

Atelier 1

Modélisation, calcul haute performance et simulations numériques

- Contours de l'atelier
 - modélisation,
 - algorithmes, schémas numériques, calcul scientifique, parallélisation, nouveaux modèles de calcul
- domaines : sciences dures, sociales, voire de la création artistique
 - thèmes identifiés (non exhaustif) : modélisation de fluides complexes, processus dynamique en science du vivant, modélisation multiéchelle en physique statistique, spatialisation du sol et prédiction, séquençage d'ADN en parallèle, performance prédictive des modèles, systèmes complexes, etc.
- liens avec Agence Math Entreprises (AMIES), CaSciModOT, CCSC
- liens avec les autres ateliers :
 - convergence HPC/IA : les données de la simulation, High Performance Data Analysis
 - reproductibilité (trans-atelier)

Contacts : sebastien.limet@univ-orleans.fr, julien.barre@univ-orleans.fr, joel.puibasset@cnrs-orleans.fr,
jean-louis.rouet@univ-orleans.fr

Quelques exemples aux interfaces des maths

Beaucoup de projets engagés, en préparation ou en gestation aux interfaces Maths / Modélisation / Calcul scientifique.

→ le RTR peut leur faire passer un cap

Exemples :

- ▶ Dynamique de populations : bioréacteurs (bactéries); adipocytes; folliculogénèse ovarienne; microbiote intestinale.
INRA (Tours) : R. Yvinec; IDP : S. Madec, M. Ribot.
- ▶ Diffusion enzymatique : modèles microscopique, modèles macroscopiques, expériences.
CBM (Orléans) : F. Piazza; IDP : J. Barré.
- ▶ Fluides complexes géophysiques : canal expérimental (Tours); mécanique des fluides; simulations numériques.
GéHCO (Tours) : L. Girolami; IDP : F. James, C. Lucas.
- ▶ ...

Activités autour du HPC

- Optimisation de l'utilisation des ressources de calcul sur les architectures modernes
 - ▶ Etude de la consommation d'énergie en regard avec les performances de calcul
 - ▶ Interfaces de programmation pour optimiser l'utilisation des ressources de calcul
- Parallelisme implicite et langages spécifiques de domaine
 - ▶ Squelettes de programmation
 - ▶ Dérivation de programmes séquentiels en programmes parallèles

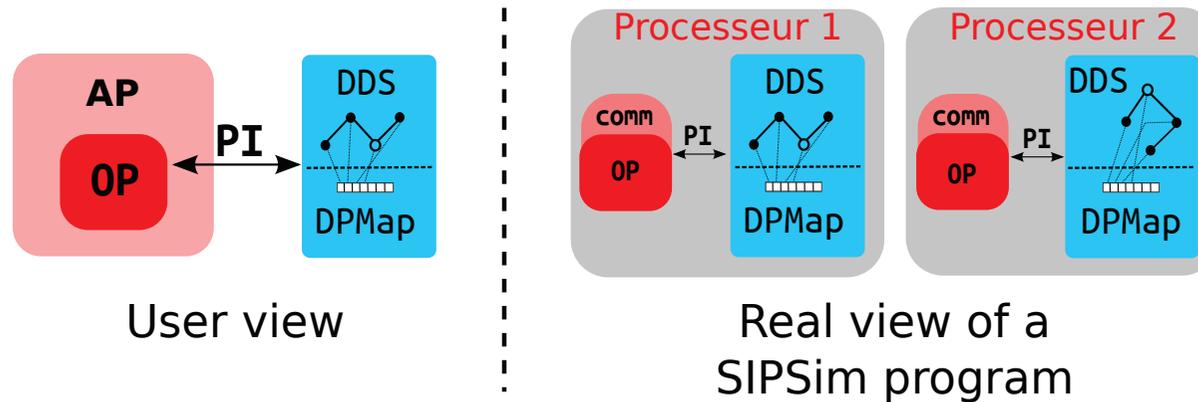
Optimisation of noyaux de calcul de simulations en GeoScience

- Thèse BRGM (G. Sornet) BRGM
 - Deux cas d'études :
 - ▶ Calcul Stencil
 - ▶ Methodes éléments spectraux (application EFFISPEC)
 - Results
 - ▶ Combination de plusieurs optimisations dans les noyaux
 - Vectorisation
 - MultiThreading
 - Accès Mémoire
 - ▶ Difficulté de tirer le meilleur de toutes les optimisations
 - ▶ Efficacité des optimisations dépendante de l'architecture cible
 - ▶ Optimisations très pointues et techniques
- ⇒ Nécessité d'interface de programmation pour aider les scientifiques

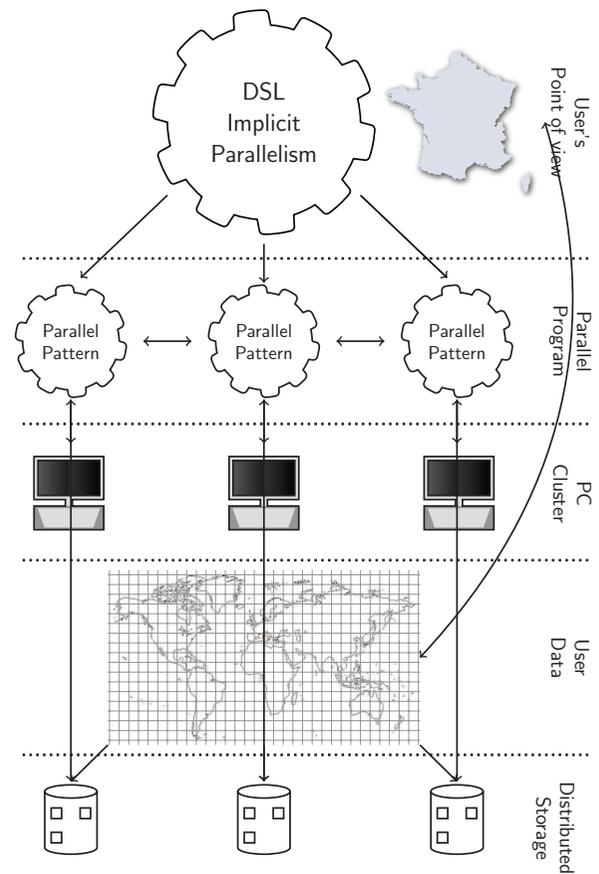
Parallélisme implicite

Fournir des outils de programmation qui cachent le parallélisme aux utilisateurs

- Deux thèses avec GeoHyd-Antea : H. Coullon et K. Bourgeois
- Définition d'un modèle et d'une bibliothèque
- Création d'un framework GEOSKEL

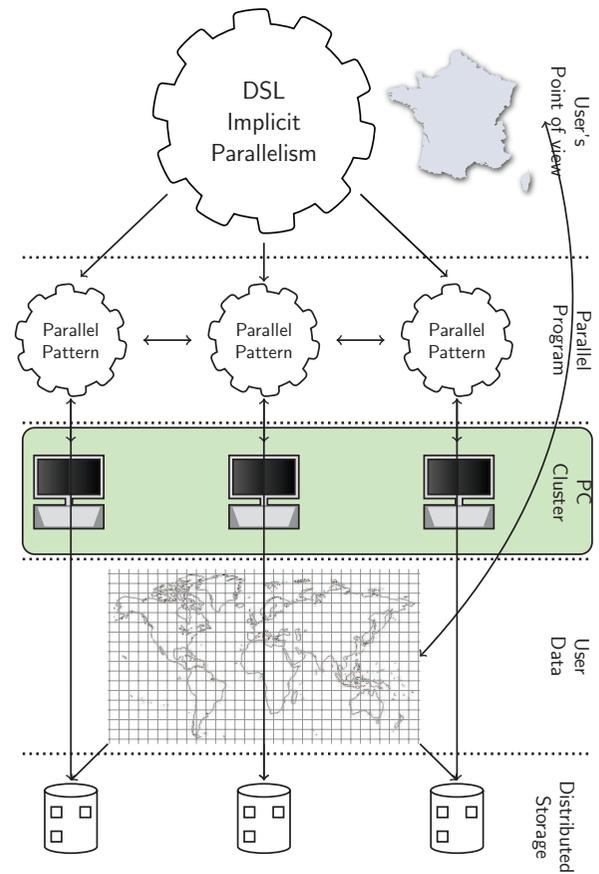


GEOSKEL : le framework



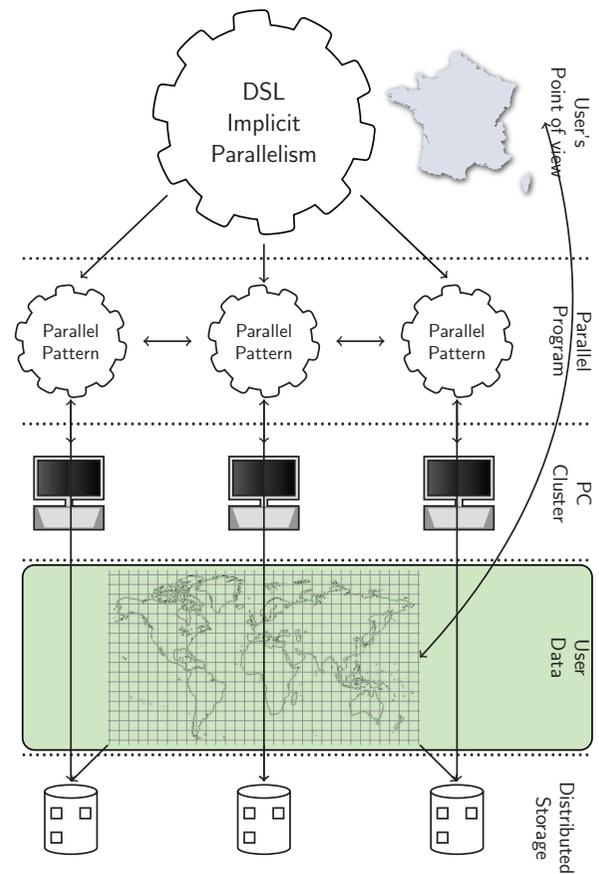
Un environnement de calcul complet

GEOSKEL : le framework



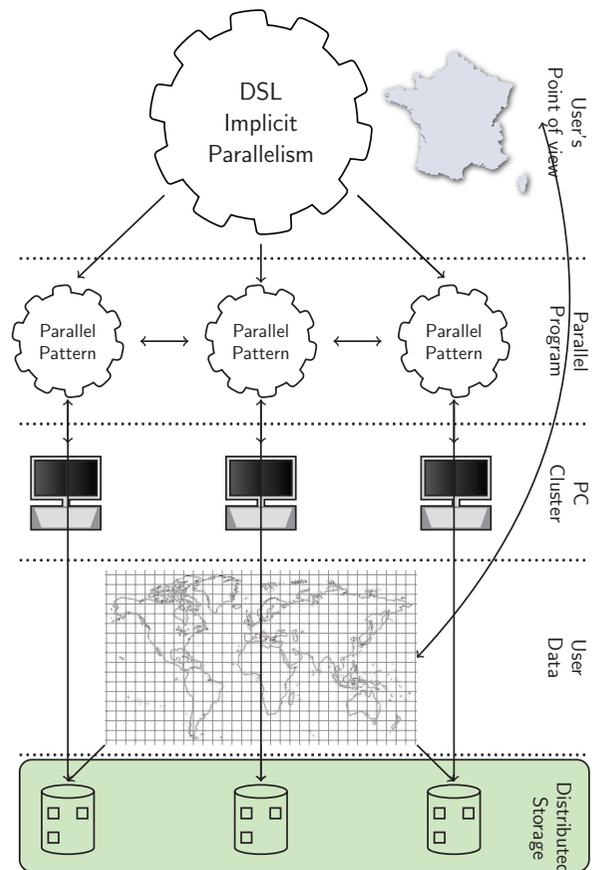
Machine parallèle distribuée (Cluster)

GEOSKEL : le framework



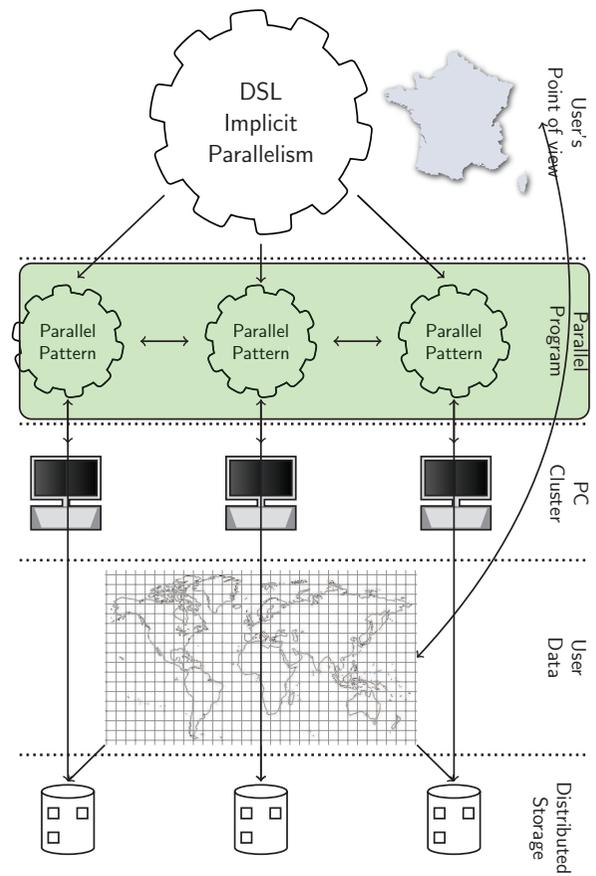
Stockage de systèmes d'information géographique de grande taille

GEOSKEL : le framework



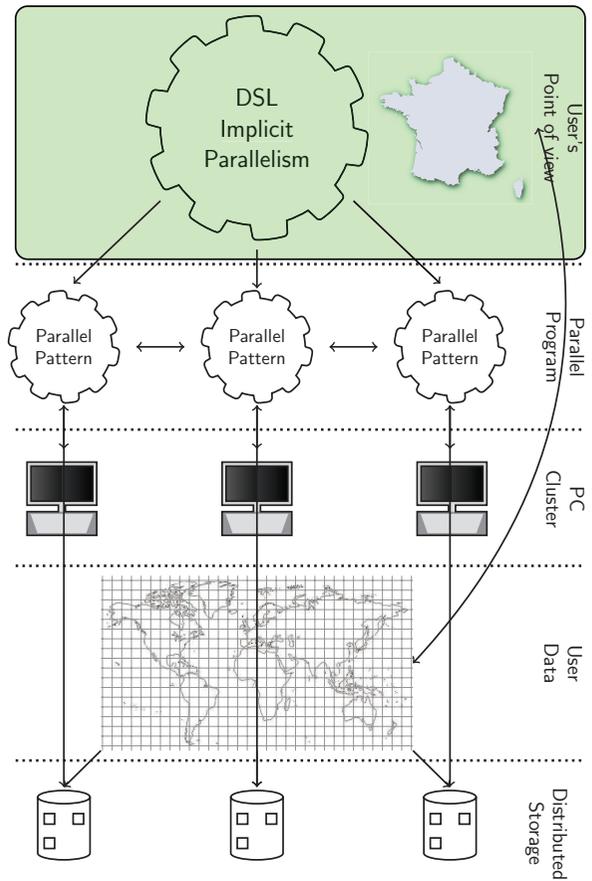
Stokage des données au plus près des unités de calcul

GEOSKEL : le framework



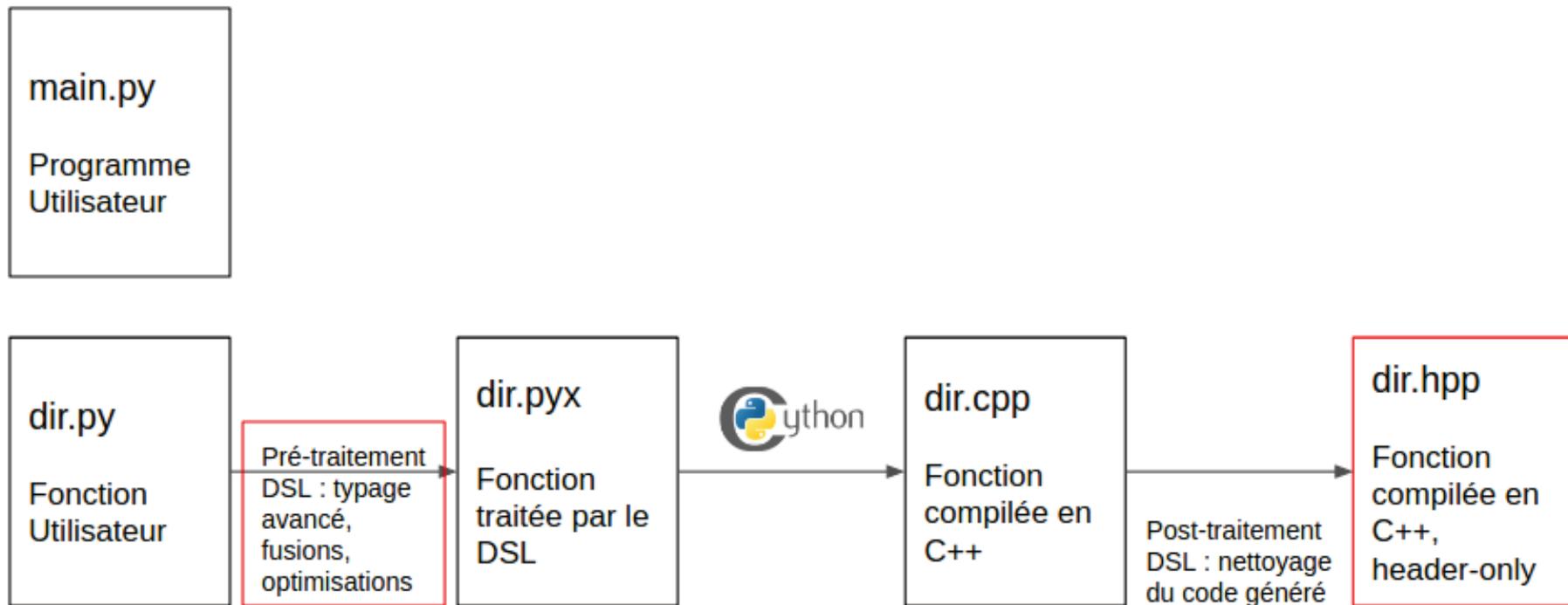
Une librairie de parallélisme implicite

GEOSKEL : le framework

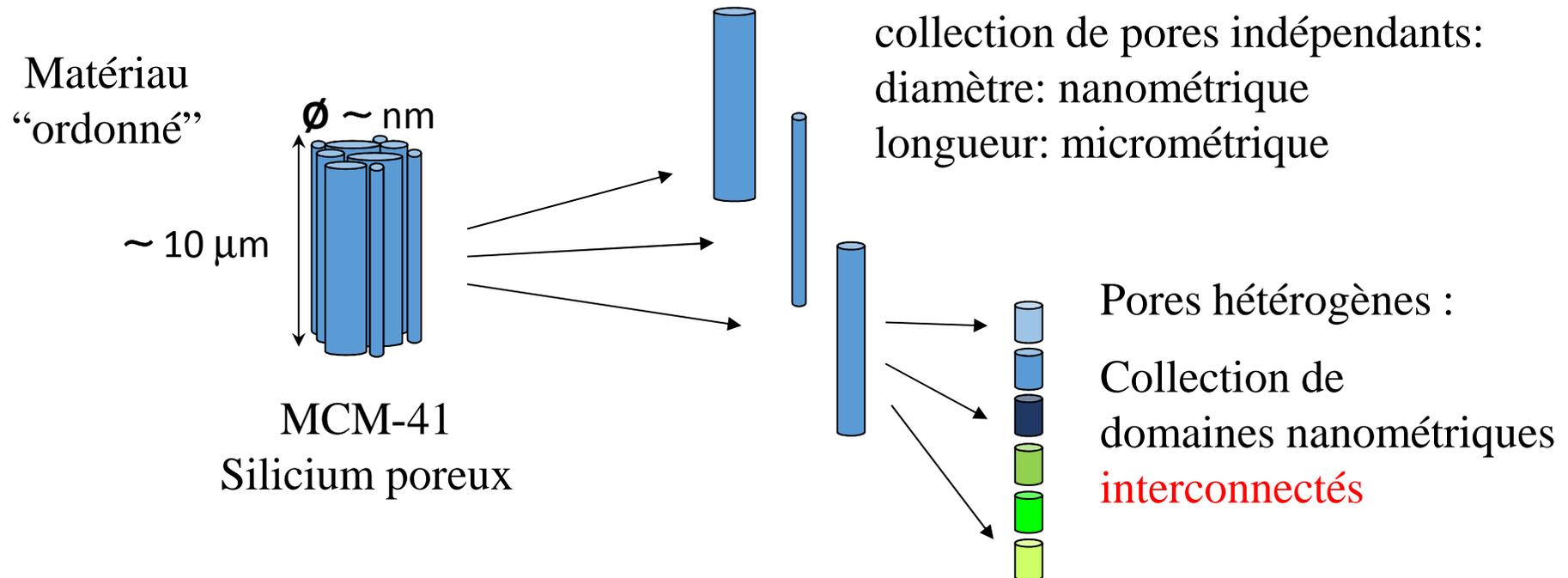


Un environnement de programmation séquentiel de haut niveau basé sur Python

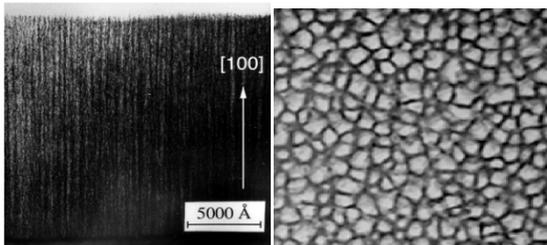
Processus de transformation de code en GEOSKEL



Approche multiéchelle dans les milieux poreux naturels

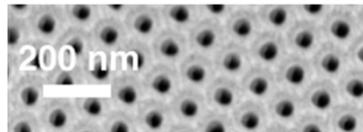


PoSi



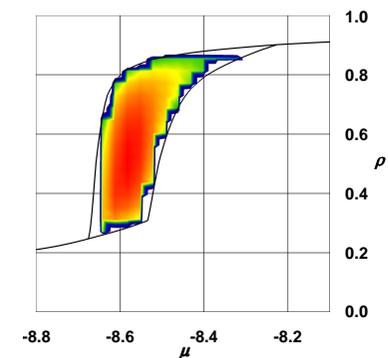
B. Coasne, A. Grosman, C. Ortega, et M. Simon, PRL 88, 256102 (2002)

PoAl

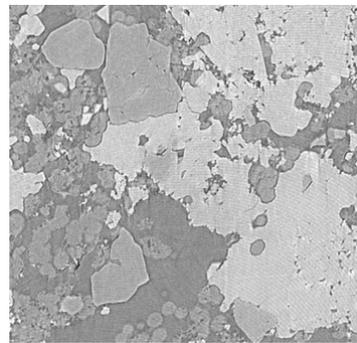


L. Cagnon, P. Stathis, P.-E. Wolf, Institut Néel

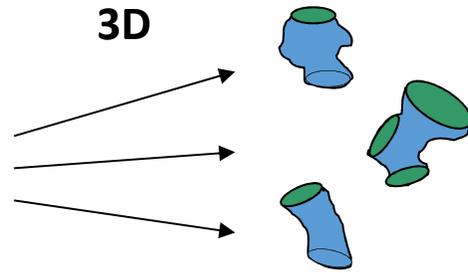
Résultats



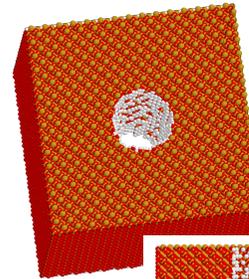
Approche multiéchelle dans les milieux poreux naturels



ISTO

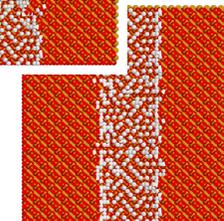
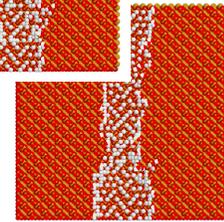
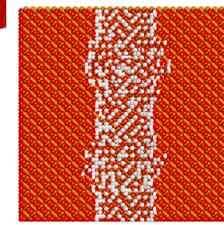


3D



simulation

moléculaire



Approche multiéchelle :
couplages entre nanopores



interconnexions 3D



calcul HPC

thématiques

écoulement, transport
structure, dynamique
matière condensée, plasmas
systèmes complexes et systèmes en
interaction
vivant et phénomènes naturels
...

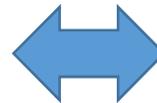


**Comment la recherche HPC
peut nourrir les thématiques
et réciproquement**



approches et méthodes

mathématique, physique statistique
Monte Carlo, pseudospectrale
multiéchelle, digital rock physics
dynamique moléculaire avancée
(réactive, accélérée, gros grains)
electron force-field
...



calcul haute performance

programmation multi-cœur
programmation GPU
programmation hybride
parallélisme implicite
...

Journée scientifique Atelier 1

objectifs

- mieux connaître nos activités de recherche
- mettre en commun nos compétences et questionnements
- développer des activités aux interfaces ou réunissant plusieurs compétences
- identifier des axes de collaborations débouchant sur des projets ANR ou européens

1 journée
2 thématiques



approches multiéchelles
et simulations



calcul haute
performance

format

une présentation générale suivie d'exposés pédagogiques