

## DOSSIER SCIENTIFIQUE PÔLE RÉGIONAL DE MODÉLISATION NUMÉRIQUE

### APPEL À PROJETS

*Ce formulaire doit être déposé sur le site <http://www.criann.fr/appe-projets>*

- Nouvelle demande, accès préparatoire (limité à 100 000 heures.cœur ou 1000 heures.gpu)
- Nouvelle demande, projet de production
- Renouvellement de projet (préciser le numéro) : \_\_\_\_\_

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

<b>Responsable (Nom, Prénom) :</b>		
<b>Laboratoire / équipe de recherche<sup>1</sup> :</b>		
<b>Thématique (voir la liste fournie p. 9-10) :</b>		
<b>Intitulé du projet :</b>		
Total d'heures.cœur <sup>2</sup> demandées		
CPU (Broadwell)	Temps CPU en heures.cœur	
Xeon Phi (KNL)	Temps CPU en heures.cœur	
GPU	Durée cumulée des travaux « elapsed » en heures.gpu	

<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 heures.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 en fin de période :

- un rapport d'activités (format libre) ;
- un rapport des publications et autres travaux (y compris stages et thèses) 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 :

- ou
- Recherche strictement académique
  - Avec partenariat industriel

### Financements liés au projet :

RIN, 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) :

---

---

## MOYENS HUMAINS AFFECTÉS AU PROJET

Nombre total de comptes nécessaires	
Nombre de chercheurs permanents	
Nombre d'ingénieurs en calcul scientifique	
Nombre de doctorants	
Nombre de stagiaires Master2	

- 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.

## LOGICIELS

Code(s) développé(s) en interne :

- Nom(s) :
  
- Langage(s) / API
 

<input type="checkbox"/> FORTRAN	<input type="checkbox"/> OpenMP	<input type="checkbox"/> Autre(s)
<input type="checkbox"/> C/C++	<input type="checkbox"/> CUDA	(préciser) :
<input type="checkbox"/> Python	<input type="checkbox"/> OpenCL	
<input type="checkbox"/> MPI	<input type="checkbox"/> OpenACC	
  
- Bibliothèque(s) :
 

<input type="checkbox"/> BLAS/LAPACK	<input type="checkbox"/> GSL	<input type="checkbox"/> ADIOS
<input type="checkbox"/> SCALAPACK	<input type="checkbox"/> SuiteSparse	<input type="checkbox"/> HDF5
<input type="checkbox"/> FFTW	<input type="checkbox"/> Cadnac	<input type="checkbox"/> NETCDF
<input type="checkbox"/> PETSC	<input type="checkbox"/> METIS	<input type="checkbox"/> OASIS3-MCT
<input type="checkbox"/> SLEPC	<input type="checkbox"/> PARMETIS	<input type="checkbox"/> OpenPALM
<input type="checkbox"/> MUMPS	<input type="checkbox"/> SCOTCH	
<input type="checkbox"/> MKL	<input type="checkbox"/> MMG3D4	
<input type="checkbox"/> Autre(s) (préciser) :		

Application(s) de référence :

Seuls les logiciels partagés (libres ou acquis par le CRIANN) sont listés ci-dessous.

Un logiciel acquis par un laboratoire pour la recherche peut être installé par le CRIANN (si le contrat de licence le permet) sur le calculateur avec restriction des droits d'accès (sur demande adressée à [support@criann.fr](mailto:support@criann.fr)).

De même, un logiciel libre non encore installé sur le calculateur peut l'être sur demande.

Mécanique/CFD/climat

- |                                       |                                    |   |
|---------------------------------------|------------------------------------|---|
| <input type="checkbox"/> Cast3M       | <input type="checkbox"/> FDS       | <input type="checkbox"/> Salome-meca      |
| <input type="checkbox"/> Code_Aster   | <input type="checkbox"/> FreeFem++ | <input type="checkbox"/> TELEMAT-MASCARET |
| <input type="checkbox"/> Code_Saturne | <input type="checkbox"/> OpenFOAM  | <input type="checkbox"/> WRF              |

Chimie/dynamique moléculaire

- |                                   |                                   |  |
|-----------------------------------|-----------------------------------|--|
| <input type="checkbox"/> Cfour    | <input type="checkbox"/> Gromacs  | <input type="checkbox"/> Psi4                |
| <input type="checkbox"/> DL-POLY  | <input type="checkbox"/> NAMD     | <input type="checkbox"/> Schrödinger Desmond |
| <input type="checkbox"/> Gamess   | <input type="checkbox"/> Polyrate | <input type="checkbox"/> Schrödinger Jaguar  |
| <input type="checkbox"/> Gaussian |                                   |  |

Deep learning

- |                                |                                     |                                  |
|--------------------------------|-------------------------------------|----------------------------------|
| <input type="checkbox"/> Caffe | <input type="checkbox"/> TensorFlow | <input type="checkbox"/> Python3 |
|--------------------------------|-------------------------------------|----------------------------------|

Mathématiques

- |                                 |                            |                                 |
|---------------------------------|----------------------------|---------------------------------|
| <input type="checkbox"/> Octave | <input type="checkbox"/> R | <input type="checkbox"/> Scilab |
|---------------------------------|----------------------------|---------------------------------|

- Autres domaines et/ou autre(s) application(s) (préciser) :

## DESCRIPTION DU PROJET DE RECHERCHE

RÉSUMÉ DU PROJET (*obligatoire pour tous les projets, compléter le cadre ci-dessous*) : *description succincte des objectifs scientifiques et des méthodes.*

Les projets demandant plus de 100 000 heures.coeur doivent fournir une DESCRIPTION DÉTAILLÉE DU PROJET sous forme d'un ou plusieurs document(s) de format libre, qui permettront aux rapporteurs de juger de la qualité scientifique du projet ainsi que de l'adéquation de la demande de ressources au problème traité : préciser le contexte et les objectifs, situer les travaux de l'équipe sur le thème de recherche (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.

## TYPOLOGIE DES TRAVAUX

### Nombre de cœurs visé par calcul

- < 64
- 64 – 256
- 256 – 1024
- > 1024 (les travaux > 2048 cœurs sont limités à une durée de 12 heures )

Nombre de GPU(s) par calcul :     K80    :             P100    :

## STOCKAGE, MÉMOIRE ET DURÉE DE CALCUL

Volume maximal de stockage de données	Par utilisateur	
<i>Si les applications doivent gérer des volumes importants de données :</i>		
<i>Entrées-sorties (scratch)</i>	Volume pour un calcul (si > 50 Go)	
	Nombre de fichiers pour un calcul (si > 1000)	
<i>Données à stocker</i>	Volume pour un calcul (si > 50 Go)	
	Nombre de fichiers pour un calcul (si > 1000)	
Mémoire	Volume maximal par cœur (si > 4 Go)	
Durée maximale d'exécution d'un calcul	Sur CPU (si > 48 h)	
	Sur GPU (si > 24 h)	

## 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.

## BESOIN EN SUPPORT ET FORMATIONS

- Souhaitez-vous une aide pour l'optimisation de performance de vos codes ?
  
- Préciser le besoin de formations en informatique scientifique (contenu détaillé sur [www.criann.fr/formation](http://www.criann.fr/formation))
  - Utilisation de Myria (généraliste) – 0.5 jour
  - Utilisation de Myria pour le deep learning – 0.5 jour
  - Atelier bonnes pratiques de développement – 0.5 jour
  - Programmation parallèle avec OpenMP – 1.5 jour
  - Programmation parallèle avec MPI – 1.5 jour
  - GPU : CUDA, OpenACC - 3 jours
  - Profilage d'application – 1 jour
  - Commandes Linux – 1, 2 ou 3 jours
  - Autre(s) (préciser) :



## 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

