

Implémentation de simulations QMC massivement parallèles pour la chimie: Du laboratoire aux calculateurs pétaflopiques en passant par les mésocentres

A. Scemama¹, M. Caffarel¹

¹Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques / IRSAMC,
Toulouse, France

10 Octobre 2012



Plan

- 1 Monte Carlo Quantique pour la Chimie
- 2 Implémentation
- 3 Du laboratoire aux calculateurs pétaflopiques en passant par les mésocentres



Monte Carlo Quantique (QMC)

- Résolution de l'éq. de Schrödinger avec des marche aléatoires
- État de l'art et méthodes de routine en physique : physique nucléaire, matière condensée, systèmes de spins, liquides quantiques, spectroscopie IR, ...
- Encore une méthode marginale pour la chimie quantique (contrairement aux méthodes post-HF ou DFT)
- Raison : Beaucoup de temps CPU pour des systèmes de petite et moyenne taille

Monte Carlo Quantique (QMC)

- Résolution de l'éq. de Schrödinger avec des marche aléatoires
- État de l'art et méthodes de routine en physique : physique nucléaire, matière condensée, systèmes de spins, liquides quantiques, spectroscopie IR, ...
- Encore une méthode marginale pour la chimie quantique (contrairement aux méthodes post-HF ou DFT)
- Raison : Beaucoup de temps CPU pour des systèmes de petite et moyenne taille

Monte Carlo Quantique (QMC)

- Résolution de l'éq. de Schrödinger avec des marche aléatoires
- État de l'art et méthodes de routine en physique : physique nucléaire, matière condensée, systèmes de spins, liquides quantiques, spectroscopie IR, ...
- Encore une méthode marginale pour la chimie quantique (contrairement aux méthodes post-HF ou DFT)
- Raison : Beaucoup de temps CPU pour des systèmes de petite et moyenne taille

Monte Carlo Quantique (QMC)

- Résolution de l'éq. de Schrödinger avec des marche aléatoires
- État de l'art et méthodes de routine en physique : physique nucléaire, matière condensée, systèmes de spins, liquides quantiques, spectroscopie IR, ...
- Encore une méthode marginale pour la chimie quantique (contrairement aux méthodes post-HF ou DFT)
- Raison : Beaucoup de temps CPU pour des systèmes de petite et moyenne taille

Monte Carlo Quantique (QMC)

Mais :

- Un scaling très favorable avec la taille du système (contrairement aux méthodes standard)
- Naturellement adapté au parallélisme extrême :
 - Très peu d'I/O (asynchrones)
 - Très peu de communications (asynchrones)
 - Très faible empreinte RAM (< 500 MiB par cœur)
 - Beaucoup de FLOPs
 - Tolérance aux pannes facile à mettre en œuvre

Monte Carlo Quantique (QMC)

Mais :

- Un scaling très favorable avec la taille du système (contrairement aux méthodes standard)
- Naturellement adapté au parallélisme extrême :
 - Très peu d'I/O (asynchrones)
 - Très peu de communications (asynchrones)
 - Très faible empreinte RAM (< 500 MiB par cœur)
 - Beaucoup de FLOPs
 - Tolérance aux pannes facile à mettre en œuvre

Monte Carlo Quantique (QMC)

Mais :

- Un scaling très favorable avec la taille du système (contrairement aux méthodes standard)
- Naturellement adapté au parallélisme extrême :
 - Très peu d'I/O (asynchrones)
 - Très peu de communications (asynchrones)
 - Très faible empreinte RAM (< 500 MiB par cœur)
 - Beaucoup de FLOPs
 - Tolérance aux pannes facile à mettre en œuvre

Monte Carlo Quantique (QMC)

Mais :

- Un scaling très favorable avec la taille du système (contrairement aux méthodes standard)
- Naturellement adapté au parallélisme extrême :
 - Très peu d'I/O (asynchrones)
 - Très peu de communications (asynchrones)
 - Très faible empreinte RAM (< 500 MiB par cœur)
 - Beaucoup de FLOPs
 - Tolérance aux pannes facile à mettre en œuvre

Monte Carlo Quantique (QMC)

Mais :

- Un scaling très favorable avec la taille du système (contrairement aux méthodes standard)
- Naturellement adapté au parallélisme extrême :
 - Très peu d'I/O (asynchrones)
 - Très peu de communications (asynchrones)
 - Très faible empreinte RAM (< 500 MiB par cœur)
 - Beaucoup de FLOPs
 - Tolérance aux pannes facile à mettre en œuvre

Monte Carlo Quantique (QMC)

Mais :

- Un scaling très favorable avec la taille du système (contrairement aux méthodes standard)
- Naturellement adapté au parallélisme extrême :
 - Très peu d'I/O (asynchrones)
 - Très peu de communications (asynchrones)
 - Très faible empreinte RAM (< 500 MiB par cœur)
 - Beaucoup de FLOPs
 - Tolérance aux pannes facile à mettre en œuvre

Monte Carlo Quantique (QMC)

Mais :

- Un scaling très favorable avec la taille du système (contrairement aux méthodes standard)
- Naturellement adapté au parallélisme extrême :
 - Très peu d'I/O (asynchrones)
 - Très peu de communications (asynchrones)
 - Très faible empreinte RAM (< 500 MiB par cœur)
 - Beaucoup de FLOPs
 - Tolérance aux pannes facile à mettre en œuvre

QMC pour les molécules

Problème : Résolution stochastique de l'équation de Schrödinger pour N électrons dans une molécule.

$$E = \frac{\int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \mathcal{H} \Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\int d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N \Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \Phi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}$$
$$\sim \frac{1}{M} \sum \frac{\mathcal{H} \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}, \text{ échantillonné avec } (\Psi \times \Phi)$$

E : Energie

\mathcal{H} : Opérateur Hamiltonien

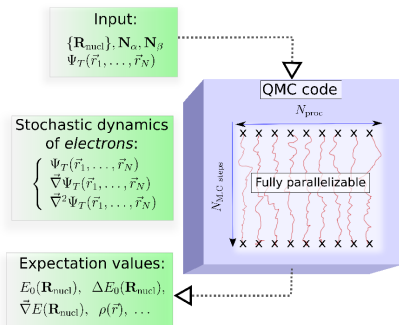
$\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$: Coord. des électrons

Φ : Fonction d'onde exacte (inconnue)

Ψ : Fonction d'onde d'essai

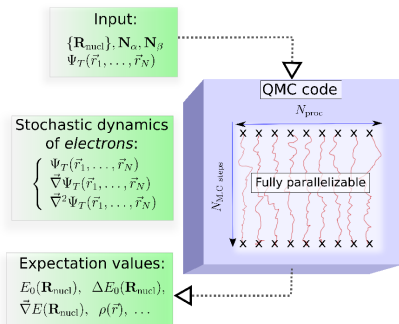
Algorithme QMC

- **Marcheur** : vecteur de \mathbb{R}^{3N} contenant les positions des électrons
- Diffusion/dérive des marcheurs avec processus de mort/naissance pour produire la densité à $3N$ -dimensions ($\Psi \times \Phi$) (on a besoin de Ψ , $\nabla\Psi$, $\Delta\Psi$)
- Calcul de $\frac{\mathcal{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}$ pour chaque point de trajectoire des marcheurs
- L'énergie est la moyenne de toutes les $\frac{\mathcal{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}$ calculées
- **Parallelisme extrême** : Populations indépendantes de marcheurs



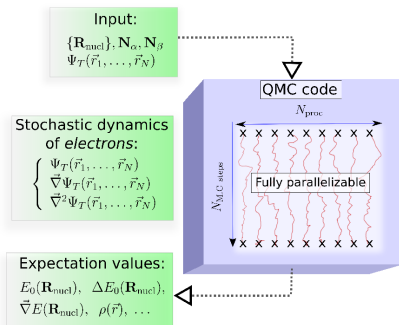
Algorithme QMC

- Marcheur : vecteur de \mathbb{R}^{3N} contenant les positions des électrons
- Diffusion/dérive des marcheurs avec processus de mort/naissance pour produire la densité à $3N$ -dimensions ($\Psi \times \Phi$) (on a besoin de Ψ , $\nabla\Psi$, $\Delta\Psi$)
- Calcul de $\frac{\mathcal{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}$ pour chaque point de trajectoire des marcheurs
- L'énergie est la moyenne de toutes les $\frac{\mathcal{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}$ calculées
- Parallelisme extrême : Populations indépendantes de marcheurs



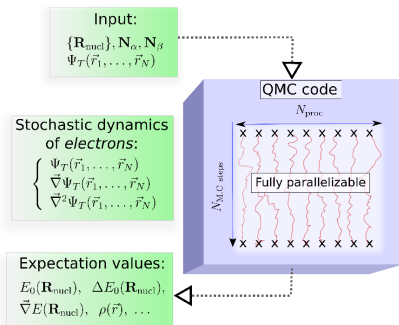
Algorithme QMC

- Marcheur : vecteur de \mathbb{R}^{3N} contenant les positions des électrons
- Diffusion/dérive des marcheurs avec processus de mort/naissance pour produire la densité à $3N$ -dimensions ($\Psi \times \Phi$) (on a besoin de Ψ , $\nabla\Psi$, $\Delta\Psi$)
- Calcul de $\frac{\mathcal{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}$ pour chaque point de trajectoire des marcheurs
- L'énergie est la moyenne de toutes les $\frac{\mathcal{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}$ calculées
- Parallelisme extrême : Populations indépendantes de marcheurs



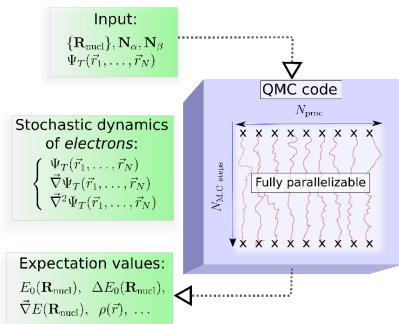
Algorithme QMC

- Marcheur : vecteur de \mathbb{R}^{3N} contenant les positions des électrons
- Diffusion/dérive des marcheurs avec processus de mort/naissance pour produire la densité à $3N$ -dimensions ($\Psi \times \Phi$) (on a besoin de Ψ , $\nabla\Psi$, $\Delta\Psi$)
- Calcul de $\frac{\mathcal{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}$ pour chaque point de trajectoire des marcheurs
- L'énergie est la moyenne de toutes les $\frac{\mathcal{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}$ calculées
- Parallélisme extrême : Populations indépendantes de marcheurs



Algorithme QMC

- Marcheur : vecteur de \mathbb{R}^{3N} contenant les positions des électrons
- Diffusion/dérive des marcheurs avec processus de mort/naissance pour produire la densité à $3N$ -dimensions ($\Psi \times \Phi$) (on a besoin de Ψ , $\nabla\Psi$, $\Delta\Psi$)
- Calcul de $\frac{\mathcal{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}$ pour chaque point de trajectoire des marcheurs
- L'énergie est la moyenne de toutes les $\frac{\mathcal{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}{\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}$ calculées
- Parallelisme extrême : Populations indépendantes de marcheurs

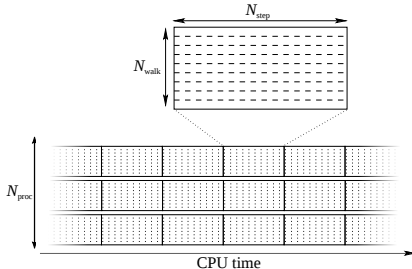


Plan

- 1 Monte Carlo Quantique pour la Chimie
- 2 Implémentation**
- 3 Du laboratoire aux calculateurs pétaflopiques en passant par les mésocentres

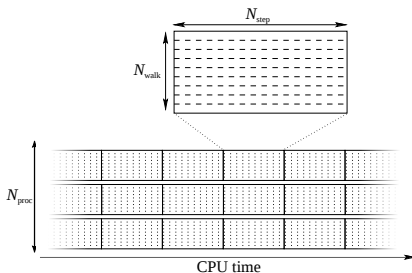
Implémentation dans QMC=Chem

- **Block** : N_{walk} marcheurs réalisant N_{step} pas
- Les moyennes sur les blocks ont une distribution Gaussienne
- Calculer le plus possible de blocks, le plus vite possible



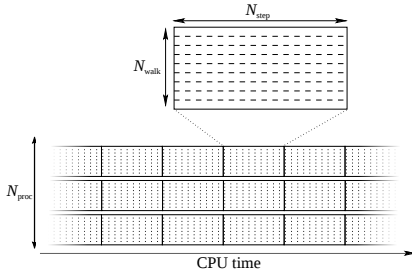
Implémentation dans QMC=Chem

- Block : N_{walk} marcheurs réalisant N_{step} pas
- Les moyennes sur les blocks ont une distribution Gaussienne
- Calculer le plus possible de blocks, le plus vite possible



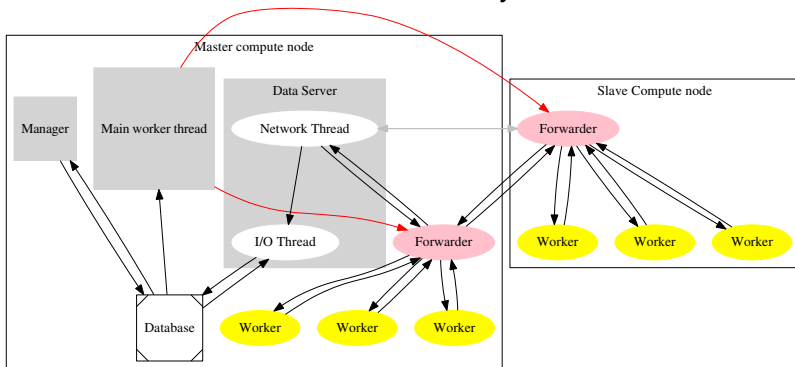
Implémentation dans QMC=Chem

- Block : N_{walk} marcheurs réalisant N_{step} pas
- Les moyennes sur les blocks ont une distribution Gaussienne
- Calculer le plus possible de blocks, le plus vite possible



Parallélisme dans QMC=Chem

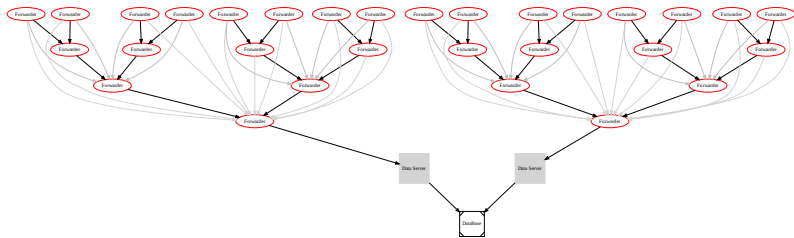
Toutes les I/O et comm. réseau sont asynchrones



Tolérance aux pannes

Parallélisme extrême \rightarrow pannes très probables

- Blocks Gaussiens \rightarrow supprimer des blocks ne change pas la moyenne
- Les simulations survivent à la perte de nœuds
- Reprendre une simulation est toujours possible à partir de la base de données



Plan

- 1 Monte Carlo Quantique pour la Chimie
- 2 Implémentation
- 3 Du laboratoire aux calculateurs pétaflopiques en passant par les mésocentres**

Au laboratoire

- Jusqu'en 2008 QMC=Chem était le code de recherche de M. Caffarel
- En 2008, ré-écriture complète du code en utilisant l'environnement IRPF90 :
 - Facilité de développement
 - Automatisation de tâches
 - Facilite le travail collaboratif
 - (Venez me voir pour en discuter...)
- Objectif : code de simulation généraliste pour les systèmes de grande taille

Au laboratoire

- Jusqu'en 2008 QMC=Chem était le code de recherche de M. Caffarel
- En 2008, ré-écriture complète du code en utilisant l'environnement IRPF90 :
 - Facilité de développement
 - Automatisation de tâches
 - Facilite le travail collaboratif
 - (Venez me voir pour en discuter...)
- Objectif : code de simulation généraliste pour les systèmes de grande taille

Au laboratoire

- Jusqu'en 2008 QMC=Chem était le code de recherche de M. Caffarel
- En 2008, ré-écriture complète du code en utilisant l'environnement IRPF90 :
 - Facilité de développement
 - Automatisation de tâches
 - Facilite le travail collaboratif
 - (Venez me voir pour en discuter...)
- Objectif : code de simulation généraliste pour les systèmes de grande taille

Au laboratoire

- Jusqu'en 2008 QMC=Chem était le code de recherche de M. Caffarel
- En 2008, ré-écriture complète du code en utilisant l'environnement IRPF90 :
 - Facilité de développement
 - Automatisation de tâches
 - Facilite le travail collaboratif
 - (Venez me voir pour en discuter...)
- Objectif : code de simulation généraliste pour les systèmes de grande taille

Au laboratoire

- Jusqu'en 2008 QMC=Chem était le code de recherche de M. Caffarel
- En 2008, ré-écriture complète du code en utilisant l'environnement IRPF90 :
 - Facilité de développement
 - Automatisation de tâches
 - Facilite le travail collaboratif
 - (Venez me voir pour en discuter...)
- Objectif : code de simulation généraliste pour les systèmes de grande taille

Au laboratoire

- Jusqu'en 2008 QMC=Chem était le code de recherche de M. Caffarel
- En 2008, ré-écriture complète du code en utilisant l'environnement IRPF90 :
 - Facilité de développement
 - Automatisation de tâches
 - Facilite le travail collaboratif
 - (Venez me voir pour en discuter...)
- Objectif : code de simulation généraliste pour les systèmes de grande taille

Au laboratoire

- Jusqu'en 2008 QMC=Chem était le code de recherche de M. Caffarel
- En 2008, ré-écriture complète du code en utilisant l'environnement IRPF90 :
 - Facilité de développement
 - Automatisation de tâches
 - Facilite le travail collaboratif
 - (Venez me voir pour en discuter...)
- Objectif : code de simulation généraliste pour les systèmes de grande taille

Du laboratoire au méso-centre

2009 :

- calculs parallèles sur 32 cœurs au laboratoire
- QMC=Chem a participé au benchmarks pour Hyperion(CALMIP) : Tests jusqu'à 512 cœurs

2010 :

- Mise en service d'Hyperion :
 - Calculs de routine sur 512 cœurs
 - Optimisation des communications réseau pour un grand nombre de nœuds (32-64) : excellente scalabilité jusqu'à 512 cœurs
 - Mode interactif indispensable pour de développement
- Utilisation simultanée de 1000 cœurs sur EGEE
- Financement ANR pour soutenir le projet en 2011

Du laboratoire au méso-centre

2009 :

- calculs parallèles sur 32 cœurs au laboratoire
- QMC=Chem a participé au benchmarks pour Hyperion(CALMIP) : Tests jusqu'à 512 cœurs

2010 :

- Mise en service d'Hyperion :
 - Calculs de routine sur 512 cœurs
 - Optimisation des communications réseau pour un grand nombre de nœuds (32-64) : excellente scalabilité jusqu'à 512 cœurs
 - Mode interactif indispensable pour de développement
- Utilisation simultanée de 1000 cœurs sur EGEE
- Financement ANR pour soutenir le projet en 2011

Du laboratoire au méso-centre

2009 :

- calculs parallèles sur 32 cœurs au laboratoire
- QMC=Chem a participé au benchmarks pour Hyperion(CALMIP) : Tests jusqu'à 512 cœurs

2010 :

- Mise en service d'Hyperion :
 - Calculs de routine sur 512 cœurs
 - Optimisation des communications réseau pour un grand nombre de nœuds (32–64) : excellente scalabilité jusqu'à 512 cœurs
 - Mode interactif indispensable pour de développement
- Utilisation simultanée de 1000 cœurs sur EGEE
- Financement ANR pour soutenir le projet en 2011

Du laboratoire au méso-centre

2009 :

- calculs parallèles sur 32 cœurs au laboratoire
- QMC=Chem a participé au benchmarks pour Hyperion(CALMIP) : Tests jusqu'à 512 cœurs

2010 :

- Mise en service d'Hyperion :
 - Calculs de routine sur 512 cœurs
 - Optimisation des communications réseau pour un grand nombre de nœuds (32–64) : excellente scalabilité jusqu'à 512 cœurs
 - Mode interactif indispensable pour de développement
- Utilisation simultanée de 1000 cœurs sur EGEE
- Financement ANR pour soutenir le projet en 2011

Du laboratoire au méso-centre

2009 :

- calculs parallèles sur 32 cœurs au laboratoire
- QMC=Chem a participé au benchmarks pour Hyperion(CALMIP) : Tests jusqu'à 512 cœurs

2010 :

- Mise en service d'Hyperion :
 - Calculs de routine sur 512 cœurs
 - Optimisation des communications réseau pour un grand nombre de nœuds (32–64) : excellente scalabilité jusqu'à 512 cœurs
 - Mode interactif indispensable pour de développement
- Utilisation simultanée de 1000 cœurs sur EGEE
- Financement ANR pour soutenir le projet en 2011

Du laboratoire au méso-centre

2009 :

- calculs parallèles sur 32 cœurs au laboratoire
- QMC=Chem a participé au benchmarks pour Hyperion(CALMIP) : Tests jusqu'à 512 cœurs

2010 :

- Mise en service d'Hyperion :
 - Calculs de routine sur 512 cœurs
 - Optimisation des communications réseau pour un grand nombre de nœuds (32–64) : excellente scalabilité jusqu'à 512 cœurs
 - Mode interactif indispensable pour de développement
- Utilisation simultanée de 1000 cœurs sur EGEE
- Financement ANR pour soutenir le projet en 2011

Du laboratoire au méso-centre

2009 :

- calculs parallèles sur 32 cœurs au laboratoire
- QMC=Chem a participé au benchmarks pour Hyperion(CALMIP) : Tests jusqu'à 512 cœurs

2010 :

- Mise en service d'Hyperion :
 - Calculs de routine sur 512 cœurs
 - Optimisation des communications réseau pour un grand nombre de nœuds (32–64) : excellente scalabilité jusqu'à 512 cœurs
 - Mode interactif indispensable pour de développement
- Utilisation simultanée de 1000 cœurs sur EGEE
- Financement ANR pour soutenir le projet en 2011

Du laboratoire au méso-centre

2009 :

- calculs parallèles sur 32 cœurs au laboratoire
- QMC=Chem a participé au benchmarks pour Hyperion(CALMIP) : Tests jusqu'à 512 cœurs

2010 :

- Mise en service d'Hyperion :
 - Calculs de routine sur 512 cœurs
 - Optimisation des communications réseau pour un grand nombre de nœuds (32–64) : excellente scalabilité jusqu'à 512 cœurs
 - Mode interactif indispensable pour de développement
- Utilisation simultanée de 1000 cœurs sur EGEE
- Financement ANR pour soutenir le projet en 2011

Du méso-centre au centre européen

2011 :

- Les résultats de benchmarks obtenus sur Hyperion nous ont permis d'obtenir un "PRACE Preparatory access" sur Curie (TGCC/Genci)
- Benchmarks réalisés sur Curie jusqu'à 10 000 cœurs
- Notre design n'était pas adapté à la très grande échelle
- Retour sur Hyperion pour remodeler la gestion du parallélisme
- Présentation de nos résultats de scalabilité au labo *Exascale computing research* (Intel/Genci/CEA/UVSQ)

Du méso-centre au centre européen

2011 :

- Les résultats de benchmarks obtenus sur Hyperion nous ont permis d'obtenir un "PRACE Preparatory access" sur Curie (TGCC/Genci)
- Benchmarks réalisés sur Curie jusqu'à 10 000 cœurs
- Notre design n'était pas adapté à la très grand échelle
- Retour sur Hyperion pour remodeler la gestion du parallélisme
- Présentation de nos résultats de scalabilité au labo *Exascale computing research* (Intel/Genci/CEA/UVSQ)

Du méso-centre au centre européen

2011 :

- Les résultats de benchmarks obtenus sur Hyperion nous ont permis d'obtenir un "PRACE Preparatory access" sur Curie (TGCC/Genci)
- Benchmarks réalisés sur Curie jusqu'à 10 000 cœurs
- Notre design n'était pas adapté à la très grande échelle
- Retour sur Hyperion pour remodeler la gestion du parallélisme
- Présentation de nos résultats de scalabilité au labo *Exascale computing research* (Intel/Genci/CEA/UVSQ)

Du méso-centre au centre européen

2011 :

- Les résultats de benchmarks obtenus sur Hyperion nous ont permis d'obtenir un "PRACE Preparatory access" sur Curie (TGCC/Genci)
- Benchmarks réalisés sur Curie jusqu'à 10 000 cœurs
- Notre design n'était pas adapté à la très grande échelle
- Retour sur Hyperion pour remodeler la gestion du parallélisme
- Présentation de nos résultats de scalabilité au labo *Exascale computing research* (Intel/Genci/CEA/UVSQ)

Du méso-centre au centre européen

2011 :

- Les résultats de benchmarks obtenus sur Hyperion nous ont permis d'obtenir un "PRACE Preparatory access" sur Curie (TGCC/Genci)
- Benchmarks réalisés sur Curie jusqu'à 10 000 cœurs
- Notre design n'était pas adapté à la très grande échelle
- Retour sur Hyperion pour remodeler la gestion du parallélisme
- Présentation de nos résultats de scalabilité au labo *Exascale computing research* (Intel/Genci/CEA/UVSQ)

Du méso-centre au centre européen

2011 :

- Proposition de participer à un “Grand Challenge” avant la mise en service de Grand Curie
- Collaboration avec W. Jalby et E. Oseret (ECR) sur l’optimisation mono-cœur du programme pour le Xeon E5
- Présentation des résultats à SC11
- Mise en place d’une simulation “Alzheimer” avec l’aide de Intel, CEA, Bull, Genci
- Réalisation du calcul sur 76 800 cœurs lors de l’installation de Curie (2×12 heures)

Du méso-centre au centre européen

2011 :

- Proposition de participer à un “Grand Challenge” avant la mise en service de Grand Curie
- Collaboration avec W. Jalby et E. Oseret (ECR) sur l’optimisation mono-cœur du programme pour le Xeon E5
- Présentation des résultats à SC11
- Mise en place d’une simulation “Alzheimer” avec l’aide de Intel, CEA, Bull, Genci
- Réalisation du calcul sur 76 800 cœurs lors de l’installation de Curie (2× 12 heures)

Du méso-centre au centre européen

2011 :

- Proposition de participer à un “Grand Challenge” avant la mise en service de Grand Curie
- Collaboration avec W. Jalby et E. Oseret (ECR) sur l’optimisation mono-cœur du programme pour le Xeon E5
- Présentation des résultats à SC11
- Mise en place d’une simulation “Alzheimer” avec l’aide de Intel, CEA, Bull, Genci
- Réalisation du calcul sur 76 800 cœurs lors de l’installation de Curie (2× 12 heures)

Du méso-centre au centre européen

2011 :

- Proposition de participer à un “Grand Challenge” avant la mise en service de Grand Curie
- Collaboration avec W. Jalby et E. Oseret (ECR) sur l’optimisation mono-cœur du programme pour le Xeon E5
- Présentation des résultats à SC11
- Mise en place d’une simulation “Alzheimer” avec l’aide de Intel, CEA, Bull, Genci
- Réalisation du calcul sur 76 800 cœurs lors de l’installation de Curie (2× 12 heures)

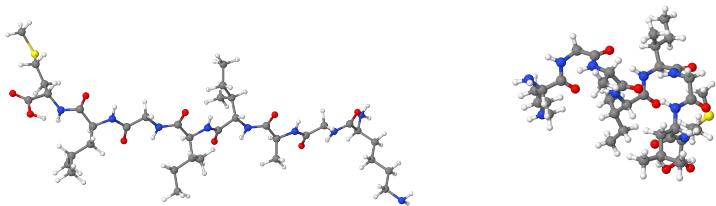
Du méso-centre au centre européen

2011 :

- Proposition de participer à un “Grand Challenge” avant la mise en service de Grand Curie
- Collaboration avec W. Jalby et E. Oseret (ECR) sur l’optimisation mono-cœur du programme pour le Xeon E5
- Présentation des résultats à SC11
- Mise en place d’une simulation “Alzheimer” avec l’aide de Intel, CEA, Bull, Genci
- Réalisation du calcul sur 76 800 cœurs lors de l’installation de Curie (2× 12 heures)

Peptide Amyloïde- β sur Curie (GENCI/TGCC/CEA)

Première étape de notre projet scientifique pour Alzheimer : Différence d'énergie entre feuillet- β et hélice- α .
 $A\beta(28-35)$: une EDP de dimension 1302 à résoudre, le plus gros calcul QMC tous-électrons jamais réalisé



⇒ **960 TFlops/s soutenus sur 76 800 cœurs de Curie**
>30% de la performance crête (mixed SP/DP)

Du méso-centre au centre européen

2012 :

- Présentation des résultats à ISC sur le stand Intel :
- Obtention d'un projet PRACE (Alzheimer), travail en cours...

Du méso-centre au centre européen

2012 :

- Présentation des résultats à ISC sur le stand Intel :
- Obtention d'un projet PRACE (Alzheimer), travail en cours...

Remerciements

- CALMIP
- Exascale Computing Research Lab.
- GENCI
- CEA
- Intel
- Bull
- ANR