

Proposition de Post-Doctorat

Environnement interactif de simulation et de visualisation de structures nanoscopiques – applications en physique des matériaux

CEA/DIF - Département des Sciences de la Simulation et de l'Information
Bruyères-le-Châtel

Contexte et objectif

L'objectif est le développement d'outils logiciels pour la simulation interactive haute performance couplant réalité virtuelle, visualisation scientifique et simulation parallèle. L'application principale au cœur du projet est la manipulation et l'exploration de simulations d'objets biologiques ou physiques complexes à l'échelle nanoscopique sur une plateforme de réalité virtuelle. Ce travail s'inscrit dans le cadre du projet FVNANO (ANR Programme Calcul Intensif 2007). FVNANO associe le Laboratoire de Biochimie Théorique du CNRS, le LIFO, l'INRIA (projet MOAIS) et le CEA/DIF. Les développements s'adossent essentiellement au middleware (intergiciel) FlowVR développé par le LIFO et MOAIS, lequel permet la distribution d'applications interactives sur grappes de PC par le couplage de modules de calcul, de visualisation et d'interaction.

Le CEA s'intéresse plus particulièrement aux applications en physique des matériaux - le CNRS se concentre pour sa part sur les applications en biochimie. La physique des matériaux utilise des méthodes à différentes échelles de modélisation. A l'échelle la plus fine, les calculs ab initio manipulent des nombres d'atomes modestes (centaines ou milliers). A l'échelle supérieure, les calculs par dynamique moléculaire peuvent manipuler des atomes par millions, voire par dizaines ou centaines de millions. D'autres échelles manipulent enfin des entités méso/macrosopiques plus éloignées des atomes – dislocations, grains – et ne sont pas concernées par ce projet.

Axes de recherche et de travail

L'étude se situe à un stade intermédiaire et/ou final du projet FVNANO et bénéficiera des développements déjà entrepris par les autres partenaires, de niveau technique (FlowVR et extensions) ou applicatif. On se concentrera donc sur les axes suivants de réflexion et de développement de composants et démonstrateurs :

- ⇒ Spécifications, identification des verrous sur un ou des scénarios 'physique des matériaux (ab initio et/ou dynamique moléculaire) ; en particulier on confirmera les tailles de problèmes à traiter, le besoin ou non de prendre en compte des liaisons chimiques – ce qui nous distinguera des applications en biochimie – et des géométries de calcul « maillées »
- ⇒ Algorithmes d'optimisation d'affichage et d'interaction adaptés à ces scénarios, mise en modules FlowVR ; on pourra utiliser des techniques de niveaux de détail, d'accélération matérielle etc. (le CEA a déjà effectué quelques études dans ces domaines)
- ⇒ Mise en place de démonstrateurs sur la configuration « mur d'images stéréo » du CEA et/ou une configuration « de bureau » à base de station plus conventionnelle
- ⇒ Il se peut que les codes du CEA ne se prêtent pas au couplage en-ligne calcul/visualisation sur les tailles de problèmes des scénarios applicatifs, mais on pourra le cas échéant expérimenter les modules développés sur des scénarios plus interactifs en biochimie

Environnement – moyens - collaborations

Le CEA/DIF héberge et assure le fonctionnement du Complexe de Calcul du CEA, un des plus grands d'Europe – calculateurs TERA 10 de plus de 60 Tflops et du CCRT de 50 Tflops.

En relation avec le pôle TERATEC, le CEA/DIF possède aussi des moyens dédiés à l'expérimentation et à la recherche : cluster graphique, mur d'images, périphériques de réalité virtuelle. Ces moyens bénéficient de la proximité des composantes du centre de calcul de production tout en étant dégagés des contraintes opérationnelles fortes de ces dernières.

Le financement du post-doctorat est assuré par le CEA, pour une durée initiale de 12 mois.

Les partenaires naturels de ce projet de recherche sont les acteurs de FVNANO : le CNRS/LBT pour les visions croisées sur les applications, le LIFO et l'INRIA/MOAIS sur les composants informatiques.

Contact

Jean-Philippe Nominé
CEA/DIF/DSSI/EC
01 69 26 55 66
jean-philippe.nomine@cea.fr