

# Calcul haute performance et simulation: Enjeux et applications dans différents domaines scientifiques

Michel Kern

Maison de la Simulation – Inria

Journées COFREND 2014

20–22 mai

Bordeaux

- 1 Les enjeux
- 2 Applications
- 3 Principaux acteurs
- 4 Conclusions



- 1 Les enjeux
- 2 Applications
- 3 Principaux acteurs
- 4 Conclusions

# Les grands enjeux du HPC

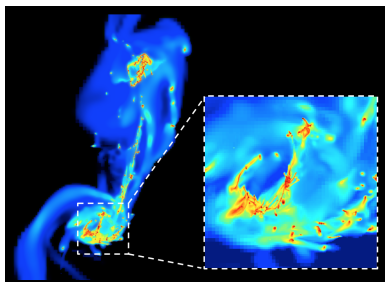
La simulation est devenue le troisième pilier de la science

La simulation permet de créer un laboratoire virtuel quand l'expérience réelle est trop chère, trop longue, dangereuse, ou **impossible**

La simulation est un élément essentiel de la compétitivité industrielle

Computational science has become the third pillar of the scientific enterprise, a peer alongside theory and physical experiment.

Rapport PITAC 2005

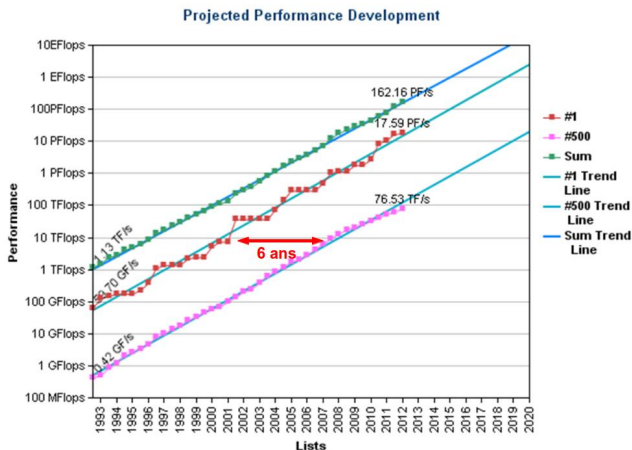


Collision de deux galaxies  
(*Renaud F., Bournaud F. & Duc P.-A*, IRFU, CEA).

Calcul sur 4096 procs sur SuperMUC (Prace, Garching), équivalent de 8 000 000 heures CPU.

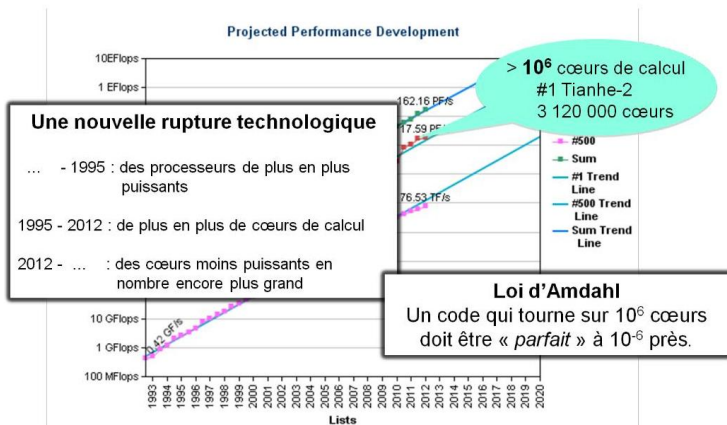


# Contexte matériel, loi de Moore



Doublement de la puissance tous les 18 mois, mais pour différentes raisons

# Contexte matériel, loi de Moore

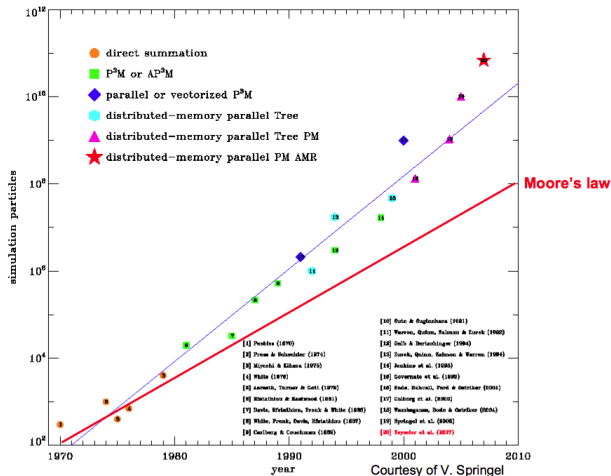


Doublement de la puissance tous les 18 mois, mais pour différentes raisons

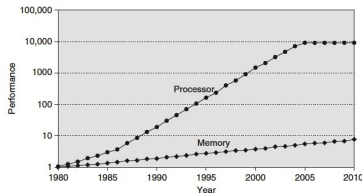
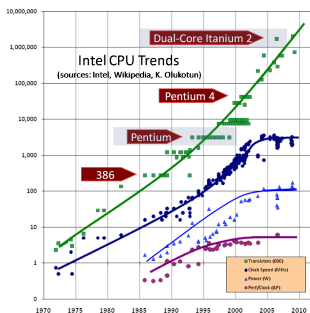
# Progrès matériels, progrès logiciels

Les progrès **algorithmique** contribuent très significativement à l'accroissement de performance des applications.

## Problème à N-corps en cosmologie



Tous les composants ne progressent pas à la même vitesse :



## Mémoire et CPU

Le facteur limitant devient la consommation électrique

Intel Pentium 100 MHz : 10 W

Intel Core i7, 3.2 GHz : 130 W

Le nombre de transistors continue à augmenter, la fréquence stagne, pour limiter la consommation électrique



# Ordinateurs d'hier, d'aujourd'hui, de demain (1)

## Hier



Cray Y-MP, 16 processeurs (Nasa),  
1990, 10 GFlops / s  
Processeurs vectoriels puissants,  
parallélisme limité (vu dans Les  
Experts)



Connection Machine CM-5, 1991, 130  
GFlops / s  
Grand nombre de « petits »  
processeurs (vu dans Jurassic Park)

## Aujourd'hui



Machines généraliste, 5 000 noeuds, 100 000 coeurs, possibilité d'accélérateurs, 1 à 10 PFlops / s



IBM Blue Gene, 1 000 000 coeurs, 20 PFlops / s

# Ordinateurs d'hier, d'aujourd'hui, de demain (2)

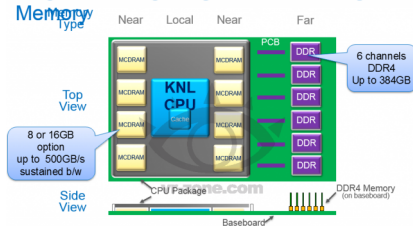
Demain ?

Système avec plusieurs millions de coeurs, peu puissants, consommation limitée.

Architecture fortement hiérarchique, Présence massive d'accélérateurs

Programmation ?

## Knights Landing Integrated On-Package Memory



**Integrated on-package MCDRAM brings memory nearer to CPU for higher memory bandwidth and better performance**

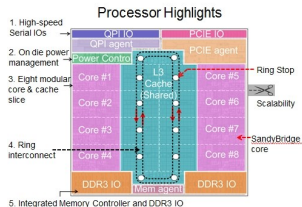
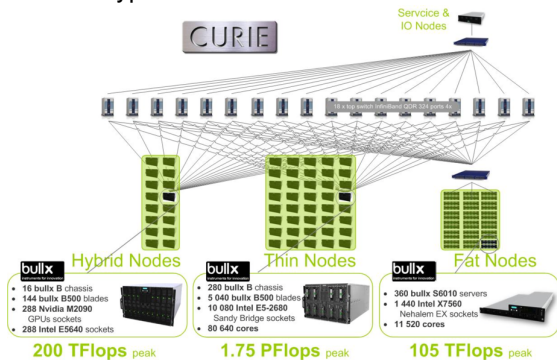
Diagram is for conceptual purposes only and only illustrates the general architecture. It is not to scale and does not include all functional areas of the CPU. © 2015 Intel Corporation

## Le futur processeur Intel Knights Landing



# Un exemple d'architecture actuelle

## Curie : 3 type de noeuds



Hiérarchie d'unités de calcul, réseau spécialisée, présence de plus en plus fréquente d'accélérateurs.

# Cartes graphiques et accélérateurs

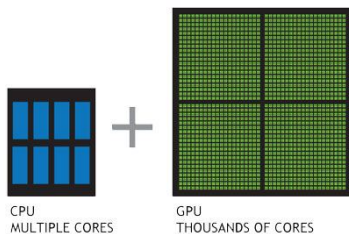
Utilisation des cartes graphiques (GP-GPU, ou GPU) pour accélérer les calculs.

Performance maximale élevée,  
consommation limitée : Tesla K20 : 1,2

Tflops, 2500 cœurs, 225 Watts

Les GPU incluent des milliers de cœurs pour traiter efficacement des tâches parallèles.

Programmation délicate (gestion des échanges avec le CPU)



# Cartes graphiques et accélérateurs

Utilisation des cartes graphiques (GP-GPU, ou GPU) pour accélérer les calculs.

Performance maximale élevée,  
consommation limitée : Tesla K20 : 1,2

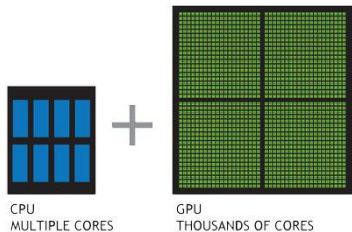
Tflops, 2500 cœurs, 225 Watts

Les GPU incluent des milliers de cœurs pour traiter efficacement des tâches parallèles.

Programmation délicate (gestion des échanges avec le CPU)

Réponse Intel : MIC (Many Integrated Core), Xeon Phi.

60 cœurs (1,1 Ghz) vectoriels, 1 Tflops, compatible x86



# Cartes graphiques et accélérateurs

Utilisation des cartes graphiques (GP-GPU, ou GPU) pour accélérer les calculs.

Performance maximale élevée,  
consommation limitée : Tesla K20 : 1,2

Tflops, 2500 cœurs, 225 Watts

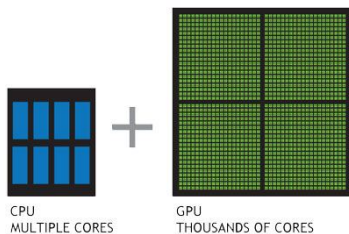
Les GPU incluent des milliers de cœurs pour traiter efficacement des tâches parallèles.

Programmation délicate (gestion des échanges avec le CPU)

Réponse Intel : MIC (Many Integrated Core), Xeon Phi.

60 cœurs (1,1 Ghz) vectoriels, 1 Tflops, compatible x86

Une constante des futures architectures : **l'hétérogénéité**

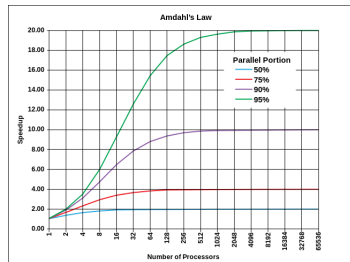


# La loi d'Amdahl ou « pourquoi le parallélisme est difficile »

Calcul avec une partie  $P$  qui peut être calculée en parallèle.

$$S(N) = \text{Speedup} = \frac{\text{temps sur 1 proc.}}{\text{Temps sur N procs}} = \frac{1}{(1 - P) + \frac{P}{N}},$$

Limité par  $1/(1 - P)$  quel que soit  $N$



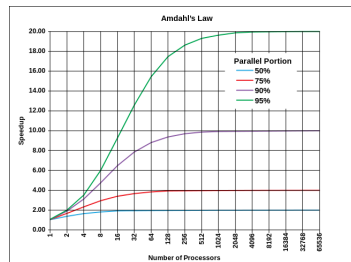


# La loi d'Amdahl ou « pourquoi le parallélisme est difficile »

Calcul avec une partie  $P$  qui peut être calculée en parallèle.

$$S(N) = \text{Speedup} = \frac{\text{temps sur 1 proc.}}{\text{Temps sur N procs}} = \frac{1}{(1 - P) + \frac{P}{N}}$$

Limité par  $1/(1 - P)$  quel que soit  $N$



Modifié par Gustafson : quand la taille du problème **augmente**, la partie séquentielle devient **proportionnellement** moins importante.

Amdahl : Scalabilité forte, Gustafson : scalabilité faible

Processeurs moins puissants, moins de mémoire / coeur rends la scalabilité forte plus importante

**MPI** Échange de messages **explicite** entre processus indépendants, sans partage de mémoire. Bas niveau, mais modèle **standard** depuis 20 ans.

**OpenMP** Parallélisation par directives, pour systèmes à **mémoire partagée**. Plus haut niveau, mais limité à l'intérieur d'un noeud.

**Cuda** Programmation des cartes GPU. Prise en compte explicite de la différence entre CPU et GPU. Plus difficile, mais indispensable pour exploiter GPU

Co-existence de 2 ou 3 modèles (programmation hybride).

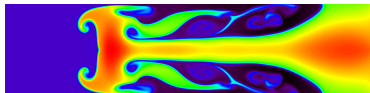
Émergence de modèles de plus haut niveau : modèles de composants, Partitioned Global Array Space (PGAS).

Question cruciale pour l'ExaFlop : **Comment exploiter un million de coeurs ?**



- 1 Les enjeux
- 2 Applications**
- 3 Principaux acteurs
- 4 Conclusions

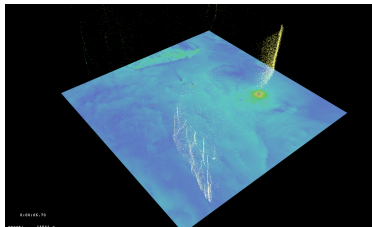
Mécanique des fluides aéroynamique,  
combustion, ...



Instabilité de Rayleigh Taylor (S.  
*van Crikingen*, MdS)

Mécanique des fluides aéroynamique,  
combustion, ...

Environnement Météo, climat

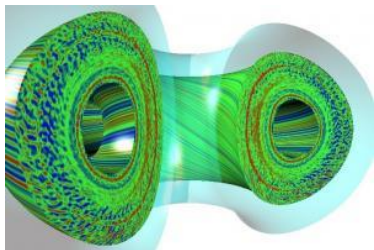


Visualisation en climatologie, (*M. Mancip*, MdS)

Mécanique des fluides aérodynamique,  
combustion, ...

Environnement Météo, climat

Énergie Fusion, pétrole



Premières simulations d'instabilités  
du plasma sur la plate-forme  
européenne (*S. Brémond*, IFRM,  
CEA)

Mécanique des fluides aéroynamique,  
combustion, ...

Environnement Météo, climat

Énergie Fusion, pétrole

Défense Dissuasion  
nucléaire



Mécanique des fluides aérodynamique,  
combustion, ...

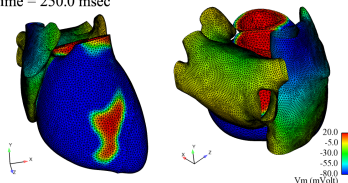
Environnement Météo, climat

Énergie Fusion, pétrole

Défense Dissuasion  
nucléaire

Sciences de la vie biologie, médecine  
virtuelle

Time = 250.0 msec



Potentiel d'action pendant la  
dépoléarisation ventriculaire, (EPI  
REO, INRIA)



**Mécanique des fluides** aérodynamique,  
combustion, ...

**Environnement** Météo, climat

**Énergie** Fusion, pétrole

**Défense** Dissuasion  
nucléaire

**Sciences de la vie** biologie, médecine  
virtuelle

**Sciences humaines** économie, sciences  
humaines



Reconstitution du cirque Maxime à Rome (Projet Archéovision, Bordeaux)

Mécanique des fluides aérodynamique, combustion, ...

Environnement Météo, climat

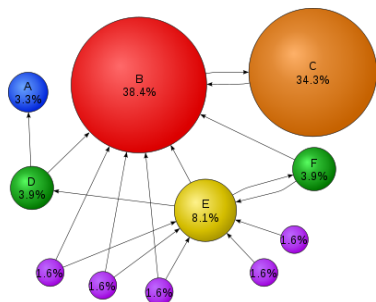
Énergie Fusion, pétrole

Défense Dissuasion nucléaire

Sciences de la vie biologie, médecine virtuelle

Sciences humaines économie, sciences humaines

Sciences des données Google, Data Analytics, ...

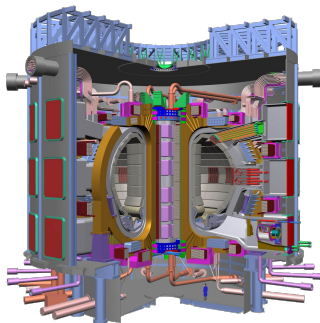
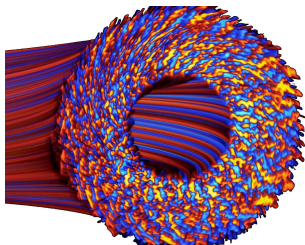


Exemple de PageRank pour un petit réseau (Wikipedia).

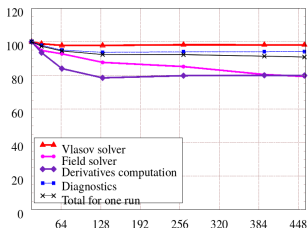
La page C a un PageRank plus élevé que la page E, même si C n'a que peu de liens.

# Fusion : prévoir le fonctionnement d'Iter

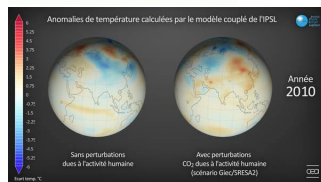
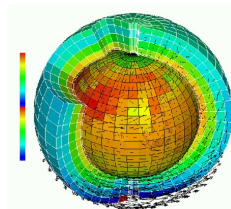
- Code Gysela (CEA / IRFM), turbulences du plasma dans Iter, géométrie toroïdale
- collab. MdS, optimisation des communications, de la mémoire, des entrées / sorties
- Extensibilité jusqu'à 450 000 coeurs (Juqueen, Jülich)



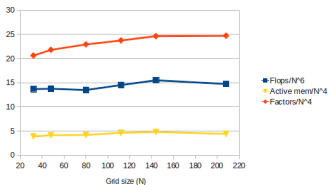
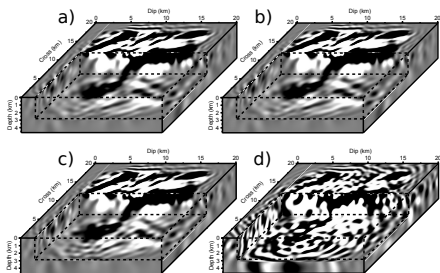
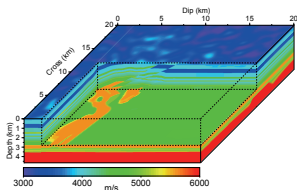
Relative efficiency, one run (Weak scaling - Juqueen)



- La simulation est un élément essentiel pour les rapports du GIEC.
- France représentée par Institut Pierre Simon de Laplace
- Couplages multiphysiques (océan, atmosphère, chimie, glace de mer, végétation)
- Gestion des incertitudes
- Très grand volume de données



Évolution de la température au 21<sup>e</sup> siècle, IPSL



Imagerie sismique, domaine fréquentiel (eq. Helmholtz), consortium *Seiscope*

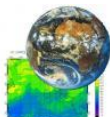
Extrapolation sur une grille

$1000 \times 1000 \times 1000$  :

55 exaflops, 250 Tera-octets mémoire (solveur MUMPS)

Permet de réduire les coûts de conception, diminuer le nombre d'essais

- Total (14<sup>e</sup> Top 500), EDF (46<sup>e</sup> Top 500) programmes importants en HPC
- Banques : évaluer les produits dérivés ou risques financiers
- Airbus : décisif pour la simulation et la "virtualisation" de la conception d'un avion



Environnement  
Climatologie



Médecine  
Biologie



Aéronautique  
Aérospatial



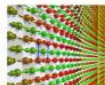
Énergie  
Physique des plasmas  
Piles à combustible



Automobile



Finance



Matériaux  
Spintronique  
Nanosciences



Centrales électriques  
de demain

## Cloud computing

- Utiliser la puissance de calcul de fermes de serveurs, via la virtualisation des ressources
- SaaS = Software as a Service : location de logiciels
- Évite des investissements lourds, obsolescence rapide du matériel



## Cloud computing

- Utiliser la puissance de calcul de fermes de serveurs, via la virtualisation des ressources
- SaaS = Software as a Service : location de logiciels
- Évite des investissements lourds, obsolescence rapide du matériel

## Gestion de données massives

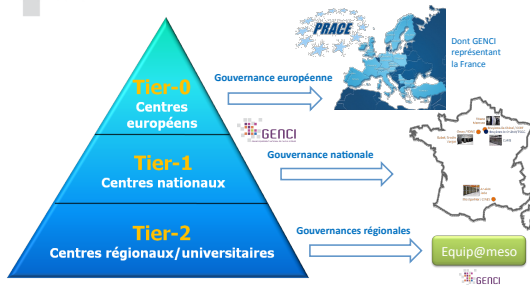
- Les centres de calcul deviennent producteurs de données (climat, fusion, astrophysique : Peta Octets)
- Dans l'autre sens, analyse de données expérimentales (satellite Planck, génome humain, imagerie cérébrale)
- Analyse de données massives pour extraire des corrélations **Data analytics**



- 1 Les enjeux
- 2 Applications
- 3 Principaux acteurs**
- 4 Conclusions



## La pyramide du HPC



21/09/2011

Journées Mésocentres

4

Image Genci

Importance de l'équilibre entre les différents niveaux

Élargir la base, favoriser la progression verticale des utilisateurs





Infrastructure pan-Européenne de ressources en HPC  
pour la recherche publique  
Accès aux supercalculateurs parmi les plus puissants  
sur critères scientifiques

Nom	Desc.	Rang	# coeurs	Flops Tflops / s	Conso kW
Juquuen	IBM Blue Gene/Q, De	8	458752	5000	2300
SuperMUC	IBM Idataplex, De	10	147456	2897	3424
Fermi	IBM Blue Gene Q, It	15	163840	1790	822
<b>Curie</b>	<b>Bull Fr</b>	20	77184	1360	2251
MareNostrum	IBM IDataPlex, Sp	34	48896	925	1016
Hermit	Cray XE6, De,	39	113472	831	1044

## Genci

**G**rand **É**quipement **N**ational en **C**alcul **I**ntensif, société civile créée en 2009.

Associés : MESR, CNRS, CEA, CPU, Inria

Financement pérenne des centres nationaux, représentation de la France dans Prace, promotion du calcul intensif.



## Centres de Calcul Nationaux



**Idris** CNRS, Orsay, Blue Gene Q Turing (65 000 coeurs)

**TGCC** CEA, Bruyères le Chatel, Bull Curie (80 000 coeurs, 256 GPU)

**Cines** Universités, Montpellier, SGI Jade (23 000 coeurs)



## Objectifs

**Sensibiliser** les entreprises au HPC et identifier les PME intéressées, en s'appuyant sur les pôles de compétitivité

**Qualifier** le projet

**Aider** à la construction technique de ce projet

**Insérer** ce projet dans les dispositifs de financement existants

## Offre

### Formation

**Expertise** (transfert de compétences) ;

**Accès** aux équipements de calcul intensif ;

**Aide** à l'intégration dans les dispositifs de financement de l'innovation.

Laboratoire en partenariat



## Missions

Valorisation scientifique des grandes infrastructures de calcul

Former des équipes pluridisciplinaires à même de relever les grands défis du calcul intensif

Trois axes de développement :

- Laboratoire de recherche pluridisciplinaire autour de la simulation numérique
- Unité de service ouverte sur les communautés offrant notamment une expertise et une aide aux développements applicatifs de haut niveau
- Un pôle d'enseignement et d'animation scientifique en calcul intensif

## 30 méso-centres en France

Ensemble de moyens humains, ressources matérielles et logicielles, d'une même région, sources de financement propres, pour fournir un environnement scientifique et technique en HPC

<http://calcul.math.cnrs.fr/spip.php?rubrique7>

Ressources de proximité, accès souple, puissance limitée

## Maisons de la modélisation

Associées aux mésocentres, ancrage régional, lien important avec les PME

Maimosine Grenoble

Cemosis Strasbourg

Cascimodot Orléans

Institut du Calcul UPMC, Paris

## Le projet Equip@Meso

Investissement d'avenir, coordonné par Genci

- Développer au niveau régional la stratégie nationale DU CI, avec des centres de calcul universitaires ;
- Renforcer les compétences et les capacités de calcul de ces centres ;
- Démultiplier localement l'initiative HPC-PME de GENCI-Inria-BPI



Animation scientifique, formation coordonnée par Maison de la Simulation, Cerfacs, Groupe Calcul



- 1 Les enjeux
- 2 Applications
- 3 Principaux acteurs
- 4 Conclusions**

- La simulation modifie le fonctionnement de la science, de l'industrie
- L'ordinateur reste un outil, qui ne vaut que par les **applications** qu'il rend possible
- Les machines de demain auront une architecture hiérarchique, **hétérogène**
- La complexité ne peut être maîtrisée que par des équipes **pluridisciplinaires**
- Les **données** prennent une importance croissante

