

Le développement du calcul intensif a permis de faire progresser la simulation numérique, outil essentiel de la recherche scientifique, technologique et industrielle. Le CEA a l'ambition, avec ses partenaires académiques et industriels, d'être un acteur majeur dans ce domaine.

Le calcul intensif

Confronter expérience et théorie



© P. Stroppa/CEA

Centre de calcul recherche et technologie (CCRT).

Un besoin interdisciplinaire

Une stratégie de développement a été mise en place :

- le premier volet concerne la conception, la réalisation et la mise en œuvre des grands outils de calcul, pour lequel le CEA s'appuie sur des collaborations industrielles. Cet aspect est pris en charge par une équipe d'experts du CEA DAM Île-de-France, qui s'appuie sur des collaborations industrielles (Bull et Intel, EDF, Safran, Astrium, Onera, Ineris);
- le second porte sur le développement des applications pour la Défense, pour l'énergie, pour la recherche dans les domaines du climat, des nanosciences et des sciences du vivant, ainsi qu'en astrophysique et physique des particules, impliquant ainsi chaque pôle du CEA.

Concevoir, réaliser et mettre en œuvre de grandes infrastructures

Plusieurs entités ont été mises en place au CEA pour concevoir, réaliser et mettre en œuvre les grandes infrastructures de calcul. La conception et la réalisation des grands moyens de calcul sont assurées de manière duale avec Bull et Intel.

Extreme Computing

Créé dans le cadre du contrat Tera 100, le laboratoire commun Bull/CEA a pour objectif de pérenniser la capacité de concevoir les architectures de machines de grande puissance en Europe.

Exatec

Créé fin 2009, ce laboratoire associant Intel (49 %), le CEA (23 %), Genci (23 %) et l'université de Versailles (5 %) a pour objectif de préparer les technologies permettant d'atteindre l'exaflops (10^{18} opérations par seconde) dans la prochaine décennie.

Le Complexe de calcul scientifique du CEA

Il est localisé à Bruyères-le-Châtel sur le centre DAM Île-de-France.

Le centre de calcul Défense Tera

Il accueille depuis 2005 le supercalculateur Tera 10 (puissance crête de 60 téraflops). Le démonstrateur Tera 100 a été livré en juin 2009, conformément au contrat signé avec Bull en juillet 2008. Il a permis de valider les nouvelles technologies nécessaires au fonctionnement d'un calculateur petaflopique qui sera installé en 2010.

Tera permet de réaliser les simulations numériques nécessaires à la garantie des armes nucléaires de la dissuasion.

<http://www-hpc.cea.fr/>

La plate-forme d'expérimentation

Elle regroupe l'ensemble des actions pilotées par le CEA et menées en collaboration avec des industriels et des laboratoires universitaires dans le cadre des appels à projets du pôle de compétitivité System@TIC, de l'Agence nationale de la recherche et de l'Union européenne (Prace). Elle sera transférée sur le campus Ter@tec en 2011.

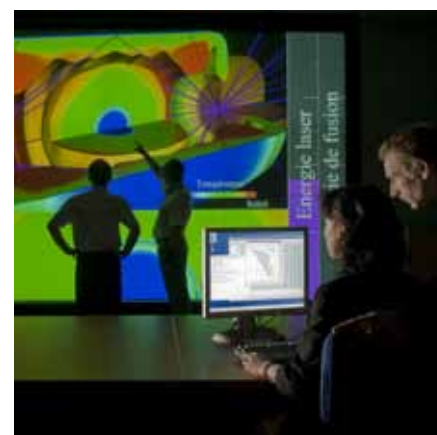
Le CCRT

Le Centre de calcul recherche et technologie, un des premiers centres de calcul européens, a pour vocation à répondre aux besoins de ses partenaires (CEA, Genci, EDF, Snecma...) en matière de grandes simulations numériques et de favoriser les échanges entre la recherche et l'industrie. Des calculateurs vectoriels et massivement parallèles (d'une puissance totale de plus de 300 téraflops) offrent aux utilisateurs des possibilités d'applications variées : astrophysique, climat, énergie, santé... Un investissement majeur a été réalisé en 2009 au CCRT par Genci avec l'installation du premier grand calculateur hybride d'Europe et pour les prochains calculs du Giec.

<http://www-ccrt.cea.fr/>

Prace

Ce programme européen a pour objectif de mettre en place trois à cinq centres de calcul, de classe mondiale, coordonnés par



Supercalculateur Tera 10 et son mur d'images.

© H. Raguet/Science&Avenir/CEA



De g. à dr. : cellule de photoélectrolyse utilisée pour les études sur la production d'hydrogène par photoélectrolyse de l'eau – programme Barracuda.

une entité européenne. Dix-huit pays de l'Union y sont engagés.

La France, dont le représentant est Genci, a choisi le site de Bruyères-le-Châtel pour installer la première machine pétaflopique de ce programme. L'appel d'offres a été lancé en décembre 2009 et est mené par une équipe commune CEA/Genci.

<http://www.prace-project.eu/>

Pour accueillir le calculateur européen Prace ainsi que le futur CCRT, le CEA a démarré en 2009 la construction du Très Grand Centre de calcul (TGCC). Il constituera le plus grand centre de calcul scientifique d'Europe.

Ter@tec

Cette association a été créée pour promouvoir la simulation numérique et développer, autour de l'expertise du CEA, des synergies entre la Défense, l'industrie et la recherche. Elle a annoncé en 2009, en collaboration avec la communauté de communes de l'Arpajonnais, le conseil général de l'Essonne et la chambre de commerce et d'industrie du département, la création de la première technopole européenne consacrée aux technologies pour le calcul intensif : le campus Ter@tec.

<http://www.teratec.eu/>

Répondre aux grands enjeux scientifiques du CEA

Simulation de matériau pour la production d'hydrogène

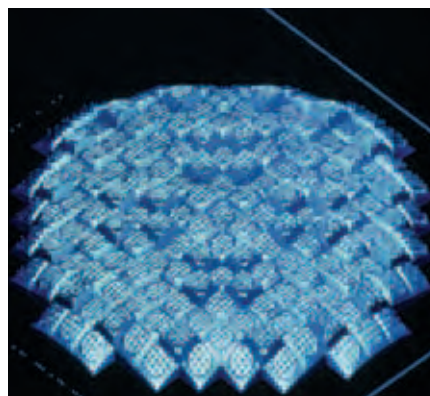
Pour la production massive d'hydrogène par électrolyse de vapeur d'eau à haute température, une cellule élémentaire composée d'un cœur céramique entouré de plaques d'interconnecteurs métalliques est simulée en mettant en œuvre des maillages volumineux. Dans ce contexte, les phénomènes physiques interviennent à des échelles très différentes, de la dizaine de microns à un objet de quelques centaines de cm². Une approche couplant thermique, hydraulique, électrochimique et mécanique



permet de prédire les distributions de courant dans les électrodes et donc la quantité d'hydrogène produite. Il est ainsi possible de définir des architectures performantes et de prévoir des points de fonctionnement optimaux.

Optimiser les traitements par hadronthérapie

La puissance de calcul du CCRT a permis à des chercheurs du SHFJ et du CNRS de simuler un traitement par hadronthérapie aux ions de carbone 12 sur deux modèles de cancer (poumon et cerveau). Le contrôle en ligne du dépôt de la dose réalisé par tomographie à émission de positons a également été étudié. Cela devrait permettre de calculer la distribution spatiale et dosimétrique du traitement. Ces simulations, réalisées avec la plate-forme de calcul Gate, sont un premier pas vers une meilleure définition et optimisation des protocoles de traitements par hadronthérapie en association



Simulation d'une distribution de puissance dans un cœur de réacteur.

avec un contrôle thérapeutique efficace par imagerie TEP.

Architecture hybride pour la nanosimulation

Dans le but de simuler la croissance de matériaux ainsi que de la dynamique de molécules avec une description des systèmes au niveau électronique, les physiciens ont mis en œuvre un code de simulation *ab initio* développé au CEA et basé sur des fonctions mathématiques, les ondelettes, spécialement adaptées à la résolution sur supercalculateurs parallèles. La simulation de la croissance de nanofils de silicium ou de graphène est désormais réalisable sur un supercalculateur comme Titane (CCRT). Ces simulations permettront de mieux comprendre les mécanismes élémentaires de la croissance, l'influence de la température et de définir le bon régime expérimental de croissance.

Chaufferie nucléaire sous protection

Dans le cadre du projet Barracuda (futurs sous-marins nucléaires d'attaque), les moyens de calcul du CCRT ont permis de valider le dimensionnement des protections radiologiques autour du compartiment chaufferie nucléaire. Le niveau d'atténuation attendu du flux de neutrons supérieur à 14 décades nécessitait d'avoir recours au calcul intensif pour effectuer le premier calcul direct de ce type en utilisant les méthodes de Monte-Carlo. Outre la performance technique incontestable des travaux réalisés, c'est la première application du calcul intensif réalisée par le CCRT au profit de la Direction de la propulsion nucléaire.

Définir un plan de chargement

Un agencement d'assemblages combustibles dans un cœur de réacteur nucléaire définit un plan de chargement. Face au nombre important de configurations à traiter, le CEA a réalisé un outil d'optimisation indépendant du type de cœur et de combustible. Basé sur le logiciel d'optimisation par algorithme génétique Uranie/Vizir et sur le code neutronique Apollo3, il permet au concepteur d'améliorer la sûreté des réacteurs. Il est désormais possible avec le calcul haute performance de calculer des plans de chargement complexes dans un délai court. Moins de 24 heures de calcul et 4 000 processeurs ont permis de réaliser avec Titane plus de 10 millions de calculs 3D qui ont fait ressortir des stratégies de gestion pertinentes.

MAISON DE LA SIMULATION À SACLAY

En 2009, le CEA, le CNRS et l'Inria ont finalisé la définition de la Maison de la simulation, localisée sur le plateau de Saclay. Elle permettra aux chercheurs de disposer de compétences pluridisciplinaires afin de développer de nouveaux codes de simulation adaptés aux supercalculateurs massivement parallèles.

