

## DOSSIER SCIENTIFIQUE PÔLE RÉGIONAL DE MODÉLISATION NUMÉRIQUE APPEL À PROJETS

*Ce formulaire doit être déposé sur le site [http://www.criann.fr/appele\\_projets\\_2018](http://www.criann.fr/appele_projets_2018)*

- Renouvellement de projet (préciser le numéro) : \_\_\_\_\_
- Nouvelle demande

### DEMANDE D'ATTRIBUTION DE RESSOURCES SUR LA GRAPPE DE CALCUL

<b>Responsable</b> (Nom, Prénom) :  <b>Laboratoire / équipe de recherche<sup>1</sup></b> :	
<b>Thématique</b> (voir la liste fournie p. 9-10) :  	
<b>Intitulé du projet</b> :  	
Nombre d'heures demandées (temps CPU en heure.cœur <sup>2</sup> )	
Besoin en ressources spécifiques (préciser GPU K80, GPU P100, Phi KNL et nombre d'heures demandées)	

<sup>1</sup> Pour les laboratoires / équipes des établissements de Normandie Université, utiliser la nomenclature décrite dans le document suivant : [http://www.normandie-univ.fr/medias/fichier/courrier-charte-signature-publications\\_1469087706487-pdf](http://www.normandie-univ.fr/medias/fichier/courrier-charte-signature-publications_1469087706487-pdf)

<sup>2</sup> Le temps d'exécution d'une application parallèle correspond au cumul du temps de calcul sur chaque cœur (unité de calcul sur laquelle un processus parallèle est exécuté). Exemple : une heure de calcul d'une application parallélisée sur 80 processus (tâches parallèles) correspond à 80 heure.cœur.

## PRÉAMBULE

Le CRIANN est le pilote du Pôle Régional de Modélisation Numérique, cofinancé par la Région Normandie, l'État et par l'Union européenne.

Le nouveau calculateur Myria mis en service en 2017 est constitué d'un ensemble de plus de 10000 cœurs de technologie x86, dont peuvent bénéficier les travaux de production et de mise au point des codes sur architecture parallèle. Myria dispose en outre de nœuds spécialisés sur les dernières technologies d'accélérateurs et de processeurs (co-processeurs GPU NVIDIA Pascal P100 et Kepler K80, processeurs Intel Xeon Phi).

Une description de la machine actuelle est donnée en page 11.

## IMPORTANT

L'attribution d'un quota d'heures oblige le titulaire à fournir un rapport d'activités en fin de période ainsi qu'avec toute demande de renouvellement, et à apporter sa contribution au rapport des publications (et autres travaux) suivant le modèle de document en annexe.

Les publications reposant sur des résultats obtenus dans le cadre de cette attribution devront mentionner la mise à disposition des moyens par le CRIANN. Formulation à titre indicatif :

- *Ce travail a bénéficié des moyens de calcul du mésocentre CRIANN (Centre Régional Informatique et d'Application Numériques de Normandie).*
- *Part of this work / The present work / was performed using computing resources of CRIANN (Normandy, France)*

## RESPONSABLE SCIENTIFIQUE DU PROJET

Civilité, Nom, Prénom : \_\_\_\_\_

Titre et fonction : \_\_\_\_\_

Laboratoire : \_\_\_\_\_

Téléphone : \_\_\_\_\_

Adresse électronique : \_\_\_\_\_

Nom du directeur de laboratoire : \_\_\_\_\_

Adresse complète du laboratoire : \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

Appartenance à un établissement membre de la ComUE Normandie–Université :  Oui  Non

Appartenance administrative du laboratoire (CNRS ou autres) :

\_\_\_\_\_

Visa du responsable du projet :	Visa du directeur du laboratoire :
Date : Signature :	Date : Signature :

## CADRE DU PROJET

Cadre général du projet :

- Recherche strictement académique  
ou  
 Avec partenariat industriel

Financements liés au projet :

ANR, FUI, PCRD, INTERREG, ... Autre (à préciser) :

---

---

Thèse(s) associée(s) au projet :

- Oui       Non

Financement de la thèse : CIFRE, MESR, CNRS, ... Autre (à préciser) :

---

---

Autres informations :

---

---

---

---

---

---

---

---

## DESCRIPTION DU PROJET DE RECHERCHE

Cette partie a pour but de justifier l'intérêt scientifique du projet.

Il conviendra pour cela de :

- préciser ses objectifs ;
- situer les travaux de l'équipe sur le thème de recherche proposé (préciser les résultats déjà acquis par le laboratoire sur ce même sujet et donner la liste des publications correspondantes) ;
- joindre au dossier tous les documents annexes jugés utiles ;
- indiquer les actions collaboratives menées dans le cadre de ce projet (régionales, interrégionales ou au-delà).

Résumé du projet :

*Préciser le plan, la méthodologie et les objectifs à atteindre. Cette partie doit être suffisamment développée pour permettre au comité scientifique de juger l'adéquation du problème à l'architecture et à la taille de la machine (insérer autant de pages supplémentaires que nécessaire) :*

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

## DESCRIPTION DES MÉTHODES

*Préciser :*

1. Algorithme utilisé
2. Modalités d'optimisation
3. Structure du programme
4. Logiciels externes
5. Langages utilisés
6. Bibliothèques nécessaires

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

---

## DESCRIPTION INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE

- Justifier de manière aussi précise que possible les ressources demandées ainsi que les architectures si nécessaire (nombre de cœurs de calcul, mémoire, nombre de calculs, GPU, etc.).

---

---

- Préciser quel(s) code(s) sera utilisé, s'agit-il de développement interne ou de logiciel communautaire ou commercial ?

---

---

- Pour les applications parallèles, donner une idée de l'efficacité parallèle (préciser sur quelle machine le code a déjà été exécuté)

---

---

- Si les applications doivent gérer des volumes importants de données, estimer :
  - le volume de données d'entrée du calcul (Go) : \_\_\_\_\_
    - nombre de fichiers : \_\_\_\_\_
  - le volume de données générées pendant le calcul (Go) : \_\_\_\_\_
    - nombre de fichiers : \_\_\_\_\_
  - le volume de données à conserver à l'issue du calcul (Go) : \_\_\_\_\_
    - nombre de fichiers : \_\_\_\_\_

- Mémoire maximum nécessaire (totale et par cœur) et durée moyenne d'exécution d'un job (préciser l'architecture).

---

---

## AUTRES MOYENS DE CALCUL UTILISÉS

- Préciser quels autres moyens de calcul sont ou seront utilisés : moyens du laboratoire, centres nationaux, européens, grille, cloud, etc. (NB : votre réponse n'a pas d'incidence sur les heures attribuées)

---

---

---

---

## MOYENS HUMAINS DU LABORATOIRE

Indiquer quels sont les moyens, tant humains que matériels, dont dispose le laboratoire et qu'il pourra affecter à la réalisation du projet.

- Chercheurs :

---

---

---

- Ingénieurs en calcul scientifique (IR, IE) :

---

---

---

- Le laboratoire dispose-t-il d'un agent en charge de la sécurité des systèmes d'information ? Si oui, précisez son nom et son adresse mél.

---

---

---

## BESOIN EN SUPPORT ET FORMATIONS

- Indiquer les besoins en support sur la parallélisation et l'optimisation de code.

---

---

- Préciser le besoin de formations informatiques spécifiques. Sur quels sujets ?

---

---



## LISTE DES THÉMATIQUES

### 1. Environnement

Mots clés : Modélisation de l'atmosphère, de l'océan et du climat. Modélisation des atmosphères planétaires. Analyse et assimilation des données. Physico-chimie atmosphérique. Biogéochimie océanique. Fonctionnement et évolution des écosystèmes terrestres. Hydrologie des sols.

### 2a. Écoulements non réactifs

Mots clés : Dynamique des écoulements compressibles. Hydrodynamique. Aérodynamique stationnaire et instationnaire. Écoulements en rotation. Transferts thermiques et convection forcée. Convection naturelle.

### 2b. Écoulements réactifs ou/et multiphasiques

Mots clés : Interfaces et écoulements polyphasiques. Changements de phase. Rhéologie complexe. Combustion turbulente. Simulation directe des écoulements réactifs. Structure de flammes. Cinétique de la combustion. Écoulements diphasiques réactifs. Plasmas froids. Arcs électriques. Milieux hors d'équilibre.

### 3. Biologie et santé

Mots clés : Interaction particule/tissu et calcul par méthodes de Monte-Carlo. Nanotechnologies en thérapeutique. Imagerie médicale (acquisition et traitement). Outils d'aide à la décision médicale. Bioinformatique. Génomique. Modélisation du corps humain. Biomécanique. Dynamique des écoulements physiologiques. Modélisation/simulation des systèmes physiologiques. Epidémiologie et dynamique des populations.

### 4. Astronomie et géophysique

Mots clés : Cosmologie. Formation des galaxies, des étoiles et des systèmes planétaires. Dynamique des systèmes gravitationnels. Modélisation d'objets astrophysiques (hors fluides et chimie). Plasmas géophysiques et planétaires. Géophysique interne. Hydrologie des sols. Géomatériaux.

### 5. Physique théorique

Mots clés : Electromagnétisme, optique, physique sur réseau dont QCD, Chaos quantique, Propriétés électroniques des solides, Physique nucléaire, Interactions ondes électromagnétiques avec la matière. Plasmas chauds, Sciences de la fusion magnétique ou inertielle. Physique de la matière condensée.

### 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Mots clés : Réseaux, middleware, algorithmes pour le parallélisme, algèbre linéaire, EDP, traitement du signal, stockage et analyses des données, visualisation.

### 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Mots clés : Structure, dynamique moléculaire, interaction des macromolécules et édifices moléculaires. Chimie supramoléculaire, relations structure-fonction. Biopolymères, interfaces, matériaux hétérogènes. Auto-assemblage, réplication. Génomique.

## 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Mots clés : Propriétés électroniques des molécules. Structures. Réactivité. Calculs ab initio. Calculs semi-empiriques. Dynamique quantique (Car-Parinello). Calculs Monte Carlo quantique (Méthodes QMC). Etat liquide. Solvation. Diffusion moléculaire. Collisions (molécules-ions, électrons). Dynamique quantique. Evolution d'un paquet d'ondes.

## 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Mots clés : Modèles de cohésion des matériaux adaptés à la simulation à l'échelle atomique (ab initio, liaisons fortes, potentiels empiriques). Simulation des systèmes classiques et quantiques par dynamique moléculaire et méthodes de Monte-Carlo. Thermodynamique numérique d'équilibre et de non-équilibre. Simulation des cinétiques à l'échelle atomique. Echelle mésoscopique. Dynamique des populations des défauts, comportement mécanique des matériaux hétérogènes. Physique et chimie des matériaux granulaires. Simulation numérique pour le dépouillement d'études expérimentales de structure des matériaux. Propriétés électroniques des matériaux.

## 10. Nouvelles applications et applications transversales du calcul intensif

Cette thématique permet d'accueillir les applications nouvelles ou multidisciplinaires.

# Pôle Régional de Modélisation Numérique

## Calculateur Myria

**Puissance crête totale : 607 TFlops**  
10504 cœurs de calcul CPU - 640 cœurs Phi KNL  
52,7 To de RAM

332 nœuds 28 cœurs @ 4 Go RAM/cœur  
Processeurs Intel BROADWELL 14 cœurs à 2.4 GHz

1 nœud SMP de 256 cœurs et 4 To RAM

13 nœuds spécialisés entrées / sorties  
12 nœuds avec 2 K80 NVIDIA (4 GPU)  
8 nœuds avec 2 P100 NVIDIA (2 GPU)

Interconnexion Intel Omni-Path (100 Gbit/s)  
2,5 Po de disques rapides partagés

Connexion 4 x 10 Gbit/s et 1 x 40 Gbit/s sur SYVIK

Mise à jour : 7 novembre 2017

