

# Développer pour Calculer (T7)

---

**Résumé :** riche en tours d'horizon, en ateliers pratiques et en groupes de discussion, la thématique “Développer pour Calculer” vous propose d'explorer la diversité des langages, des bibliothèques, des outils et des infrastructures au service du calcul. Nous nous efforcerons de mettre en lumière les différences et les complémentarités des différentes technologies. Les questions liées à la précision numérique, à l'analyse et à l'optimisation des performances tiendront une place de choix. Cette thématique sera un lieu d'échange où les retours d'expérience viendront enrichir les débats. Elle est organisée avec le soutien du Groupe Calcul. Avec une session plénière, 7 ateliers et 3 groupes de travail, l'objectif est de couvrir un large spectre de pratiques, de techniques, de savoir-faire propres au développement pour le Calcul. C'est aussi l'occasion de tisser des liens, de créer des communautés, bénéfiques à chacun d'entre nous.

**Public :** les différents ateliers, groupes de travail et la session plénière sont destinés à un large public désireux d'enrichir ses connaissances dans le domaine du développement pour le Calcul. Des connaissances classiques en programmation seront, la plupart du temps, suffisantes même si, pour certaines ateliers des prérequis seront nécessaires pour en profiter pleinement (dans ce cas, ces prérequis sont clairement indiqués).

## Présentations

*Vendredi 9h00-12h30, Amphi Becquerel*

---

### T7.P0 Introduction

#### T7.P1 Les offres de Calcul de France : de son PC aux centres nationaux en passant par les mésocentres

Nous avons tous accès à une large étendue de ressources de calcul : nous développons sur nos PC et faisons passer des grosses simulations sur les centres de calcul régionaux, les noeuds de grille, les centres nationaux ou européens. Cet exposé vous présentera les acteurs du calcul et la structuration qui s'est progressivement mise en place. Vous connaîtrez les procédures d'accès et découvrirez l'accompagnement dont vous pourrez bénéficier, aussi bien pour le portage que pour l'optimisation de vos codes.

#### T7.P2 Visualisation scientifique : concepts, outils, bibliothèques

Il existe aujourd'hui énormément d'outils et de bibliothèque qui peuvent vous aider dans le domaine de la visualisation scientifique. Que ce soit pour faire une figure pour un article ou pour surveiller à l'écran une expérience en temps réel, il y a généralement des outils adaptés qui peuvent vous faire gagner un temps précieux. Cependant, même en utilisant ces outils, vous resterez responsable de la qualité de votre visualisation et comme nous le verrons, le chemin entre une bonne et une mauvaise visualisation peut être très court.

#### T7.P3 Que calcule vraiment un ordinateur ? Arithmétique flottante et précision

Les grandeurs réelles sont le plus souvent manipulés dans l'ordinateur sous la forme de nombres en virgule flottante. Mais les flottants ne sont qu'une approximation des réels: les identifier aveuglément aux réels vous expose à des bugs qui peuvent aller bien au-delà de la petite imprécision numérique. A contrario, les flottants ne sont pas responsables de tous les problèmes numériques: il y a bien d'autres sources d'approximation dans les programmes. Dans cet exposé, on survolera ces différentes questions, et on apprendra en particulier à utiliser les flottants pour ce qu'ils sont.

#### T7.P4 Le Calcul à l'INRA : Organisation, besoins, spécificités

L'objectif sera de décrire par des exemples concrets et représentatifs les principaux enjeux “computationnels” de questions scientifiques traitées à l'Inra essentiellement dans les domaines de la bioInformatique et la modélisation des eco-agro-systèmes afin de permettre à un ingénieur informaticien hors institut de comprendre les missions de leurs homologues Inra et de percevoir les orientations stratégiques dans le domaine de l'informatique et du calcul.

## Ateliers

---

### T7.A1 Calcul parallèle hybride avec OpenMP, MPI et OpenCL

*Jeudi 9h00-12h30*

*Pré-requis :* la connaissance de généralités concernant MPI et OpenMP est souhaitée pour suivre l'atelier.

Processeurs, coeurs, co-processeurs : autant de ressources de calcul disponibles pour les simulations numériques d'aujourd'hui. Leur maîtrise est rendue possible avec la méthodologie hybride. À travers les paradigmes de programmation MPI, OpenMP, et OpenCL utilisés conjointement, nous illustrerons ce mode de programmation en l'appliquant à la composante hydrodynamique d'un code de référence en astrophysique.

### **T7.A2-3 Python**

*Jeudi 9h00-12h30*

Cet atelier donnera une première impression du langage Python et de l'écosystème de calcul scientifique qui s'est développé autour de ce langage aux développeurs qui sont plus familiers avec les langages compilés du monde scientifique (C/C++/Fortran). Les participants apprendront comment écrire des simples scripts Python, comment utiliser le module NumPy qui ouvre la porte aux applications numériques, et comment interfacer les bibliothèques en C ou Fortran. En fonction du temps disponible, cet atelier pourra aussi être l'occasion de montrer l'élaboration d'un projet couvrant l'ensemble de ces aspects sur un problème jouet.

### **T7.A4 Précision et arithmétique flottante : outils, bibliothèques**

*Mercredi 14h00-17h30*

Les calculs sur ordinateurs étant réalisés avec une précision finie, les résultats numériques doivent toujours être considérés comme des approximations des "vraies" valeurs. Cet atelier sera l'occasion de montrer, d'utiliser des outils pour

- donner une mesure de la précision numérique (ou une estimation, un intervalle, ...)
- améliorer cette précision

### **T7.A5 Analyse, mesure et optimisation de la performance**

*Jeudi 14h00-17h30*

L'objectif de cet atelier est d'aborder de manière pratique les questions liées à l'analyse, la mesure et à l'optimisation des performances d'un programme séquentiel.

- Quand et pourquoi analyser ?
- Outils de mesure
- Optimisation : quelques règles et outils

### **T7.A6 OpenMOLE : faites tourner votre code indifféremment sur votre ordinateur, un cluster, une grille**

*Jeudi 14h00-17h30*

OpenMOLE permet d'intégrer des applications basées sur des technologies différentes: par exemple, Java, Scala, C, C + +, Fortran, Scilab, Octave, netlogo. Une fois intégré dans la plate-forme, OpenMOLE distribue automatiquement différents exécutables de l'application sur un environnement distribué spécifié par l'utilisateur.

### **T7.A7 Introduction à Scilab**

*Mercredi 14h00-17h30*

Cet atelier présentera Scilab et son environnement de travail ergonomique dédié au calcul numérique. Après une présentation globale des fonctionnalités et capacités de Scilab, l'atelier sera consacré à des exemples pratiques d'utilisation pour aider à la prise en main du logiciel.

## **Groupes de travail**

---

### **T7.GT1 Bibliothèques pour le calcul scientifique (retours d'expérience)**

*Jeudi 9h00-10h30*

Quelles bibliothèques (algèbre linéaire, spécifique métier...) ?

- Pour quelles architectures ( many-core, accélérateurs de calcul... ) ?
- Quels sont les éléments "moteurs" du projet et ses cibles ;
- Quelles sont les évolutions en cours ou prévues ;
- Comment inscrire ce type de projet dans la durée ;
- Y a-t-il une spécificité liée à ce travail de développement logiciel, et une reconnaissance en tant que tel (des pairs, des organismes concernés, . . . ) ?

### **T7.GT2 Processeur Xeon-Phi : 1ers retours d'expérience**

*Jeudi 11h00-12h30*

Ce groupe de travail sera l'occasion de présenter les premiers retours d'expériences de portages ou optimisations sur le nouveau coprocesseur d'Intel : le xeon PHI. Plusieurs retours d'expériences sont prévus en provenance de l'observatoire Midi-Pyrénées, des fournisseurs potentiels DELL et BULL.

### **T7.GT3 L'environnement scientifique R : intérêts, retours d'expérience, évolutions**

*Jeudi 14h00-15h30*

- Présentation générale de R : des structures de données pour les statistiques
- Retours d'expérience : R apporte avec lui toute la force du logiciel libre... mais également quelques-unes de ses faiblesses !
- R++, The Next Step : un projet open source visant à asseoir les forces de R sur les épaules d'un langage objet.