

Beste de savoir

[Signet] HPC - La Gray Scott School

mercredi 24 avril 2024

Table des matières

Introduction	1
Conclusion	2

Introduction

Vous n'êtes peut-être pas sans savoir que je réalise régulièrement des calculs (de chimie quantique) sur plusieurs dizaines de CPUs. Cette prouesse ne serait pas possible sans d'important développements dans le domaines et l'utilisation de bibliothèques adaptées. Et justement, si le domaine du calcul intensif vous intéresse, Le LAPP d'Annecy et [EuroCC FR](#) (le centre de compétence français sur le calcul intensif) organisent une école d'été, la *Gray Scott School*, du 1 au 12 juillet 2024. Vous pouvez retrouver toutes les infos sur la page dédiée, <https://indico.in2p3.fr/event/30939/overview> .

La réaction de Gray Scott est un [modèle de réaction-diffusion](#) qui cherche à décrire comment une réaction chimique évolue dans le temps, en modélisant le fait que les composés : 1) réagissent et 2) se dispersent dans l'espace. Bien qu'assez simple conceptuellement, le problème est difficile à implémenter correctement si on veut correctement tirer parti des ressources calculatoires. C'est surtout un prétexte pour passer en revue différentes techniques pour optimiser un code et le préparer à tourner sur un supercalculateur.

Mais si je vous en parle, ce n'est pas tant pour cette école d'été (quoique si le sujet vous intéresse et que c'est possible pour vous, n'hésitez surtout pas à vous inscrire), mais parce que la plupart des sujets qui seront abordés ont déjà fait l'objet d'une série de *webinaires*, nommé les *jeudis Gray Scott* et disponible (gratuitement) à cette adresse : <https://indico.in2p3.fr/event/30939/page/3642-les-jeudis-gray-scott> . Ces webinaires abordent des thèmes assez variés qui vont de [l'architecture GPU](#) au [bibliothèques de calculs optimisées en C++](#) en passant par [Fortran](#) ou encore [Rust](#) .

Bref, si le sujet vous intéresse, voilà qui vous fera quelques heures de vidéo à déguster. Personnellement, je vous recommande cette vidéo qui discute d'allocation mémoire, c'est très intéressant et un peu plus compliqué qu'il n'y paraît :

ÉLÉMENT EXTERNE (VIDEO) —

Consultez cet élément à l'adresse <https://www.youtube.com/embed/zBmiVSCd1t4?feature=oembed>.

Conclusion

Bref un petit billet rapide pour pointer une ressource accessible, facilement pour ceux que ça intéresse.

Notez encore que cette école d'été n'aura pas lieu qu'à Annecy, puisque [plusieurs sites satellites](#) sont prévus un peu partout en France, mais également au Maroc et en Belgique. Pour les Belges qui passeraient par là, c'est également possible grâce à mes copains d'EuroCC Belgium, voir <https://www.enccb.be/GrayScott2024fr>.

PS : La mignature est issue de [cette simulation](#) de la réaction de Gray Scott.

PPS : ce billet n'est pas sponsorisé (je ne travaille plus pour EuroCC), je suis juste très enthousiaste 🍌!