

Un supercalculateur GPU pour l'Université d'Oxford

Astrophysique, bioinformatique, chimie, ingénierie, génomique, sciences de la vie, nanotechnologies, physique... autant de domaines scientifiques sur lesquels les chercheurs britanniques vont bénéficier du nouveau système de calcul haute performance (HPC) Emerald du laboratoire de STFC Rutherford Appleton de l'université d'Oxford.

Particularité de ce supercalculateur, il est accéléré par 372 [GPU Tesla M2090 de Nvidia](#), sous l'environnement de programmation parallèle CUDA du même Nvidia. De quoi rappeler que le fabricant de puces graphiques propose pour les domaines de calcul de très hautes performances parallélisé une solution originale fondée non plus sur des processeurs informatiques classiques mais sur des GPU (*Graphics Processing Unit*), des processeurs graphiques.

Emerald fait partie de l'**e-infrastructure South Consortium** créée sur incitation financière (145 millions de livres sterling d'investissement) du gouvernement britannique. Le consortium regroupe les universités d'Oxford, de Bristol, de Southampton, et l'University College de Londres. Centre pour l'innovation en calcul hautes performances, Emerald leur fournira l'infrastructure pour le développement d'applications scientifiques et techniques, ainsi que la formation de scientifiques et d'ingénieurs en HPC.

L'architecture multi-parallèle du GPU

Pourquoi des GPU dans un super calculateur ? La création et l'affichage du graphisme nécessite de multiplier des calculs simples pour gérer les millions de points qui composent une image. Les processeurs graphiques sont donc largement plus parallélisés que les processeurs informatiques CPU (*Central Processing Unit*), certes plus puissants mais dont les capacités de traitement sont limitées au nombre de coeurs multiplié par le nombre de *threads*. Il va de soi cependant qu'un GPU n'a pas la capacité de faire ce qui fait la force d'un CPU (rapidité, fonctionnalités multiples intégrées dans le silicium, mémoire cache, etc.), mais tant que l'attendu se résume à du calcul parallélisé...

CUDA : plateforme de programmation de calcul parallèle

Nvidia propose également la plateforme programmatique de calcul parallèle appelée CUDA qui permet l'expression de données denses et complexes dans un contexte de parallélisme. Cet outil destiné aux programmeurs leur donne la possibilité de choisir d'exprimer le parallélisme avec des langages à hautes performances comme C, C++, Fortran, ou avec des standards ouverts comme les directives OpenACC.

Nvidia a profité du lancement d'Emerald pour élever l'Université d'Oxford, qui regroupe 18 institutions d'élite, au rang de Centre d'excellence CUDA (CCOE) en reconnaissance des travaux

ayant recours au GPU et à l'environnement de programmation parallèle.

Trois domaines cibles profiteront plus particulièrement des apports matériels et financiers de Nvidia :

- l'**astrophysique** pour l'application de détection de pulsars en temps réel pour le prochain projet Square Kilometre Array en vue de déployer le radio télescope le plus puissant du monde ;
- la **bioinformatique** pour l'analyse et la modélisation statistique des données de séquençage du génome entier ;
- la **chimie** pour les simulations de dynamique moléculaire des principaux mécanismes de nanotechnologie de l'ADN.