



LA SIMULATION SUR LES ORDINATEURS DE GRANDE PUISSANCE : AUJOURD'HUI ET DEMAIN

CONFÉRENCE-DÉBAT

Mardi 29 juin 2010 de 14h30 à 17h00

Organisateur : Olivier PIRONNEAU,
Membre de l'Académie des sciences



Académie
des sciences

14 h 30 **Le calcul intensif**

Olivier PIRONNEAU, *Laboratoire Jacques Louis Lions, Université Pierre et Marie Curie, Président du Comité Stratégique pour le Calcul Intensif*

14h50 **Simulation d'un tremblement de terre à l'échelle planétaire**

Dimitri KOMATITSCH, *Université de l'Adour, Pau*

15 h 25 **La simulation des molécules du vivant**

Richard LAVERY, *Institut de Biologie et Chimie des Protéines, CNRS/Université de Lyon*

16 h 00 **Les calculs de pointe en météorologie et climatologie**

Patrick MASCART, *Laboratoire d'Aérodynamique, CNRS/Université Paul Sabatier- Toulouse III*

Grande salle
des séances

16 h 35 **Discussion**

Palais de
l'Institut de
France

23, quai de
Conti
75006 Paris

Présentation

Récemment, la France a fait un très gros effort de rééquipement pour le calcul intensif, ce qui lui donne une très bonne place sur le plan international pour la recherche. La simulation numérique est un moyen d'investigation aussi puissant que la théorie et l'expérience, mais une course aux ressources informatiques maximales est nécessaire dans certains domaines. Actuellement la puissance des ordinateurs de pointe double tous les ans, le parallélisme massif est devenu incontournable et les processeurs vont être hybrides. Trois chercheurs présenteront des simulations extrêmes dans les domaines de la géologie, de la chimie et de la climatologie, avec leurs difficultés et leurs projets. Auparavant, Olivier Pironneau aura fait le point sur la situation du matériel en France et dans le monde.

Entrée libre



La simulation sur les ordinateurs de grande puissance : aujourd'hui et demain

Résumés

Le calcul intensif

Olivier PIRONNEAU, *Professeur à l'Université Pierre et Marie Curie, Membre de l'Académie des sciences et de l'Institut universitaire de France, Laboratoire Jacques-Louis Lions UMR CNRS UPMC*

La simulation sur les ordinateurs de pointe concerne presque tous les domaines de la science, ces objets de très haute technologie sont cent mille fois plus puissants que les ordinateurs personnels. En France, nous avons trois centres de calcul pour la recherche et une part importante du projet européen PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe). Ces ordinateurs sont très complexes à programmer car ils ont plusieurs dizaines de milliers de cœurs de calcul dont certains sont en fait des processeurs graphiques (GPU) avec un jeu d'instructions réduit.

Des bibliothèques spécialisées doivent être développées ainsi que, et surtout, une nouvelle école de scientifiques aux doubles compétences : un vrai changement culturel !

Simulation d'un tremblement de terre à l'échelle planétaire

Dimitri KOMATITSCH, *Professeur, membre de l'Institut universitaire de France, « Modélisation et imagerie en géosciences », UMR CNRS Université de Pau et des Pays de l'Adour*

L'augmentation spectaculaire des performances des ordinateurs au cours des dernières années a pleinement bénéficié à la géophysique, et en particulier à l'étude de la propagation des ondes sismiques résultant de tremblements de terre. Nous illustrerons le fait que la résolution numérique de l'équation des ondes permet de modéliser l'aléa sismique, et que depuis peu la résolution de problèmes inverses permet l'amélioration des modèles que nous avons de la structure de la Terre. Nous montrerons aussi notre capacité à prédire en temps réel les secousses sismiques secondaires après un séisme, comme celui d'Aquila.

La simulation des molécules du vivant

Richard LAVERY, *Directeur de recherche au CNRS, Institut de biologie et chimie des protéines, UMR CNRS Université de Lyon*

Les biomacromolécules et leurs assemblages sont les moteurs de la vie cellulaire. Pour comprendre, et pour moduler, leur fonctionnement, il est important de pouvoir simuler leur comportement à l'échelle atomique. La puissance des ordinateurs disponibles aujourd'hui, alliée aux avancées algorithmiques, permet d'atteindre ce but pour des systèmes contenant de dizaines de milliers, voire des millions d'atomes, et pour des temps dépassant des microsecondes. Les résultats ont des applications dans la biologie structurale, la pharmacologie, la biotechnologie et la biologie des systèmes.

Les calculs de pointe en météorologie et climatologie

Patrick MASCART, *Physicien à l'Observatoire Midi-Pyrénées, Laboratoire d'aérodynamique, UMR CNRS, Université Toulouse III Paul Sabatier*

Les progrès rapides des capacités de calcul intensif permettent désormais de s'attaquer à la modélisation de systèmes naturels de très grande taille. On présentera deux exemples de simulations extrêmes s'appuyant sur des travaux de Météo France, de l'Institut Pierre Simon Laplace, et du CERFACS (Centre européen de recherche et de formation avancée en calcul scientifique) : les calculs de pointe en climatologie et en météorologie.

En climatologie, on examinera comment l'évolution des ordinateurs permet de mieux prendre en compte le couplage entre les composantes du système climatique, d'explorer l'impact régional du climat global, et d'esquisser une discussion de la variabilité statistique des solutions trouvées. On essaiera de replacer le savoir faire actuel dans sa perspective à moyen terme.

En météorologie, on examinera comment l'amélioration de la taille des mailles de calcul (aujourd'hui kilométriques) des modèles de prévision météorologique permet de progresser sur plusieurs fronts simultanés comme l'assimilation d'observations nouvelles (satellite, radars...), la représentation des orages et des phénomènes extrêmes, et la quantification des probabilités de prévision par approche ensembliste.

Dans les deux exemples, on montrera que les avancées des machines doivent s'accompagner d'une révolution de l'algorithmique des modèles pour prendre en compte le parallélisme massif, et donc d'un important investissement scientifique.