, ainsi que sur les stratégies de programmation utilisant un modèle de graphe de tâches pour des machines multi-CPU et multi-GPU. Il coordonne actuellement les travaux du défi Inria concernant la convergence entre le HPC, l'IA et le Big Data.

Ce groupe de travail a catégorisé et répertorié l'écosystème logiciel HPC-HPDA sur lequel s'appuient majoritairement les applications. L'objectif a été de dresser une vue d'ensemble des solutions logicielles à prendre en considération dans une démarche de passage à une échelle exaflopique d'applications de simulation numérique, de traitement des données ou d'intelligence artificielle. Bien sûr, ce travail de cartographie ne prétend pas être exhaustif et le document de synthèse ainsi que cette restitution ont vocation à être étoffés. Les solutions sont classées selon les catégories suivantes:

- Les modèles de programmation et les supports d'exécution ;
- Les outils de développement ;
- Les bibliothèques de solveurs d'algèbre linéaire, de partitionnement et de gestion de maillage ;
- Les bibliothèques de traitement de données, de visualisation et les outils d'apprentissage ;
- Les solutions de déploiement de piles logicielles et de gestion de données.

LES MODÈLES DE PROGRAMMATION ET LES SUPPORTS D'EXÉCUTION

On s'intéresse ici aux solutions les plus courantes qui ont un impact direct sur l'expressivité du parallélisme au sein des applications.

Langages à base de directives

Les approches à base de directives de programmation permettent de paralléliser un code existant (C, C++ ou Fortran) par ajout d'instructions spéciales (*e.g.,* directives #pragma) qui indiquent au compilateur comment il doit « paralléliser » le code. L'avantage des approches et d'encourager une parallélisation incrémentale du code et de conserver, parfois, la structure originelle du code séquentiel. L'inconvénient est qu'en partant d'un code séquentiel, le programmeur reste parfois prisonnier d'un schéma de pensée « séquentiel » peu adapté à l'utilisation d'un parallélisme dit massif. Cette approche est particulièrement bien adaptée au portage sur GPU d'applications parallèles déjà existantes, en maximisant la productivité (*i.e.* le rapport entre les performances obtenues et le temps de développement associé) tout en minimisant les changements dans le code. Suivant le type d'application, l'expérience montre que les performances obtenues peuvent être excellentes. Pour le portage GPU de très grosses applications, c'est probablement la seule approche viable sur le court et moyen terme. Enfin cette approche est accessible à tout développeur non expert du domaine. Cependant, les grands codes communautaires font pratiquement tous appel à des bibliothèques métiers ou spécialisées ; le portage de celles-ci sur GPU doit donc se faire en harmonie avec les choix des codes pour que les exécutifs soient compatibles. C'est un domaine encore largement inexploré et surtout dans le cadre des langages à base de directives.

- OpenMP est le standard de programmation élaboré par l'OpenMP *Architecture Review Board* regroupant de nombreux acteurs industriels et académiques de la communauté du calcul intensif. La version 1.0 de la spécification du langage date de 1997. À l'époque, les machines cibles étaient principalement des machines multiprocesseurs à mémoire partagée uniforme (*Symmetric Multiprocessing*) et la parallélisation était surtout focalisée sur le parallélisme de boucles (régulières). Plus tard, le parallélisme de tâches a été introduit pour permettre d'extraire du parallélisme dans des schémas de calcul moins réguliers que des boucles

(spécification 3.0). En 2013, la spécification 4.0 d'OpenMP introduit aussi la possibilité de générer du code dont l'exécution sera déléguée à un accélérateur (FPGA, GPU).

Le modèle de programmation OpenMP pour GPU s'appuie sur trois axes : (i) des annotations ajoutées dans les sources (appelées directives OpenMP), (ii) des fonctions et (iii) des variables d'environnement. Pour réaliser des optimisations plus explicites, le standard propose des clauses aux annotations et une API (interfaces d'un ensemble de fonctions spécialisées GPU). Les directives et fonctions sont normalisées ce qui doit nous garantir une certaine pérennité du développement pour nos applications. De plus, les directives de la version GPU d'OpenMP utilisent la même philosophie que les directives déjà disponibles pour le multithreading. Elles ont donc un comportement différent uniquement en fonction des paramètres utilisés en argument.
En conséquence, ce modèle de programmation doit permettre à terme de disposer d'un code unifié entre les CPUs et les GPUs mais aussi d'être portable sur n'importe quelle architecture GPU.

Les sections de code identifiées par des directives ayant un argument target sont exécutées sur un device qui doit être précisé par le développeur. Il peut être soit un GPU soit les cœurs CPU du nœud de calcul. Ce choix s'effectue dans le programme par l'API OpenMP en spécifiant quel est l'accélérateur cible par défaut, ou plus généralement par la clause OpenMP device(dev) au niveau de la directive parallèle. Néanmoins, il sera nécessaire de vérifier que les deux versions possibles CPU et GPU sont bien efficaces. En effet, dans certains cas, il faut modifier l'algorithme pour obtenir une version GPU performante et celle-ci peut impacter en positif comme en négatif les performances de la version CPU. Actuellement, ce qui diffère le plus entre ces deux versions est l'ajout de directives spécifiques (ou via des fonctions) pour décrire les échanges de données entre la mémoire du nœud et celle du GPU.

La qualité d'une implémentation OpenMP dépend de la version de la norme supportée par le compilateur mais aussi de la qualité du support d'exécution associé. Pour un même code, le comportement à l'exécution de ce dernier peut afficher des comportements à l'échelle très différents (support Intel par rapport à celui de GCC par exemple). On trouvera dans le document complet rédigé par le groupe de travail SUN une liste des principaux compilateurs avec leurs caractéristiques.

- OpenACC est un autre standard de programmation, développé à partir de 2012 par Cray, CAPS et poussé essentiellement par Nvidia et PGI. À l'origine, l'idée était de réfléchir à des extensions d'OpenMP pour supporter la génération de code permettant de déléguer certains calculs (offload) à des accélérateurs de calcul (notamment les cartes graphiques). Cet effort qui devait être transitoire est devenu avec le temps une alternative possible au standard OpenMP et est perçu comme le "lièvre" pour OpenMP. A noter que le modèle de programmation OpenMP pour GPU supporte des fonctionnalités qui sont similaires à celles d'OpenACC.
- En conclusion, on peut affirmer que les langages à base de directives, ainsi que les compilateurs associés, progressent et génèrent (ou vont bientôt générer) du code d'efficacité acceptable sur GPU. En ce sens, ils représentent d'ailleurs un bien meilleur compromis portabilité/performances que les approches bas-niveau (OpenCL, CUDA) qui mènent à des codes difficilement maintenables. La principale lacune des langages à base de directives est qu'ils n'intègrent pas encore la notion d'ordonnancement dynamique : l'«*offload* » des calculs est très statique et souvent explicitement spécifié par le programmeur. C'est donc ce dernier qui précise s'il souhaite déléguer un bloc de code sur accélérateur ou s'il souhaite l'exécuter sur les CPUs. Les mouvements de données entre la mémoire principale et les mémoires embarquées des accélérateurs sont également très explicites (sauf en cas d'utilisation de la mémoire unifiée) et Il est souvent difficile de recouvrir efficacement ces mouvements de données et avec le calcul.

Extensions de langages

- Kokkos C++ a pour objectif de devenir la couche d'abstraction de référence pour abstraire l'hétérogénéité matérielle des futures machines de niveau exascale. Kokkos C++ vise une portabilité au niveau du code tout en assurant une bonne portabilité de la performance. Pour cela, Kokkos C++ propose une gestion des accès mémoire performante sur des structures de données spécifiques et ce pour chaque type d'architecture. Il permet d'accéder à des fonctions avancées permettant de faciliter l'exécution sur des machines disposant de plusieurs accélérateurs de types différents, mais aussi la gestion des données entre

différents types de mémoires comme celles qui sont maintenant accessibles sur les machines modernes (HBM, DRAM, NVRAM...). Au-delà du modèle de programmation, Kokkos C++ fournit aussi des outils de profiling et de debugging et aussi des noyaux de calcul mathématiques. C'est une des plateformes logicielles centrales du Exascale Computing Project du DoE ainsi que de plusieurs logiciels de calcul scientifique européen.

- OpenCL est un langage « bas niveau » visant la portabilité du calcul hybride avec tout type d'accélérateur et de processeur. Descendant direct de CUDA, il en étend un certain nombre de concepts. La spécification est open source et maintenue par le Khronos Group. Son principal inconvénient est qu'il n'est utilisable qu'en C/C++ et ne se prête pas facilement à un déploiement dans un grand code scientifique. Pour contourner cette dernière difficulté, SYCL a été proposé. C'est une interface C++ au-dessus d'OpenCL permettant d'offrir une vue à source unique au programmeur. La dernière version de SYCL est la 2020 en date du 9 février 2021. L'arrivée de DPC++ marque l'intérêt renouvelé d'Intel pour OpenCL pour concurrencer CUDA d'une part et pour permettre le support d'une plus grande variété de matériels propriétaires. DPC++ est une extension de SYCL. Ces extensions préfigurent ce que seront de prochaines versions de SYCL, sachant que la tendance de fond, tant pour Intel que NVIDIA est de fondre leurs propositions au sein de la norme C++ (>= C++17). On remarquera que FORTRAN est le grand oublié de ces efforts.

Supports d'exécution & Back-ends de compilateurs

L'objectif des supports d'exécution est de permettre le développement d'un modèle de programmation parallèle efficace et devant conduire à une bonne portabilité des performances pour les architectures hétérogènes à base de CPU, GPU, FPGA, etc... Pour cela la conception algorithmique du calcul à réaliser se fait de manière « générique » sous la forme d'un graphe de tâches qui représente de manière précise les dépendances en temps dans les calculs. Les références vers les données utilisées (en lecture et/ou écriture) sont également fournies de manière à ce que le support d'exécution puisse automatiser (et même anticiper) les transferts de données entre la mémoire principale et la mémoire des accélérateurs par exemple. Ces informations sur les accès mémoire permettent également d'inférer des dépendances entre les tâches.

À chaque type de tâche de calcul peut être associé plusieurs implémentations, ce qui permettra à l'ordonnanceur intégré dans le support d'exécution de choisir celle qui semblera la plus adaptée (en fonction d'un apprentissage antérieur ou d'un modèle paramétrique de complexité). Une tâche dotée d'au moins une implémentation sur CPU et d'au moins une sur GPU offrira donc une certaine latitude de choix d'ordonnancement au support d'exécution. À noter que de nouvelles stratégies d'ordonnancement peuvent souvent être rajoutées par l'utilisateur et que ces stratégies peuvent optimiser des critères différents : par exemple, certaines peuvent être orientées « latence » (*i.e.* on vise la terminaison au plus tôt du calcul), mais aussi « énergie » (*i.e.* on vise le meilleur ratio performance/watt possible).

On trouvera dans le document complet rédigé par le groupe de travail SUN les principales caractéristiques de supports d'exécution connus comme OMPss, StarPU, XKAAPI entre autres, ainsi que des liens vers la description de back-ends de compilateurs. Dans ces approches, la problématique d'assurer un surcoût à l'exécution (pour la soumission et la gestion des tâches) et une empreinte mémoire faibles pour des déploiements à grande échelle est centrale.

On dispose désormais de supports d'exécution qui savent très bien ordonnancer des graphes de tâches sur architectures hétérogènes. Ces supports sont généralement accessibles au travers d'une interface OpenMP étendue en s'appuyant sur des versions modifiées du compilateur LLVM, mais leur utilisation suppose que le programmeur fournisse lui-même les versions GPU (typiquement en OpenCL ou CUDA) des noyaux de calcul qu'il souhaite utiliser. Ce n'est bien sûr pas aussi confortable qu'un compilateur OpenMP qui générerait le code pour GPU tout en s'appuyant sur un support d'exécution dynamique de manière sous-jacente... Mais la R&D avance dans ce sens ! À noter d'autre part que le prototypage dans OMPss a contribué fortement dans la définition du modèle de tâches avec dépendances d'OpenMP.

Programmation distribuée

- MPI (Message Passing Interface) est le standard de fait pour la programmation à base de passage de messages pour les applications à large échelle qui

fonctionnent en mémoire distribuée. Les implantations MPI sont des bibliothèques qui fournissent des fonctions pour échanger des données de manière abstraite entre processus mais aussi par exemple pour les synchroniser, pour gérer des types composés ou des topologies de processus. MPI fournit plusieurs types de communications : les point-à-point entre deux processus, les communications collectives entre les processus d'un même groupe ou des communications unilatérales (*one-sided*). Ces communications peuvent être persistantes ou non, bloquantes ou non bloquantes. Depuis la version 3.0 de la norme, toutes les communications collectives existent avec une version non-bloquante ce qui permet de faire du recouvrement calcul/communication. La version 4.0 introduit les notions de sessions, de communications collectives persistantes ainsi que la gestion abstraite des topologies.

- Une autre approche répandue se retrouve dans UPC++ (Berkeley Lab) qui est un environnement de programmation parallèle obéissant au modèle « PGAS » (Partitionned Global Address Space). L'idée est de disposer d'un espace mémoire virtuellement partagé sur une architecture distribuée dans lequel il est possible de lire/écrire au moyen d'opérateurs spéciaux. Contrairement aux systèmes distribués à mémoire virtuellement partagée (*Distributed Shared Memory systems*), les communications sont ici explicites. L'avantage du modèle PGAS est d'utiliser un modèle de programmation uniforme pour exploiter les architectures distribuées et les architectures à mémoire partagée. UPC++ est une évolution de UPC (*Unified Parallel C*), qui nécessitait un compilateur spécifique pour convertir les fichiers sources (C + extensions) vers du C agrémenté d'appels explicites à la bibliothèque sous-jacente. Cette bibliothèque GASNet fournit une interface de communication orientée « accès mémoire distants » qui permet à un processus d'effectuer des opérations de lecture/ écriture depuis/vers la mémoire d'autres processus, sans intervention de leur part, et de manière totalement asynchrone. GASNet permet également l'utilisation de messages actifs, c'est-à-dire d'émettre des requêtes de communication qui déclencheront spontanément l'exécution d'un traitement sur le site de destination.

LES OUTILS DE DÉVELOPPEMENT

On s'intéresse ici à des solutions qui permettent de faire du co-design d'applications sur plateforme distribuée hétérogène, l'objectif étant idéalement d'assurer raisonnablement la prédiction et la portabilité des performances en maîtrisant au mieux les problématiques liées à l'hétérogénéité de la plate-forme, à la contention réseau et à la dynamicité des applications. On aborde ici une solution basée sur la simulation d'exécution ainsi que des solutions basées sur le profilage, la génération et l'analyse de traces.

Simulation d'exécution et du comportement des plateformes de calcul

Parmi les outils de type simulateur, SimGrid est un des plus représentatifs. C'est un environnement qui fournit un ensemble d'interfaces et de modèles de comportement (pour les réseaux, les calculs, l'activité des disques, la consommation énergétique...) permettant de simuler des plateformes aussi variées que des grilles de calcul, des supercalculateurs, des data-centers, des plates-formes de calcul bénévole ou de fog, etc... L'objectif est de proposer des simulations valides (i.e. avec des capacités prédictives attestées par des comparaisons régulières avec la réalité dans de nombreux contextes différents), rapides, passant à l'échelle et avec des abstractions aussi proches et adaptées que possible des systèmes étudiés. SimGrid permet donc de développer des simulateurs de systèmes de calcul distribué et on peut citer par exemple les 4 exemples suivants :

- SMPI permet de simuler des applications MPI (C, C++, FORTRAN) sans qu'aucune modification ne soit nécessaire et d'étudier leur comportement en simulation en termes de passage à l'échelle, de contention réseau, de sensibilité à l'hétérogénéité ou à la variabilité de la plate-forme. Dans le cas où l'application est constituée de noyaux de calculs "réguliers", des annotations de ces noyaux permettent d'accélérer les simulations et d'étudier de véritables applications à l'échelle d'un supercalculateur ;
- StarPU-SimGrid est complètement intégré à StarPU et permet de simuler toute application StarPU avec SimGrid sans qu'aucune modification ne soit nécessaire, tout en simulant finement toutes les spécificités des ordonnanceurs de StarPU. Des techniques d'apprentissage permettent de simuler des plateformes composées de plusieurs nœuds multi-cœurs et multi-GPUs ;
- SOMP est un simulateur dédié aux applications OpenMP (modèle de tâche OpenMP) permettant de rejouer des traces obtenues à l'aide de Tikki en prenant en compte les effets de contention mémoire ; BatSim est un simulateur de batch scheduler permettant d'étudier et d'analyser la qualité de l'exploitation globale d'un supercalculateur.

Profilage, génération et analyse de traces d'exécution

MAQAO (Modular Assembly Quality Analayzer and Optimizer) est un outil performant d'analyse et d'optimisation des performances de base, fonctionnant sur des applications binaires exécutables et ce sans qu'aucune recompilation ne soit nécessaire. L'outil applique des analyses dynamiques et statiques sur des structures de haut niveau extraites/reconstruites - boucles et fonctions - pour guider le développeur dans le processus d'optimisation en fournissant des rapports et des conseils synthétiques et exploitables. MAQAO a été conçu de manière extensible en permettant aussi aux utilisateurs de développer facilement des modules d'analyse et d'instrumentation en utilisant une API Lua. Il comprend à la base de nombreux modules déjà prêts à l'emploi. Les trois modules principaux sont :

- LProf (*Lightweight Profiler*) qui est un profileur basé sur l'échantillonnage fournissant la liste des points à examiner (boucles et fonctions) pendant l'exécution du programme ;
- CQA (*Code Quality Analyzer*) qui est un analyseur statique utilisant un modèle de machine pour évaluer la qualité du code assembleur des boucles et fonctions cibles et ce en utilisant des métriques spécifiques telles que celles relatives à l'utilisation des unités arithmétiques et à l'utilisation de la longueur des vecteurs ;
- ONE View qui est un module qui agrège les résultats afin de construire un rapport HTML restituant un large ensemble de mesures de performance clés. Ce rapport comprend des mesures de métriques globales caractérisant la qualité générale du code et une liste de points critiques classés selon leur origine : déroulement de l'exécution parallèle, E/S, gestion mémoire, etc… Pour chaque point, le rapport fournit une description du problème potentiel, une estimation de l'impact sur les performances globales de l'application et des conseils sur la façon d'améliorer les performances par des directives de compilation ou des modifications d'implémentation.

MAQAO peut également générer des rapports de comparaison entre plusieurs exécutions d'une même application avec différents jeux de données ou paramètres d'exécution parallèle.

De manière complémentaire, ViTE est un logiciel de visualisation de traces d'exécution générées par des applications parallèles au sens large. Il s'agit d'un logiciel codé en C++ et utilisant le framework QT et la bibliothèque OpenGL pour afficher des traces de très grands volumes. ViTE est pensé pour être générique et supporte les traces d'applications OpenMP, MPI, et aussi utilisant un support d'exécution. Il suffit pour cela de générer la trace dans les formats plus ou moins standards OTF, OTF2, TAU, ou Pajé. Cet outil permet ainsi de visualiser le bon déroulement de l'algorithme et les choix d'ordonnancement faits a priori, et ce afin de détecter les potentiels problèmes d'inactivité ou de synchronisation qui pourraient ralentir les applications à grande échelle. Des modules de statistiques et de visualisation supplémentaires sont également disponibles pour enrichir le retour fourni à l'utilisateur.

Si la programmation à base de tâches permet généralement d'exploiter efficacement les architectures multi-cœurs dotées d'accélérateurs, il est en général très difficile d'analyser les exécutions qui en résultent car elles sont bien plus complexes que celles provenant d'un modèle de programmation SPMD par exemple. L'ordonnancement est stochastique, les tâches sont très nombreuses et de granularité variable, les points de synchronisation ne sont plus visibles et l'application apparaît souvent comme déstructurée. Une approche possible pour comprendre si l'exécution s'est bien passée et si des optimisations sont possible consiste à intégrer des informations de niveau applicatif dans l'analyse, des techniques d'apprentissage statistique pour modéliser les noyaux de calcul et détecter les irrégularités, et enfin à utiliser des représentations en lien avec l'ordonnancement. Dans ce contexte, un bon exemple est StarVZ. C'est une bibliothèque écrite en R qui fournit ces fonctionnalités et qui permet de construire un workflow d'analyse de performances d'applications HPC à bases de tâches s'exécutant au-dessus de StarPU. Ces analyses fines permettent de détecter des phénomènes non triviaux (problèmes de priorité et d'ordonnancement, de contention mémoire, utilisation sous-optimale des ressources, etc.) et de les corriger en agissant directement au niveau de la configuration du support d'exécution.

Un dernier point concerne la précision et la robustesse numérique des codes parallèles de simulation numérique à grande échelle. Ce point particulier fait partie des compromis délicats à considérer entre performance, consommation énergétique et donc précision numérique. Verificarlo estime la précision numérique de codes applicatifs de grande taille. Il permet également d'optimiser les programmes utilisant une précision mixte et de simuler des formats de virgule flottante personnalisés (important pour le HPDA). Il identifie les lignes d'un programme source affectées par des problèmes numériques grâce à des techniques de localisation des erreurs. Verificarlo s'appuie principalement sur l'arithmétique Monte Carlo pour laquelle du bruit est injecté dans chaque opération en virgule flottante pour modéliser les erreurs d'arrondi ou d'annulation de manière stochastique. L'outil instrumente le code au moment de la compilation, par le biais de passes LLVM spécifiques, sans qu'il soit nécessaire de modifier le code source du programme. Cette facilité d'implémentation a permis à Verificarlo d'analyser et d'optimiser plusieurs grands codes de simulation.

LES BIBLIOTHÈQUES DE SOLVEURS D'ALGÈBRE LINÉAIRE, DE PARTITIONNEMENT ET DE GESTION DE MAILLAGES

Les solveurs d'algèbre linéaire et aux valeurs propres sont souvent des briques de base critiques dans les codes de simulation numérique. Le coût opératoire, la robustesse numérique ainsi que la scalabilité des méthodes algorithmiques mises en œuvre dans les bibliothèques numériques associées font encore l'objet actuellement de nombreux travaux de recherche et de développement. Au-delà de la recherche des "meilleures" méthodes possibles, l'utilisation incontournable à l'avenir d'accélérateurs de calcul engendre une réflexion/refonte des algorithmes avec une gestion des données et une utilisation fine de la granularité de calcul qui n'est pas triviale, et il n'est pas étonnant que ces algorithmes soient des candidats préférentiels pour évaluer et faire progresser les modèles de programmation parallèle pour passer à l'échelle sur les futures machines hétérogènes.

Dans le document de synthèse rédigé par le groupe de travail SUN, on retrouvera un **tableau citant un grand nombre de solveurs open-source** avec à chaque fois un lien vers les sites web de référence. Dans ce tableau, qui assez complet mais bien sûr pas exhaustif, on retrouvera un certain nombre de caractéristiques méthodologiques (méthodes de résolution, types de matrices traitées et de précisions calcul, utilisation de techniques de compression basées sur la notion de rang faible), de caractéristiques du parallélisme mis en œuvre (langages de programmation utilisé et implémentations mémoire partagée et/ou distribuée, utilisation d'accélérateurs de calcul, mise en œuvre sur support d'exécution). A noter que les méthodologies développées conduisent à une vision assez naturellement hiérarchique. Ainsi les solveurs hybrides basés sur une décomposition de domaines et une approche complément de Schur utilise des solveurs directs pour matrices creuses pour traiter l'intérieur des sous-domaines et des approches itératives pour traiter les interfaces de ces sous-domaines. Et les solveurs directs creux font essentiellement du calcul par blocs denses en utilisant des noyaux de calcul BLAS, éventuellement accélérés, que l'on retrouve aussi dans les solveurs pour matrices denses. Cette structuration hiérarchique correspond en outre à différents niveaux de granularité de calcul qu'il est fondamental d'exploiter finement sur les architectures hiérarchiques hétérogènes actuelles et futures.

De manière complémentaire, il existe un certain nombre d'environnements (*toolkits*) assez complets organisés comme des bibliothèques de briques logicielles comme celles indiquées ci-dessus et qui permettent le développement d'applications complexes via des enchaînements de ces briques logicielles tout en proposant aussi une gestion des données et du parallélisme à différents niveaux. On peut citer **PETSc** ou **Trilinos** comme exemples bien connus. Dans certains cas, ces environnements proposent aussi via un DSL une méthodologie haut niveau permettant à un utilisateur de décrire son EDP et son modèle d'éléments finis pour l'interpolation et d'interfacer cela avec des solveurs parallèles de son choix. Cette approche est souvent orientée applications et propose un certain nombre d'outils spécifiques à des domaines de la physique comme la CFD, l'interaction fluides-structures, l'électromagnétisme, etc... FreeFEM++ et Feel++ sont de bons exemples de tels environnements.

Concernant l'équilibrage de charge, le partitionnement des structures de données complexes et leur distribution sur les entités de calcul est aussi une problématique extrêmement critique surtout sur des plates-formes de grande taille. D'autre part, la nécessaire intégration de l'outil de partitionnement dans la chaîne globale de calcul qui se doit être entièrement parallèle constitue une difficulté supplémentaire car les algorithmes à mettre en œuvre pour cela posent souvent des problèmes difficiles de parallélisation.

Les outils de partitionnement permettent de trouver des couplages faibles entre des sous-parties de problèmes modélisés sous forme de graphes ou d'hypergraphes, afin de les traiter de façon relativement indépendante et selon une méthodologie « diviser pour résoudre ». Ces outils sont notamment utilisés pour répartir la charge d'un calcul sur un ensemble d'éléments de traitement. Dans ce cadre, la prise en compte de la topologie cible conduit à un problème plus général, s'apparentant au *placement* d'un graphe source dans un graphe cible. Au vu de la taille des problèmes considérés, il s'agit toujours d'heuristiques. L'adéquation d'un outil à un problème donné dépend de la fonction objectif à optimiser. Celles-ci peuvent être extrêmement diverses et conduire à des algorithmes très différents. Notamment, le besoin de représenter exactement les interactions entre entités (ex. : les éléments d'un maillage) peut conduire à délaisser le modèle de graphe au profit du modèle d'hypergraphe, structurellement plus riche mais bien plus coûteux à manipuler. Parmi les caractéristiques recherchées des outils de partitionnement et de leurs fonctions et objectifs, figurent notamment :

- La présence de plusieurs poids par sommet (équilibrage de calculs multi-phases) ;
- La production de partitions des arêtes ou des sommets (cette dernière fonctionnalité dite de « séparation » est utilisée pour la renumérotation des inconnues pour les solveurs directs de matrices creuses et aussi pour la décomposition de domaines) ;
- La gestion des « sommets fixes » (pré-affectation de certains sommets, par exemple pour des nœuds d'i/o) ;
- Le partitionnement « rectilinéaire » 2d de structures de matrices ;
- L'existence de versions parallèles à mémoire partagée et/ou distribuée.

Il existe de nombreux outils, à des stades de développement et de maintenance très divers, et le document de synthèse du groupe de travail SUN en cite un certain nombre dont les plus connus sont METIS (bibliothèque d'outils de partitionnement de graphes de d'hypergraphes séquentiels et parallèles développés à l'université du Minnesota), SCOTCH (partitionneur et placeur de graphes séquentiels et parallèles - mémoire partagée et distribuée - servant en particulier à la renumérotation de graphes) et ZOLTAN (Bibliothèque de calcul scientifique développée à Sandia qui encapsule de nombreux outils disponibles et propose aussi ses propres versions de partitionneurs parallèles de graphes et d'hypergraphes).

Le dernier point de cette section concerne les aspects maillages qui jouent un rôle central pour la simulation numérique moderne. Il existe aujourd'hui de nombreux travaux dans ce domaine et les directions essentielles sont :

- La modélisation géométrique de qualité et ce couplé avec des outils de CAO ;
- La conception d'algorithmes efficaces pour la génération de maillages de taille de plus en plus grande avec des capacités à faire de l'adaptation et du raffinement de maillage, à générer des maillages pour faire de l'ordre élevé et à gérer des maillages en mouvement associés à des géométries en mouvement ;
- La capacité à obtenir une certification de la solution du calcul avec des maillages convergés numériquement via des techniques d'estimation et de correction d'erreurs ;
- La visualisation avancée des maillages produits et des solutions calculées ;
- La mise en œuvre d'un pipeline complet permettant d'enchaîner toutes les étapes et exploitant les architectures parallèles.

Le document de synthèse du groupe de travail SUN cite un certain nombre d'outils qui répondent de manière plus ou moins effective à ces problématiques, mais c'est un sujet qui est encore dans le domaine de la R&D. Ces outils sont par ailleurs souvent supportés par des consortia entre recherche académique et partenaires industriels.

LES BIBLIOTHÈQUES DE TRAITEMENT DE DONNÉES, DE VISUALISATION ET LES OUTILS D'APPRENTISSAGE

La simulation numérique moderne a mis au-devant de la scène l'exploitation des données (on parle souvent de *data intensive computing*) que ce soit en termes d'acquisition de données externes, par exemple en provenance de grands instruments, ou de traitement, aussi bien pour ces données externes que pour des données computationnelles générées en cours de simulation. L'intégration dans le processus global de simulation de fonctionnalités de type *data analytics* et *deep learning* en particulier implique des évolutions sensibles qui ont un fort impact sur le design et la conception des modèles de calcul et aussi sur le fait qu'il faut faire cohabiter efficacement des piles logicielles HPC traditionnelles et HPDA plus récentes sur des architectures qui sont de fait hétérogènes de par la présence d'accélérateurs. On parle de solutions matérielles et logicielles « convergées ».

Dans ce contexte, les **interfaces** permettent de standardiser l'instrumentation des codes de simulation pour l'extraction et l'injection de données complexes à des fins de stockage, de manipulation, d'analyse et de visualisation. Un bon exemple est PDI (Parallel Data Interface) qui est une interface unifiée offrant accès à de nombreuses bibliothèques de stockage ou de traitement de données via son système de greffons comme HDF5, NetCDF, SIONlib, FlowVR, FTI, Sensei et même via du code utilisateur dans un langage qui n'a pas à correspondre à celui du code principal (C, C++, Fortran, Python...).

De la même manière, la **gestion performante et passant à l'échelle des entrées/sorties (I/O)** est critique et il existe de nombreux outils pour écrire et lire des données de manière efficace et aussi pour monitorer le comportement d'une application au regard de son utilisation des I/O. On trouve cela en particulier chez ALTAIR avec des suites logicielles comme Breeze et Mistral qui permettent entre autres de faire de la télémétrie d'applications en direct et du profilage précis pour localiser les problèmes d'I/O, résoudre les problèmes de dépendances de fichiers et de réseau, ...

En termes de **visualisation scientifique**, VTK et les outils associés (Paraview, Visit) sont les plus connus. Ils supportent un grand nombre d'extensions permettant de nombreux usages (Catalyst, libSim, Damaris, Ascent) et permettent aussi la visualisation *in situ*. A noter que Sensei est une interface commune à Paraview et Visit pour l'instrumentation des codes de simulation permettant l'extraction de données pour la visualisation in situ.

La possibilité de réaliser du **traitement in situ** data-flow (pour la visualisation ou du traitement relevant du HPDA) repose sur la capacité à réaliser de manière efficace et à grande échelle des couplages à grain fin asynchrones entre codes de simulation parallèles et des codes de traitement de données qui sont aussi eux-mêmes parallèles. Une utilisation effective de ce genre d'outils repose aussi sur la capacité d'avoir un cadre non intrusif (autant que faire se peut) au niveau des codes de simulation et qui est basé sur l'exploitation de workflows efficaces et flexibles (souvent en utilisant des scripts Python). De bons exemples sont DAMARIS et FlowVR qui sont basés en particulier sur la possibilité d'utiliser des cœurs ou des nœuds dédiés au traitement et à la visualisation des données *in-situ* (grâce aux cœurs dédiés) et *in-transit* (grâce aux nœuds dédiés).

Les outils de traitement de données parallèles basés sur Python gagnent aujourd'hui fortement en popularité, car ils parviennent à offrir une « parallélisation transparente » grâce à des API d'analyse de données de haut niveau comme Numpy, Panda ou Scikit-learn. Il existe aussi des environnements de programmation distribuée générique comme Dask basé sur une représentation à base de graphes de tâches et qui supportent ces API Python de haut niveau.

L'exécution d'**ensembles de runs indépendants** (pour faire de l'analyse de sensibilité paramétrique par balayage de paramètres) est de plus en plus courante en HPDA et cela est naturellement bien adapté au calcul exascale (cadre *embarrassingly parallel*). Un certain nombre d'environnements logiciels sont dédiés au traitement de tels modèles de calcul (y compris pour l'analyse de données et le pilotage du processus d'exploration), certains s'appuyant sur des fichiers pour l'échange de données et d'autres comme Melissa proposant un traitement des données en ligne (traitement in situ pour les ensembles de runs).

Parmi les méthodes et outils relatifs à **l'apprentissage statistique**, nous pouvons discerner deux catégories principales, les bibliothèques d'apprentissage machine comme Scikit-Learn qui s'appuient sur des outils comme Dask pour la parallélisation, et les logiciels d'apprentissage profond qui prennent généralement en charge le parallélisme de données et parfois celui induit par les modèles, soit en interne, soit par le biais d'extensions (comme l'extension MPI Horovod pour le parallélisme de données). Certains réseaux neuronaux, en particulier ceux dérivés des architectures Transformeur, peuvent être de très grande taille et nécessiter des milliers de GPU pour l'apprentissage, ce qui en fait de bons candidats pour le calcul exascale. Vient ensuite le cas spécifique de l'apprentissage par renforcement qui combine l'exécution simultanée de plusieurs solveurs qui produisent des données pour un apprenant (un réseau neuronal profond). Une dernière catégorie concerne la recherche d'hyperparamètres, aussi appelée auto-ML. Il s'agit de s'appuyer sur un balayage de paramètres, guidé par l'apprentissage par renforcement ou des algorithmes génétiques pour les approches les plus classiques, pour trouver une architecture neuronale optimisée.

Scikit-learn est l'une des bibliothèques les plus utilisées pour l'apprentissage automatique, en particulier sur des données tabulaires. Elle privilégie la facilité d'utilisation et implémente des centaines de modèles classiques d'apprentissage automatique avec une API de haut niveau. Elle est également fournie avec des utilitaires d'ajustement des paramètres, d'inspection des modèles et de validation, d'extraction d'informations et de la valeur des données. À ce jour, elle n'exploite pas les accélérateurs matériels, mais une prise en charge est prévue via des *back-ends* de calcul tels que Jax et CuPy. Elle ne prend pas en charge l'apprentissage profond et doit plutôt être utilisée en combinaison avec des modèles pré-entraînés. Ses modèles, comme par exemple celui basé sur les *gradient-boosted trees*, sont à la pointe de la technologie pour les données tabulaires et fournissent en général des solutions simples et performantes pour les applications avec des données de taille moyenne. Scikit-learn prend en charge la parallélisation grâce à la bibliothèque Joblib, qui peut déléguer la gestion des tâches à Dask et à RLib pour les configurations distribuées.

L'apprentissage des réseaux neuronaux profonds nécessite des implémentations efficaces de noyaux de calcul générique en grande dimension sur les tenseurs (convolution, multiplication, normalisation, ...), ainsi que de la dérivée de ces noyaux. TensorFlow et PyTorch fournissent des interfaces Python pour de telles implémentations (basées sur CUDA) et un mécanisme de différenciation automatique qui permet de calculer la dérivée de compositions de noyaux. Le processus d'apprentissage est exprimé très simplement via des interfaces adaptées, Keras pour TensorFlow et Lightning pour PyTorch.

Ces environnements fournissent également des capacités automatiques d'utilisation de **précision mixte** pour accélérer les calculs qui ne nécessitent pas une précision élevée. L'apprentissage en parallèle des données est disponible, avec un modèle de communication de type BSP (tous les nœuds effectuent une étape d'apprentissage sur un lot d'entrées, suivie d'une opération de communications collectives de type *all reduce*). Enfin, ces environnements fournissent une compilation XLA (Accelerated Linear Algebra) dite *just-in-time*, permettant de générer des noyaux GPU/TPU optimisés spécifiques à l'application de l'utilisateur.

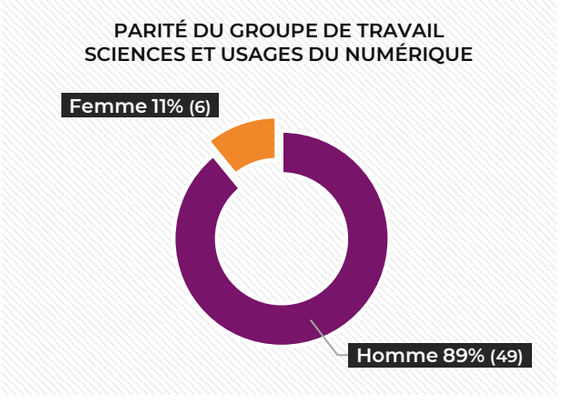
LES SOLUTIONS DE DÉPLOIEMENT DE PILES LOGICIELLES ET DE GESTION DE DONNÉES

On parle ici de solutions pour packager facilement un ensemble de logiciels afin de s'assurer de la disponibilité de ces logiciels à la fois sur les machines accessibles à distance (niveau européen, national, régional) ainsi que sur la machine personnelle de l'utilisateur. Dans ces outils, on trouve des technologies basées sur les machines virtuelles, les containers (Docker, Singularity), ainsi que les outils de modification des environnements du type "environnement module" ou NIX & GUIX. Le contexte d'utilisation de ces technologies de déploiement correspond aux besoins suivants :

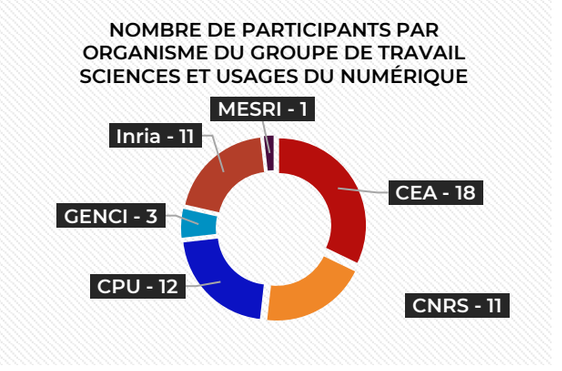
- Assurer la **disponibilité** de différentes versions du même logiciel et permettre le chargement d'une version donnée en s'assurant de son bon fonctionnement ainsi que de sa cohérence avec les dépendances ;
- Pour des raisons de **reproductibilité**, pouvoir démarrer la même pile logicielle dans quelques années ou sur une autre machine ;
- **Réduire le temps nécessaire aux installations** en mutualisant les efforts, afin que les mêmes packages soient disponibles à la fois sur les machines européennes, nationales, régionales et même sur la machine personnelle de l'utilisateur. Des sites de dépôts partagés et la création d'une communauté dédiée au domaine sont souhaitables.
- **Prendre en compte l'avènement de python** dans les contextes du HPC et surtout de l'IA.

Si les logiciels utilisés sont souvent les mêmes, ceux-ci utilisent potentiellement des matériels différents et donc des briques logicielles de base qui sont fondamentalement différentes, et la difficulté se situe bien à ce niveau-là. Dans le document de synthèse rédigé par le groupe de travail SUN, on trouvera une présentation rapide des environnements Singularity, Environnement modules, Spack, Easybuild, NIX et GUIX-HPC qui ont atteint un niveau de maturité reconnu.

Parité et organismes présents dans le groupe de travail Sciences et Usages du Numérique



Sur le graphique « **Parité du Groupe de Travail Sciences et Usages du Numérique** », les femmes représentent environ 12% des participants.



Dans ce GT-SUN, les organismes CEA, CNRS, CPU et Inria sont équitablement représentés (graphique « nombre de participants »). La communauté SUN est très présente dans les organismes CEA, CNRS, France Universités et Inria : ce groupe de travail est donc représentatif en termes de participants et de répartition par organisme.

CONCLUSION

Le travail de recensement a permis de mettre en exergue 5 recommandations transverses aux 6 GTs qu'il faudra intégrer à la réponse française à l'AMI Exascale et de façon durable dans les communautés applicatives et du numérique (CEA, CNRS, France Universités et Inria).

RECOMMANDATIONS TRANSVERSES AUX 6 GTS

- **Veiller à l'empreinte environnementale du Projet Exascale France et de ses applications**
- **Renforcer les équipes et les communautés avec des moyens humains pour assurer la transition vers l'exascale et anticiper l'avenir**
- **Consolider les liens entre les équipes de Sciences et Usages du Numérique (SUN) et les équipes applicatives**
- **Assurer l'équilibre entre sécurité et facilité d'accès aux supercalculateurs**
- **Prendre en compte les problématiques liées aux données observationnelles ou expérimentales et au déploiement des chaînes de traitement**

Veiller à l'empreinte environnementale du Projet Exascale France et de ses applications

Le projet Exascale France se doit d'intégrer le suivi de son empreinte environnementale dans sa stratégie, y compris à une granularité qui permette de redistribuer cette empreinte entre les différentes applications utilisatrices des ressources et ainsi de favoriser des pratiques efficaces voire sobres.

En premier lieu il s'agira de repérer les indicateurs permettant de décrire l'empreinte environnementale des activités du projet. Cela concernera les analyses en cycle de vie (incluant les étapes d'extraction, de fabrication, de transport, d'utilisation et de fin de vie) des différents matériels, en lien avec les constructeurs, les empreintes de l'usage des matériels, en tenant compte de leur durée de vie, de leur taux de renouvellement et d'autres indicateurs à retenir en fonction de l'état de l'art.

Dans un deuxième temps il faudra renseigner régulièrement ces indicateurs, les faire connaître et les communiquer, globalement et en détail, aux utilisateurs en séparant les différents services de type ressources calcul, espaces de stockage, utilisation des réseaux.

Au niveau applicatif, l'utilisation d'outils de mesure de la consommation électrique permettra d'analyser le coût de différentes parties du code au niveau utilisateur ou plus proche du matériel (calcul, accès mémoire des calculs, accès réseau interne des calculs, ...).

Dans le même temps, les leviers d'actions permettant de réduire cette empreinte seraient à étudier, tels que :

- Durée de vie des machines
- Comparaison des architectures des cœurs de calcul pour un code donné
- Comparaison des coûts des algorithmes sur une machine donnée et sur différentes machines
- Comparaison des stockages de résultats par rapport à des simulations à refaire tourner à la demande
- Description des résultats des simulations et diffusion pour études d'autres équipes, y compris pluridisciplinaires, en lien in fine avec la science ouverte
- Étude sur les leviers de sobriété

Enfin, les bénéfices socio-environnementaux attendus et obtenus grâce aux projets devraient être renseignés et suivis au fil du temps.

Renforcer les équipes et les communautés avec des moyens humains pour assurer la transition vers l'exascale et anticiper l'avenir

Les travaux des GTs conduisent tous à un même constat : il est nécessaire de renforcer les équipes applicatives pour assurer un passage à l'exascale des applications françaises. Ce renfort doit à la fois concerner des postes permanents (CDI) et des postes temporaires (CDD).

L'adaptation des codes, dans le cadre de la machine exascale, met en évidence plusieurs défis liés aux problématiques de ressources humaines :

- La montée en compétence sur de nouveaux usages, à savoir l'IA et le HPDA. Ces nouveaux usages ne peuvent être considérés comme « optionnels », il s'agit d'usages qui peuvent à la fois améliorer l'efficacité de l'application scientifique, mais également fournir de nouveaux modèles et donc conduire à des avancées scientifiques majeures. Les communautés ont toutes identifié des besoins liés à l'analyse de données et à l'IA. Ces compétences sont très différentes de celles des métiers du HPC.

- Afin de tendre vers de nouveaux paradigmes de programmation, il faut favoriser l'intégration de compétences multidisciplinaires dans les équipes (informatique, mathématiques appliquées, domaine applicatif concerné). Cela doit passer à la fois par des ressources pérennes, avec un renforcement également des ressources temporaires.

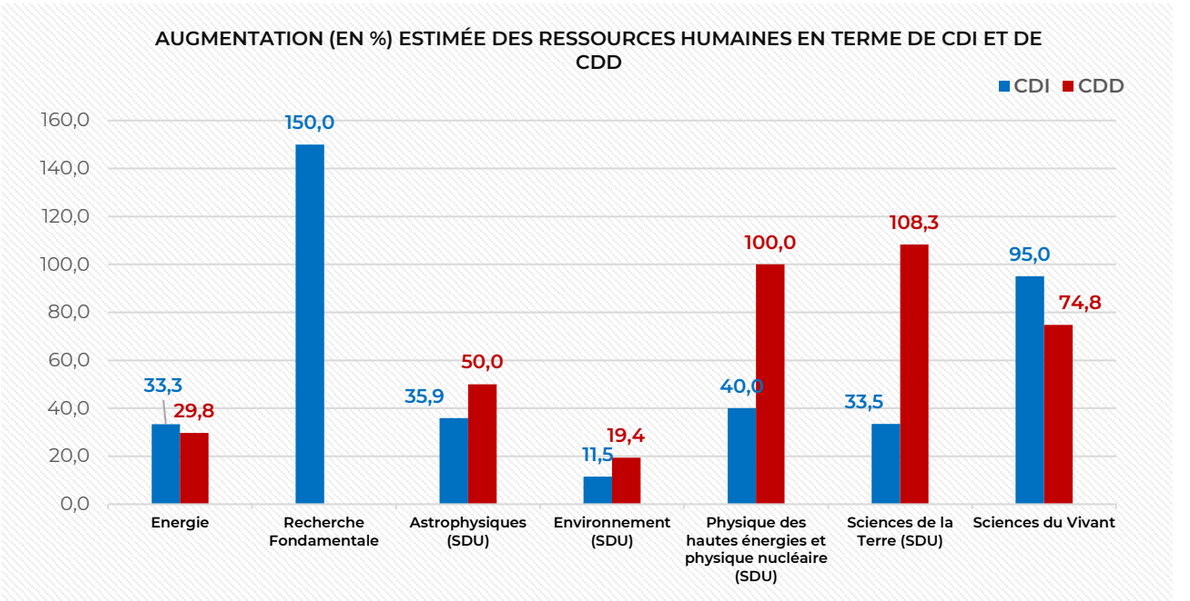
EuroHPC impose des usages IA, HPDA et HTC sur les futurs calculateurs exascales, besoins qui sont déjà largement présents à ce jour au sein des 6 GTs. Au-delà d'un aspect scientifique, il y a un enjeu de compétitivité internationale, avec la prise en compte des règles strictes fixées par l'appel à manifestation d'intérêt EuroHPC. Il reste difficile de donner des projections sur des usages que l'on pressent comme indispensables mais qui ne sont pas, au moment de la rédaction de ce document, en mode production pour toutes les communautés ayant contribué à ce recensement. Cette investigation est donc à continuer auprès des organismes associés à GENCI, et ne doit pas se limiter à l'échéance du Projet Exascale France, mais se poursuivre bien au-delà.

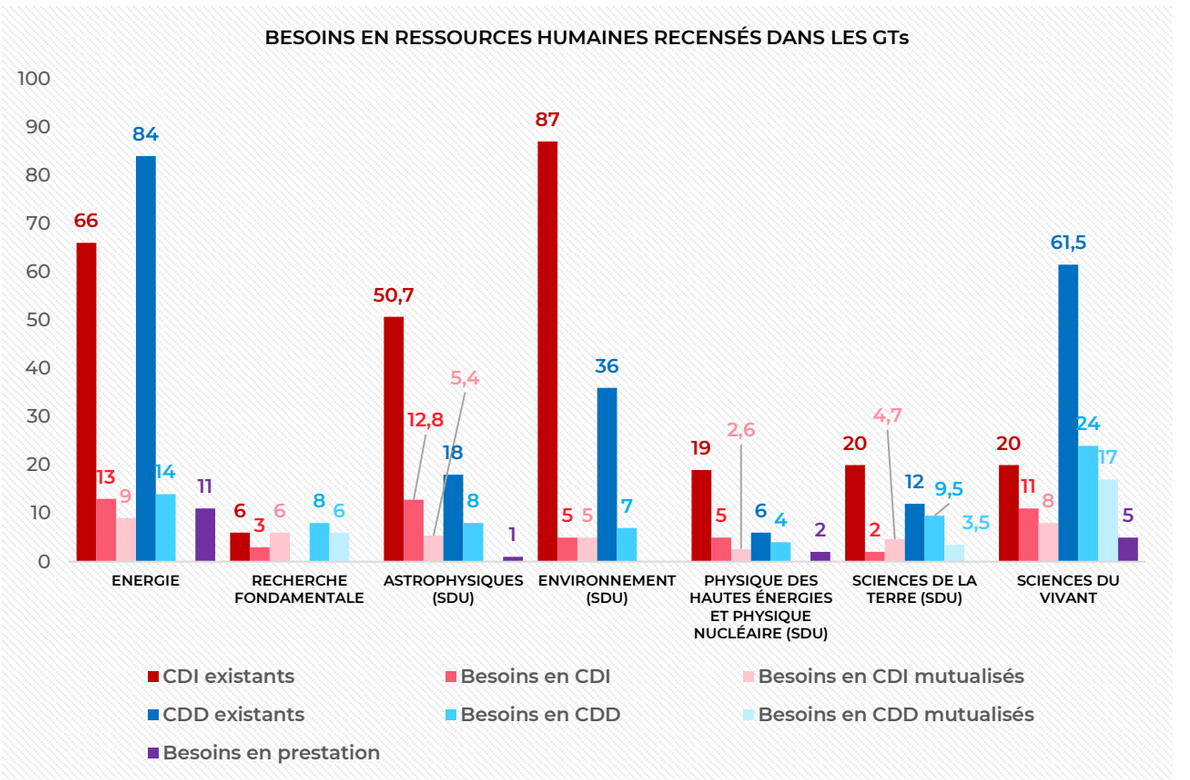
Le SP3 redonne ci-dessous une figure récapitulant les recommandations en terme d'augmentation des ressources humaines pour chaque groupe de travail. Par ailleurs, le SP3 propose, en annexe, une vue rapide et synthétique des initiatives similaires menées au sein des grandes puissances mondiales dans le secteur du numérique (Etats-Unis, Japon, Chine notamment).

Pour rappel, les GTs Industrie du Futur et Transition Numérique (IFTN) et Sciences et Usages du Numérique (SUN) n'ont pas fourni de chiffres sur les besoins RH ; aussi, leur absence sur la figure ne signifie pas que ces GTs n'ont pas besoin de ressources, mais simplement que ceux-ci n'ont pas été renseignés. Il conviendra de poursuivre ce travail au sein des organismes ayant contribué à ce livrable afin d'ajuster les données recensées par le SP3 et s'assurer de la bonne représentativité de chaque communauté.

Le renforcement des équipes applicatives pose un double challenge :

- Idéalement, les ressources humaines des équipes applicatives devraient être renforcées le plus tôt possible. Cependant, une partie des calculateurs EuroHPC (notamment les calculateurs de classe pétascale) sont déjà livrés et en production, tandis que les calculateurs de classe pré-exascale sont en cours de déploiement. Pour ces deux classes de supercalculateur, les architectures accélérées sont majoritaires. Il en est de même pour les calculateurs nationaux. Pour les applications très consommatrices en temps et en ressources de calcul, le risque d'un usage peu efficace des ressources de calcul disponibles faute d'adaptation des codes à ces architectures est donc bien réel. En poussant le raisonnement un peu plus loin, cela peut signifier, pour certaines applications (et donc communautés de recherche), un ralentissement de leurs activités, et donc une perte de compétitivité considérable, ce à court terme (moins de 5 ans).
- Les compétences demandées dans le secteur du numérique haute performance sont rares. D'une part parce que la formation initiale existante ne permet pas de satisfaire toute la demande, d'autre part, parce que les organismes de recherche peinent à être compétitif dans ce secteur hautement stratégique. La reconnaissance (scientifique et salariale) des compétences dans les sciences et usages du numérique n'est pas suffisante dans le secteur académique. A ceci s'ajoute le manque d'attractivité des postes (problème de la pérennité des postes, manque de diversité et de parité). En conséquence, les talents sont absorbés par d'autres acteurs du numérique (à savoir les entreprises privées du secteur et les GAFAM).


AUGMENTATION (EN %) ESTIMÉE DES RESSOURCES HUMAINES EN TERME DE CDI ET DE CDD
CDI
CDD
160,0
140,0
120,0
100,0
80,0
60,0
40,0
20,0
0,0
33,3
29,8
150,0
35,9
50,0
11,5
19,4
40,0
100,0
33,5
108,3
95,0
74,8
Energie
Recherche Fondamentale
Astrophysiques (SDU)
Environnement (SDU)
Physique des hautes énergies et physique nucléaire (SDU)
Sciences de la Terre (SDU)
Sciences du Vivant


BESOINS EN RESSOURCES HUMAINES RECENSÉS DANS LES GTs
100
90
80
70
60
50
40
30
20
10
0
66
13
9
84
14
11
6
3
6
8
6
50,7
12,8
5,4
18
8
1
87
5
5
36
7
19
5
2,6
6
4
2
20
2
4,7
12
9,5
3,5
20
11
8
61,5
24
17
5
ENERGIE
RECHERCHE FONDAMENTALE
ASTROPHYSIQUES (SDU)
ENVIRONNEMENT (SDU)
PHYSIQUE DES HAUTES ÉNERGIES ET PHYSIQUE NUCLÉAIRE (SDU)
SCIENCES DE LA TERRE (SDU)
SCIENCES DU VIVANT
CDI existants
Besoins en CDI
Besoins en CDI mutualisés
CDD existants
Besoins en CDD
Besoins en CDD mutualisés
Besoins en prestation

Consolider les liens entre les équipes de SUN et les équipes applicatives

Le SP3 a dès le départ identifié, dans ce travail de recensement, la nécessité de rapprocher les équipes applicatives des équipes du GT SUN. Ce lien est fondamental pour garantir un soutien adéquat aux équipes applicatives et une intégration à long terme des outils et des avancées développées par les équipes SUN dans les usages du numérique. Renforcer ce lien passe par plusieurs actions, comme celle de construire une communauté « Computational and Data Science ». Cette communauté est en partie identifiée grâce au travail du SP3 et à l'aide précieuse des participants aux GTs. Il convient néanmoins de créer une structure d'animation et de partage d'information qui rassemblera à la fois les équipes applicatives et les équipes transverses (SUN et RF). Le SP3 poursuivra ce travail dans un cadre associatif.

Assurer l'équilibre entre sécurité et facilité d'accès aux supercalculateurs

Du point de vue de l'usage applicatif (académique et industriel), la machine exascale devra être accessible dans des conditions d'exploitation en adéquation avec les pratiques et les contraintes des communautés scientifiques. Les points suivants sont critiques pour l'usage du calculateur :

- Imposer une adresse fixe aux utilisateurs rend impossible l'accès dans un certain nombre de cas. Si cette contrainte apparaît comme une bonne pratique de sécurité, elle rentre en collision avec les conditions d'usages de certains industriels (e.g. Renault) qui ne peuvent mettre en place une gestion des adresses IP de cette manière. Ces limitations impactent également les équipes des organismes académiques dans la mesure où elles sont amenées à collaborer très régulièrement avec des industriels. Le constat actuel est que certaines équipes préfèrent se tourner alors vers des calculateurs hors de France (au mieux européens, au pire hors Europe) uniquement pour des raisons administratives d'accès.
- Des équipes applicatives font également le constat de problèmes d'accès aux calculateurs en fonction de la nationalité et/ou de la localisation de leurs membres. La conséquence est la même que précédemment, à savoir que ces équipes travaillent alors sur des calculateurs non nationaux.
- Vers une uniformisation des interfaces : les utilisateurs font face à des calculateurs qui proposent des interfaces d'utilisation différentes (commande d'ordonnanceur par exemple), mais également à la gestion de comptes multiples selon les conditions d'obtention des heures allouées (compte européen versus national par exemple).

Prendre en compte les problématiques liées aux données observationnelles ou expérimentales et au déploiement des chaînes de traitement

LA LOGISTIQUE DES DONNEES, INTEGRATION DANS LES WORKFLOWS

Une partie des usages de la future machine exascale s'inscrira dans des workflows applicatifs. Les thématiques telles que les jumeaux numériques, la ville intelligente, l'analyse de données expérimentales et de grands instruments, etc. reposent sur la composition de traitements/analyses de données et de modèles numériques. Les données et produits d'observation utilisés dans ce cas sont exogènes à la simulation et issues d'équipements scientifiques (satellites, systèmes d'observation, etc.) ou encore de réseaux de capteurs.

Les masses de données issues des jumeaux numériques doivent pouvoir être réinjectées et distribuées dans des environnements périphériques à la machine exascale de manière à alimenter des processus de R&D pour accélérer l'innovation ou pour constituer un élément d'aide à la décision. La manière dont ces flux de données seront accessibles et utilisables par la future machine influencera largement son utilisation. Par ailleurs, certains industriels remarquent que les prétraitements des données (sélection, conditionnement, assemblage ...) deviennent de plus en plus coûteux que l'étape de calcul (simulation, optimisation, Machine Learning ...) à proprement parler.

ARTICULATION AVEC LES INFRASTRUCTURES CLOUD

La question de l'articulation avec les infrastructures Cloud (dans notre contexte essentiellement orienté données) commerciales (e.g. OVH) ou publiques (e.g. Gaia-X -France) doit aussi faire partie de l'environnement de l'infrastructure exascale.

UTILISATION DE L'IA ET DU HPDA

L'IA est amenée à jouer un rôle grandissant dans le cadre des 6 piliers proposés par le SP3. De plus, la machine exascale devra assurer le support à l'analyse/réduction de très gros volumes de données qui, entre autres, sont issues de flux continus et/ou temps réel (e.g. Data-Terra et Gaia-Data).

ARCHITECTURE DES CODES ET VENDOR LOCK-IN

Les codes d'importance pour l'industrie ne sont pas architecturés pour faciliter la migration vers la nouvelle génération de systèmes. Les besoins de personnels maîtrisant les techniques d'optimisation de codes sur architectures accélérées sont sur le chemin critique. Cependant, si des connaissances génériques sur l'optimisation de code sont nécessaires, elles doivent s'articuler avec les compétences métiers.

Par ailleurs, dans des contextes académiques et industriels contraints, il n'est pas rare d'être dépendant de solutions des éditeurs de certaines briques logicielles, limitant leur déploiement sur certaines architectures spécifiques.

ACCESSIBILITÉ DES RESSOURCES

Le transfert/logistique de données entrant et sortant du système doit être facilité en particulier en autorisant la mise en œuvre d'API. Il s'agit aussi de répondre à des contraintes temps-réel ou de flux de données nécessaires.

CONCLUSION DE CETTE ETUDE

Vers de nouveaux usages et de nouveaux paradigmes : une simulation n'est plus une exécution monolithique mais une succession de traitements pouvant être HPC, et/ou IA, et/ou HPDA, et/ou HTC.

Une simulation numérique (peut-être devrait-on plutôt parler d'une expérience numérique) est donc maintenant une chaîne de traitements divers, faisant intervenir plusieurs composants (grands instruments, supercalculateurs peta-exaflopiques, traitements de données, etc...).

Ce constat impose de se questionner sur la limitation des usages actuels des supercalculateurs.

Initié par le SP3, un travail d'analyse de l'existant très important a été conduit par près de 230 experts sur le premier semestre 2021. Organisés en groupes de travail thématiques sur les applications et le savoir-faire informatique, ces experts ont permis d'identifier plus de 80 codes existants et d'analyser leur potentiel de pérennisation ces prochaines années, en particulier en considérant leurs besoins matériels (temps CPU, GPU, et mémoire).

Le SP3 a analysé l'ensemble des fiches soumises. Ces fiches ont mis en évidence que :

- Tous les piliers applicatifs font face à une diversification des usages. Ce constat draine plusieurs problèmes, à la fois de capacité et de souplesse des structures de calcul, mais aussi de formation et d'aide aux utilisateurs pour la prise en main effective de ces nouveaux usages ;
- Une majorité des codes actuellement en production ne seront pas en mesure de « passer » à (et dépasser) l'exascale si les ressources humaines ne sont pas renforcées ;
- Dans le cadre de l'exascale, il ne s'agit pas d'un simple « portage » des codes, mais pour certains d'entre eux (actuellement en production et indispensables à la science) d'une totale refonte. C'est dans ce contexte que les chercheurs (académiques et industriels) se sont massivement mobilisés pour répondre à l'appel du SP3.
- Il existe une attente et une motivation de la part de la communauté « Computational and Data Science » rencontrée lors de ce travail. Le SP3 a pris conscience d'un besoin de mise en relation et de mise en commun des compétences. La mixité également entre le GT SUN transverse, et les GT applicatifs a été très bénéfique. Une telle structure de mise en commun doit être pérennisée.

La souveraineté scientifique, européenne et nationale, dépend de notre capacité à influencer et à développer les applications (académiques et industrielles) qui soient propres à nos priorités

scientifiques et à nos axes de recherche. Ce constat est à étendre à toute la chaine de développement d'une application : cela inclut donc les middlewares, les bibliothèques numériques, les interfaces de programmation, etc... Dans le cadre de l'exascale, la souveraineté « numérique » et scientifique ne pourra être maintenue que par un travail collectif et massif des acteurs de la recherche (académique et industrielle) afin de soutenir les équipes applicatives dans ce nouvel écosystème.

En conclusion, le SP3 continuera, sous réserve de l'accord des directions du CEA, du CNRS, de l'Inria, des Universités et des grandes écoles, d'affiner le recensement proposé dans ce document. Il sera ensuite nécessaire d'identifier, à l'aide des données fournies par le travail du SP3, des applications prioritaires pour l'exascale, qui bénéficieront ainsi d'un accompagnement humain et matériel renforcé. Une application faisant partie d'un écosystème scientifique, cet arbitrage peut donc se concevoir comme la mise en avant de secteurs scientifiques prioritaires dans le cadre de l'exascale.

En accord avec les directions des organismes associés à GENCI, le SP3 poursuivra ces travaux de construction pérenne et d'animation de la communauté « Computational and Data Sciences » afin d'assurer une bonne prise en compte de la voix de cette communauté. Il est indispensable que le lien entre cette communauté (académique et industrielle) et les centres de calculs, les équipes SUN et les instances décisionnaires soit renforcé et visible : cela permettra une meilleure prise en compte des besoins des communautés identifiées par le SP3.

REMERCIEMENTS

Le SP3 remercie très chaleureusement tous les participants aux groupes de travail qui ont mobilisé plus de 230 personnes et nous remercions chacune d'entre elle pour leur contribution, leurs efforts et leur soutien.
Ce travail n'aurait pu aboutir sans la mobilisation de la communauté « Computational Science » et « Data Science ».

Le SP3 tient à remercier tous les animateurs de chaque groupe de travail : leur dévouement et leur motivation ont été un point clé du succès des groupes de travail.

Enfin, le SP3 remercie GENCI, qui nous a apporté un soutien logistique qui a permis le succès de ces travaux. L'aide et le soutien de GENCI tout au long de cette réalisation ont été déterminants.

Jean-Paul AMPUERO
Gabriel ANTONIU
Dominique AUBERT
Ludovic AUBRY
Édouard AUDIT
Nicolas AUNAI

Marc BAADEN
Mohd-Afeef BADRI
Rémi BARON
Corinne BEAL
Olivier BEAUMONT
Arnaud BECK
Marina BECOULET
Rachid BENSHILA
Marjorie BERTOLUS
Édouard BERTRAND
Guillaume BESLON
Gérard BIAU
Julien BIGOT
Quentin BLETERY
Benoit BLOSSIER
François BODIN
France BOILLOD-CERNEUX
Olivier BOUCHER
Fréderic BOURNAUD
Éric BOYER
Olivier BRESSAND
Patrick BROCKMANN
Romain BROSSIER
Allan-Sacha BRUN
Hugo BUFFERAND
Gaël BURGOS
ALFREDO BUTTARI

Ansar CALLOO
Yann CAPDEVILLE

Alessandra CARBONE
Fabien CASSE
Fréderic CAZALS
Jean-Pierre CHABOUREAU
Emmanuel CHALJUB
Jérôme CHAPELLE
Damien CHAPON
Fréderic CHEVALLIER
Rayan CHIKHI
Philippe CIUCIU
Jean-François CLOUET
Guillaume COLIN DE VERDIERE
Lucille COLOMBEL
Laurent COLOMBET
Benoit COMMERÇON
Juan CORTES
François COSTE
Sabine CREPE-RENAUDIN
Paul CRISTINI
Laurent CROUZET

Michel DAYDE
Alexandre DE BREVERN
Florent DE MARTIN
Laurent DEBREU
Jean-François DELEUZE
Maxime DELORME
Thierry DELZESCAUX
Julien DEROUILLAT
Thierry DEUTSCH
Yohan DUBOIS
Thomas DUBOS
Laurent DUFLOT
Arnaud DUROCHER

Bruno ESPINOSA
Juan ESCOBAR MUNOZ

Caroline ESSERT
Daniel ESTEVE
Catherine ETCHEBEST
Emmanuel FAURE
Luca FEDELI
Evelyne FOERSTER
Gauthier FOLZAN
Vincent FAUCHER
Miguel FERNANDEZ
Marie-Alice FOUJOLS
Alexandre FOURNIER
Pascal FREY
Patrick FUCHS

Filippo GATTI
Fabrice GAUDIER
Thomas GASTINE
Hugo GLOTIN
Thierry GAUTIER
Luigi GENOVESE
Brice GOGLIN
Virginie GRANDGIRARD
Mickael GRECH
Sergei GRUDININ
Abdou GUERMOUCHE
Fabien GILLET-CHAULET
Laurent GUILLOT

Hubert HANSEN
Laurent HELIOT
Yann HERAULT
Guido HUIJSMANS
Guillaume HUPIN

Olivier JAMOND
Sebastien JAN

Emmanuel JEANNOT
Pierre JOLIVET
Laetitia JOURDAN
Sylvie JOUSSAUME
Laurène JOUVE

Masa KAGEYAMA
Charles KERVRANN
Bruno KLAHOLZ
Samuel KOKH
Michael KRAJECKI
Gerhard KRINNER

Damien LAAGE
Elodie LAINE
Bart LAMIROY

Stéphane LANTERI
François LANUSSE
Guillaume LATU
Pierre-François LAVALLEE
Philipe LAVOCAT
Pierre LEDAC
Laurent LEFEVRE
Arnaud LEGRAND
Geoffroy LESUR
François LEVRIER
Mathieu LOBET
David LOFFREDA
Celine LOSCOS

Pierre-Etienne MACCHI
Fabienne MAIGNAN
Jean-François MANGIN
Marinica MIHAI-COSMIN
Olivier MARTI
Michel MASELLA
Sébastien MASSON
Benoit MATHIEU
Yves MECHULAM
Claudine MEDIGUE
Luca MESSINA
Yann MEURDESOIF
Raphaël MITTEAU
Vadim MONTEILLER
Luca MONTICELLI
Richard MORENO
Raymond NAMYST
Cyril NGUYEN
Florence NIEDERGANG
Michael NILGES
Gregory NUEL
Lucas NUSSBAUM

Jean-Christophe OLIVO
Anne-Cécile ORGERIE

Jean-Noël PATILLON
Perrine PAUL-GILLOTEAUX
Christian PEREZ
Jean-Philippe PIQUEMAL
Cyril POUPON
Simon PRUNET

Bruno RAFFIN
Pierre RAMET
Giuseppe RASTIELLO
Elisabeth REMY
Arnaud RENARD
Zaccharie RAMZI

Yann RASERA
Stéphane REQUENA
Jean ROMAN
Jonathan ROUZAUD-CORNABAS

Roland SABOT
Marco SAITTA
Jean SALAMERO
Mathieu SALANNE
Samuel SALVADOR
Emilia SANCHEZ-GOMEZ
Yanick SARAZIN
Claude SCARPELLI
Nathanaël SCHAEFFER
Roch SMETS
Vittorio SOMA
Aymeric SPIGA
Jean-Luc STARCK
Fabio STERPONE
Radek STOMPOR
Antoine STRUGAREK

Patrick TAMAIN
Éric TANNIER
François TESSIER
Maxence THEVENET
Simon THORPE
Marc TORRENT
El-Ghazali TALBI
Helene TOUZET
Pascal TREMBLIN

Sophie VALCKE
Patrice VERDIER
Thibaut VERY
Denis VEYNANTE
Jean-Pierre VILOTTE
Henri VINCENTI
Dorothea VOM BRUCH
Mathieu VRAC
Rodolphe VUILLEUMIER

Philippe WAUTELET

Savvas ZAFEIROPOULOS
Neil ZAIM
Christophe ZIMMER

Ainsi que nos partenaires industriels qui ont contribué à ce document, et bien d'autres encore que nous remercions chaleureusement.

EXASCALE France

Les applications françaises face à l'exascale

La France prépare une réponse au prochain appel à manifestation d'intérêt (AMI) d'EuroHPC en vue d'héberger l'une des deux machines européennes exaflopiques prévues en Europe à l'échéance de 2024 au sein d'un consortium dont GENCI est la « Hosting Entity » et le TGCC au CEA le "Hosting Center".

Pour ce faire, le projet exascale, porté par GENCI (Grand Équipement National de Calcul Intensif), a été mis en place en 2019 et est constitué de trois sous-groupes (SP) : SP1 – Management, SP2 – Machine, SP3 – Applications. Ce projet rallie les compétences d'experts français provenant du CEA, du CNRS, des universités (représentées par la CPU), et de l'Inria. Le SP3 est en charge de recenser les domaines applicatifs et applications prioritaires qui figureront dans la réponse française à l'AMI et/ou bénéficieront des moyens d'accompagnement qui devraient être déployés autour de cette initiative.

Le recensement des applications présent dans ce document a pour but de donner une vision claire de l'état actuel des applications des organismes impliqués dans le Projet Exascale France et également donner le dimensionnement des besoins relatifs à ces applications pour être en mesure d'exploiter et d'utiliser un supercalculateur exaflopique.

cea cnrs France Universités GENCI Le calcul intensif au service de la connaissance Inria MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR, DE LA RECHERCHE ET DE L'INNOVATION

ANNEXES DU PROJET EXASCALE

Annexe de la conclusion

L'EXASCALE AUX ETATS-UNIS

Aux USA, il y a traditionnellement un soutien important, très en avance de phase à la préparation, au portage et au développement des applications en vue de leur déploiement sur les nouvelles générations de calculateurs. En voici quelques illustrations :

- Ci après, une annonce récente de la NSF: « NSF to award up to $150,000 per year to research teams to improve codes, help drive requirements for future HPC systems » dans la perspective de l'implantation en 2025 d'un calculateur Exascale appelé LCCF au Texas Advanced Computing Center (TACC).
- Au DOE :
    - Si on se limite à examiner le National Energy Supercomputing Center (NERSC), il y a environ un total de 110 personnes dans l'activité de support/accompagnement autour des calculateurs dans les divers groupes (cf. organigramme ci-après).
    - Le projet « Exascale Computing » du DOE a créé 6 centres de co-design regroupant des experts de 8 laboratoires autour de thématiques différentes à Brookhaven, Argonne, Lawrence Berkeley, Lawrence Livermore, Los Alamos, Oak Ridge, Pacific Northwest, Sandia avec de l'ordre de 10 personnes dans les groupes de Brookhaven et Lawrence Livermore.

L'EXASCALE AU JAPON

Au Japon, la conception de Fugaku comme précédemment celle de la machine K, a été fortement anticipée avec l'identification de plusieurs priorités thématiques fortes : santé, catastrophes naturelles, énergie, compétitivité industrielle, recherche fondamentale. Le « Riken supercomputing Center » a été créé en 2017 et regroupe environ 3000 personnes sur l'ensemble du territoire japonais. Dans le « Riken Center for Computational Science » localisé à Kobe et dirigé par Satoshi Matsuoka, une vingtaine d'équipes de recherche couvrant tout l'écosystème autour de Fugaku ont été déployées avec des compétences allant du système, des I/O, des environnements de programmation et d'exécution jusqu'aux applications et aux librairies numériques, chacune avec à chaque fois des ingénieurs et des chercheurs impliqués.

A titre d'illustration, dans le « Programming Environment Research Team » dirigé par M. Sato il y a 16 membres, 5 personnes dans le « High Performance Artificial Intelligence Systems Research Team », 8 personnes dans le « Large-Scale Parallel Numerical Computing Technology Research Team », 6 personnes dans le « Computational Materials Science Research Team ».

L'EXASCALE EN CHINE

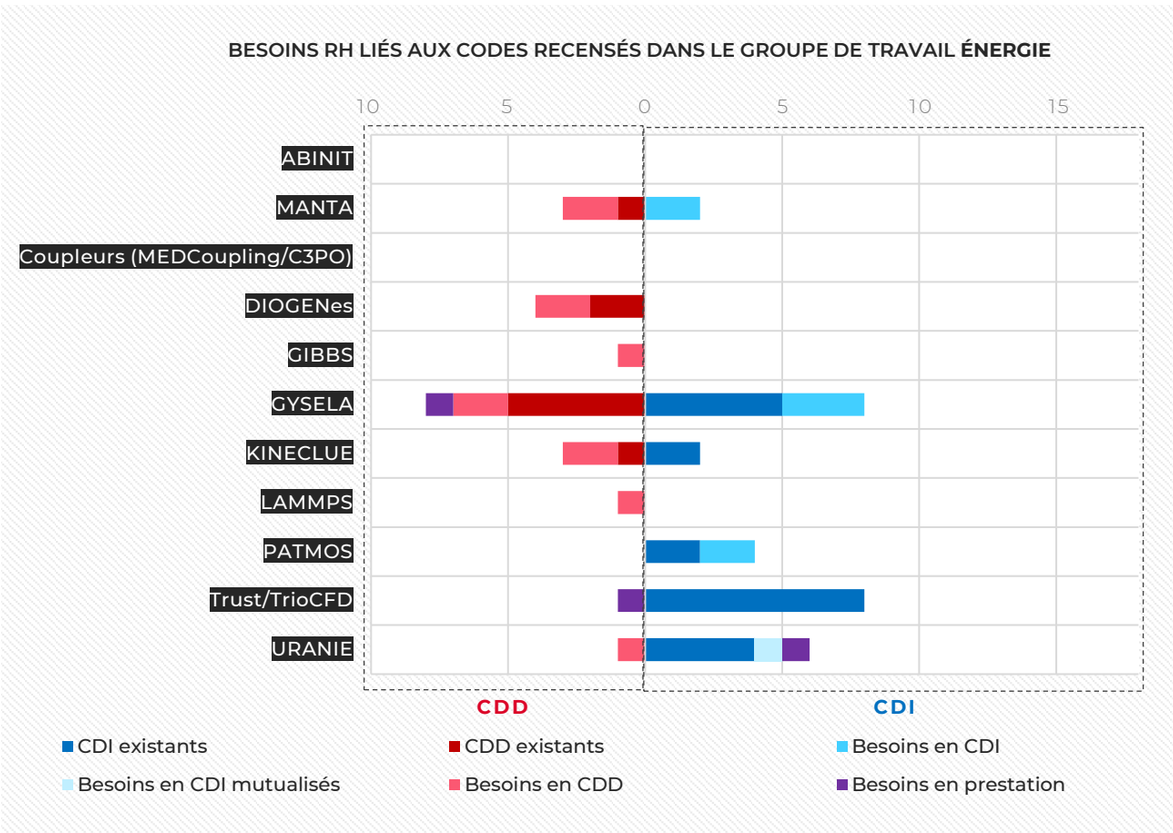
Nous disposons de peu de données chiffrées sur la Chine, cependant, compte tenu de leur arrivée récente et à la tête du top500 (en moins de 10 ans), les forces en présence (tant le budget que les ressources humaines) dans ce secteur sont considérables.

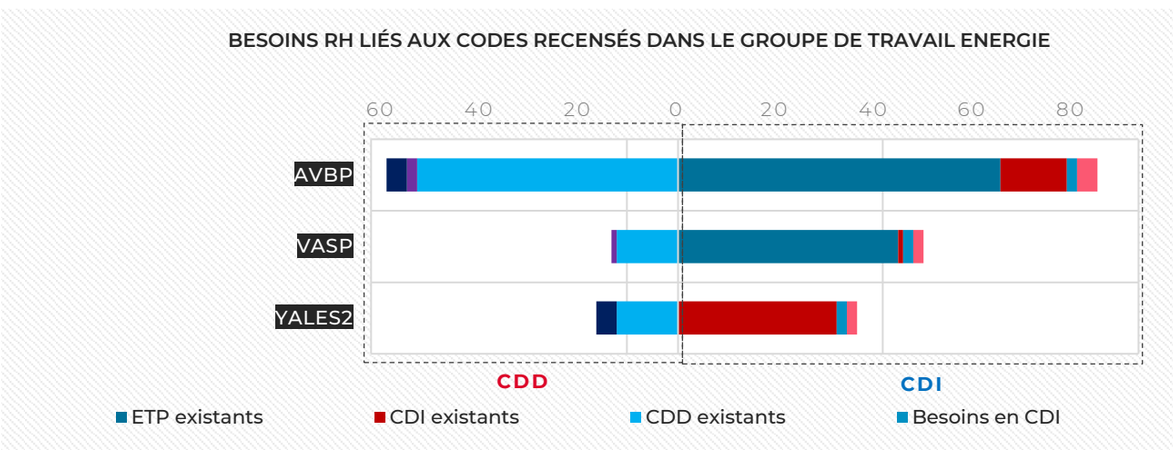
En Chine, sur Thianhe-3, qui sera la future machine Exascale dont un prototype est testé depuis 2019, le développement d'une vingtaine d'applications a débuté en avance de phase pour qu'elles soient opérationnelles dans les temps, et ce, en plus des tests effectués sur le prototype, ce qui représente plus d'une cinquantaine d'applications existantes. Le tout s'accompagne d'un effort majeur en termes de ressources humaines.

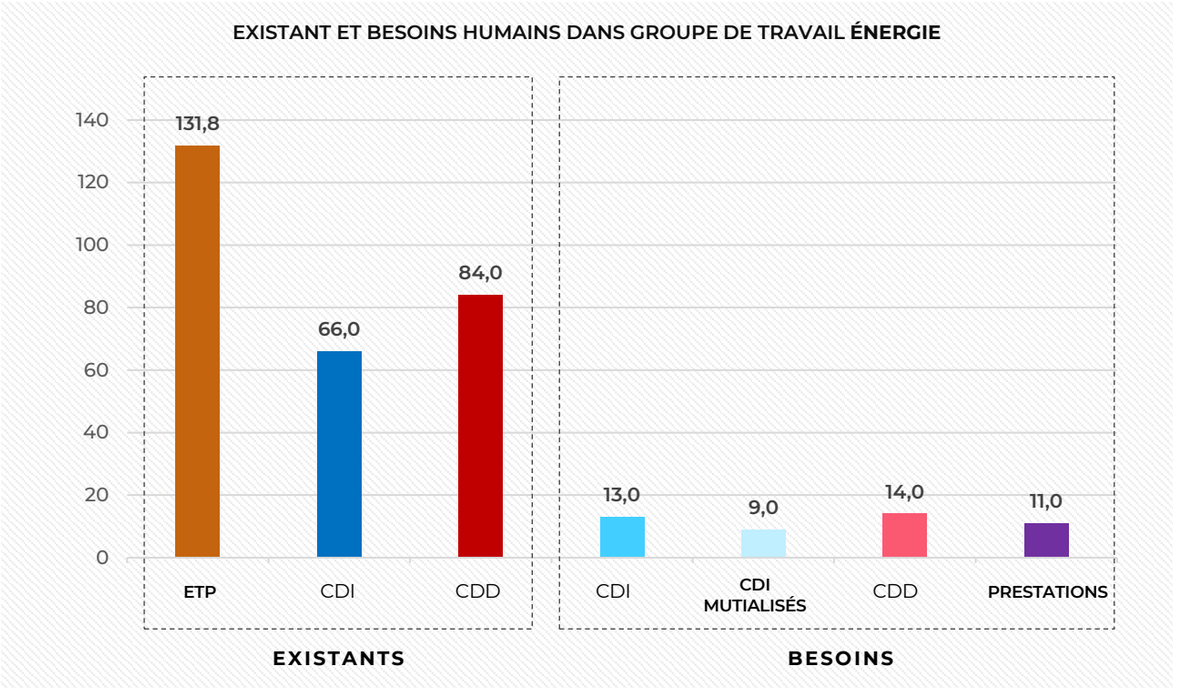
Groupe de travail Energie

GRAPHIQUES DES BESOINS RH

Les graphiques ci-dessous sont fournis en complément des graphiques présents dans le rapport. On présente en addition le nombre d'ETP existants pour chaque code. Cependant, ce nombre d'ETP est à considérer avec précautions, car d'un organisme à un autre (voir d'une équipe à une autre), la notion d'ETP peut être variable. Ce chiffre est donc à interpréter avec les équipes des codes concernés.






EXISTANT ET BESOINS HUMAINS DANS GROUPE DE TRAVAIL ÉNERGIE
140
120
100
80
60
40
20
0
131,8
66,0
84,0
13,0
9,0
14,0
11,0
ETP
CDI
CDD
CDI
CDI MUTIALISÉS
CDD
PRESTATIONS
EXISTANTS
BESOINS

MATRICE DES CODES PAR DOMAINE APPLICATIF

PRODUCTION	STOCKAGE	COMBUSTION	RÉCUPÉRATION D'ÉNERGIE	RECHERCHE FONDAMENTALE	SCIENCE ET USAGE DU NUMÉRIQUE (SUN)
CASTEM-EUROPLEXUS					
Trust/TrioCFD					
DIOGENeS					
Coupleurs (MEDCoupling/C3PO)					
PATMOS					
TRUST + Sympy2TRUST					
MetalWalls					
YALES2		YALES2			
AVBP					AVBP
GYSELA				GYSELA	
JOREK				JOREK	
URANIE	URANIE	URANIE	URANIE		URANIE
ABINIT					
BigDFT					
VASP					
LAMMPS					
GIBBS					
KINECLUE					
CRESCENDO					
MOLGW					
MILADY					

MATRICE DES CODES PAR DOMAINES SUN

HPC	HPDA	HTC	IA
CASTEM-EUROPLEXUS			
GYSELA			
JOREK			
Trust/TrioCFD			
PATMOS			
DIOGENeS			
Metalwalls			
BigDFT			
ABINIT			
VASP			
LAMMPS			
GIBBS			
KINECLUE			
Coupleurs (MEDCoupling/C3PO)			
YALES2			
AVBP			
TRUST + Sympy2TRUST			
MILADY			MILADY
MOLGW			
CRESCENDO			
URANIE	URANIE		URANIE

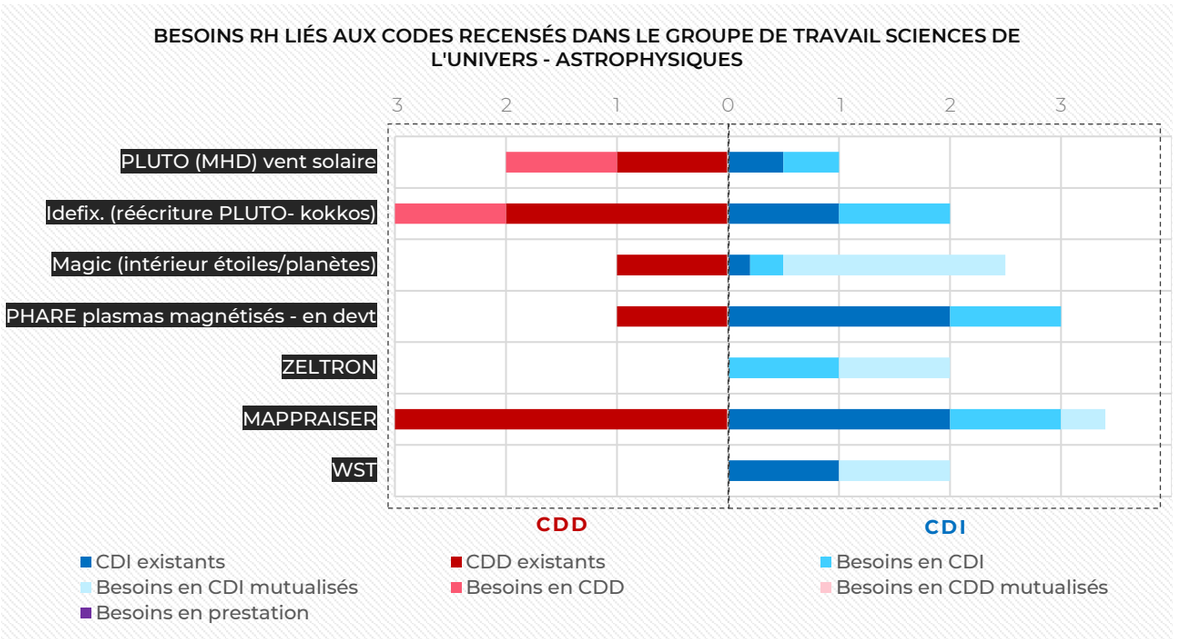
MATRICE DES CODES PAR PORTAGE DES CODES

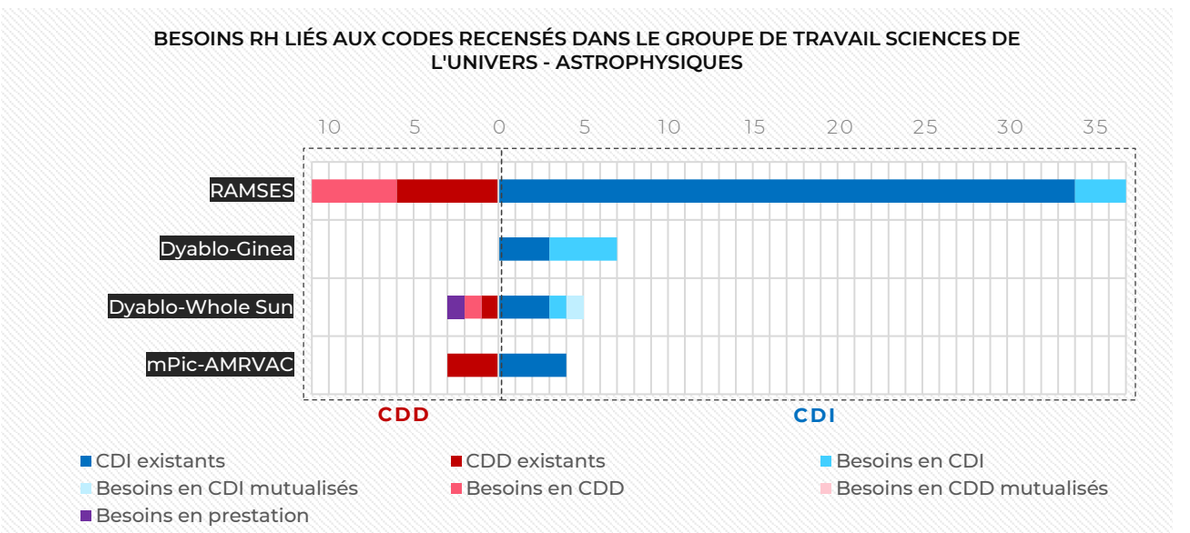
	GPU			**CPU ARM**	**Parallélisme**
	OUI (Single/Multi)/NON	Tous	%		
CASTEM-EUROPLEXUS	NON		0	NON	MPI et openMP
Trust/TrioCFD	OUI (Single ou Multi) mais expérimental	OUI	5% code (mais 50 à 80% temps)	OUI (ARMv8-A)	MPI
URANIE	OUI (Single)	NVidia	2% (algos de ML)	NON	openMP (algos) + MPI (distribution des calculs)
DIOGENeS	NON	NON	0	NON	MPI et OpenMP
PATMOS	OUI (Multi)	OUI	20 (variable suivant le cas)	OUI	MPI et OpenMP
GYSELA	NON	NON	0	OUI	MPI et OpenMP
JOREK	NON	NON	0		MPI et OpenMP
METALWALLS	OUI (Single)	NON	80	OUI (mais experimental)	MPI et OpenACC
Coupleurs: MEDCoupling	NON	NON	0	NON	MPI
C3PO	NON	NON	0	NON	MPI
TRUST + Sympy2TRUST	OUI + NON (Sympy2TRUST)	NON	0	OUI + NON	MPI + NON
YALES2					
AVBP					
ABINIT	Experimental	Nvidia		OUI	surtout MPI, speedup open MP
BigDFT	OUI	Nvidia	100	OUI	MPI, hybrid MPI/open MP
VASP	OUI	Nvidia	90	OUI	MPI, nouvelle version hybrid MPI/open MP
LAMMPS	OUI	Nvidia	60?	OUI	MPI, hybrid MPI/open MP
GIBBS	NON			OUI	MPI
KINECLUE	NON			NON	NON
MILADY				OUI	MPI
MOLGW				OUI	MPI
CRESCENDO				OUI	MPI

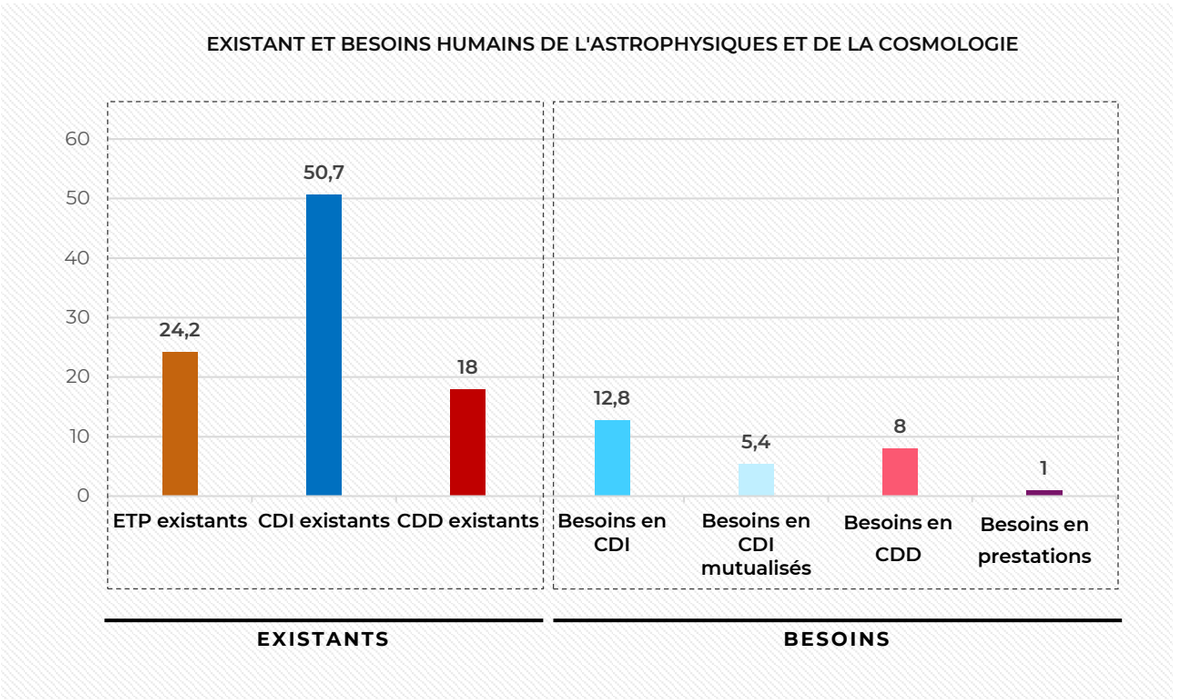
Groupe de travail Sciences de l'Univers

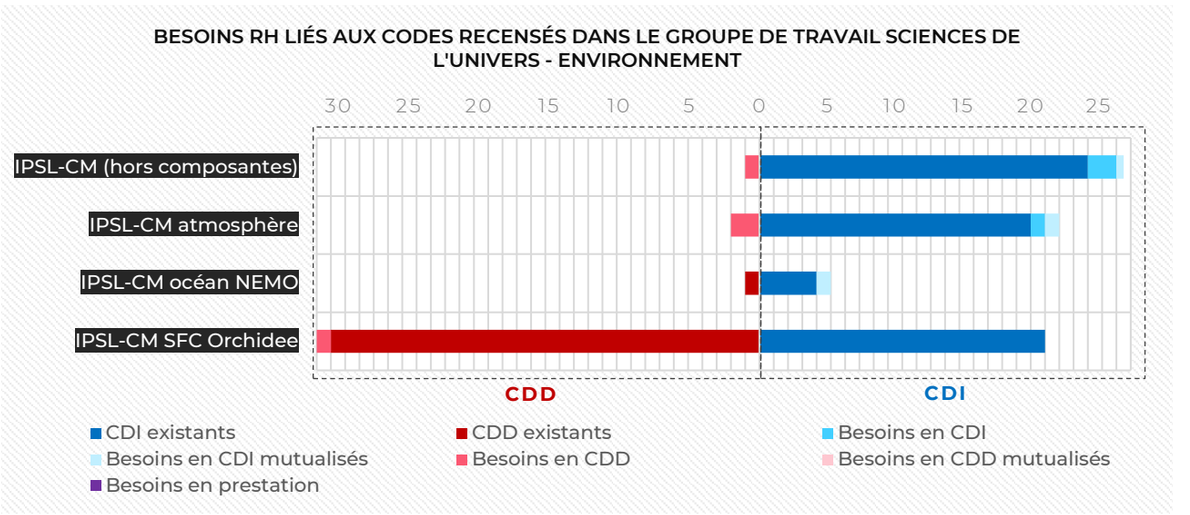
GRAPHIQUES DES BESOINS RH

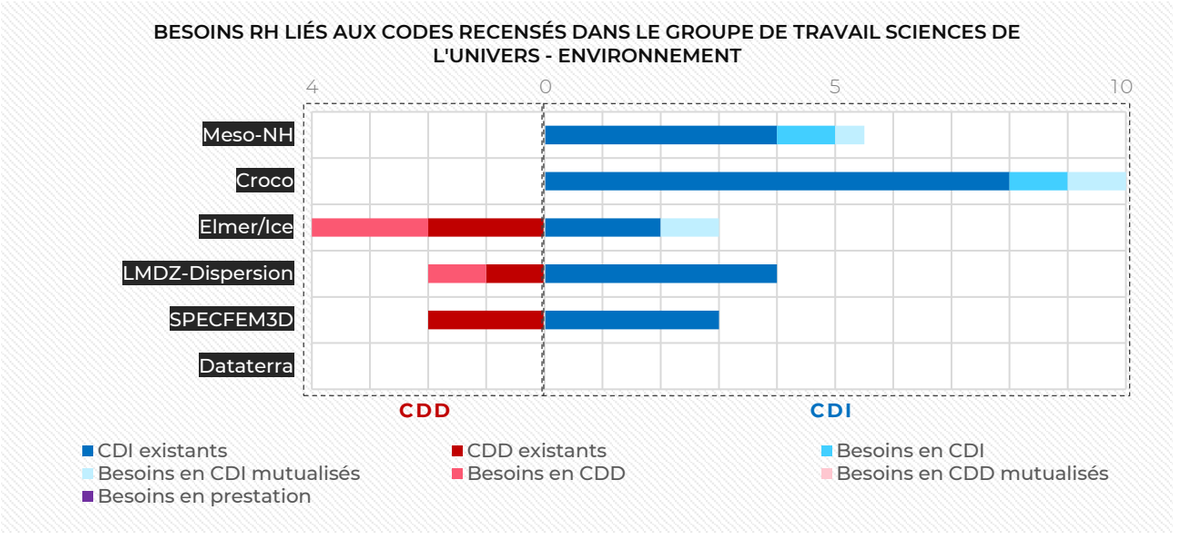
Les graphiques ci-dessous sont fournis en complément des graphiques présents dans le rapport. On présente en addition le nombre d'ETP existants pour chaque code. Cependant, ce nombre d'ETP est à considérer avec précautions, car d'un organisme à un autre (voir d'une équipe à une autre), la notion d'ETP peut être variable. Ce chiffre est donc à interpréter avec les équipes des codes concernés.

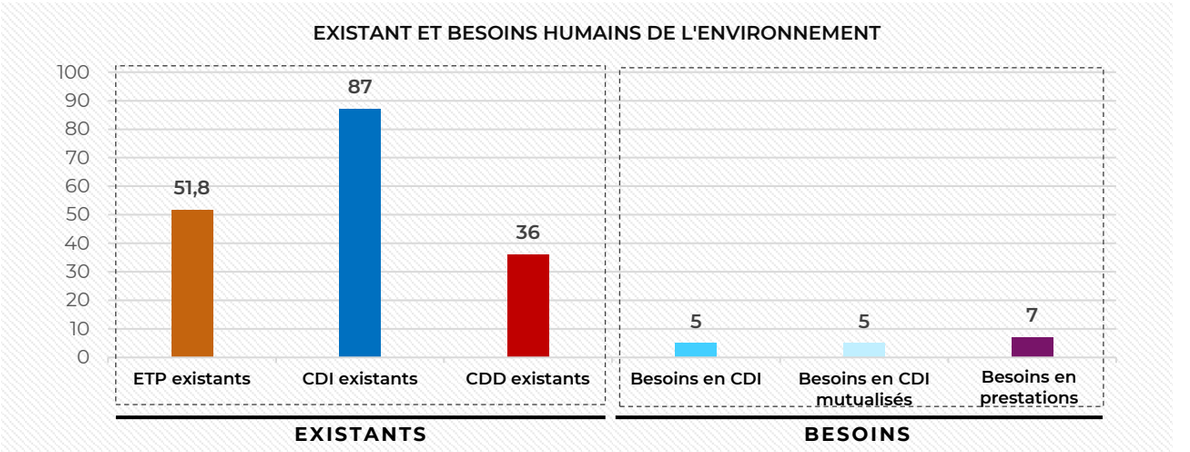


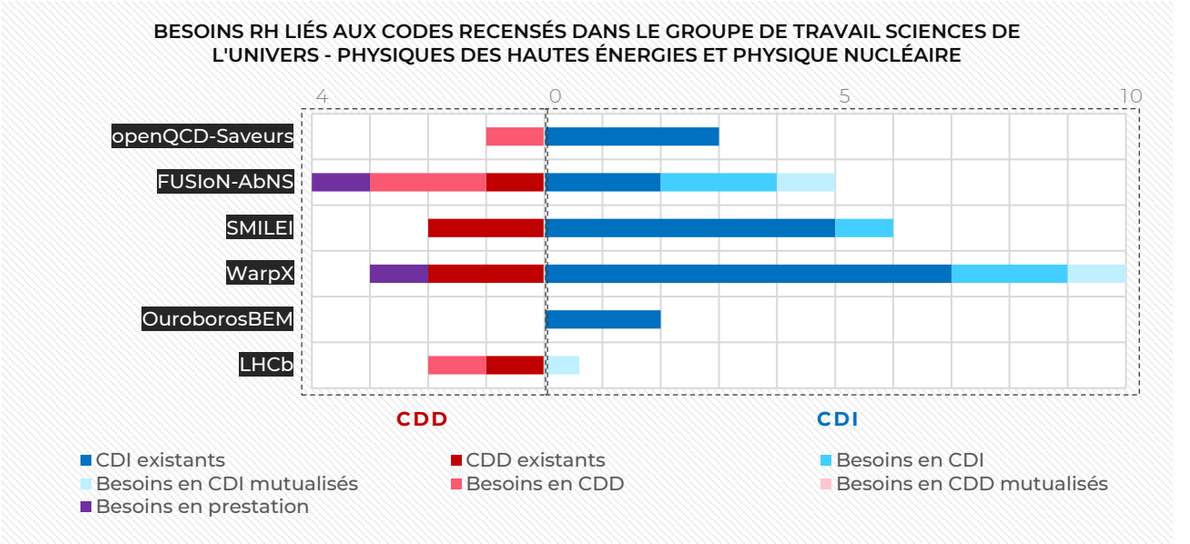


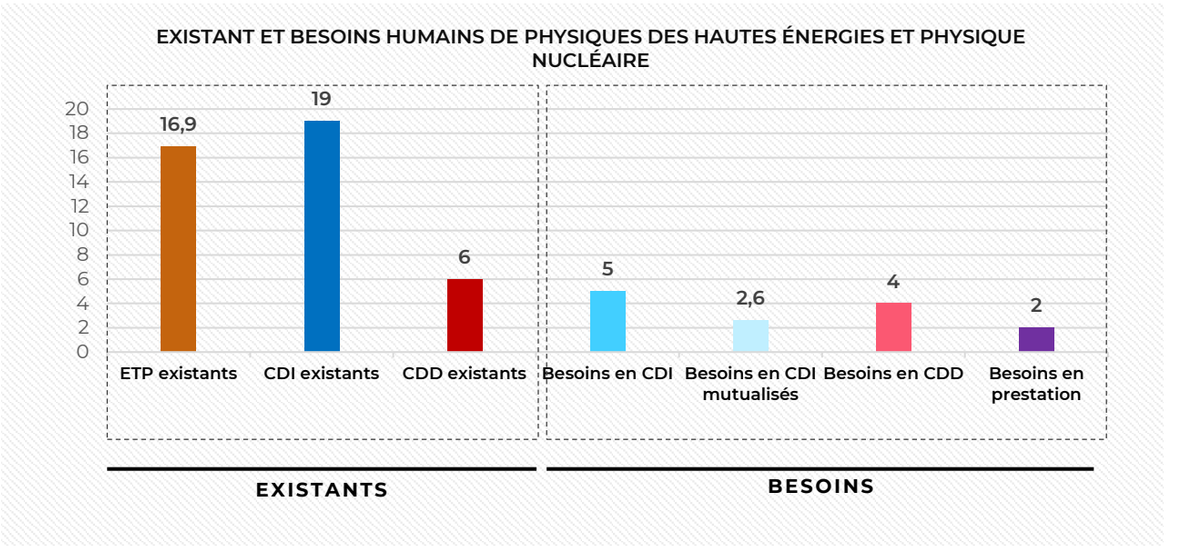

EXISTANT ET BESOINS HUMAINS DE L'ASTROPHYSIQUES ET DE LA COSMOLOGIE
60
50
40
30
20
10
0
24,2
50,7
18
12,8
5,4
8
1
ETP existants
CDI existants
CDD existants
Besoins en CDI
Besoins en CDI mutualisés
Besoins en CDD
Besoins en prestations
EXISTANTS
BESOINS

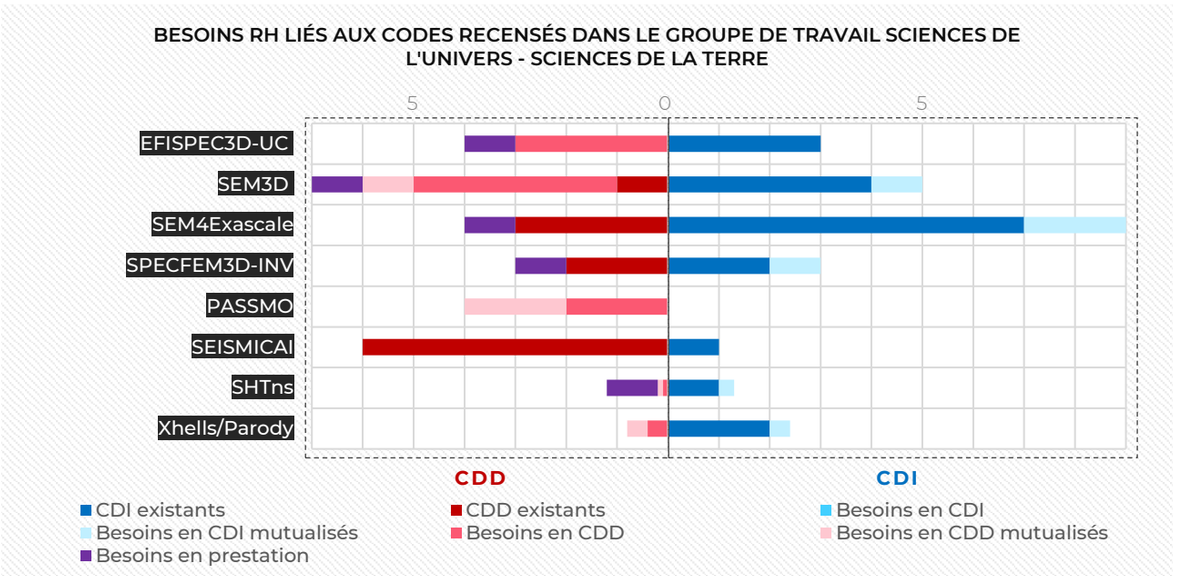

BESOINS RH LIÉS AUX CODES RECENSÉS DANS LE GROUPE DE TRAVAIL SCIENCES DE L'UNIVERS - ENVIRONNEMENT
30 25 20 15 10 5 0 5 10 15 20 25
IPSL-CM (hors composantes)
IPSL-CM atmosphère
IPSL-CM océan NEMO
IPSL-CM SFC Orchidee
CDD
CDI
CDI existants
CDD existants
Besoins en CDI
Besoins en CDI mutualisés
Besoins en CDD
Besoins en CDD mutualisés
Besoins en prestation

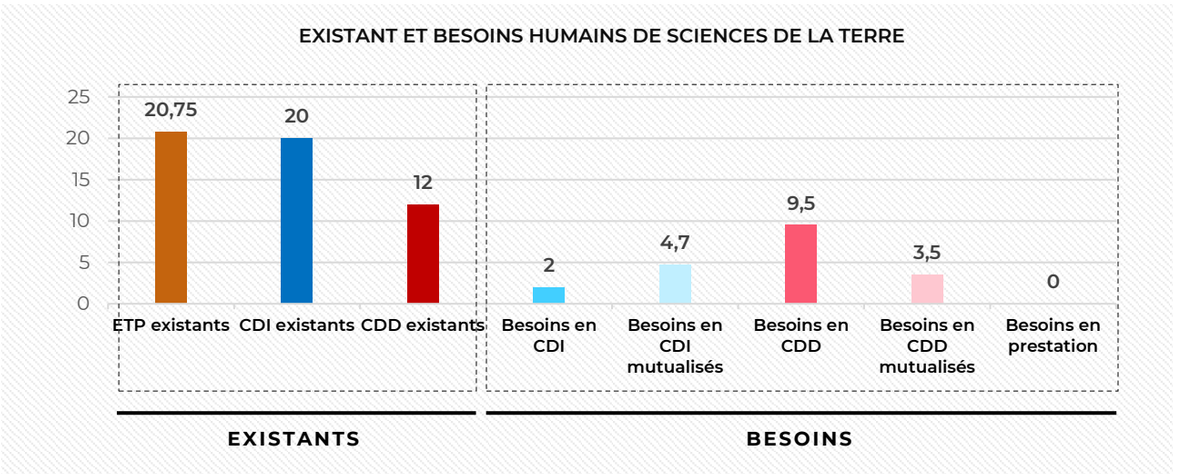

BESOINS RH LIÉS AUX CODES RECENSÉS DANS LE GROUPE DE TRAVAIL SCIENCES DE L'UNIVERS - ENVIRONNEMENT
4
0
5
10
Meso-NH
Croco
Elmer/Ice
LMDZ-Dispersion
SPECFEM3D
Dataterra
CDD
CDI
CDI existants
CDD existants
Besoins en CDI
Besoins en CDI mutualisés
Besoins en CDD
Besoins en CDD mutualisés
Besoins en prestation


EXISTANT ET BESOINS HUMAINS DE L'ENVIRONNEMENT
100
90
80
70
60
50
40
30
20
10
0
51,8
87
36
5
5
7
ETP existants
CDI existants
CDD existants
Besoins en CDI
Besoins en CDI mutualisés
Besoins en prestations
EXISTANTS
BESOINS


BESOINS RH LIÉS AUX CODES RECENSÉS DANS LE GROUPE DE TRAVAIL SCIENCES DE L'UNIVERS - PHYSIQUES DES HAUTES ÉNERGIES ET PHYSIQUE NUCLÉAIRE
4
0
5
10
openQCD-Saveurs
FUSIoN-AbNS
SMILEI
WarpX
OuroborosBEM
LHCb
CDD
CDI
CDI existants
CDD existants
Besoins en CDI
Besoins en CDI mutualisés
Besoins en CDD
Besoins en CDD mutualisés
Besoins en prestation


EXISTANT ET BESOINS HUMAINS DE PHYSIQUES DES HAUTES ÉNERGIES ET PHYSIQUE NUCLÉAIRE
20
18
16
14
12
10
8
6
4
2
0
16,9
19
6
5
2,6
4
2
ETP existants
CDI existants
CDD existants
Besoins en CDI
Besoins en CDI mutualisés
Besoins en CDD
Besoins en prestation
EXISTANTS
BESOINS


BESOINS RH LIÉS AUX CODES RECENSÉS DANS LE GROUPE DE TRAVAIL SCIENCES DE L'UNIVERS - SCIENCES DE LA TERRE
5
0
5
EFISPEC3D-UC
SEM3D
SEM4Exascale
SPECFEM3D-INV
PASSMO
SEISMICAI
SHTns
Xhells/Parody
CDD
CDI
CDI existants
CDD existants
Besoins en CDI
Besoins en CDI mutualisés
Besoins en CDD
Besoins en CDD mutualisés
Besoins en prestation


EXISTANT ET BESOINS HUMAINS DE SCIENCES DE LA TERRE
25
20
15
10
5
0
20,75
20
12
2
4,7
9,5
3,5
0
ETP existants
CDI existants
CDD existants
Besoins en CDI
Besoins en CDI mutualisés
Besoins en CDD
Besoins en CDD mutualisés
Besoins en prestation
EXISTANTS
BESOINS

MATRICE DES CODES PAR DOMAINES APPLICATIFS

SCIENCE DE LA TERRE	PHYSIQUE DES HAUTES ENERGIES ET PHYSIQUE NUCLEAIRE	ASTROPHYSIQUE ET COSMOLOGIE	ENVIRONNEMENT
	ZELTRON		
	mPIC-AMRVAC		
	SMILEI		
	OuroborosBEM		
	FUSIoN		
	Expériences LHC		
	LHCb		
	Chroma_WM		
	Janos		
	DynQCD		
	OpenQCD		
	WarpX		
	PICSAR		
		Couplage LMDZ/WRF – Dynamico – planètes	Couplage LMDZ – Dynamico
		WST-WPH	
		Dyablo-Ginea	
		Dyablo-Whole Sun	
		RAMSES	
		PHARE	
		PLUTO	
		IDEFIX	
		MAPPRAISER	
MagIC			
SHTns			
SPECFEM3D-INV			
XSHELLS / Parody			

SEISMICAI			
SEM3D			SEM3D
PASSMO			
EFISPEC3D-UC			EFISPEC3D-UC
Data Terra			Data Terra
			MESO-NH
			LMDZ-Dispersion
			ORCHIDEE
			NEMO
			CROCO
			IPSL-CM
			Elmer/Ice

MATRICE DES CODES PAR DOMAINES SUN

HPC	HPDA	HTC	IA
ZELTRON			
OuroborosBEM			
FUSIoN			
Chroma_WM			
Janos			
DynQCD			
OpenQCD			
Couplage LMDZ/WRF – Dynamico – planètes			
Couplage LMDZ – Dynamico			
Dyablo-Ginea			
Dyablo-Whole Sun			
RAMSES			
PHARE			
PLUTO			

IDEFIX			
SPECFEM3D-INV			
			SEISMICAI
SEM3D			
PASSMO			
EFISPEC3D-UC			
MESO-NH			
LMDZ-Dispersion			
ORCHIDEE			
NEMO			
CROCO			
IPSL-CM			
Elmer/Ice			
MagIC			
SMILEI			
MAPPRAISER			
SHTns			
XSHELLS / Parody			XSHELLS / Parody
		Expériences LHC	
		LHCb	
		Data Terra	
		Virgo-Ligo/Einstein Telescope	
		WST-WPH	
WARPX			
PICSAR			
mPIC-AMRVAC			

MATRICE DU PORTAGE DES CODES

	GPU			CPU ARM	NEC Vector Engine Models	Parallélisme
	OUI (Single/Multi)/NON	Tous	%			
Chroma_WM	OUI(Multi)	Oui	100%	OUI		MPI et OpenMP
Couplage DYNAMICO+LMDZ	DYNAMICO : Oui (Multi) LMDZ : NON	OpenACC : oui ?	100	OUI Non testé (probalement oui?)	OUI NON	MPI et OpenMP
Couplage LMDZ – Dynamico – WRF-planètes						MPI et OpenMP
IPSL-CM	Non (sauf Dynamico)	Non (sauf Dynamico)	10%	Non (sauf Dynamico)		MPI et OpenMP pour le découpage de domaine. Couplage de codes par MPI.
CROCO	OUI (Multi)	OpenACC	80	NON	NON	MPI / OpenMP / OpenACC
Data Terra						
Dyablo-Ginea	OUI (Multi)	OUI (Kokkos)	80	Non testé (OUI?)		MPI + Kokkos (OpenMP/ CUDA)
Dyablo-Whole Sun	OUI (Multi)	OUI (Kokkos)	80	Non testé (OUI?)		MPI + Kokkos (OpenMP/ CUDA)
DYNAMICO	OUI (Multi)	OpenACC (oui ?) testé uniquement sur Nvidia	100	OUI	OUI	MPI/OpenMP/OpenACC
DynQCD						
EFISPEC3D-UC	NON			NON	NON	MPI
Elmer/Ice	NON			NON	NON	MPI + OpenMP
Expériences LHC	Partiellement pour certains code, en cours de portage	oui	faible à ce jour	partiellement validé		whole node pour la majorité + MPI pour teering / collecte des données
FUSIoN	En cours		20%	NON		MPI et OpenMP
IDEFIX	Oui (multi)	Oui	100%	En principe oui mais non testé (base Kokkos)	non	MPI, OpenMP et pThread
Janos						

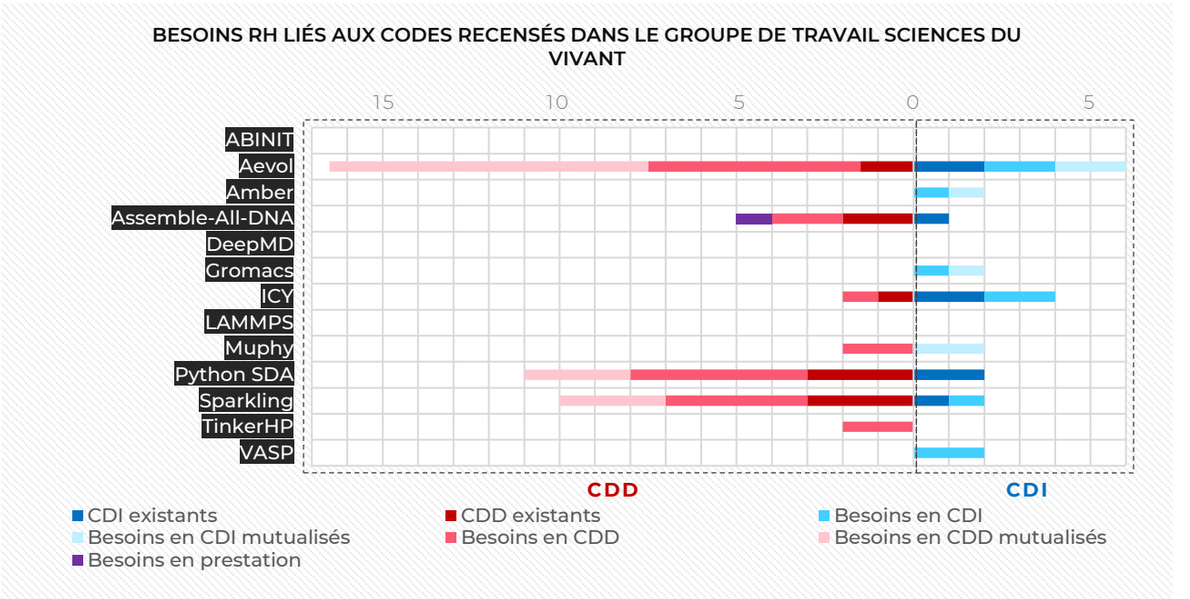
LHCb	Allen: OUI (multi) Moore: NON	Allen: Tous	Allen: 100%	Allen: partiellement validé Moore: partiellement validé	Allen: NON Moore: NON	CUDA, std::thread TBB
LMDZ-Dispersion	En cours via l'insertion de Dynamico			En cours via l'insertion de Dynamico	NON	MPI
LMDZ-Dynamique	Non			Non testé (probablement oui)	Non	MPI et OpenMP
MagIC	Non			Non testé	Non	MPI + OpenMP
MAPPRAISER	Non	Non		Non	Non	MPI + openMP
MBC-CycleGAN (MBC-CG)						
MESO-NH	OUI	OUI	5%	OUI		MPI + OpenACC pour GPU
mPIC-AMRVAC	NON	NON		NON	NON	MPI
NEMO	non	non		oui	oui	MPI
OpenQCD						
ORCHIDEE	NON	NON	0	NON	NON	MPI et OpenMP
OuroborosBEM	OUI (Multi)	OUI	100%	NON	NON	CUDA
PASSMO	NON	NON	0	Non testé	NON	MPI
PHARE	NON			OUI		MPI
PICSAR	OUI	OUI	50%	EN COURS	Non testé	MPI/OpenMP/CUDA
PLUTO	Non	Non	0	Non	Non	MPI
RAMSES	Oui	OpenAcc	25	Non testé		MPI
SEISMICAI	OUI (Multi)	OUI	100	NON		Cuda
SEM3D	NON	NON	0	OUI	NON	MPI, OpenMP
SHTns	OUI (single)	Nvidia	75	Non testé	Non	OpenMP + CUDA
SMILEI	OUI (Multi)	Nvidia pour le moment (dépendance à Thrust)	60%	OUI (testé sur ThunderX)	Non	MPI + OpenMP / OpenACC
SPECFEM3D-INV	OUI	Nvidia	100%	Partiellement	Non testé	MPI, OpenMP
WarpX	OUI	OUI	100%	EN COURS	Non testé	MPI/OpenMP/OpenACC/CUDA

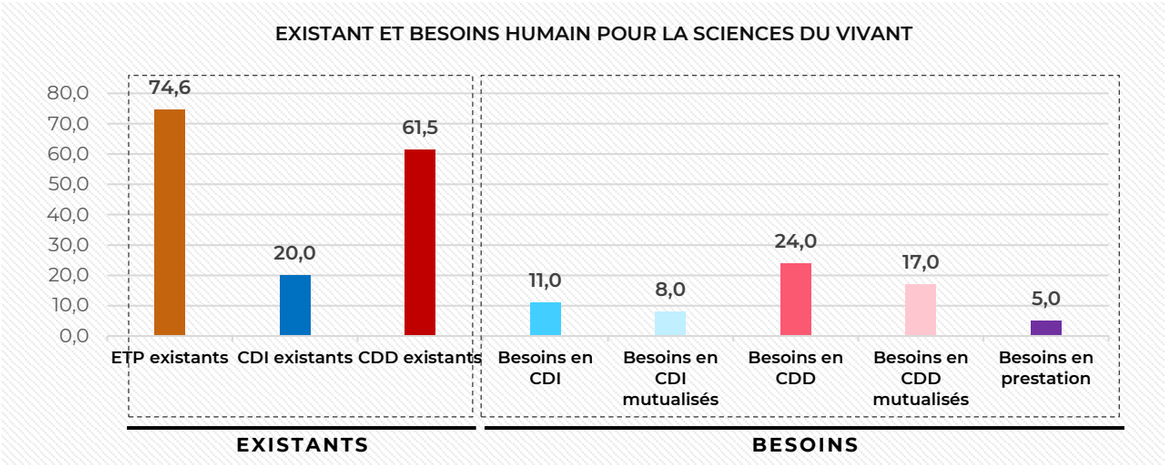
WST-WPH	Oui (single)	Non	75	Non	Non	Cuda
XSHELLS / Parody	Non			Non testé	Non	MPI + OpenMP
ZELTRON	Non	Non	0	Non	Non	MPI

Groupe de travail Sciences du Vivant

GRAPHIQUES DES BESOINS RH

Les graphiques ci-dessous sont fournis en complément des graphiques présents dans le rapport. On présente en addition le nombre d'ETP existants pour chaque code. Cependant, ce nombre d'ETP est à considérer avec précautions, car d'un organisme à un autre (voir d'une équipe à une autre), la notion d'ETP peut être variable. Ce chiffre est donc à interpréter avec les équipes des codes concernés.





MATRICE DES CODES PAR DOMAINES APPLICATIFS

MODÉLISATION DU VIVANT	BIO-SANTÉ-PHARMACOLOGIE	ENVIRONNEMENT	RF	SUN
Tinker-HP				
Aevol				Aevol
Tinker-HP	Tinker-HP			
		ABINIT	ABINIT	
AVBP				
BigDFT				
CP2K				
GIBBS				
LAMMPS				
VASP				
GROMACS	GROMACS	GROMACS		
MUPHY	MUPHY			

MATRICE DES CODES PAR DOMAINES SUN

HPC	HPDA	HTC	IA
BigDFT couplé à de la dynamique moléculaire, lien docking			
Aevol			
Tinker-HP			
GROMACS			
ABINIT		ABINIT	
AVBP			
BigDFT			
CP2K			
GIBBS			
LAMMPS			
VASP			
MUPHY			

MATRICE DE PORTAGE DES CODES

	GPU			CPU ARM	PARALLELISME
	OUI (Single/Multi)/NON	Tous	%		
Aevol	OUI (Single)	NON (CUDA)	80	OUI	MPI, OpenMP (Parallel and Vectorization) et CUDA
ABINIT	OUI (Multi)	CUDA	20	OUI	MPI, openMP
AVBP					
BigDFT	OUI (Multi)	OUI	100	OUI	MPI et OpenMP
CP2K					
GIBBS					
GROMACS	OUI (Multi)	CUDA, OpenCL	90	OUI (v8, Cray ThunderX2, Power8, Power9)	SIMD, MPI, thread-MPI, OpenMP, CUDA, OpenCL
LAMMPS					
Tinker-HP	OUI (Multi)	NON(CUDA)	100	OUI	MPI, OpenMP et CUDA
VASP					
MUPHY	OUI	NON (CUDA)	50	OUI (powerxx)	MPI / CUDA

Groupe de travail Recherche Fondamentale

MATRICE DE CODES PAR DOMAINES APPLICATIFS

MATÉRIAUX DU FUTUR	INTÉRACTION RAYONNEMENT/MATIÈRE	RECHERCHE FONDAMENTALE
ABINIT		Oui
BigDFT		Oui
CP2K		Oui
Quantum-Expresso		Oui
VASP		Oui
	Fiesta beDEFT	
LAMMPS		Oui
GIBBS		
AVBP		

QUANTUM PACKAGE		Oui
EXACORR (DIRAC)		Oui

MATRICE DE CODES PAR DOMAINES SUN

HPC	HPDA	HTC	IA
ABINIT			
BigDFT			
CP2K			
Fiesta beDEFT			
Quantum-Expresso			
VASP			
LAMMPS			
GIBBS			
AVBP			
Fiesta beDEFT			

MATRICE DE PORTAGE DES CODES

	GPU			CPU ARM	NEC VECTOR ENGINE MODELS	PARALLELISME
	OUI (Single/Multi)/NON	Tous	%			
ABINIT	Expérimental	Nvidia		OUI		surtout MPI, speedup open MP
CP2K	OUI (Multi)	OUI	100	?		MPI et OpenMP
BigDFT	OUI (Multi)	OUI	100	OUI		MPI et OpenMP
Quantum Expresso	OUI	OUI	?	OUI		MPI et OpenMP
VASP	OUI	OUI	?			MPI et OpenMP
Fiesta beDEFT						
LAMMPS	OUI	Nvidia	60?	OUI		MPI, hybrid MPI/open MP
GIBBS	NON			OUI		MPI
AVBP						