

Offre de post-doctorat : Couche logicielle pour le portage du cœur numérique d'une application volumes finis implicite sur accélérateurs

Contexte

L'évolution continue des moyens de calcul impose aux logiciels de simulation une constante adaptabilité. Aujourd'hui les accélérateurs GPGPU s'imposent dans les grands centres de calcul étant donné leur très bon rapport puissance/consommation électrique. La puissance du futur supercalculateur européen *Alice Recoque*, reposera par exemple essentiellement sur ce type d'accélérateurs. Il est clair aujourd'hui que les logiciels de simulation exploiteront efficacement ce type d'architecture, ou ne seront pas. Par ailleurs, à la différence des processeurs classiques, un changement de fabricant implique aujourd'hui pour le développeur un changement de modèle de programmation pour le code accélérateur (Cuda, HIP/Rocm...). Il est donc nécessaire d'introduire dans les codes de simulation une couche logicielle unique permettant ensuite de déployer sur différents types d'accélérateurs. Plusieurs abstractions logicielles de ce type sont actuellement disponibles comme les implémentations d'OpenMP-target (GNU, LLVM, etc.), de l'API SYCL : DPC++ (Intel) ou AdaptiveCpp (université d'Heidelberg), ainsi que d'autres bibliothèques similaires : Kokkos (Linux Foundation, ANL, CEA, CSCS, LANL & SNL) ou RAJA (LNL) par exemple. La bibliothèque Kokkos est notamment au cœur du projet CExA qui vise à l'adapter aux besoins des matériels et des applications européens.

C'est dans ce contexte qu'a vu le jour le programme français dédié à l'Exascale, NumPEX. Ce dernier vise à concevoir et à développer les composants logiciels qui équiperont les futures machines Exascale. C'est au sein de son projet ciblé Exa-Soft [2], dédié à l'adaptation de la pile logicielle aux architectures Exascale, que s'inscrit ce travail de post-doctorat, avec un cofinancement NumPEX/IFPEN.

A IFPEN, nous avons fait le choix depuis 2007 de développer les logiciels industriels pour la simulation du sous-sol sur la plateforme Arcane [3], codéveloppée par IFPEN et le CEA. Cette plateforme en Open Source depuis 2021, propose depuis peu une API pour abstraire le déploiement sur accélérateur. Cette API permet d'interfacer les langages CUDA et HIP. Une implémentation SYCL est également utilisable.

Quelle que soit l'API accélérateur utilisée, le portage sur GPU d'un logiciel industriel de simulation reste une tâche complexe et très coûteuse en temps de développement. Cette action de portage est facilitée si l'architecture de l'application gère de manière automatique les boucles itératives des algorithmes de calcul.

Dans les codes géosciences d'IFPEN, le cœur numérique des applications, c'est-à-dire l'assemblage de la matrice Jacobienne résultant de la discrétisation volumes finis ou éléments finis implicite, est facilité par des outils de la bibliothèque ArcGeoSimTM : Law Framework, Audi et Gump [4]. L'outil Law Framework permet aux utilisateurs de définir des lois physiques complexes sans avoir à gérer l'évaluation de celles-ci sur les supports (maillage, tableaux...). C'est ce composant qui va nous intéresser lors de ce travail de post-doctorat.

Objectifs du post-doctorat

Une première phase du post-doctorat consistera à travailler sur le portage GPU du composant Law Framework et d'une collection de lois représentatives des patterns rencontrés. Le premier objectif sera de réaliser le portage en utilisant l'API fournie par Arcane et d'obtenir de premiers résultats sur accélérateurs Nvidia et AMD. Dans un deuxième temps, le post-doctorant sera

amené à concevoir l'intégration dans ce composant de la bibliothèque Kokkos. Cette intégration nécessitera de revoir l'architecture logicielle pour ajouter et utiliser efficacement les structures de données Kokkos. Ces deux solutions devront ensuite être analysées et comparées dans le contexte d'une application complète utilisant Law Framework. Une étude d'un équilibrage de charge dynamique des différentes lois entre CPU et GPU en cours de simulation sera réalisée. Une deuxième phase du post-doctorat, plus prospective, devra étudier la possibilité de monter d'un niveau dans l'abstraction des lois, et d'offrir une API simplifiée à l'utilisateur, en Python, et directement portable sur GPU. Dans cette phase, il sera également possible de voir comment aller plus loin dans le portage du cœur numérique de l'application sur GPU, en étudiant l'algorithme d'assemblage complet.

Programme de travail

- Prise en main de l'environnement de travail Arcane/ArcGeoSim
- Mise en place d'un cas test de simulation pour le portage (avec des lois de complexité croissante)
- Portage sur GPU via l'API Arcane
- Mise en place d'une solution Kokkos pour le cas de simulation traité
- Portage sur GPU via l'API Kokkos
- Analyse et comparaisons des différents portages, choix et optimisation d'une solution optimale
- Etude d'une abstraction de haut niveau pour l'écriture des lois et leur portage GPU (API Python + génération de code C++)
- Extension de l'API GPU au-delà des lois pour l'assemblage

Formation

- Doctorat en informatique scientifique, calcul haute performance (HPC), mathématiques appliquées, physique numérique, ou domaine connexe.
- Une spécialisation en calcul parallèle, simulation numérique ou architectures accélérées (GPU, many-core) sera particulièrement appréciée.

Compétences techniques

- Très bonnes compétences en programmation scientifique, en particulier en C++ moderne et/ou Python.
- Expérience en calcul parallèle, incluant un ou plusieurs des modèles suivants :
 - o MPI, OpenMP, CUDA, HIP, SYCL, ou Kokkos, ou des bibliothèques scientifiques accélérées (e.g. Kokkos, RAJA, Thrust, CuPy, JAX).
- Connaissance des architectures HPC modernes, notamment :
 - o Systèmes GPU (NVIDIA, AMD),
 - o Architectures many-core et hiérarchies mémoire complexes,
- Optimisation de performance et portabilité.
- Compréhension des méthodes numériques pour les EDP (volumes finis, éléments finis, solveurs implicites) et de leur implémentation efficace sur architectures parallèles.

Qualités personnelles

- Forte capacité d'analyse et de résolution de problèmes complexes.
- Autonomie et rigueur scientifique.

- Capacité à travailler dans un environnement collaboratif multidisciplinaire.
- Bon niveau de communication en anglais (oral et écrit).

Durée

Contrat de post-doctorat de 24 mois.

Moyens mis à disposition

Le post-doctorant aura accès à :

- Des plateformes HPC de premier plan incluant des systèmes GPU modernes,
- Les infrastructures de calcul du CEA et d'IFPEN,
- L'écosystème logiciel Arcane, ArcGeoSim et Kokkos,
- Les ressources du programme national NumPEX et des collaborations associées.

Encadrement

Le post-doctorant sera encadré conjointement par des chercheurs et ingénieurs du CEA et de l'IFPEN, experts en :

- HPC et architectures exascale,
- Développement logiciel scientifique,
- Portage et optimisation sur GPU,
- Simulation numérique industrielle.

Il interagira également avec les équipes du projet NumPEX Exa-Soft et avec des partenaires académiques et industriels.

Localisation

Le poste est basé en région parisienne, sur les sites du CEA et de l'IFPEN, avec des interactions régulières entre les deux institutions.

Pourquoi nous rejoindre ?

- Contribuer directement au développement de la prochaine génération de logiciels HPC pour les architectures exascale européennes.
- Participer au programme national stratégique NumPEX et à l'adaptation des applications scientifiques aux futurs supercalculateurs européens tels qu'Alice Recoque.
- Travailler à l'interface entre recherche académique et applications industrielles à fort impact.
- Accéder à des infrastructures HPC de classe mondiale et à un écosystème logiciel avancé.
- Évoluer dans un environnement scientifique international avec de nombreuses collaborations européennes et internationales.

Salaire et avantages

Le CEA propose une rémunération compétitive, basée sur le diplôme et l'expérience.

Le poste offre également de nombreux avantages :

- Participation à des collaborations internationales (Europe, États-Unis, Japon),

- Opportunités de participation à des conférences et workshops internationaux,
- Possibilité de télétravail jusqu'à 3 jours par semaine,
- Remboursement jusqu'à 75 % des frais de transport,
- Couverture santé complémentaire avantageuse,
- Dispositifs d'épargne salariale,
- 5 semaines de congés payés et environ 20 jours de RTT par an.

Candidature

Les candidats/ates intéressés/ées sont invités/ées à envoyer :

- Un CV détaillé,
- Une lettre de motivation,
- Et deux lettres de recommandation,

à : stephane.de-chaisemartin@ifpen.fr, julien.bigot@cea.fr, yuuichi.asahi@cea.fr

et pascal.tremblin@cea.fr

Références

[1] PEPR NumPEX, <https://numpex.org>

[2] Projet Ciblé Exa-Soft, logiciels et outils HPC, <https://numpex.org/fr/exa-soft-logiciels-et-outils-hpc/>

[3] The Arcane Development Framework, Proceedings of the 8th Workshop on Parallel/High-Performance Object-Oriented Scientific Computing, 2009

[4] [ArcNum: an Arcane-based numerical framework used in porous media flow simulation applications](#), Comptes-Rendus Mécanique de l'Académie des Sciences, 2026