



MAISON DE LA SIMULATION





Les grands enjeux du HPC

La simulation est devenue le *troisième pilier* de la science

Apparaît les plans stratégiques des organismes de recherche

Computational science has become the third pillar of the scientific enterprise, a peer alongside theory and physical experiment.

Rapport PITAC 2005

- Les grands défis à venir pour le HPC sont partagés par une grande partie de la communauté scientifique :
 - Visualisation et exploitation de grands volume de données
 - Parallélisme massif, technologies émergentes (GPU, multi-cœurs,...)
 - Algèbre linéaire
 - Tolérances aux pannes
 - ...
- Être créatif sur les aspects techniques et maintenir le cap sur la science
- Pouvoir réagir et s'adapter rapidement
- Nécessité de construire des équipes pluri-disciplinaires et de développer les partenariats
- Besoin de mutualisation des ressources humaines :
 - économie d'échelle
 - Mutualisation et diffusion des compétences.





Contexte et Evolution des Moyens de calcul

Echelle Nationale :

□ **Création du GENCI**

→ Financement pérenne des centres nationaux



Echelle Européenne : le Projet **PRACE**

Partnership for Advanced Computing in Europe

→ Développement d'une infrastructure de Européenne de classe mondiale pour le calcul haute performance



2011 : Installation de la machine Curie au TGCC

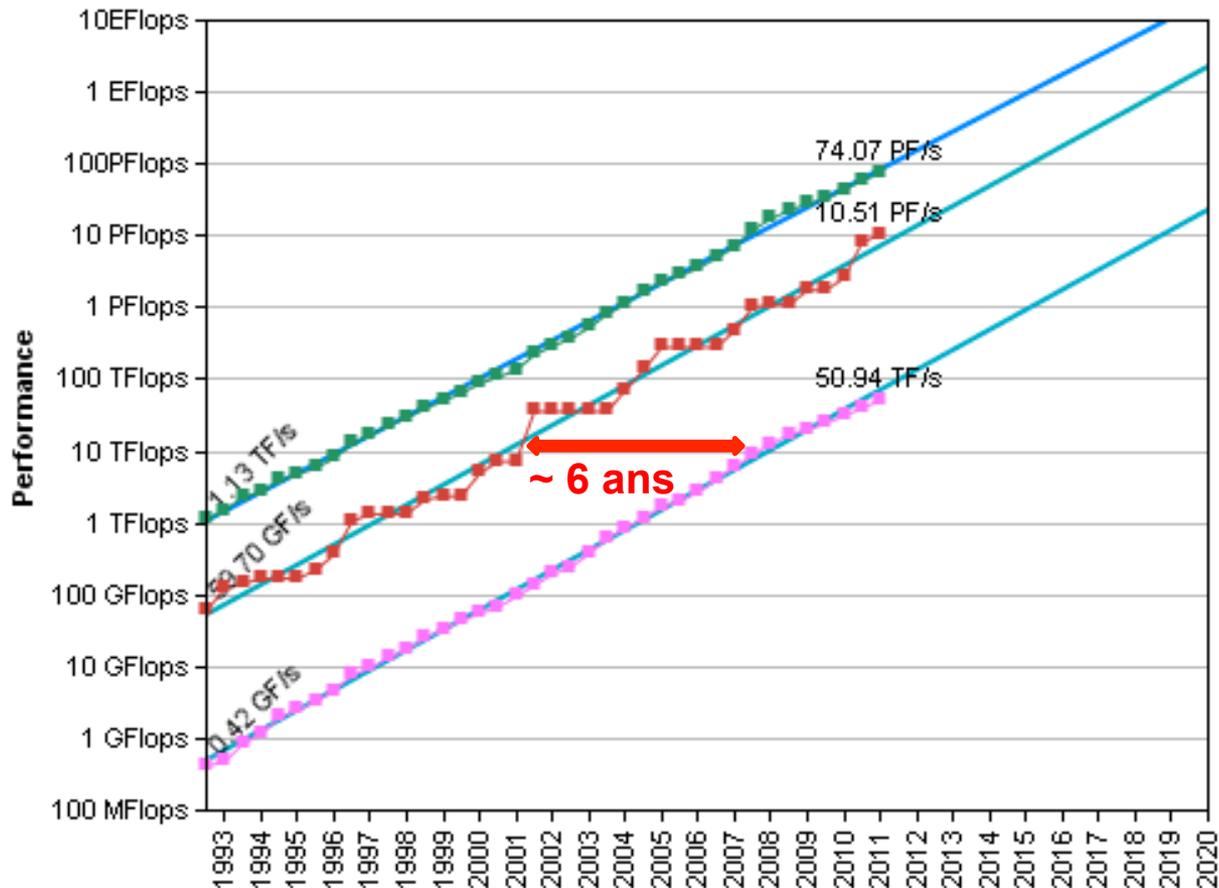




La Loi de Moore

Utiliser un supercalculateur impose une très grande réactivité et une forte capacité d'innovation, notamment avec les évolutions techniques prévisibles.

Projected Performance Development

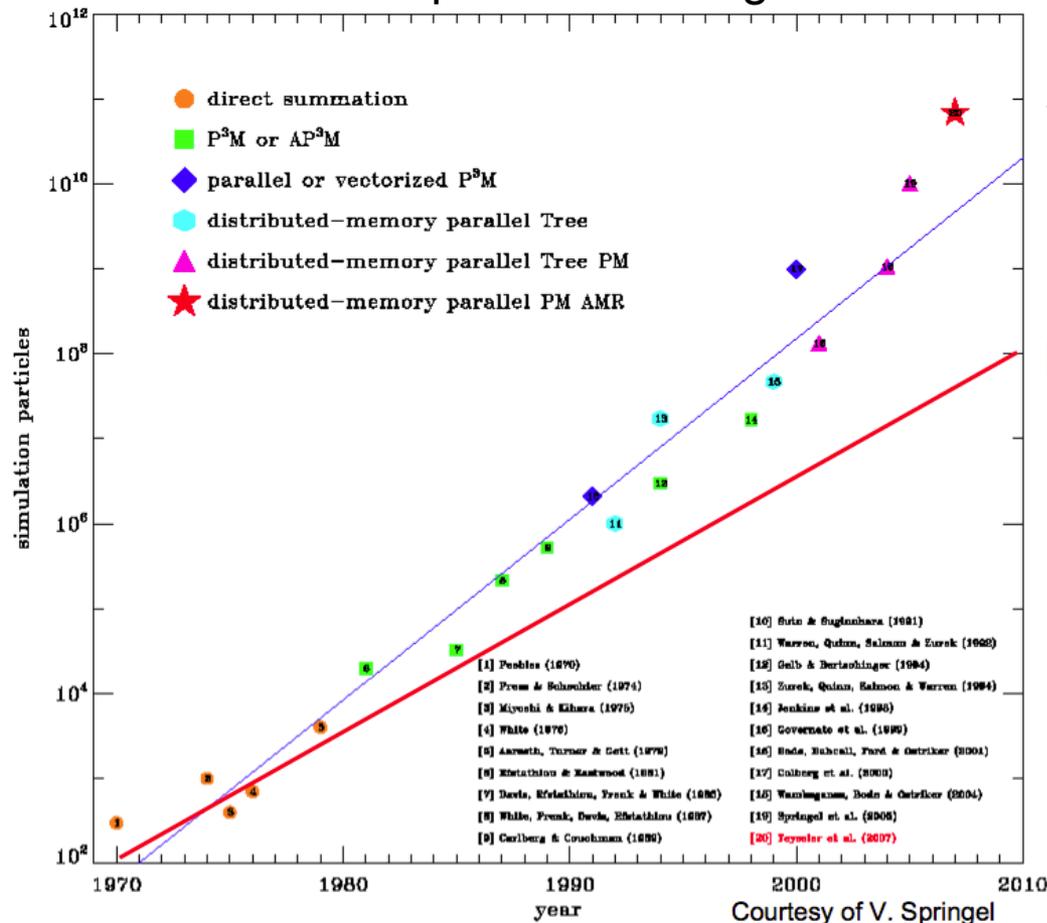




La Loi de Moore pour les Applications

Les progrès « *algorithmiques* » contribuent très significativement à l'accroissement de performance des applications.

N-corps en cosmologie





- ❑ Création en Janvier 2011 :
 - Projet commun CEA/CNRS/INRIA/UPS/UVSQ
 - La MdS est une Unité de Service et de Recherche
 - Mise en place d'un comité de pilotage et d'un conseil scientifique
 - Localisé sur le plateau de Saclay

Accompagner, soutenir et stimuler les communautés scientifiques afin de tirer le meilleur parti des moyens de calcul disponibles

- Laboratoire de recherche pluridisciplinaire autour de la simulation numérique
- Unité de service ouverte sur les communautés offrant notamment une expertise et une aide aux développements applicatifs de haut niveau
- Un pôle d'enseignement et d'animation scientifique en calcul intensif





Centre d'excellence multidisciplinaire dans le domaine de la simulation

Création au sein d'un même laboratoire d'équipes pluridisciplinaires à même de relever les grands défis du calcul intensif

Chercheurs permanents : thématiques *transverses* (mathématiques appliquées, informatique, algorithmique,..) ainsi que dans quelques domaines où le calcul représente un enjeu majeur.

- un lien étroit avec leurs communautés d'origine
- mise en place de projets pluridisciplinaires
- transfert de compétences

Chercheurs accueillis sur projets

Ingénieurs : conception, réalisation et diffusion d'outils numériques

Contribuer au développement et à l'exploitation de codes numériques novateurs ayant vocation à être utilisés sur les équipements nationaux (GENCI) et européens (PRACE)





Fournir une expertise et une aide aux développements applicatifs de haut niveau pour l' utilisation des grands moyens de calculs, notamment ceux mis à disposition dans le cadre de GENCI et du projet PRACE

- ❑ **Accueillir des chercheurs et/ou des équipes et leur fournir le support matériel et humain pour :**
 - le développement et l'optimisation de codes applicatifs
 - la préparation, la réalisation et l' exploitation de simulations de type « grand challenge »
- ❑ **Soutenir les équipes de recherches impliquées dans la simulation notamment par l' attribution de bourses doctorales et postdoctorales**
- ❑ **Contribuer à l'animation scientifique autour du HPC.**
- ❑ **Collaboration étroite avec GENCI et les centres de calculs nationaux**
- ❑ **Volonté d'Inria de créer un réseau national**





Formation et animation scientifique

Formation initiale :

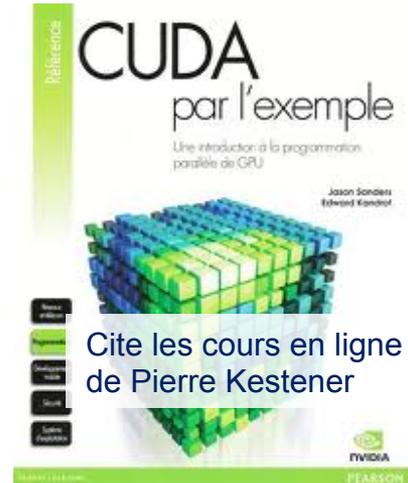
Contribuer, en collaboration avec les partenaires, à assurer une implication forte de la MdS dans les masters "HPC" du plateau de Saclay.

M2S :

- Etablissement partenaire
- Mise en place et hébergement du site web
- Accueil des certains cours et participations à 3 modules

MIHPS

Utilisation de la plateforme par deux autres Masters



Formation continue : (6 semaines de formation, ~150 personnes formées)

Former les chercheurs et ingénieurs à l'utilisation des grands moyens de calculs.

Labélisation PRACE Advanced Training Center (PATC) :

- Candidature française portée par la Maison de la Simulation et regroupant les trois centres de calcul nationaux et Inria
- Dix formations/an

Sessions de formation

Organisation d'ateliers, de conférences et d'écoles. Soutien au CECAM Ile-de-France





Personnel

- Equipe de direction : E. Audit, A. Bui et M. Kern
- 6 permanents : 1 secrétaire, 4 ingénieurs/chercheurs, 1 professeur
- 12 doctorants : Math. appli., Fusion, Géoscience, Astrophysique, Science de la vie,...
- 3 post-docs
- 3 ingénieurs HPC en CDD
- 1 CDD pour travailler dans PRACE

- 2 CDD en cours de recrutement pour l'ANR *ANEMOS*





La Maison de la Simulation est ouverte à toutes les communautés.

■ Fusion :

- 1 doctorat (+ 1 en octobre 2012), 1 post-doctorant
- 1 ANR (Uni. Nice, IRFM, INRIA/Bordeaux, MdS)
Instabilité MHD dans les Tokomaks

■ Astrophysique :

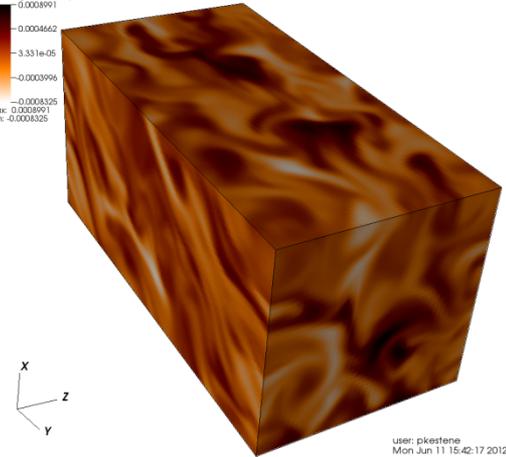
- Développement d'un code sur GPU en lien avec une ERC (demande de temps de calcul sur Curie)
- Un doctorat en co-tutelle

■ Nanoscience :

- un CDD ingénieur en collaboration avec un postdoctorant du programme transverse nanoscience.
- optimisation du code DP du LSI → demande PRACE

DB: mhd_mri_3d_gpu_48x96x48.xmf
Time:5000

Pseudocolor
Var: magnetic_field_y
-0.0003591
-0.0004662
-3.331e-05
-0.0003996
-0.000325
Max: 0.0003891
Min: -0.000325



user: pkefene
Mon Jun 11 16:42:17 2012

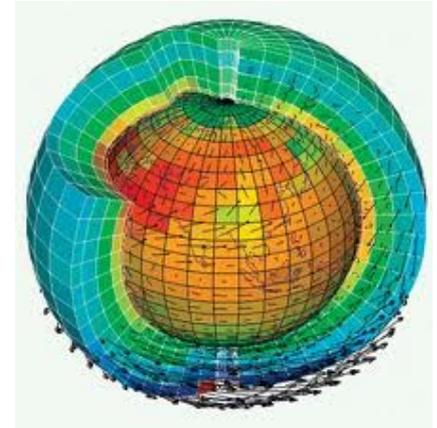




Activités scientifiques - II

■ Climatologie :

- un CDD PRACE/CEA
- Optimisation du coupleur OASIS dans le cadre de PRACE
- Contribution à la représentation de la communauté française dans PRACE



■ Mathématiques appliquées :

- Deux doctorats en collaboration avec les universités de Lille-I et de Pau
- Collaboration en émergence avec Paris-sud sur l'algèbre linéaire et la résolution de l'équation de Poisson

■ Informatique :

- Démarrage de deux thèses (solveurs linéaires)

■ Modélisation du Vivant :

- Action de développement technologique sur l'électrophysiologie avec l'équipe INRIA/CARMEN à Bordeaux
- Optimisation des solveurs linéaires, passage à l'échelle





ANR :

ANEMOS: (Uni. Nice, IRFM, INRIA/Bordeaux, MdS)

Etude des instabilités MHD dans les tokamaks

Deux équipements phares :

I - Digiscope :

Mise en place d'une infrastructure haute performance pour la visualisation interactive et collaborative sur le plateau de Saclay

- Mur d'image stéréoscopique, cluster de visualisation
- Visualisation de données de simulation issues des grands centres de calcul.
- Partenariat avec plusieurs laboratoires du plateau spécialiste de visualisation et d'interaction





II - Le Projet Equip@meso



Renforcer la « base » de la pyramide est devenu nécessaire après le développement des Tier-1 (GENCI) et Tier-0 (PRACE)

→ Installation en France de 10 méso-centres avec l'objectif affiché de développer l'usage du HPC et de pousser les utilisateurs vers les Tier-1 et les Tier-0.

- Projet coordonné par GENCI
- Coordination nationale des activités de formation
- 2 CDDs ingénieurs pour les développements applicatifs (déjà une demande PRACE..)
- Méso-équipement de calcul (mutualisé avec l'IRFM) :
 - ~ 1700 cœurs + GPU, hébergé et administré par le CNRS.
 - Développements applicatifs
 - Optimisation de codes
 - Formation
 - Développement du code Gysela (Fusion, IRFM)





- Développement d'un code de MHD sur GPU
 - En lien avec l'ERC *Peta-Disk*
 - Test au TGCC (Curie)
 - Utilisé dans une demande GENCI 2012 (accepté)
- Optimisation du code de DFT du LSI, *DP*. *Etude de la possibilité du portage sur GPU.*
- Portage d'un code sur Curie-Hybride (Présentation acceptée au SIAM 2012) 15th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Collaboration avec l'IDRIS





Advanced Institute for Computational Science (AICS)

*AICS creates an international center of excellence, dedicated to generating cutting-edge scientific results and technological breakthroughs through **the collaboration and integration of computational science and computer science.***

14 équipes : 7 computer science (informatique, visualisation,...)
7 computational science (climat, chimie, matériaux,...)



EMCL : The Engineering Mathematics and Computing Lab, is a center dedicated to **interdisciplinary research activities** with focus on technology transfer in the domains of scientific computing, numerical optimization, high performance computing,...

Three topic-driven Computing Labs : Energy Research, Meteorology and Environmental Sciences, Medical Engineering and Biotechnology

The topic-driven Computing Labs are complemented by **cross-sectional Computing Labs** dedicated to Hardware-aware Numerics, Scientific Visualization, Cloud Computing IT Management and Infrastructure





Initiatives comparables à l'étranger



SciDAC

Scientific Discovery through Advanced Computing

SciDAC is a program within the Office of Science of the U.S. Department of Energy. It enables **Scientific Discovery through Advanced Computing**, and is driven by a spirit of collaboration. Discipline scientists, applied mathematicians, and computer scientists are working together to maximize use of the most sophisticated high-power computers for scientific discovery.

HP2C

High Performance and
High Productivity Computing

The HP2C platform aims at developing applications to run at scale and make efficient use of the next generation of supercomputers.

The platform consists of domain science projects that are lead by research groups at Swiss universities and Institutes of the ETH Domain, and supported by a core group of scientific computing experts in the Lugano area.

HP2C is jointly operated by the *Swiss National Supercomputer Center (CSCS)* and the *Institute for Computational Sciences of the University of Lugano (USI)*.





Conclusions

- Outil scientifique : **Ordinateur + Application**
- Développer en France une communauté des *Sciences pour et par la Simulation* (Computational sciences)
- La Maison de la Simulation est un lieu d'expertise et d'accueil que les équipes doivent s'approprier

