

Journée Calcul et Simulation de l'Université Paris Sud

Rapport sur les contributions

ID de Contribution: **0**

Type: **Non spécifié**

Introduction

mercredi 4 juin 2014 09:30 (15 minutes)

Orateur: GERMAIN-RENAUD, Cécile (LRI & LAL)

ID de Contribution: 1

Type: Non spécifié

Simulation de la spectroscopie d'absorption et d'émission de systèmes moléculaires d'intérêt astrophysique

mercredi 4 juin 2014 09:45 (30 minutes)

La présence d'hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) dans le milieu interstellaire (ISM) a été proposée il y a une trentaine d'années suite à l'observation des bandes infrarouges non identifiées (UIB) dans le spectre d'émission d'une grande variété d'objets astronomiques. Ces bandes situées entre 3,3 et 11,3 μm , correspondent aux vibrations typiques CC et CH d'hydrocarbures aromatiques. Le mécanisme responsable de l'émission IR correspond à l'excitation visible/UV des HAP suivi par des processus intramoléculaires non-adiabatiques laissant la molécule dans un état vibrationnellement chaud. La molécule se refroidit alors par émission spontanée de photons infrarouges. L'obtention directe d'information physico-chimique sur ces molécules à partir d'observations reste une tâche très difficile, en particulier parce que les photons émis proviennent d'une famille de molécules plutôt que d'une molécule spécifique. Dans ce contexte, le développement d'outils théoriques pour d'une part prédire les structures des molécules responsables des UIB et d'autre part simuler leurs spectres d'émission IR est essentiel.

Au cours de cette présentation, nous allons présenter nos récents développements pour simuler les spectres IR des HAP notamment en décrivant explicitement les processus de dissociation, d'isomérisation, d'émission et en incluant les processus de couplages anharmoniques vibrationnels. Notre approche repose sur une description où la dynamique vibrationnelle est décrite par la théorie des perturbations et où la cascade d'émission IR est décrite par des simulations de type Monte-Carlo cinétique.

Orateur: FALVO, Cyril**Classification de Session:** Session I

ID de Contribution: 2

Type: **Non spécifié**

Utilisation en parallèle des logiciels de simulation quantiques et classiques sur la grappe du LCP

mercredi 4 juin 2014 15:00 (30 minutes)

La plupart des calculs s'effectuant sur la grappe du LCP sont des calculs parallèles. Dans cette présentation, nous étudierons leur profil et leur efficacité, selon les types de logiciels et selon les systèmes étudiés.

Orateur: TEULER, Jean-Marie (LCP)

Classification de Session: Session III

ID de Contribution: 6

Type: **Non spécifié**

Présentation de l'équipe Inria Postale et de ses activités HPC

mercredi 4 juin 2014 10:15 (30 minutes)

Orateur: BABOULIN, Marc (LRI)

Classification de Session: Session I

ID de Contribution: 7

Type: **Non spécifié**

Programmation Générique et Générative pour le Calcul Haute Performance

mercredi 4 juin 2014 11:30 (30 minutes)

Orateur: FALCOU, Joel (LRI)

Classification de Session: Session II

ID de Contribution: 8

Type: **Non spécifié**

Conception de systèmes à partir d'expériences numériques coûteuses

mercredi 4 juin 2014 12:30 (30 minutes)

Le processus de conception d'un système est un processus itératif qui alterne des étapes de spécification de performances, de définition d'architectures, et d'évaluation des performances et des coûts associés, jusqu'à la définition d'un produit industriellement réalisable et compétitif d'un point de vue économique. Aujourd'hui, pour rendre un processus de conception le plus performant possible, l'utilisation d'outils de simulation numérique et de techniques d'optimisation performantes est essentielle.

L'optimisation des performances globales d'un système à partir de simulations numériques est souvent une question délicate. Une situation où l'optimisation d'une performance est particulièrement difficile se rencontre lorsque les simulations numériques sont coûteuses. Il devient alors essentiel de considérer des méthodes d'optimisation qui utilisent aussi efficacement que possible l'information fournie par les simulations. L'approche appelée optimisation par méta-modèle consiste à construire un modèle numérique simplifié reproduisant le comportement du modèle complexe. Le méta-modèle est une approximation de la fonction à optimiser, construite à partir des résultats d'évaluation précédents, et servant à choisir les points d'évaluation suivants. Ce choix est guidé par un critère d'échantillonnage qui effectue un compromis entre recherche locale et recherche globale. L'un des critères les plus utilisés aujourd'hui est le critère d'amélioration moyenne (en anglais, Expected Improvement), et qui s'obtient comme l'espérance du dépassement de la valeur courante de l'optimum sous un modèle de processus aléatoire gaussien pour la fonction à optimiser. Ce type de méthode d'optimisation reçoit une interprétation naturelle dans le cadre général de la théorie

bayésienne de la décision, et peut être généralisé à d'autres problèmes, notamment celui de l'estimation de la probabilité de défaillance d'un système à partir de simulations numériques.

Orateur: M. VAZQUEZ, Emmanuel (SUPELEC)

Classification de Session: Session II

ID de Contribution: 9

Type: **Non spécifié**

Mining for disease-causing genes in the other 98% of the human genome

mercredi 4 juin 2014 12:00 (30 minutes)

Orateur: GAUTHERET, Daniel (IGM)

Classification de Session: Session II

ID de Contribution: 10

Type: **Non spécifié**

Physique des Particules : le retour du parallélisme

mercredi 4 juin 2014 14:00 (30 minutes)

La physique des particules a été de longue date un gros consommateur de simulations. Les besoins sont sans cesse croissant, les ressources ne peuvent plus augmenter (près de 300.000 coeurs tournent en permanence pour les simulations des expériences LHC), et les nouvelles machines à nombreux coeurs sont de moins en moins adaptées aux logiciels actuels. Par ailleurs, l'utilisation des accélérateurs (GPU) est encore timide. Les physiciens et informaticiens de physique des particules amorcent donc une profonde mutation de leurs logiciels, pour embrasser le parallélisme qui avait disparu de leur horizon pendant une petite trentaine d'années. Après un tour d'horizon, les enjeux et les contours de cette mutation seront exposés.

Orateur: Dr ROUSSEAU, David (ATLAS)**Classification de Session:** Session III

ID de Contribution: 11

Type: **Non spécifié**

Simulations de mouvements de foules

mercredi 4 juin 2014 14:30 (30 minutes)

Orateur: MAURY, Bertrand (Laboratoire de Mathématiques d'Orsay)

Classification de Session: Session III

ID de Contribution: 12

Type: **Non spécifié**

Structuration d'une communauté du calcul autour d'un mésocentre (2009-2014)

mercredi 4 juin 2014 15:50 (20 minutes)

Lancé à partir de la volonté d'une petite communauté motivée dans le domaine du calcul scientifique, impliquant plusieurs laboratoires avec le soutien fort de la direction de l'établissement, le projet de mésocentre s'est mis en place autour d'un équipement mutualisé, d'une animation scientifique commune, et d'une équipe d'ingénieurs support expérimentée. Le mésocentre rassemble maintenant l'ensemble des laboratoires du centre de recherche de l'Ecole Centrale Paris, mettant ainsi en connection des disciplines scientifiques diverses et des expériences du calcul haute performance à plusieurs niveaux. Il a permis aux chercheurs de structurer et d'étendre leur activité dans ce domaine selon trois voies : amener de nouveaux acteurs au calcul scientifique, voire au calcul intensif, proposer un tremplin pour aller calculer sur les centres nationaux, voire européens et développer des méthodes numériques de nouvelle génération. Le retour d'expérience après trois ans de fonctionnement tend à montrer que la création de cette communauté, qui s'est naturellement instaurée autour de l'équipement de calcul qui remplit pleinement son rôle, a permis d'ouvrir de nombreuses perspectives aux chercheurs qu'un laboratoire isolé n'aurait pas permis.

Orateurs: SÉRIES, Laurent (Ecole Centrale de Paris); MASSOT, Marc (Ecole Centrale de Paris)

Classification de Session: Session IV

ID de Contribution: 13

Type: **Non spécifié**

Maison de la Simulation : un laboratoire de Paris-Sud dédié au calcul haute performance.

mercredi 4 juin 2014 16:10 (20 minutes)

Orateur: AUDIT, Edouard (Directeur de la Maison de la Simulation)

Classification de Session: Session IV

ID de Contribution: 14

Type: **Non spécifié**

SMILEI, un code de simulation laser-plasma open-source collaboratif

mercredi 4 juin 2014 10:45 (30 minutes)

SMILEI est un code de simulation numérique d'interaction laser-plasma de type Particle In Cell (PIC). Ce code est initialement développé pour répondre aux besoins de la communauté des plasmasiens du plateau de Saclay. Il a pour vocation d'être open source et collaboratif. Plusieurs laboratoires et instituts participent déjà à son développement. Il réunit autour d'un même projet des experts reconnus du calcul haute performance (Maison de la Simulation, IDRIS), des ingénieurs en calcul scientifique experts en simulations numériques (LLR, LULI) et des physiciens théoriciens ou expérimentateurs qui peuvent directement exprimer leurs besoins (LLR, LULI, LPGP). Cette synergie devrait pouvoir conduire à la création d'un outil à la fois performant et qui répond aux besoins précis de la communauté.

Orateur: BECK, Arnaud (LLR)**Classification de Session:** Session I