



LIEU

Union Internationale des chemins de fer

16 rue Jean Rey - 75015 Paris

RER C : Station Champs de Mars Tour Eiffel

Metro : Line 6 Bir Hakeim

PROGRAMME

Le calcul à l'horizon 2025 :
Quelles applications sur quelles infrastructures ?

Forum organisé par :



Avec le soutien de :



**8:45 Accueil-café et enregistrement des participants /
Welcome and registration**

9:15  Ouverture du Forum / Opening

Patrick Garda, Ministère de l'Enseignement supérieur, de la Recherche et de l'Innovation

Président de séance / *Chairman*: **Serge Petiton** (CNRS/Université de Lille I)

**9:30  An Overview of High-Performance and a Look at Energy Saving
on the Intel Knights Landing for Linear Algebra Computations**

Jack Dongarra, University of Tennessee Knoxville, USA

Abstract

In this talk, we will look at the current state of high performance computing and look to the future toward exascale. In addition, we will examine some issues that can help in reducing the power consumption for linear algebra computations.

**10:15  Oakforest-PACS: Japan's Fastest Supercomputer and It's
Applications**

Taisuke Boku, Center for Computational Sciences, University of Tsukuba

Abstract


JCAHPC (Joint Center for Advanced HPC) in Japan, which has been operated as a joint center with University of Tsukuba and the University of Tokyo, introduced the fastest supercomputer in Japan named Oakforest-PACS since December 2016. The system is constructed as a large scale cluster with advanced Intel Xeon Phi (Knights Landing) and Intel Omni Path Architecture interconnection network with 8208 nodes for 25 PFLOPS os peak performance, and ranked at #6 in TOP500 List on November 2016 to be recognized as new Japan's fastest supercomputer overcoming K Computer.

The test operation of Oakforest-PACS started on December 2016 and the official operation started on April 2017 as a commonly shared resource for advanced computational science/engineering. In this talk, the brief introduction of Oakforest-PACS system, current operation status and several performance results on full-system scale application run such as particle physics, material science and seismic simulation.

10:45

Pause café / Coffee break

Présidente de séance / Chairwoman: **Marie-Alice Foujols**
(Institut Pierre Simon Laplace, CNRS/UPMC)

11:15  **Irene un nouveau supercalculateur multi-pétafloppique pour la recherche française**

Philippe Lavocat, PDG de GENCI

11:45  **De TERA à EXAI : des calculateurs pour la simulation de l'extrême**

Didier Juvin, CEA – Direction des Applications Militaires

Résumé

Le calcul haute-performance est un élément stratégique pour la croissance de nos économies, clé de l'innovation et de la compétitivité. Les supercalculateurs ont réellement modifié le paysage en permettant de modéliser et simuler la physique aux extrêmes, ainsi que les phénomènes complexes et inaccessibles à l'échelle humaine. Pour répondre aux besoins de ses programmes représentatifs de ceux de la recherche et de l'industrie, la Direction des Applications Militaires du CEA conduit avec ATOS/Bull une stratégie de co-design de supercalculateurs compétitifs et d'intérêt général. Cette stratégie a été confortée par l'état qui a confié au CEA la responsabilité du Pilier Technologique du Plan Supercalculateur Français (2014-2020). L'offre Bull Sequana, conçue pour intégrer les technologies les plus avancées permettant d'atteindre le niveau de l'exascale à l'horizon 2021 est un des résultats de cette démarche, le premier exemplaire de cette génération, Tera1000, a été mis en service au CEA DAM pour atteindre en 2017 une puissance de calcul de 25 Pflops, soit 20 fois supérieure à la machine précédente, Tera100, pour une même consommation énergétique.

12:15  **Cellule de veille technologique GENCI : démarche et premiers résultats**

Eric Boyer, GENCI

12:45  **Le HPC dans Horizon 2020 - perspectives du Work Programme 2018-2020**

Jean-Philippe Nominé, CEA – Direction des Analyses Stratégiques

Résumé

La publication des appels à projets reliés au HPC dans la dernière phase de H2020 est imminente. On rappellera les grands axes de la stratégie HPC de la Commission européenne, ses évolutions les plus récentes, et plus particulièrement les opportunités offertes par les appels à projets prévus en 2018.

13:00

Déjeuner / Lunch

Président de séance / *Chairman*: Thomas Simonson
(Ecole Polytechnique, Palaiseau)

14:15  **Transition to Exascale, an user perspective**
Henri Calandra, Total EP

Abstract


For several decades, Oil and Gas industry have been continuously challenged to produce at lower cost more hydrocarbons in response to the growing world demand for energy.

Progress in data acquisition, rapid progress in rocks physics labs and more powerful computers have greatly contributed to the development of advanced numerical algorithms integrating more and more complex physics and delivering high value to O&G industry.

As we approach to the exascale era, we expect that the order of magnitude increases in computing capability combined to the emergences of HPDA and machine learning will still contribute in the development of more accurate and efficient algorithms.

However, as we transition from post-petascale to pre-exascale HPC technologies, scientist must face challenging problems and questions. There is a notable increase in complexity both in hardware and software stack. Technology roadmap is still a moving process and sometime difficult to understand from a user perspective. What technology for what application? HPC landscape is becoming more and more heterogeneous. How the emergence of cloud computing will impact HPC and the future of datacenter? With the predicted end of Moore's law by mid 2020s what will be HPC evolution? Are there any disruptive technologies to be explored/investigated and what will be the impact on numerical algorithms and software development?

In this presentation, we will review Total's experience in HPC and demonstrate the value that HPC has delivered to the O&G industry. We will see that, our industry can still leverage the rapid evolution in computing capability, highlighted by new "players" taking advantage of advances in HPC technologies. However, as we move toward to exascale we assist to an increase of the HPC ecosystem and from an user perspective we will discuss about the different challenges we are facing and the necessity to explore new disruptive technologies.

14:45  **Calcul haute performance pour la fusion magnétique**
Eric Sonnendrücker, Max Planck Institute for Plasma Physics

Résumé

La Fusion thermonucléaire consiste à obtenir de l'énergie grâce à la fusion de deux noyaux légers en un noyau plus lourd. Ce processus est à la source de l'énergie du soleil. Pour créer les conditions de la fusion sur terre, il faut confiner ces noyaux à très haute température pendant un temps suffisamment long et à une densité suffisamment élevée. Ceci peut être réalisé en confinant les noyaux électriquement chargés dans un champ magnétique toroidal. Le fonctionnement de ce principe a été vérifié dans maintes installations expérimentales à petite échelle à travers le monde. Pour obtenir un bilan d'énergie positif avec l'état actuel des connaissances, il faut une expérience de grande envergure, ITER, qui est actuellement en construction dans le sud de la France associant de nombreux partenaires.

Même si le principe du confinement magnétique semble simple, un plasma (gaz de particules chargées) à très haute température est la source de nombreuses instabilités qu'il s'agit de contrôler. Les modèles le décrivant, de type cinétique ou fluide, sont complexes et non linéaires et nécessitent le recours au calcul haute performance pour être compris.

Nous aborderons dans cet exposé les efforts de la communauté européenne de recherche en fusion magnétique, dans le cadre du consortium EUROFUSION, pour développer des codes de calcul haute performance pour résoudre en particulier les modèles gyrocinétique, magnétohydrodynamique et full-wave qui sont fondamentaux pour mieux comprendre la dynamique des plasmas de fusion.

15:15 **Gating and Allosteric Regulation in Pentameric Neurotransmitter Receptors. A Molecular Dynamics Perspective**

Marco Cecchini, Laboratoire d'Ingénierie des Fonctions Moléculaires (ISIS)
UMR 7006 CNRS, Université de Strasbourg

Abstract

Pentameric ligand-gated ion channels (pLGICs) are neurotransmitter receptors involved in fundamental cognitive processes such learning, attention, and memory. They are transmembrane protein assemblies that mediate interneuron communication by opening an ion pore in response to the binding of neurotransmitter at synaptic termini. Despite the increasing availability of high-resolution structures of pLGICs, a detailed understanding of the functional isomerization from open to closed, as known as gating, is missing. During my talk, I will present atomistic Molecular Dynamics (MD) simulations of prokaryotic pLGICs from *Gloeobacter violaceus* (GLIC) and *Erwinia chrysanthemi* (ELIC) and the eukaryotic glutamate-gated chloride channel from *Caenorhabditis elegans* (GluCl) solved in complex with the neurotransmitter L-glutamate and the positive allosteric modulator ivermectin (IVM). The simulated trajectories of GLIC and ELIC are examined to identify structural observables that distinguish the open from the closed states of the channel. These observables are used as progress variables to analyze the time evolution of GluCl simulated with IVM removed. The 2.5 μ s relaxation of GluCl captures the spontaneous transition from open to closed, eventually converging to the X-ray structure of GluCl solved in the absence of ligands.

Analysis of the simulated trajectory supports the conclusion that ion-channel deactivation or un-gating is composed of two quaternary transitions, i.e. a global receptor twisting followed by the radial expansion (or blooming) of the extracellular domain. The simulated deactivation of GluCl provides fundamental insights onto the link between agonist unbinding and pore closing in pLGICs, which appears to be regulated by the global receptor twisting. Based on these results, a structural mechanism for channel deactivation/activation in pLGICs is proposed. Additional simulations with L-glutamate restrained to the crystallographic binding mode indicate that agonist binding at the orthosteric site regulates the same twisting isomerization. These results suggest a plausible mechanism for the pharmacological action of positive allosteric modulators (PAMs) in pLGICs.

15:45

Pause café / Coffee break

16:15  **Table ronde** : Animée par **Olivier Monod** (News Tank Education)
Calcul à l'horizon 2025, comment anticiper les évolutions ?

Avec la participation de :

Hervé Lozach (CEA), **Stéphane Requena** (GENCI), **Henri Calandra** (Total),
Eric Sonnendrücker (Max-Planck-Institut für Plasmaphysik), **Marco Cecchini** (ISIS,
Strasbourg).

Résumé

Cette table ronde aborde les questions de l'évolution des systèmes sous trois angles complémentaires : la science, l'économie et la technologie.

17:30

Clôture du forum / Adjournal

« Save the date »:

Prochain Forum Orap / Next Orap Forum

Jeudi 29 mars 2018