

La maison de la simulation

11 septembre 2014



Inria



MAISON DE LA SIMULATION

DOSSIER DE PRESSE

Contacts Presse

CEA : François LEGRAND | T. +33 (0)1 64 50 20 11 | francois.legrand@cea.fr

CNRS : Lucie DEBROUX | T. +33 (0)1 44 96 43 09 | lucie.debroux@cnrs-dir.fr

Sommaire

<u>UN CENTRE DE COMPETENCES SUR LE CALCUL INTENSIF DEDIE A LA COMMUNAUTE SCIENTIFIQUE ACADEMIQUE</u>	<u>3</u>
<u>LES OBJECTIFS DE LA MAISON DE LA SIMULATION</u>	<u>4</u>
DEVELOPPER LE CALCUL HAUTE PERFORMANCE POUR LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE	4
RECHERCHE, SERVICE ET FORMATION	4
CINQ CHAMPS D'INVESTIGATION POUR LA RECHERCHE ACADEMIQUE	5
<u>LA MAISON DE LA SIMULATION S'INSCRIT DANS LE DISPOSITIF NATIONAL POUR LE CALCUL INTENSIF</u>	<u>6</u>
<u>LA RECHERCHE A LA MAISON DE LA SIMULATION</u>	<u>7</u>
MODELISATION EN PHYSIQUE ET EN BIOLOGIE	7
MATHEMATIQUES APPLIQUEES & MODELISATION	7
INFORMATIQUE POUR LE CALCUL INTENSIF	8
GENIE LOGICIEL ET DEVELOPPEMENT D'APPLICATIONS	8
VISUALISATION ET EXPLORATION DES DONNEES (<i>DATA MINING</i>)	9
<u>LA FORMATION A LA MAISON DE LA SIMULATION</u>	<u>10</u>
RESEAU DES CENTRES DE FORMATION PRACE	10
PROJET EQUIP@MESO	10
PROGRAMME DE MASTERS	11
<u>CLUSTER ET MUR D'IMAGES : LES EQUIPEMENTS DE LA MAISON DE LA SIMULATION</u>	<u>12</u>
CLUSTER DE CALCUL - EQUIP@MESO	12
MUR D'IMAGES - DIGISCOPE	12
<u>QUELQUES PROJETS MENES A LA MAISON DE LA SIMULATION, DE LA CHIMIE A L'ASTROPHYSIQUE</u>	<u>13</u>
PHYSIQUE DES PLASMAS DE HAUTE INTENSITE : UN CODE OUVERT ET MODULAIRE	13
PROCESSEURS GRAPHIQUES : LES LOGICIELS PROFITENT PLEINEMENT DE LA PUISSANCE DE CALCUL DISPONIBLE	14
DES SUPERCONDENSATEURS A HAUTE DENSITE POUR LE STOCKAGE D'ENERGIE	16
PLASMA DE FUSION PAR CONFINEMENT MAGNETIQUE	17
LE CALCUL HAUTE PERFORMANCE POUR LA SIMULATION ET LA VISUALISATION DES SYSTEMES BIOLOGIQUES	18
<u>LES PARTENAIRES DE LA MAISON DE LA SIMULATION</u>	<u>19</u>
LE CEA ET LE CALCUL INTENSIF	19
LE CNRS ET LE CALCUL INTENSIF	19
L'INRIA ET LE CALCUL INTENSIF	20
L'UNIVERSITE PARIS-SUD ET LE CALCUL INTENSIF	20
L'UNIVERSITE VERSAILLES-SAINT-QUENTIN ET LE CALCUL INTENSIF	21

Un centre de compétences sur le calcul intensif dédié à la communauté scientifique académique

Avec le déploiement d'une infrastructure matérielle pour le calcul intensif, aussi bien au niveau national avec Genci¹ qu'au niveau européen dans le cadre de l'infrastructure de recherche Prace², les chercheurs ont maintenant accès à un parc de supercalculateurs de classe mondiale. De tels supercalculateurs devraient rendre possible des avancées majeures dans différents domaines scientifiques mais aussi bénéficier à la compétitivité industrielle. Atteindre ces objectifs impose de disposer d'applications conçues et optimisées pour une exécution des calculs en parallèle (sur des calculateurs ayant un très fort degré de parallélisme). De plus, l'exploitation des masses de données produites par les grandes simulations nécessite des outils de post-traitement et de visualisation adaptés. La complexité des architectures de systèmes de la classe *Petaflops* et celles des systèmes physiques à simuler représentent de grands défis. Seules des équipes pluridisciplinaires comptant des informaticiens spécialisés dans le calcul intensif (HPC : *High Performance Computing*), des spécialistes du traitement numérique et des experts des domaines scientifiques visés peuvent les relever.

Pour héberger de telles équipes, le CEA, le CNRS, Inria et les universités Paris-Sud et Versailles-St Quentin ont créé un laboratoire commun de service et de recherche baptisé 'Maison de la simulation' (MDS), sur le campus de Paris-Saclay.

Un nouveau laboratoire

La Maison de la simulation est un laboratoire créé en 2011. Il compte 4 enseignants-chercheurs à temps partiel, 8 ingénieurs et chercheurs ; 19 post-docs et doctorants. Il est l'un des 6 centres « *Prace Advanced Training Center* » (Pact) en Europe. Il participe aux Equipex 'Digiscope' et 'Equip@meso'.

¹ Créé en 2007 par les pouvoirs publics, Genci (Grand Equipement National de Calcul Intensif) porte la stratégie nationale d'équipement des trois centres nationaux de calcul (TGCC, Idris, Cines), participe à la création d'un écosystème intégré du calcul intensif à l'échelle européenne et assure la promotion de la simulation numérique et du calcul intensif auprès des chercheurs et des industriels. www.genci.fr

² PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) met à disposition des chercheurs et industriels européens six supercalculateurs d'une puissance globale de 15 Pflop/s. Cette infrastructure européenne de recherche compte 25 pays membres dont la France. www.prace-ri.eu

Les objectifs de la Maison de la simulation

Développer le calcul haute performance pour la recherche scientifique

Le laboratoire répond à quatre grands objectifs :

- favoriser l'émergence en France d'une communauté du calcul intensif ;
- favoriser l'utilisation efficace des infrastructures de calcul par les chercheurs français ;
- préparer les utilisateurs et adapter les logiciels pour les futures machines ;
- développer de fortes synergies entre ingénieurs et chercheurs de plusieurs disciplines. Ces initiatives visent les utilisateurs actuels des centres de calcul existants, ainsi que ceux qui projettent d'y accéder pour les besoins de leur recherche.

Recherche, service et formation

Pour atteindre ces objectifs, la Maison de la simulation développe ses activités dans trois directions :

- un centre de recherche pluridisciplinaire sur la simulation numérique et la modélisation. Il héberge des équipes de recherche regroupant chercheurs et ingénieurs autour de projets liés au calcul intensif ;
- une unité de service et d'expertise ouverte sur les communautés scientifiques. Une équipe d'ingénieurs spécialistes du calcul intensif fournit une expertise et une aide au développement de codes de calcul de haut niveau. Cette expertise concerne l'algorithmique parallèle, l'optimisation des codes, les schémas numériques ainsi que la visualisation et le post-traitement des données. Elle travaille à l'émergence et à la promotion d'outils numériques communautaires ;
- un pôle d'enseignement (formation initiale et formation permanente) et d'animation scientifique en calcul intensif.

Au cœur du campus Paris-Saclay

Disposant d'une implantation centrale sur le campus Paris-Saclay, la Maison de la simulation souhaite susciter des initiatives similaires sur d'autres sites. La Maison de la simulation bénéficie de deux implantations physiques : des bureaux et une salle de formation, ainsi que son mur d'images Digiscope sont situés au sein du bâtiment Digiteo Labs, près du CEA Saclay, tandis que son cluster de calcul et d'autres bureaux sont localisés à quelques kilomètres de distance, à l'Idris (CNRS), sur le plateau du Moulon.

Cinq champs d'investigation pour la recherche académique

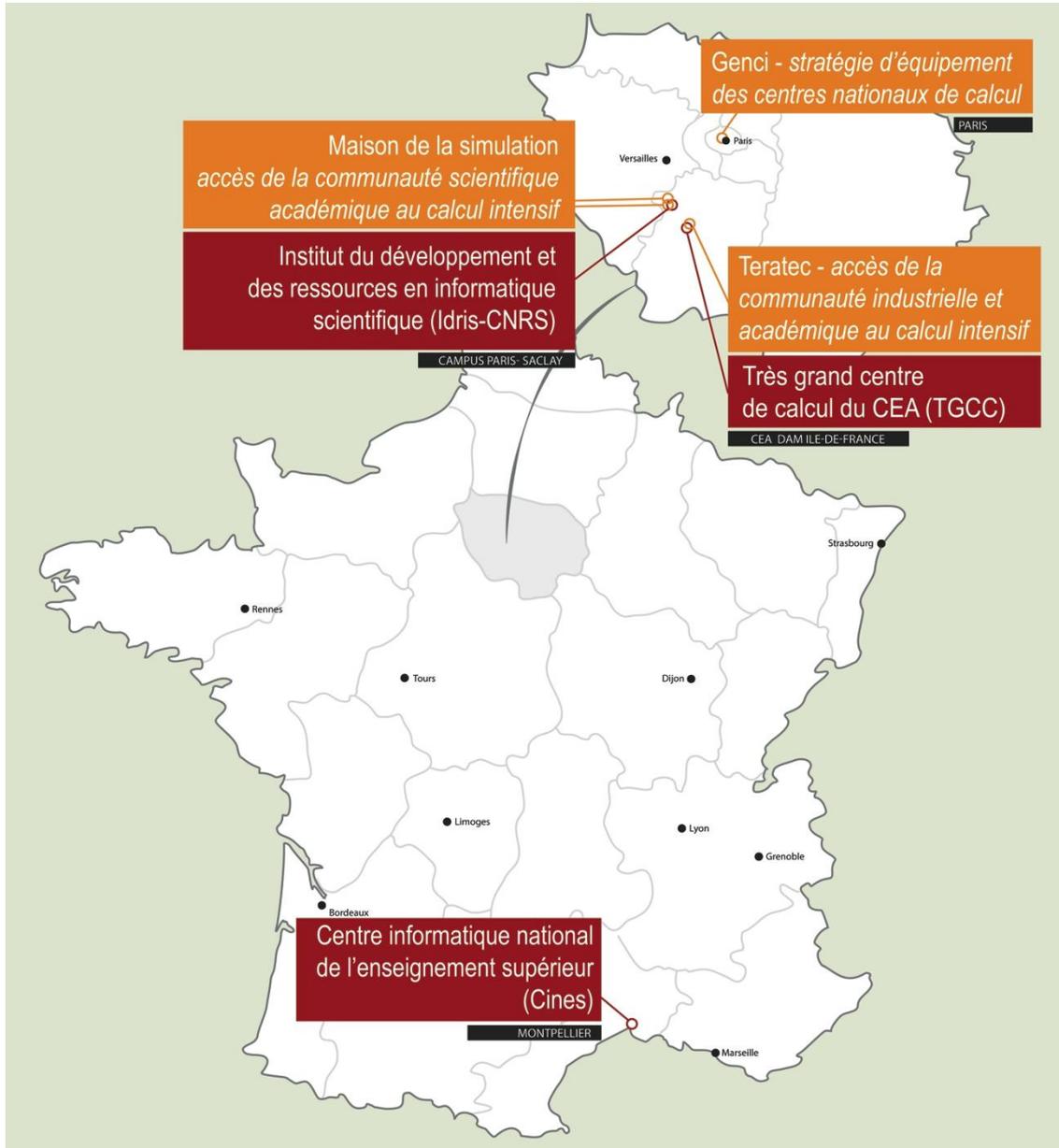
Le laboratoire compte cinq pôles thématiques pour ses activités :

- Modélisation en physique et en biologie
- Mathématiques appliquées et modélisation
- Informatique pour le calcul haute performance
- Ingénierie logicielle et développement d'applications
- Visualisation et exploration des données (*data mining*)

La Maison de la simulation est principalement destinée à venir en appui à la communauté scientifique académique. Elle est ainsi complémentaire de Teratec qui fédère, pour sa part, plus de 80 acteurs du domaine de la simulation numérique : industriels et académiques, offreurs et utilisateurs.³

³ Le campus Teratec, situé à Bruyères-le-Châtel, auprès du Très Grand Centre de Calcul du CEA (TGCC) à 20 kilomètres au sud du Campus Paris-Saclay, regroupe en un même lieu de grands acteurs industriels (constructeurs, éditeurs, offreurs de service), une pépinière d'entreprises spécialisées en simulation numérique et des laboratoires communs de recherche. www.teratec.eu

La Maison de la simulation s'inscrit dans le dispositif national pour le calcul intensif



La recherche à la Maison de la simulation

Modélisation en physique et en biologie

La Maison de la simulation investit quelques domaines scientifiques sélectionnés où les apports du calcul intensif sont essentiels. Ces domaines concernent les communautés qui ont déjà une solide expérience dans le calcul telles que la climatologie ou la fusion par confinement magnétique, mais aussi des communautés où le calcul intensif n'est pas encore fortement organisé comme dans les sciences du vivant. La Maison de la simulation fournit une expertise et constitue une plaque tournante pour favoriser les collaborations au sein et entre les communautés scientifiques.

Appel à projets

Suite à un appel à projet national, le laboratoire a mis en place deux chaires d'excellence permettant à des projets innovants et ambitieux de s'implanter à la Maison de la simulation. Le premier projet sélectionné concerne la modélisation des supercondensateurs (voir plus loin) pour le stockage de l'énergie et le second concerne le développement d'un code de transport par la méthode de Monte-Carlo avec des applications en physique nucléaire et en imagerie médicale. Ces projets ont une durée de trois à cinq ans. Ils reposent sur une approche pluridisciplinaire visant le développement de méthodes numériques originales. Les projets sélectionnés bénéficient de l'environnement scientifique multidisciplinaire de la Maison de la simulation et se voient attribuer des ressources pour créer une petite équipe (ingénieurs, doctorants et post-docs).

Couplage des modèles à plusieurs échelles et plusieurs paramètres physiques

La disponibilité d'ordinateurs multi-pétaflopiques⁴ (voire exaflop vers la fin de la décennie) ouvre de nouvelles possibilités pour l'astrophysique, les sciences des matériaux, la fusion par confinement inertiel, entre autres. Ainsi, en astrophysique, les principaux défis scientifiques clés nécessitent de faire appel à des simulations multi-échelles et multi-physiques. Le programme scientifique de la Maison de la simulation prévoit l'étude et la conception d'applications logicielles adaptées aux futures architectures de supercalculateurs et de solutions utilisant les ressources de calcul multicoeurs.

Mathématiques appliquées & modélisation

L'étude des équations aux dérivées partielles (EDP) est une composante historique et naturelle du calcul scientifique. Les nouvelles architectures de calculateurs doivent être prises en compte afin d'utiliser efficacement la prochaine génération d'ordinateurs de calcul intensif. Les chercheurs de la Maison de la simulation s'intéressent à quatre grandes questions où l'étude EDP joue un rôle clé pour le calcul intensif : améliorer la robustesse et l'efficacité des algorithmes (stratégies de

⁴ pétaflopique : qui est capable de réaliser un million de milliards d'opérations par seconde

discrétisation) ; enrichir les simulations tout en préservant l'efficacité des algorithmes (conditions aux limites en modifiant l'objectif initial fixé des équations aux dérivées partielles) ; augmenter la complexité des modèles (couplage de différents modèles pour des simulations multi-physiques ou multi-échelles des phénomènes) ; développer de nouvelles stratégies de résolution asynchrones (découpage du problème en sous problèmes à traiter indépendamment les uns des autres).

Informatique pour le calcul intensif

Rationalisation globale du calcul

Les chercheurs et les ingénieurs de la Maison de la simulation étudient de nouvelles méthodes itératives adaptées pour les futurs supercalculateurs Exascale⁵. Il s'agit de minimiser le nombre d'itérations, la durée de chaque itération ainsi que le nombre de communications et la quantité d'énergie nécessaire au calcul.

Big Data

Dans de nombreux problèmes concrets, il est nécessaire d'être en mesure de traiter de très grands ensembles de données. La gestion d'ensembles de type 'Big Data' est donc un axe d'étude de la Maison de la simulation. La dynamique des collaborations internationales de la Maison de la simulation permettra d'accéder aux plus grands ordinateurs disponibles dans le monde et à des ensembles de données pertinentes.

Génie logiciel et développement d'applications

Amélioration continue

Une mission centrale de la Maison de la simulation est de fournir un appui aux utilisateurs pour leur permettre le meilleur usage possible de l'infrastructure de calcul actuelle. Il s'agit d'optimiser les codes existants dans leur exploitation sur des architectures traditionnelles.

Approche pro-active

En parallèle, la Maison de la simulation développe une approche plus pro-active où des informaticiens sont impliqués dans un projet dès le début, en aidant à définir les spécifications du code et son design *ab initio*. Cette stratégie de co-développement est de loin la meilleure façon de créer des outils de simulation haut de gamme capables d'exploiter pleinement les ressources disponibles sur des supercalculateurs. Dans ce contexte, la relation étroite de la Maison de la simulation avec les communautés utilisatrices, les grands centres informatiques et les équipementiers est essentielle.

⁵ En 2010, le leader mondial du microprocesseur INTEL crée trois centres de recherche sur l'Exascale en Europe, dont un en France, Exascale Computing Research, en collaboration avec le CEA, GENCI et l'UVSQ (www.exascale-computing.eu) ;

Approche modulaire

La Maison de la simulation conçoit aussi des architectures logicielles efficaces mais modulaires, deux caractéristiques antagonistes, non seulement du point de vue des performances, mais aussi du point de vue de la physique. Cela contribuera à la mise en œuvre de codes capables de simuler en multi-physique ou en multi-géométrie des problèmes avec les performances optimales et une accessibilité facilitée (par exemple, afin qu'un physicien puisse utiliser le code de manière autonome).

Visualisation et exploration des données (*data mining*)

Suivre le calcul en temps réel

La visualisation ne se limite plus à une étape de simple optimisation de post-traitement des résultats du calcul. En effet, la modélisation implique une utilisation combinée et conjointe de la visualisation et du calcul. La Maison de la simulation va développer des outils très innovants de visualisation / analyse des données et les mettre à la disposition de la communauté scientifique. Ces travaux s'inscrivent dans le cadre du projet Digiscope⁶. Les premiers développements seront réalisés en propre à la Maison de la simulation, puis en collaboration avec les centres de calcul, afin de disposer d'un affichage « en temps réel » des données issues des grands calculateurs nationaux. Le but est d'offrir aux utilisateurs la capacité d'interagir, de conduire le calcul et de contrôler les valeurs de paramètres qui guident la simulation.

Révéler des détails nouveaux

Les dispositifs de visualisation offrent également de nouvelles possibilités de travail collaboratif où les chercheurs peuvent échanger des informations relatives aux résultats de la simulation à l'aide d'un mur d'images. De nouvelles formes de visualisation (rendu en temps réel, affichage des collecteurs, des particules ou des textures) aideront à caractériser des phénomènes encore mal compris. Elles permettront aussi de rendre compte en temps réel de la qualité de la modélisation. Toutes ces nouvelles fonctionnalités faciliteront l'interaction entre les acteurs de différentes disciplines (physiciens, analystes numériques, programmeurs, graphistes...), stimuleront l'innovation, la créativité et ouvriront la voie à de nouveaux moyens de « produire la science ».

⁶ Le projet Digiscope, porté par Digiteo, est lauréat de l'appel « Équipement d'Excellence » lancé dans le cadre du programme des investissements d'avenir, dans la catégorie Sciences Informatiques. Lancé depuis fin mars 2011, il implique 8 établissements du plateau de Saclay et d'Île-de-France et 11 laboratoires, et doit durer 10 ans. www.digiteo.fr/equipex-digiscope

La formation à la Maison de la simulation

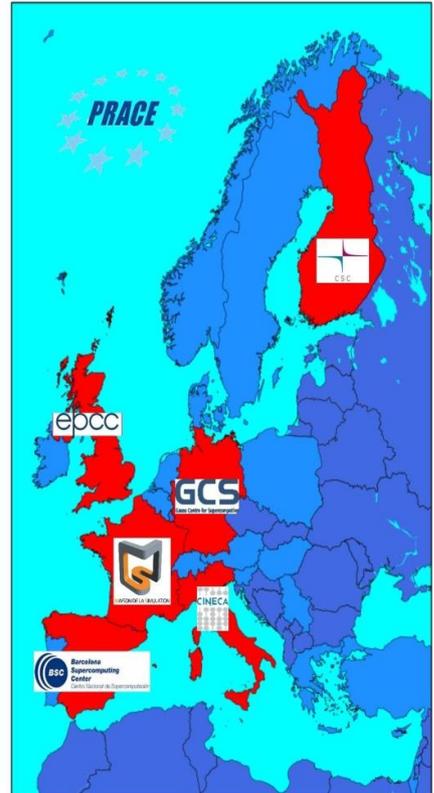
Le calcul intensif est un domaine qui évolue rapidement et les besoins de formation spécifique sont en augmentation. La Maison de la simulation participe à plusieurs programmes de formation, au niveau national et européen, et participe également à des masters spécialisés.

Réseau des centres de formation Prace

La Maison de la simulation coordonne la partie France du réseau de formation mis en place par Prace au niveau européen. Six Prace Advanced Training Center (Pact) ont ainsi été établis (voir ci-contre). Ils offrent un programme coordonné et des possibilités de formation de pointe pour l'ensemble des chercheurs et ingénieurs européens, qu'ils viennent du monde académique ou de l'industrie.

Le « Pact français » réunit les trois centres de calcul nationaux (Cines, Idris et TGCC), Inria et la Maison de la simulation elle-même. Il couvre des sujets de base (MPI, OpenMP) et des plus pointus tels que la programmation, les accélérateurs, les bibliothèques numériques et la visualisation scientifique.

Au cours des deux premières années (juin 2012-juin 2014), le « Pact français » a organisé 27 sessions de formation, pour un total de 78 jours de formation et 320 participants.



Projet Equip@meso

La Maison de la simulation est responsable de la formation dans le projet Equip@meso. Financé dans le cadre du programme Investissements d'Avenir 2010 et coordonné par Genci, le projet regroupe quinze partenaires. Il vise notamment à implanter le calcul intensif en région et à servir de tremplin pour l'accès aux machines nationales et européennes. Chaque année, quatre sessions de formation sont organisées, ainsi qu'un séminaire de présentation des meilleures réalisations des partenaires (mésoschallenges).



Programme de masters

La Maison de la simulation assure des enseignements dans le cadre des masters « Modélisation & simulation » (M2S) et « Informatique haute performance et simulation » (MIHPS). Ces masters forment des scientifiques, chercheurs ou ingénieurs de haut niveau en modélisation mathématique, en simulation appliquée aux sciences physiques et en informatique pour le calcul intensif. Ces masters font partie des "formations emblématiques" qui intégreront l'offre de formation de l'Université Paris-Saclay ; ils bénéficient du soutien de la Maison de la simulation et de Teratec.

<http://www.maisondelasimulation.fr/m2s/>

Cluster et mur d'images : les équipements de la Maison de la simulation

La Maison de la simulation possède deux équipements lourds. Un cluster de calcul acheté dans le cadre du projet Equip@meso, coordonné par Genci, et un mur de visualisation financé par le projet Digiscope. Les financements associés proviennent du programme d'investissement d'avenir Equipex.

Cluster de calcul - Equip@meso

Le cluster Poincaré comprend environ 1500 cœurs de calcul ainsi que des cartes GPU. Il est équipé d'un réseau rapide InfiniBand et d'un système de stockage de 50To. Il est principalement utilisé pour le développement et l'optimisation de codes ainsi que pour la formation. Lors de formations, l'ensemble de la machine peut-être réservé pour les étudiants si cela s'avère nécessaire. Ce cluster est hébergé et administré par l'Ildris (CNRS).

Mur d'images - Digiscope

Le mur d'image de la Maison de la simulation est installé dans le bâtiment Digitéo/Saclay. Il a été choisi après une longue analyse des différentes technologies disponibles menée dans le cadre du groupe technique de Digiscope. Ce mur est composé de 16 (4x4) cubes Barco OLS521. Ces cubes permettent un affichage stéréoscopique et ont des bords très fins (moins de 0.8mm). La résolution globale du mur est de 33 millions de pixels, ce qui en fait l'un des murs les plus résolus disponibles pour la communauté scientifique. Barco fournit également l'ensemble du système de contrôle vidéo. Ce mur d'image est couplé à un cluster de calcul permettant de traiter d'importants volumes de données. Ce cluster comporte notamment un nœud maître avec 64 cœurs de calcul, 2To de mémoire et un carte graphique Nvidia K5000 ainsi que quatre nœuds de rendus avec chacun 128 Go de mémoire, 12 cœurs et une carte K5000. Cet équipement est entièrement opéré par la Maison de la simulation mais c'est une plateforme unique d'analyse de données ouverte à l'ensemble de la communauté scientifique. Un système de télé-présence permettra, dans un avenir proche, de relier le mur d'image de la Maison de la simulation aux autres plateformes de visualisation du projet Digiscope, dans le but de développer des méthodes de travail collaboratif à distance.

Caractéristiques des nœuds

- 92 nœuds de calculs équipés de :
 - 2 processeurs Sandy Bridge E5-2670 (2.60GHz, 8 cœurs par processeur, soit 16 cœurs par nœud)
 - 32 Go de mémoire par nœud
 - 4 nœuds GPU équipés de :
 - 2 processeurs Sandy Bridge E5-2670
 - 64 Go de mémoire par nœud
 - 2 GPU Tesla K20 (Cuda Capability 3.5, 4.8 Go de mémoire par GPU)
 - 4 frontales interactives équipées de :
 - 2 processeurs Sandy Bridge E5-2670
 - 32 Go de mémoire par nœud
 - 2 nœuds de calcul "large" équipés de :
 - 4 processeurs AMD Opteron 6282 (2.60GHz, 16 cœurs par processeur, soit 64 cœurs par nœud)
 - 128 Go de mémoire par nœud
-

Quelques projets menés à la maison de la simulation, de la chimie à l'astrophysique

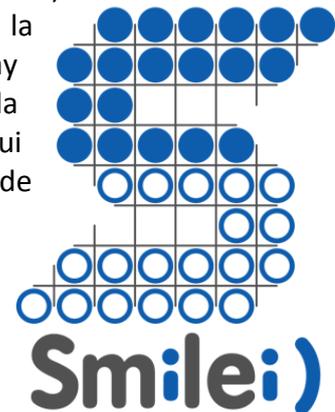
Physique des plasmas de haute intensité : un code ouvert et modulaire

Smilei (Software for Matter Interacting with Laser at Extreme Intensities) est un code de simulation PIC (*particles in cell*) résultant de la coopération entre plusieurs laboratoires du Campus Paris-Saclay spécialisés dans les interactions laser/plasma et la Maison de la Simulation. Il est notamment destiné à modéliser les expériences qui seront menées sur le laser Apollon, actuellement en cours de construction sur le Campus Paris-Saclay.

Ce projet a été lancé début 2013 pour répondre aux besoins exprimés par une large communauté laser/plasma en matière de nouvelles simulations (physique des hautes intensités, précision et volumétrie des simulations). Aujourd'hui d'autres laboratoires, tant de la communauté physique que de la communauté HPC, se joignent à ce projet. De par la variété des nombreux besoins identifiés par les différents laboratoires, la Maison de la Simulation a proposé une architecture de code modulaire en langage C++. Il permet ainsi d'examiner différentes questions de physique liées aux plasmas (physique, géométrie, les solveurs ou diagnostic) sans impacter les performances et la viabilité du code. D'autres part les structures de données mises en oeuvre sont flexibles pour pouvoir adapter Smilei à l'architecture des futurs supercalculateurs.

Il est conçu en mode 'open source' et ainsi une communauté scientifique - non restreinte à celle des interactions plasma/lasers - peut se l'approprier, le faire évoluer et l'enrichir. Physiciens et informaticiens peuvent expérimenter de nouveaux paradigmes de calcul. C'est typiquement l'esprit dans lequel la Maison de la simulation conduit ses travaux : des logiciels fédérateurs, souples, adaptables à différentes architectures de calculateurs et à différentes problématiques scientifiques.

La version actuellement opérationnelle de Smilei traite des problèmes cartésiens en une et deux dimensions (un projet d'étude en cours porte sur l'amplification Brillouin en 2D : autofocalisation et filamentation). Les développements se poursuivent pour permettre d'une part le traitement de problèmes en trois dimensions et pour prendre en compte de nouveaux éléments de physique tels que l'émission de photons de haute énergie, la production de paires électroniques ou l'accélération des électrons.



En savoir plus sur Smilei

Julien Derouillat julien.derouillat@cea.fr

<http://www.maisondelasimulation.fr/en/Phocea/Page/index.php?id=94>

Processeurs graphiques : les logiciels profitent pleinement de la puissance de calcul disponible

Exploiter la puissance de calcul disponible des nouvelles architectures massivement multi-cœurs

L'avènement des processeurs graphiques (Graphics Processors Unites - GPU) permet d'accéder à de plus grandes capacités de calcul. De ce fait, il a ouvert une nouvelle ère du calcul scientifique. De plus, les GPU permettent de réduire significativement la puissance électrique consommée pour le calcul, par rapport à des processeurs classiques.

De tels processeurs sont aujourd'hui couramment utilisés dans beaucoup de supercalculateurs et dans de très nombreux systèmes embarqués comme les smartphones, les tablettes et d'autres objets mobiles. Mais les codes de calculs existants doivent être adaptés à ces nouvelles architectures afin de profiter au maximum de la puissance de calcul disponible et d'effectuer des tâches en parallèle sur plusieurs centaines, voire plusieurs milliers de processeurs. L'écriture et l'optimisation de tels codes massivement parallèles requièrent l'utilisation d'outils innovants pour garantir la performance et l'exactitude du code, de bibliothèques logicielles adaptées et la maîtrise de l'architecture intrinsèque des processeurs.

La conception de codes de simulation efficaces est un enjeu important, en particulier parce que l'accès aux très grands calculateurs est très concurrentiel. Il est donc indispensable de démontrer que les codes sont capables d'utiliser au mieux les ressources de calcul disponibles. De plus, un code optimisé pourra résoudre des problèmes scientifiques plus complexes pour une capacité de calcul donnée et donc plus à même de dépasser l'état de l'art d'une discipline scientifique donnée.

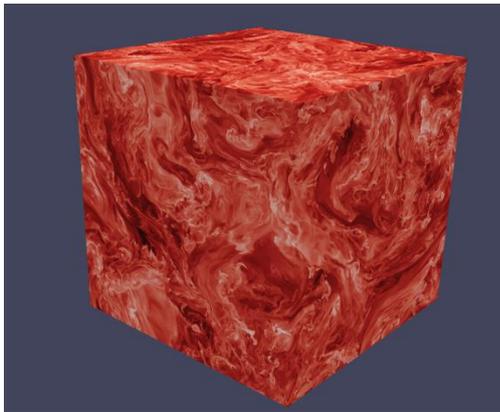
RamsesGPU : un code pour simuler des écoulements fluides en astrophysique

Les astrophysiciens de l'Institut de recherche sur les lois fondamentales de l'Univers (CEA Irfu) ont développé, depuis 2002 un code baptisé Ramses, dédié à la simulation de systèmes astrophysiques bien représentés par un modèle de fluide compressible, magnétisé, auto-gravitant. Le code est utilisé, par exemple, pour simuler les disques d'accrétion des systèmes proto-planétaires (système solaire et proto planètes en formation). Les ingénieurs de la Maison de la simulation ont repris la structure mathématique du code existant et l'ont totalement écrite dans un langage compatible avec la programmation des cœurs GPU.

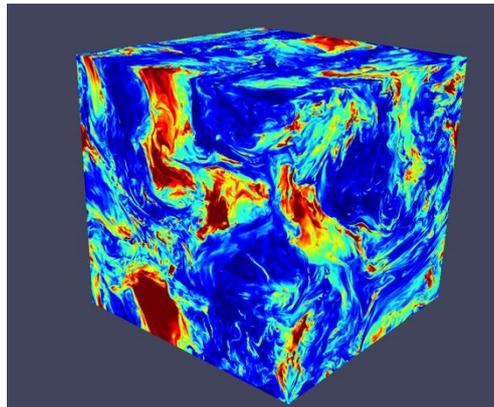
En collaboration avec le CEA Irfu, ils ont ensuite mis en œuvre le nouveau code, baptisé RamsesGPU, sur le supercalculateur Prace/Curie (Genci) localisé à Bruyères-le-Châtel (Essonne). Ils ont ainsi réalisé une simulation avec la plus haute résolution jamais atteinte pour une étude des turbulences protoplanétaires : une grille de 1600 x 800 x 800 éléments. Le calcul a été réalisé sur 256 processeurs GPU. Par comparaison, il aurait fallu le mettre en œuvre sur plus de 4000 cœurs CPU conventionnels (x86), pour obtenir le même résultat dans le même temps.

Par ailleurs, le code RamsesGPU a été mis en œuvre sur deux des plus gros ordinateurs disponibles aux Etats-Unis : XSEDE/Keeneland et OLCF/TitanGPU (le plus puissant calculateur GPU au Monde). Les ingénieurs de la Maison de la simulation, en collaboration avec leurs collègues du CEA Irfu et de l'Université de Californie à San Diego, ont fait fonctionner leur code sur 4096 processeurs GPU en parallèle avec une efficacité de 78 %. La simulation ainsi réalisée comptait plus de 64 milliards (4096^3) d'éléments unitaires (cellules), soit la plus haute résolution spatiale jamais atteinte dans la simulation de la turbulence magnétohydrodynamique compressible, modélisant la dynamique du milieu interstellaire dans lequel se forment les nouvelles étoiles.

Fluctuations turbulentes d'un écoulement magnéto-hydrodynamique à fort nombre de Mach, calculé avec le code RamsesGPU sur la machine OLCF/Titan en utilisant la résolution 2048^3 nécessitant 512 GPU pendant 5 jours.



Cette image représente les fluctuations de la densité de matière en échelle logarithmique, i.e. les zones blanches contiennent environ 10 000 fois plus de matière que les zones noires, le rouge représente toutes les valeurs intermédiaires.



Cette image représente l'énergie cinétique du fluide calculée lors de la même simulation.

En savoir plus sur RamsesGPU

Pierre Kestener : pierre.kestener@cea.fr

<http://www.maisondelasimulation.fr/projects/RAMSES-GPU/html/index.html>

Des supercondensateurs à haute densité pour le stockage d'énergie

Pour répondre à la demande croissante et délocalisée d'énergie dans différents appareils et pour compenser l'intermittence des sources d'énergie solaire et éolienne, les scientifiques cherchent à concevoir et à mettre au point des systèmes de stockage électrique de faible poids et pour un coût modique.

Les supercondensateurs sont capables de fournir une grande puissance en quelques secondes, et sont ainsi complémentaires des batteries lithium-ion dans de nombreuses applications. Elles sont actuellement utilisées dans la fonction marche / arrêt des véhicules hybrides ou des portes de secours de l'A380.

Les supercondensateurs fonctionnent sur un principe d'électrochimie par adsorption réversible d'ions dans des électrodes de carbone poreux. Récemment, il a été démontré qu'on peut obtenir une forte augmentation de la capacité de stockage d'électricité en utilisant des électrodes dont les pores (dans lesquels pénètrent les ions de l'électrolyte) sont de taille nanométrique.

Une équipe de la Maison de la simulation cherche à comprendre les mécanismes qui entrent en jeu dans ces pores nanométriques grâce à la dynamique moléculaire. Les simulations modélisent de façon quantitative et réaliste la structure des électrolytes adsorbés à l'intérieur des électrodes de carbone. Elles ont permis de caractériser différents types d'adsorption en fonction du degré de confinement des ions dans les pores de l'électrode. La désolvatation des ions et la charge électrique localement stockée à la surface de l'électrode augmentent avec le degré de confinement, ce qui permet d'expliquer l'augmentation de la capacité des supercondensateurs munis d'électrodes en carbone nanoporeux.

En savoir plus sur les supercondensateurs

Daniel Borgis (CNRS), Directeur adjoint de la Maison de la simulation et chercheur au laboratoire Pasteur (CNRS/UPMC/ENS) - daniel.borgis@ens.fr
Tel : 06 15 53 86 03 / 01 69 08 07 63

Mathieu Salanne (UPMC), chercheur au laboratoire Phenix (CNRS/UPMC) - mathieu.salanne@upmc.fr
Tel : 01 44 27 32 65 / 06 62 94 44 82

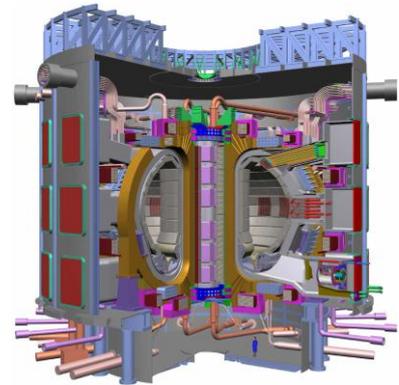
<http://www2.cnrs.fr/presse/communique/2525.htm>

Plasma de fusion par confinement magnétique

L'Institut de recherche sur la fusion magnétique (CEA IRFM) développe depuis une dizaine d'années plusieurs codes pour simuler le comportement du plasma dans les machines dites «tokamak» utilisées pour l'étude de la fusion nucléaire, comme Tore Supra ou Iter.

L'un de ces codes, baptisé Gysela, constitue un outil d'analyse de la relation complexe entre flux de matière, transport de chaleur, instabilités et turbulences. Les modèles qu'il fournit doivent permettre d'améliorer la compréhension des mécanismes de confinement et la définition des conditions nécessaires à l'allumage de la réaction de fusion dans les grands tokamaks.

En collaboration forte avec le CEA IRFM, les chercheurs de la Maison de la simulation ont entièrement repensé plusieurs schémas de communication entre les nœuds de calcul, optimisé le parallélisme interne aux nœuds de calcul ainsi que les



© Iter

lectures/écritures sur disques. Ils ont aussi conçu une bibliothèque (module logiciel réutilisable) pour analyser et optimiser les allocations de mémoire vive.

Grâce à ces développements, ils ont pu faire fonctionner le code sur l'intégralité du supercalculateur Juqueen qui compte 453 752 cœurs de calcul (Centre de recherche de Jülich, Allemagne) avec une efficacité relative de 91% en utilisant 1 835 008 tâches en parallèles.

Cette étape prépare l'exécution de ce code sur la prochaine génération de machines de calcul (dites Exascale) 1000 fois plus performantes que celles sur lesquelles il fonctionne aujourd'hui. Il sera alors possible aux physiciens de prendre en compte, dans la simulation, des paramètres très spécifiques des électrons, pour affiner leur modélisation du comportement du plasma.

En savoir plus sur Gysela5D

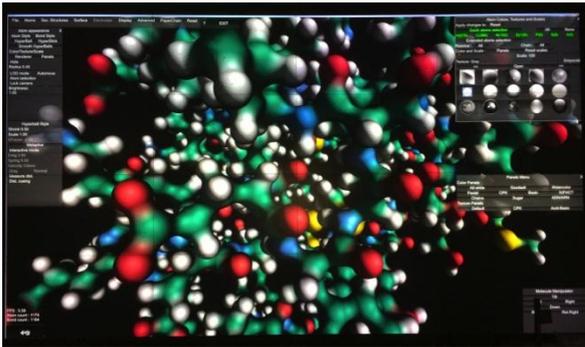
Julien Bigot : julien.bigot@cea.fr

<http://gyseladoc.gforge.inria.fr>

Le calcul haute performance pour la simulation et la visualisation des systèmes biologiques

Le calcul intensif permet de modéliser, de façon de plus en plus réaliste et avec une très bonne résolution, la structure tridimensionnelle de molécules complexes telles que le virus de la grippe ou des récepteurs membranaires présents dans le cerveau humain. Des recherches menées au sein de la Maison de la simulation s'attachent à étudier ces structures et à comprendre les liens entre la configuration et le fonctionnement des molécules.

En s'intéressant par exemple à l'impact de la structure 3D sur le mode d'action d'un récepteur associé à des anesthésiques généraux, ces recherches constituent une première étape vers la conception de nouveaux composés, plus spécifiques et présentant moins d'effets secondaires. Ce type de modélisation est également utilisé pour étudier de quelle façon des assemblages de protéines évoluent avec la température et comment ces changements peuvent expliquer les variations saisonnières dans la virulence du virus de la grippe.



Le mur d'images de la Maison de la simulation plonge le chercheur au sein d'une protéine géante représentée à l'aide du logiciel UnityMol.

© Martial Mancip / Marc Baaden

Les masses de données générées par les supercalculateurs nécessitent également de développer des méthodes de simplification et des instruments permettant de les visualiser au mieux. Des projets de recherche sont développés à la Maison de la simulation pour obtenir une visualisation originale et immersive de données biologiques et avoir la possibilité d'interagir avec les simulations en cours.

Le programme de visualisation moléculaire UnityMol est l'un des outils mis en place. Grâce à lui, l'utilisateur peut visualiser la structure d'une molécule et la manipuler tout en respectant ses propriétés mécaniques et biophysiques intégrées dans le modèle. À l'écran, les molécules changent d'apparence, les atomes s'apparient et se séparent, les liens apparaissent, s'allongent et cette visualisation interactive des données permet de tester des hypothèses scientifiques.

En savoir plus sur ce thème

Marc Baaden (CNRS), Directeur de recherche au Laboratoire de biochimie théorique (CNRS) - Institut de biologie physico-chimique

baaden@smplinux.de /

Marc.Baaden@ibpc.fr

Tel : 01 58 41 51 76 / 06 09 84 32 17

<http://www2.cnrs.fr/presse/communiquede/2064.htm>

http://www.cnrs.fr/inc/communication/direct_labos/baaden.htm

Les partenaires de la Maison de la simulation

Le CEA et le calcul intensif

Le CEA, acteur majeur de la recherche et de l'innovation, est reconnu comme un expert du calcul intensif grâce à l'impulsion du « Programme Simulation » porté par sa Direction des applications militaires. Les défis que le calcul intensif doit relever dans les prochaines années sont multiples : développement d'architectures matérielles et logicielles permettant d'accéder aux très grandes puissances de calcul ; méthodes de modélisation couplant différentes échelles et modèles physiques ; maîtrise de très grands volumes de données.

C'est pourquoi le CEA conduit ses activités sur le calcul intensif sur trois axes stratégiques :

- la définition et la mise en service de moyens de calculs disposant des architectures répondant aux besoins de la simulation,
- le développement des logiciels de simulation correspondants,
- un investissement important en terme de recherche et développement.

En savoir plus : www-hpc.cea.fr

Le CNRS et le calcul intensif

Le calcul intensif et son écosystème (moyens de calcul, de communication et de stockage, traitement et exploitation des données...) sont au cœur de la plupart des avancées de la recherche au sein du CNRS comme dans l'ensemble de la communauté scientifique. Les enjeux ne sont pas seulement scientifiques mais aussi sociétaux, économiques, financiers et éthiques.

Modélisation et simulation étant donc essentielles pour de multiples avancées scientifiques, la maîtrise de tous les aspects du calcul haute performance ainsi que la capacité à exploiter les masses de données afin d'aborder la résolution de ces modèles complexes sont incontournables. C'est un exercice pluridisciplinaire dans lequel un organisme tel que le CNRS se doit par nature d'exceller.

L'importance du calcul intensif pour le CNRS s'est concrétisée par la parution du « Livre Blanc sur le Calcul Intensif au CNRS » en 2012 et la formalisation d'une stratégie autour du calcul et des données en 2013-2014. Tous ces éléments ne font que souligner l'importance stratégique du calcul intensif et du « Big Data » au CNRS ainsi que la taille des communautés de recherche concernées (de l'ordre de 2500 chercheurs pour le calcul intensif).

Retrouvez le Livre Blanc sur le Calcul Intensif au CNRS sur : http://www.cnrs.fr/ins2i/IMG/pdf/Livre_blanc_-_derniere_version.pdf

L'Inria et le calcul intensif

Au sein d'Inria, plus de 30 équipes-projets sont concernées par le calcul intensif. Les activités des chercheurs Inria dans le HPC vont de la conception d'environnements logiciels (supports d'exécution, compilation pour processeurs avancés) aux applications (physique des plasmas, qualité de l'air, simulations cardiaques), en passant par des bibliothèques numériques (algèbre linéaire, maillages). Afin de tirer parti de compétences variées en mathématiques, calcul et simulation, mais aussi en algorithmique, en programmation ou en architectures, Inria soutient sur le sujet du HPC deux *Inria Project Lab* - actions transversales impliquant plusieurs équipes-projets - dédiés au HPC, Hemera et CS2@Exa.

Historiquement, le HPC génère une importante activité de transfert en particulier à destination des grandes entreprises. Inria soutient par ailleurs l'initiative HPC-PME qui propose d'aider les PME à intégrer le HPC dans leurs processus par le biais d'un premier projet industriel créateur de valeur. Plusieurs start-up issues d'Inria se sont d'ailleurs créées dans le secteur du HPC.

A l'international, Inria et l'université d'Urbana Champaign ont mis en place une collaboration autour des ordinateurs à échelle pétaflopique et au-delà. Et avec le Cerfacs a été créé un laboratoire de recherche commun pour répondre aux enjeux de la simulation numérique haute performance. Inria a également des collaborations avec les Universités de Stanford et de Berkeley, ainsi qu'au Brésil autour de la prospection des ressources pétrolières.

La participation d'Inria à la Maison de la simulation permet une ouverture vers des communautés scientifiques variées, et pouvant donner lieu à des transferts de connaissance, et à de nouvelles directions de recherche. Elle s'inscrit naturellement dans le cadre des partenariats stratégiques déjà existants (avec Bull, EDF, le CEA ou Genci).

L'Université Paris-Sud et le calcul intensif

L'Université Paris-Sud est l'une des plus prestigieuses universités en Europe sur le plan de la recherche. Classée parmi les premiers établissements d'enseignement supérieur français et 42^e mondial au classement de Shanghai 2014, elle est un acteur majeur de la création de l'Université Paris-Saclay.

Pluridisciplinaire et à forte dominante scientifique et de santé, de nombreux laboratoires de l'Université Paris-Sud ont recours au calcul intensif : la simulation numérique est devenue le « troisième pilier » de la science, à côté de la théorie et de l'expérimentation. Hier réservée à des secteurs précis et équipés d'une informatique spécialisée, elle concerne maintenant tous les domaines scientifiques et toutes les échelles d'équipements. L'Université Paris-Sud étend son spectre de pratiques, de méthodes et de plateformes relatives à la simulation dans les domaines tels que l'ingénierie, la cosmologie, la chimie théorique,... et participe au développement de synergies scientifiques autour du calcul intensif.

L'Université Versailles-Saint-Quentin et le calcul intensif

En dix ans, l'université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines est devenu un acteur phare du calcul intensif au niveau européen, et ce en plusieurs étapes :

- En 2005, l'UVSQ participe en tant que membre fondateur à la création de Teratec ;
- En 2009, en partenariat avec l'ECP et l'ENS Cachan, l'UVSQ ouvre le premier Master en deux ans dédié au Calcul Haute Performance, le MIHPS (www.mihps.fr) ;
- En 2010, le leader mondial du microprocesseur INTEL crée trois centres de recherche sur l'Exascale en Europe, dont un en France, Exascale Computing Research, en collaboration avec le CEA, GENCI et l'UVSQ (www.exascale-computing.eu) ;
- En 2012, l'UVSQ s'illustre dans sa participation au montage de la Maison de la Simulation.

Les Sciences de l'information et de la communication constituent un domaine de recherche fondamental de l'UVSQ porté notamment par le laboratoire Parallélisme, réseaux, systèmes, modélisation, au sein duquel les équipes ARPA (Architecture et Parallélisme) et CaRO (Calcul réparti et optimisation) se sont illustrées par leurs travaux et la richesse de leurs partenariats.