

Mini-symposium CalInt

Impacts et enjeux du calcul intensif en France

Mini-symposium porté par le GdR Calcul, la Maison de la Simulation et MaiMoSiNE

Résumé

La simulation est maintenant omniprésente dans les sciences et l'ingénierie, les modèles gagnent en sophistication et le calcul intensif (ou calcul haute performance) devient un outil indispensable des chercheurs. L'évolution constante des matériels s'est accompagnée de progrès algorithmiques à un rythme au moins aussi important, ce qui prouve (s'il en était encore besoin) que les mathématiques jouent un rôle fondamental dans "l'écosystème" du calcul intensif.

Ce mini-symposium propose un tour d'horizon de cet écosystème. Un premier exposé fera le point sur le paysage du calcul en France. Il sera suivi d'une présentation montrant comment la problématique de l'énergie consommée lors d'un calcul peut être prise en compte. Les deux autres présentations illustreront des progrès récents dans des applications rendus possibles par les évolutions évoquées ci-dessus, d'abord dans le domaine de l'assimilation de données (avec des applications aux simulations océaniques), d'autre part dans celui des méthodes multi-échelles (avec des applications à la combustion).

Organisateur(s)

1. **Loïc Gouarin**, CNRS, Laboratoire de Mathématiques d'Orsay, groupe Calcul.
2. **Michel Kern**, Inria, Maison de la Simulation.
3. **Stéphane Labbé**, LJK, MaiMoSiNE.

Liste des orateurs

1. **Mark Asch**, ANR
Titre : Les e-infrastructures : état des lieux en France et en Europe.
2. **Sébastien Varrette**, Université du Luxembourg
Titre : HPC Performance and Energy-Efficiency : Overview and Trends.
3. **Arthur Vidard**, Inria/LJK
Titre : Present and future challenges in data assimilation.
4. **Matthieu Boileau**, CNRS, Laboratoire EM2C, CentraleSupélec, Fédération de Mathématiques
Titre : Mathematical modeling and numerical methods for HPC of multi-scale engineering applications.

Loïc Gouarin, <http://www.math.u-psud.fr/~gouarin/>, Loic.Gouarin@math.u-psud.fr
Michel Kern, <https://who.rocq.inria.fr/Michel.Kern/>, Michel.Kern@inria.fr
Stéphane Labbé, <http://www-ljk.imag.fr/membres/Stephane.Labbe/index.php>, stephane.labbe@imag.fr

1 Les e-infrastructures : état des lieux en France et en Europe

Mark Asch, ANR

Les infrastructures numériques (calcul + réseau + données + services associés) sont indispensables pour la recherche. Les nouveaux paradigmes d'open science et d'open data requièrent des infrastructures nationales et mondiales cohérentes et interopérables. Dans ce contexte, nous prévoyons une prospective nationale dans laquelle les infrastructures de calcul (HPC, grille, mésocentres) joueront un rôle central.

2 HPC Performance and Energy-Efficiency : Overview and Trends

Sébastien Varrette, Université du Luxembourg

Several major trends can be distinguished in today's IT&C landscape. First of all, the rise of the CC paradigm has allowed a never-before-seen flexibility in access to computing power. In parallel, the surging demand for data processing capability is being driven by the exponential increase of the amount of data generated every day, and the business opportunities and competitive advantages associated with the analysis of this data. Initially used in research environments, High Performance Computing (HPC) platforms are now used across all industries in order to model, simulate and analyze these growing volumes of data. Current supercomputers are however already reaching the limits of practicality as regards power usage. Energy efficiency is thus a prevalent concern in the development of future HPC systems. A confluence of these trends is anticipated, with next-generation HPC systems expected to be hybrid designs that incorporate high efficiency low power computing elements that also allow the dynamic expansion of user tasks to Cloud platforms, based on designated performance and economic parameters.

In this talk, we will review these trends and depict concrete evaluations of the energy efficiency and performances in the next-generation HPC systems.

3 Enjeux présents et futurs en assimilation de données

Arthur Vidard, Inria/LJK

Pour réaliser une prévision d'un système dynamique, toutes les informations disponibles sur ce dernier doivent être prises en compte : de nature très différentes, elles se retrouvent sous la forme d'un ensemble d'EDP non linéaires (information de type mathématique), de mesures in-situ et de télémessures (information de type physique), de statistiques et enfin de d'informations qualitatives.

La prévision est produite par l'intégration d'un modèle à partir d'un état initial auquel l'évolution du système est très sensible. Par conséquent, on tente de déterminer de façon cohérente les champs initiaux à partir de ces sources d'informations hétérogènes, c'est ce que l'on appelle l'*assimilation de données*.

Ces méthodes, très consommatrices en calcul intensif, sont utilisées quotidiennement depuis de nombreuses années en prévision numérique du temps ou de la circulation océanique. Cependant elles font face actuellement à plusieurs défis importants. Premièrement l'évolution des moyens de calcul qui impose de traquer de nouvelles sources de parallélisme. Deuxièmement la complexité des modèles numériques qui s'accroît grandement avec la montée en résolution, l'inclusion de plus en plus de processus et le couplage de différents systèmes. Enfin, avec l'avènement des observations satellites, la quantité d'observation a explosé. La masse de l'information à traiter devient énorme, de plus ces données peuvent être redondantes, complémentaires ou même contradictoires.

Dans cet exposé, après une revue des enjeux cités plus haut, on présentera plus en détail quelques pistes actuelles pour y répondre.

4 Mathematical modeling and numerical methods for HPC of multi-scale engineering applications

Matthieu Boileau, CNRS, Laboratoire EM2C, CentraleSupélec, Fédération de Mathématiques

Adam Larat, CNRS, Laboratoire EM2C, CentraleSupélec, Fédération de Mathématiques

Frédérique Laurent, CNRS, Laboratoire EM2C, CentraleSupélec, Fédération de Mathématiques

Marc Massot, Laboratoire EM2C, CentraleSupélec, Fédération de Mathématiques

Aymeric Vié, Laboratoire EM2C, CentraleSupélec, Fédération de Mathématiques

The present communication aims at presenting the effort, which has been taking place in the mathematics team of Laboratory EM2C at former Ecole Centrale Paris[1], in order to develop new generations of models and numerical methods for the predictive simulation of multiscale engineering problems. The application fields are strongly related to the simulation of combustion chambers with liquid fuel injection, which represent a major challenge for the engineering and industrial communities, but cover also physics of plasmas, biomedical engineering, etc. The originality of the approach is to tackle the whole range of disciplines, from mathematical modeling, development of numerical methods and their analysis in stiff multiscale context[5], to their efficient implementation on parallel architectures in the framework of HPC and their validation through comparisons with experimental measurements. Once these models and methods have proved to be scalable and efficient, they can be transferred to semi-industrial and industrial codes such as AVBP, CEDRE or IFP-C3D[4].

In this presentation, we will mainly focus on mathematical modeling and numerical simulation of two major issues in combustion chambers as building blocks of a long-term project : the description of the liquid spray as well as the resolution of the dynamics of reaction fronts. After briefly introducing the context, we will highlight the strongly multi-scale character of such flows and the various strategies in terms of both modeling[2], numerical methods[3, 6] and implementation on parallel architectures with two types of HPC strategies : either (1) a scalable and efficient distributed-memory algorithm based on robust and accurate methods or (2) a shared-memory algorithm which makes it possible to perform a 3D detailed simulation on a standard computer using adaptation in time and space with error control[7].

Références

- [1] M. BOILEAU, A. LARAT, F. LAURENT-NÈGRE AND M. MASSOT, *Une équipe de mathématiques dans un laboratoire d'ingénierie ou comment tenter de repousser les limites de l'interaction des mathématiques sans y perdre son identité*, Matapli, Vol 101 (2013) 125-138.
- [2] A. VIÉ, F. DOISNEAU, M. MASSOT, *On the Anisotropic Gaussian closure for the prediction of inertial-particle laden flows*, Communications in Computational Physics, Vol 17, No. 1 (2015) 1-46.
- [3] M. BOILEAU, C. CHALONS, M. MASSOT, *Robust numerical coupling of pressure and pressureless gas dynamics equations for Eulerian spray DNS and LES*, SIAM SISC, Vol. 37, No. 1 (2015) B79-B102 .
- [4] D. KAH, O. EMRE, Q.H. TRAN, S. DE CHAISEMARTIN, S. JAY, F. LAURENT, AND M. MASSOT, *High order moment method for polydisperse evaporating spray with mesh movement : application to internal combustion engines*, International Journal of Multiphase Flows, Vol. 71 (2015) 38-65.
- [5] S. DESCOMBES, M. DUARTE, T. DUMONT, F. LAURENT, V. LOUVET, M. MASSOT, *Analysis of operator splitting in the non-asymptotic regime for nonlinear reaction diffusion equations*, Application to the dynamics of premixed flames, SIAM J. of Num. Analysis, Vol. 52, No. 3 (2014) 1311-1334.
- [6] M. SABAT, A. LARAT, A. VI, M. MASSOT, *On the development of high order realizable schemes for the Eulerian simulation of disperse phase flows : a convex-state preserving Discontinuous Galerkin method*, Journal of Computational Multiphase Flows Vol 6, No. 3 (2014) 247-270.
- [7] S. DESCOMBES, M. DUARTE, T. DUMONT, T. GUILLET, V. LOUVET, M. MASSOT, *Task-based adaptive multiresolution for time-space multi-scale reaction-diffusion systems on multi-core architectures*, submitted to SIAM J. Scientific Computing (2015).