

# AgGlob: Calcul et workflow pour la simulation informatique de modèles agronomiques à l'échelle de la France

H. Raynal <sup>(3)</sup>, E. Ancelet <sup>(3)</sup>, C. Le Bas <sup>(4)</sup>, P. Bertuzzi <sup>(1)</sup>, E. Cahuzac <sup>(2)</sup>,  
E. Casellas <sup>(3)</sup>, P. Chabrier <sup>(3)</sup>, T. Poméon <sup>(2)</sup>, B. Toutain <sup>(4)</sup>

(1) US 1116 Agroclim, INRA Provence Alpe Côte d'Azur \_ (2) US 0685 ODR, INRA Occitanie-Toulouse \_ (3) UR 875 MIAT, INRA Occitanie-Toulouse \_ (4) US 1106 INFOSOL, INRA Centre Val de Loire

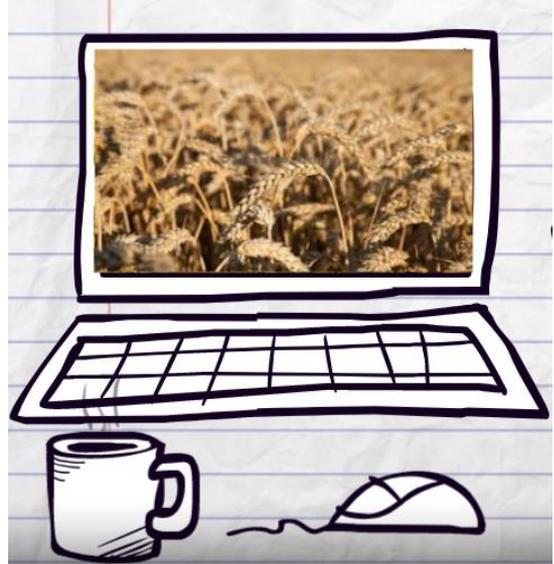


## Simulation informatique de modèles de culture Plateforme RECORD

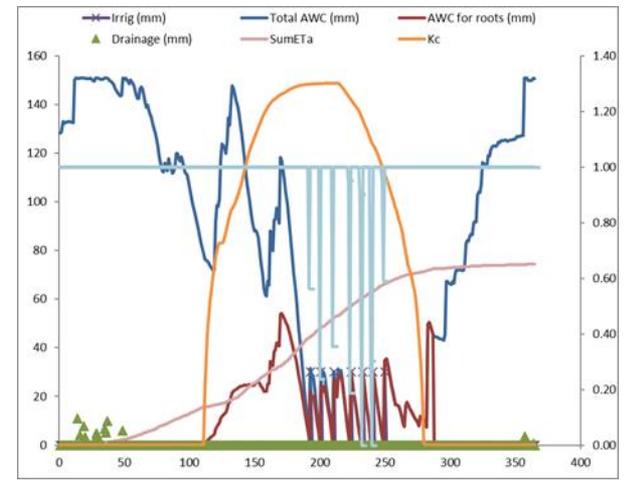
Hand-drawn diagrams on a grid background containing various mathematical formulas for crop simulation:

- $ALAI = (1 - \text{FracSen}()) * LAI()$
- $HI = HI(-1) * \text{FracSen}()$
- $HIpot = (HIpot(-1) * \text{dayCount}(-1) + hiMax * \text{reduc}(\text{ATPT}(-1), r1hi, r2hi)) / \text{dayCount}()$
- $TT = TT(-1) + \text{min}(30, \dots)$
- $\text{Yield} = HI() * \text{AGBiomass}() * \text{min}(\dots)$
- $\text{Irrig} = p1 * \log(\dots)$
- $\text{FracSen} = \dots$
- $\text{LAI} = \dots$

© J.Constantin. Project MASTIC. INRA



© J-E. Bergez. Project MASTIC. INRA



En lien avec enjeux scientifiques  
Passage à échelle globale



Created by Randomero  
from Noun Project



Created by Valerly  
from Noun Project

## Données

- Distantes + hétérogènes
- Volumétrie
- Pré-traitements

## Plan d'expé

- Maillé
- Scénarisation

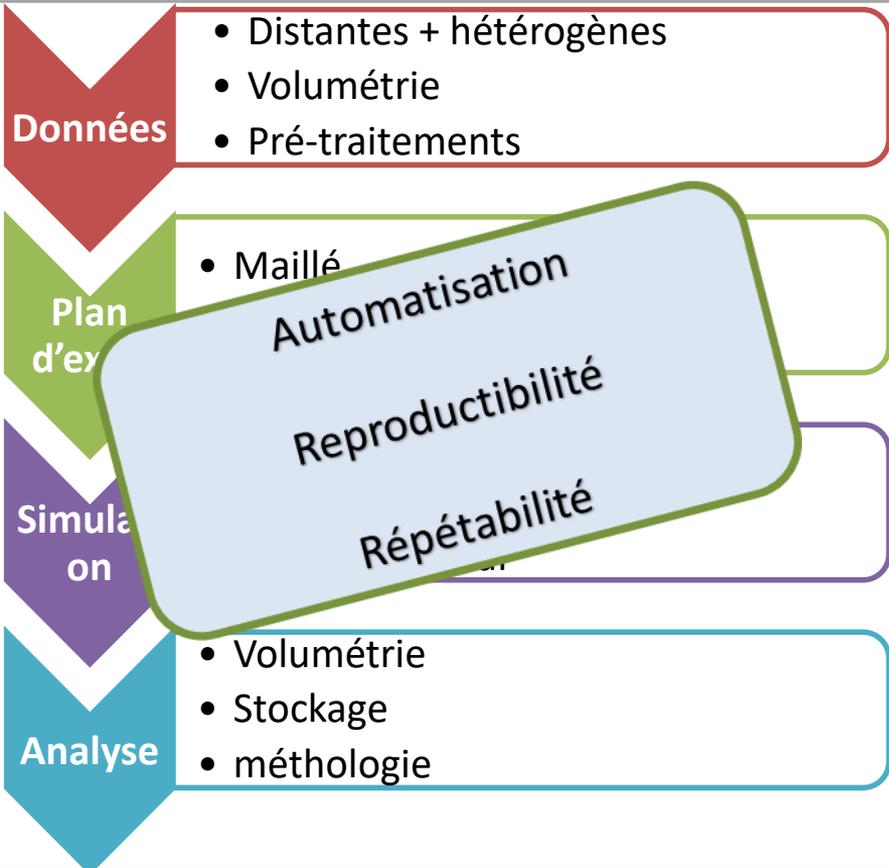
## Simulati on

- Adaptation simulateur
- Parallélisation
- Temps de calcul

## Analyse

- Volumétrie
- Stockage
- méthodologie

# Défis à relever



- **Pas de parallélisation du code:**
  - contraintes « legacy code »
- **Traitement massif des simulations:**
  - Outil cvle: pg d'exécution des simulations, pour des clusters de calcul disposant de MPI (Message Parsing Interface)
  - Conception d'une interface utilisateur (.csv), pour design plan d'expérience
  - Conception de la chaîne de traitement associée



Created by Uralis  
from Nove Project

<u>id_unic</u>	<u>UPC</u>	<u>ucs</u>	<u>uts</u>	<u>station</u>	<u>Norg_GC</u>	<u>code_reg</u>	<u>irrigation</u>	<u>ferti_min</u>	<u>sequence</u>	<u>codevar_Mai</u>
279_1555.330327.BT.se.N1	279_1555	330084	330327	1555_sta.txt	0.13	24	0	1	BT	
279_1555.330327.BT-BT-Co.s	279_1555	330084	330327	1555_sta.txt	0.13	24	0	1	BT-BT-Co	
279_1555.330327.BT.se.N0	279_1555	330084	330327	1555_sta.txt	0.13	24	0	0	BT	
279_1555.330327.BT-BT-Co.s	279_1555	330084	330327	1555_sta.txt	0.13	24	0	0	BT-BT-Co	

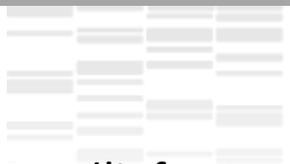


RECORD: Pas d'infrastructure de calcul en propre

Actuellement pas d'offre de calcul à l'INRA (hors ressources dédiées bioinformatique )

### **Etude de l'offre de calcul:**

- Calmip à Toulouse
- France Grille
- EGI émanation de France Grille, à l'échelle européenne
- useGalaxy.eu
- Muse@LR



RECORD: Pas d'infrastructure propre

Actuellement pas d'offre de calcul à l'INRA (hors ressources dédiées bioinformatique )

## Etude de l'offre de calcul:

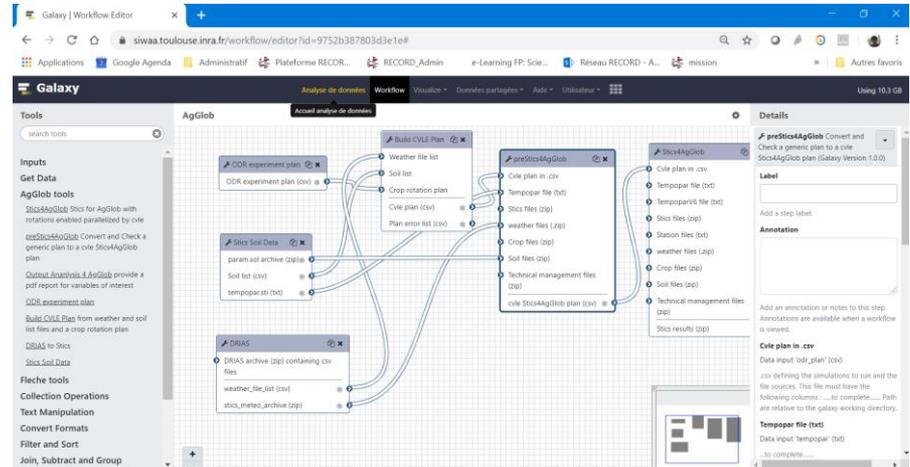
- Calmip à Toulouse
- France Grille
- EGI émanation de France O
- useGalaxy.eu
- **Muse@LR**

- Infrastructure organisée comme celle de Genotoul (INRA)
- Compétence technique du niveau de celle de l'équipe
- Support très efficace
- Compatible avec nos objectifs
- Tarification claire
- Même région: Occitanie

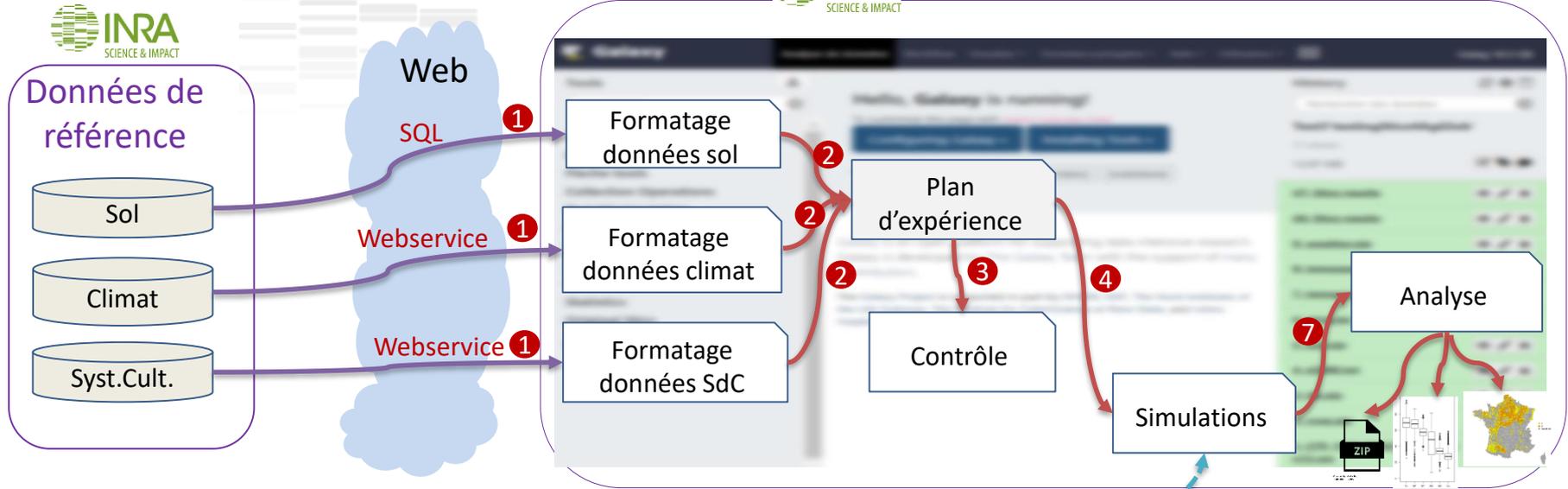
Galaxy <https://galaxyproject.org/>



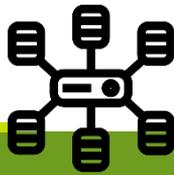
- Plateforme web
- Orientée fouille de données, gestion des données, archivage des données pour la recherche bioinformatique
- Moteur de workflow
- Opensource



# Chaîne de traitements développée avec Galaxy: WORKFLOW



MESO@LR



Created by Inria  
from Inria Project



Created by Inria  
from Inria Project



- WORKFLOW: enchaînement séquentiel de traitements.
- TOOL: un composant qui effectue un traitement.  
Reçoit en entrée des fichiers de données.  
Génère en sortie des fichiers.

Exemple de technologies utilisées pour composant « Simulation »:

Logiciel VLE

- Logiciel RECORD
- Ses dépendances

Software package simulateur

- Modèle
- Ses dépendances

Image docker

Image singularity

Wrapper XML



Created by Rogn Sapoton  
More Hour Project

## Témoignage de l'ouverture progressive de notre communauté au calcul intensif

### Impacts sur nos pratiques:

- S'appuyer sur des infrastructures de calcul existantes.
- Aller vers le développement de chaînes de traitement: (Galaxy)
  - Manipulables par les utilisateurs
  - Automatisées
  - Portables
  - Modulables
- Développer l'interopérabilité avec les données
- Faciliter l'analyse des résultats: data mining, outils de visu
- Assurer la reproductibilité



Merci pour votre attention