

3ème Journée Méso-centre – 21 Sept. 2010

« Animation scientifique et technique en lien avec les plateformes de calcul »

Le méso-centre de calcul de l'Ecole Centrale Paris

Damien Durville, Anne-Sophie Mouronval, Matthieu Boileau, Marc Massot



PLAN :

- **Contexte scientifique et historique d'un projet fédérateur**
- **Dialogue Compétitif : le pourquoi et le comment**
- **Organisation du Méso-centre**

Petit historique

- **Depuis 2004**
 - collaborations entre EM2C et MSSMat sur les calculateurs parallèles de chacun des deux laboratoires (UPR et UMR CNRS)
 - partage de moyens de calcul (Possibilité d'un moyen de calcul local disponible a généré un véritable développement du calcul au sein des laboratoires)
- **2008 – 2009 : appels à projet SESAME (Région)**
 - EM2C/MSSMat/SPMS en lien avec la Fédération Francilienne de Mécanique
 - projet non retenu – difficulté de mutualisation réelle entre établissements
- **2009 Projet méso-centre ECP**
 - Laboratoires EM2C / MAS / MSSMat / SPMS / LGPM
 - Point clef : soutien de la direction de l'ECP (sensibilisation des instances dirigeantes aux problématiques du Calcul)
- **2009 Participation de EM2C au GdR CALCUL de l'INSMI**
 - Maths / Info / Ingénierie - <http://calcul.math.cnrs.fr>

Pourquoi un méso-centre ?

- **Rôle croissant de la simulation dans le développement des disciplines scientifiques, aux côtés de la théorie et de l'expérience**
 - **Augmentation exponentielle des besoins de calcul**
 - abord de nouvelles échelles
 - couplages multi-physique
 - validation des modèles sur des cas industriels
 - **Des défis communs concernant le recours au calcul haute performance**
 - recours au calcul parallèle
 - de nouvelles manières de formuler et résoudre les problèmes
 - nouvelle génération de méthodes numériques et d'algorithmes
- **Spécificité ECP : Culture mathématiques appliquées et méthodes numériques transverse aux laboratoires : belle interface avec les applications et les partenaires industriels**

Intérêt d'un méso-centre

- **Plus qu'un équipement**
- **Synergie pour résoudre les problématiques scientifiques communes liées au recours au calcul parallèle**
 - coupler les approches (mathématiques, analyse numérique, mécanique des solides et des fluides, etc.)
 - Pas un lieu d'exploitation, mais un lieu de développement de nouveaux outils et codes de calculs avant passage aux grands Centres Nationaux (GENCI)
- **Lieu d'échange**
 - bonnes pratiques
 - séminaires
 - formation des chercheurs et thésards, mais aussi ingénieurs
 - ouverture sur l'extérieur

Un projet fédérateur

- **Mettre en commun les ressources et compétences dans le domaine du calcul haute performance**
 - Regroupement de 6 laboratoires
 - EM2C : mécanique des fluides, combustion, maths appliquées
 - MAS : maths appliquées, méthodes numériques, probabilités
 - MSSMat : mécanique des structures et des matériaux
 - LGPM et SPMS : structure de la matière aux échelles atomiques
 - LGI Laboratoire de Génie Industriel
 - Réseau national des méso-centres (groupe Calcul du CNRS)
- **Calendrier approximatif**
 - Fin juin 2008 début de la conception du projet (SESAME 2008 puis 2009)
 - Sept. 2009, décision d'un équipement ECP mutualisé co-financé Ecole / ressources propres laboratoires – Poste IR acquis – Dialogue compétitif
 - Automne 2009 : GROS travail préparation
 - Lancement Dialogue toute fin 2009 – Clôture : fin juillet 2010
 - Installation Octobre 2010 – Lancement : Novembre 2010 – Arrivée IR

Les interlocuteurs du projet

- **Comité technique opérationnel**

- Enseignants/chercheurs : Damien Durville (MSSMat), Didier Clouteau (MSSMat), Hervé Duval (LGPM), Olivier Gicquel (EM2C), Frédéric Magoulès (MAS), Marc Massot (EM2C)
- Ingénieurs calcul : Matthieu Boileau (EM2C), Anne-Sophie Mouronval (MSSMat)
- Direction informatique : René Lemarchand

- **Services financiers**

- **Services techniques de l'ECP**

→ Point clef : noyau motivé associant chercheurs et ingénieurs + articulation efficace avec la direction ECP, services techniques et services financiers

Équipement visé

- **Première phase 2010 : Calculateur à environ 1000 cœurs (10 TF)**

Adapté aux différents besoins exprimés dans le programme fonctionnel - Reconditionnement de l'ancien cluster (~200 cœurs) - Mise en racks refroidis par eau - aménagements et servitudes techniques sont pris en compte dans un autre marché - pré-requis techniques communiqués de manière détaillée et précise

- Budget

- calculateur + maintenance 3 ans : 1
- aménagement (électricité + climatisation) : ½

- Augmentation de la capacité prévue

- dépôt de nouvelles demandes de financement (ANR / DIGITEO...)

- **Seconde phase 2011 : Extension potentielle de la machine**

- Tranche conditionnelle

Structure du Budget :

½ machine financé par la Direction de la Recherche de l'ECP

½ machine financé par les ressources propres des laboratoires

(ANR, Contrats, Projet DIGITEO, CNRS - 3 Instituts)

~½ machine financé par l'ECP pour adaptation sur le site du Centre Informatique

Présentation des benchmarks

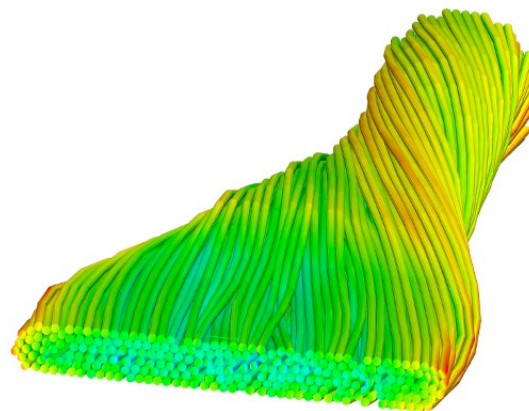
- **6 benchmarks représentatifs des différents besoins :**
 - 3 benchmarks de type « MEM »
 - 3 benchmarks de type « PAR »
- **Tests déjà effectués sur différentes architectures :**
 - performances obtenues fournies
 - portage facilité
- **Benchmarks nombreux \Rightarrow limitation des optimisations autorisées**

Présentation des benchmarks (ii)

Benchmarks représentatifs de tâches de type « MEM »

- **Benchmark MULTIFIL**

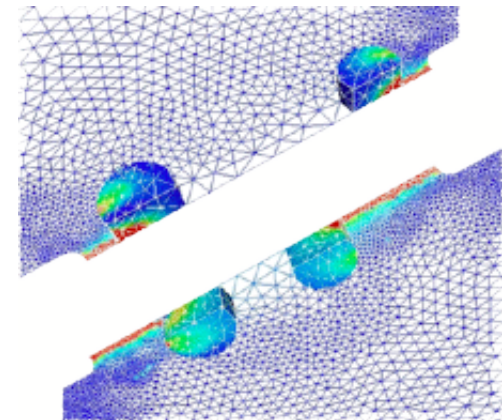
- Utilisation : simulation des milieux enchevêtrés ;
- Code Fortran utilisant OpenMP comme parallélisation
Solveur de système linéaire sparse symétrique (MKL) ;
- En pratique : calculs sur 4 threads, mémoire modérée (1-4 Gos), IOs faibles ;
- Point clé du bench : test de scalabilité (8 cœurs max).



Présentation des benchmarks (iii)

- **Benchmark OOFE**

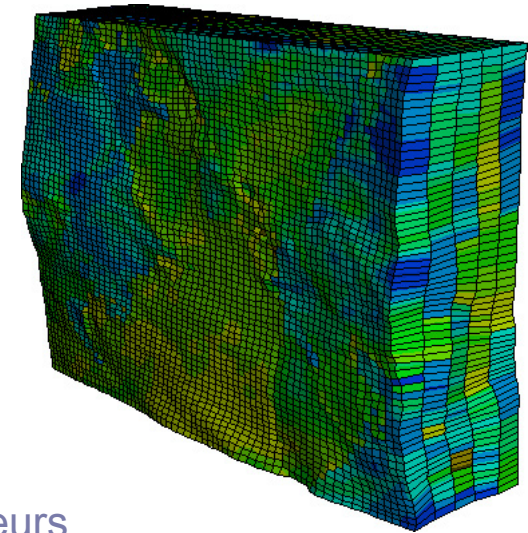
- Utilisation : analyse non linéaire et dynamique des structures par des modèles adaptatifs et hiérarchiques en éléments finis ;
- Code C++ séquentiel ;
- En pratique : besoins en mémoire modérés (2-4 Gos) ou élevés (64 Gos max), IOs modérés (1-10 Mos) ;
- Point clé du bench : tester les aspects relatifs à la mémoire pour un code séquentiel.



Présentation des benchmarks (iv)

- **Benchmark ABAQUS**

- Utilisation : simulation du comportement et de l'endommagement des matériaux ;
- Abaqus 6.8 + utilisation d'UMATs en Fortran
parallélisation OpenMP ou MPI suivant le problème ;
- En pratique : calculs OpenMP sur 4 threads ou MPI sur 4 cœurs,
besoins en mémoire modérés (2-16 Gos), IOs importants (100 Mos - 1Go) ;
- Point clé du bench : tester la scalabilité (8 cœurs max) et surtout les IOs (fichiers de résultats de 3 et 6 Gos).



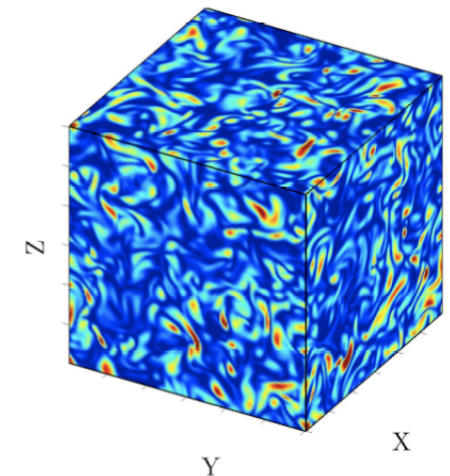
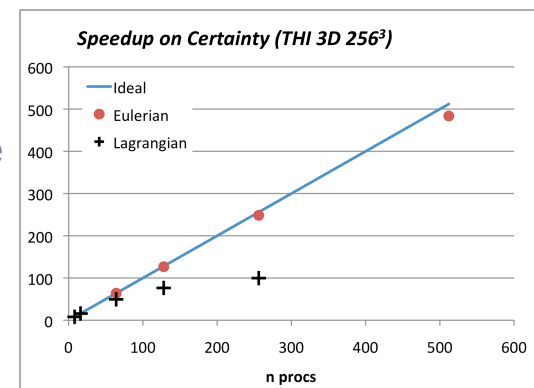
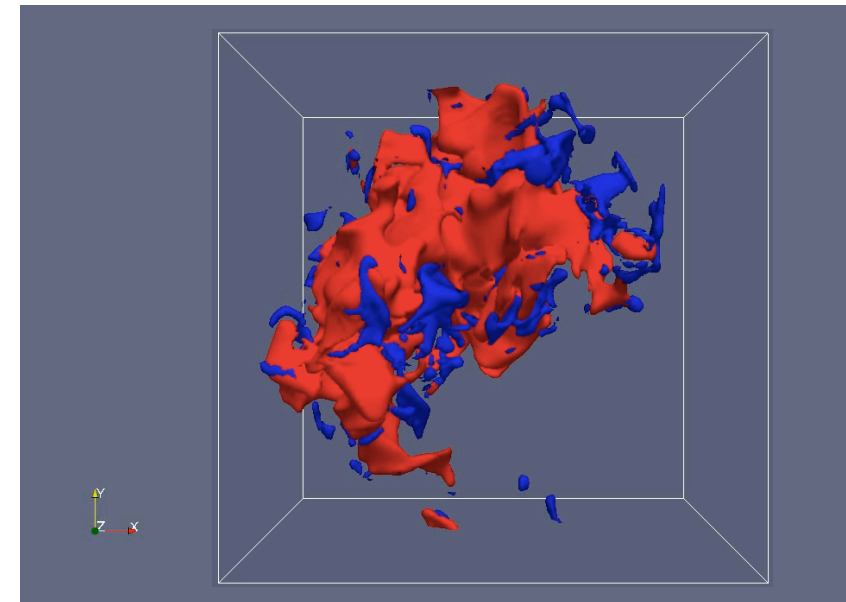
Présentation des benchmarks (v)

CTR Summer Program 2010
Stanford University, Freret et al.

Benchmarks représentatifs de tâches de type « PAR »

- **Benchmark MUSES3D**

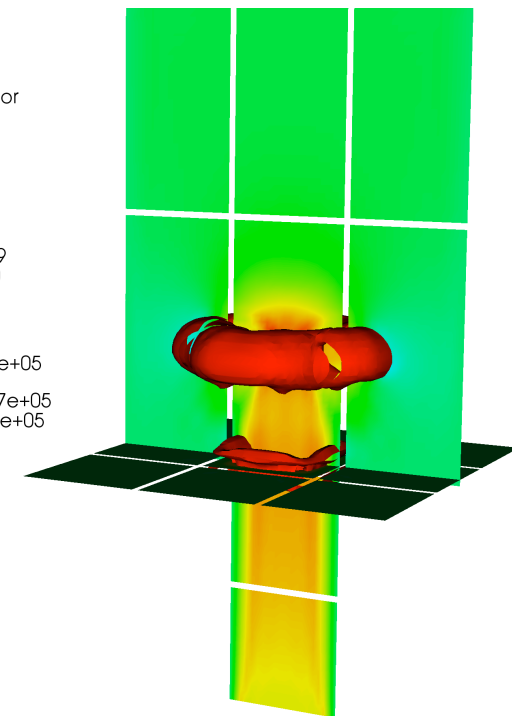
- Utilisation : Simulation de la dispersion turbulente de brouillards de gouttes polydispersés (diverses tailles) dans des écoulements gazeux turbulents 3D;
- Code Fortran 90/95
parallélisation MPI;
- En pratique : calculs de 1 à 1000 cœurs sur réseau rapide ; besoins en mémoire modérés (2-4 Go) ; I/O modérés
- Point clé du bench : tester la scalabilité



Présentation des benchmarks (vi)

- **Benchmark YWC**

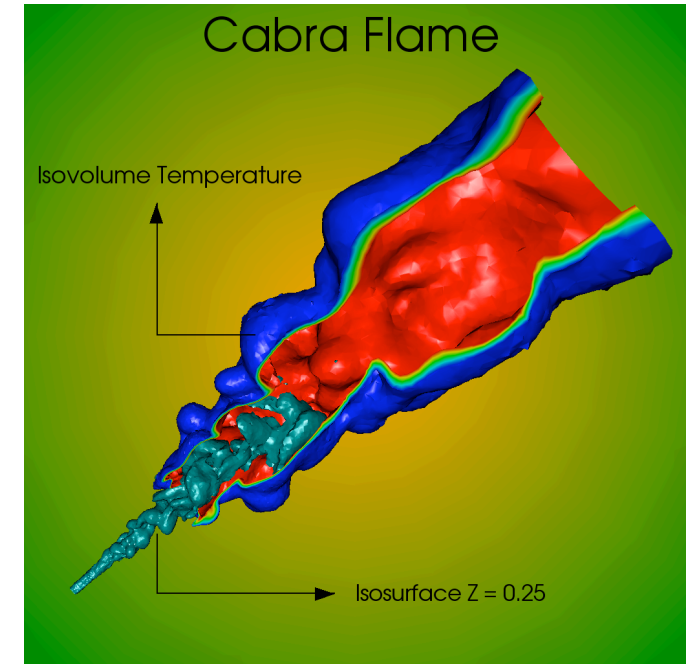
- Utilisation : simulation numérique directe réactive en mécanique des fluides ;
- Fortran 90
parallélisation MPI ;
- En pratique : calculs de 1 à 4000 coeurs sur réseau rapide, besoins en mémoire modérés (2-4 Go) ;
- Point clé du bench : tester la scalabilité



Présentation des benchmarks (vii)

- **Benchmark AVBP**

- Utilisation : simulation aux grandes échelles réactive en mécanique des fluides ; code recherche utilisé dans l'industrie aéronautique et automobile
- Fortran 90
parallélisation MPI ; bibliothèques HDF5
- En pratique : calculs de 1 à 12000 coeurs sur réseau rapide, besoins en mémoire modérés (2-4 Go) ;
- Point clé du bench : tester la scalabilité



Présentation des benchmarks (viii)

- **Éléments à fournir dans le rapport de benchmarks :**
 - Description détaillée de la machine de bench
 - Performances et validation des calculs
 - Techniques d'extrapolation utilisées
 - Description des modifications nécessaires au portage ou des optimisations mineures
- **Benchmarks choisis**
 - Représentatifs des futurs utilisateurs principaux
 - Expérience sur les codes proposés
 - Correspondent à la double demande MEM/PAR
 - Éléments de dialogue très importants avec les constructeurs

Dialogue Compétitif : le pourquoi et le comment

Dialogue compétitif : intérêts

- **Du temps pour définir la solution**

- en dialogue avec les fournisseurs
- préciser progressivement les besoins
 - en dialogue entre partenaires
 - en dialogue avec fournisseurs en fonction de ce qui existe sur le marché
- relance éventuelle de nouveaux benchmarks pour clarifier ou confirmer

- **Émergence de nouvelles idées**

- les premiers tours permettent de voir ce qui se fait sur le marché
- exemple : machine SMP non envisagée au départ

- **Limites**

- un temps minimum (et maximum) nécessaire
- La procédure doit rester d'un coût raisonnable pour les candidats (dédommagement)

→ Point clef : permet de « construire » les caractéristiques techniques précises de l'offre tout en « formant » le comité technique pour la rédaction du programme fonctionnel final

Dialogue compétitif : calendrier

- **Préparation**

- octobre / novembre 2009

- préparation du document d'orientation
- évaluation précise des besoins des divers partenaires
- préparation de benchmarks

- **La procédure**

- prévoir du temps

- plannings des constructeurs (autres appels d'offres, congés)
- temps de réflexion
- possibilité de demander des benches complémentaires
- délais pour les analyses, les envois des courriers

- pas trop de réunions

- **L'installation**

- octobre 2010

Dialogue compétitif : calendrier

22/12/09	Lancement appel à candidatures	- Document d'orientation - Règlement de la consultation	
25/01/10	Réception des candidatures		7 candidats 1 candidat éliminé
01/02/01	Invitation des candidats retenus au dialogue	- Première version programme fonctionnel	
11/02/10	Première audition	- Benchmarks - Questions sur spécifications techniques	
18/02/10	Visite technique implantation	- Nouvelle version programme fonctionnel	
19/03/10	Réception rapports de benchmarks		1 candidat éliminé
26/03/10	Deuxième audition		
16/04/10	Envoi nouveaux benchmarks de charges		
07/05/10	Réception rapports seconds benchmarks		
11/05/10	Troisième audition		
21/06/10	Remise des offres finales		
20/07/10	Notification du candidat retenu		

Dialogue compétitif : points d'attention

- **Règlement de la consultation**

- les différents critères (sélection des candidatures, élimination des candidats en cours de dialogue, et surtout sélection de l'offre finale) et leurs pondérations sont définis dès le lancement de la consultation : bien y réfléchir !
- bons critères : critères facilement discriminants, quantifiables, et en correspondance avec les attentes
- critères de prix : attention si on donne le montant du budget
- critères éventuellement intéressants :
 - performances sur les benches
 - dimensionnement objectif de la machine
 - nombre de cœurs, puissance en Tflops, mémoire, rapidité du réseau
 - consommations énergétiques
 - assistance, formation
- critères trop vagues à éviter, ou à pondérer d'un faible coefficient (ex : environnement)

Dialogue compétitif : points d'attention

- **Les benchmarks**
 - représentatifs des différents besoins
 - bien documentés
 - représentant un coût raisonnable pour les candidats
 - bien préciser les formats de retours attendus (critères précis)
 - la question de l'optimisation des codes
 - coût plus élevé pour les candidats
 - apporte un biais dans l'évaluation stricte de la machine
- **Cas des benchmarks sous-traités chez un même fabricant**
 - grande difficulté à comparer les solutions

Dialogue compétitif : points d'attention

- **La question du budget : faut-il l'annoncer ?**
 - le budget n'est pas forcément définitivement établi au moment de l'appel d'offres
 - la question arrive très rapidement
 - annoncer un budget permet de cadrer et de se concentrer sur l'efficacité de la machine
 - une solution : proposer deux ou trois budgets – peut permettre de discriminer - et prévoir un partie tranche conditionnelle pour l'évolution de la machine

Travaux d'aménagement

- **Importance croissante des coûts d'infrastructure**
 - alimentation électrique
 - climatisation
 - charge au plancher
- **Travaux à prévoir le plus tôt possible**
 - lancement des différentes études et dimensionnement
 - préparation des marchés pour les travaux
- **Difficultés**
 - lancer les études d'aménagement avant que la configuration de la machine soit figée
 - variations essentiellement sur la climatisation par eau réfrigérée (températures, débits)
- **Solutions alternatives**
 - conteneurs
 - ...

Organisation du Méso-centre

Organisation du Méso-centre

- **Moyens humains**
 - un demi-poste IR Ecole (recrutement oct. 2010) dédié au méso-centre
 - appui attendu du CTI : administration système et réseau
 - ingénieurs calculs des laboratoires participants
- **Organisation**
 - comité technique opérationnel
 - gestion des questions courantes : utilisation de la machine
 - définition des orientations techniques du méso-centre
 - comité des utilisateurs du méso-centre
 - Lien du comité opérationnel avec la communauté des utilisateurs
 - comité scientifique (experts internes et externes à l'ECP)
 - fournir une évaluation scientifique des travaux réalisés au méso-centre
- **Animation scientifique**
 - séminaire régulier (premier séminaire le 7 octobre 2010)
 - formations chercheurs, doctorants et ingénieurs
 - Lien avec l'enseignement (cours / séminaires)

BILAN:

- **Arrivée d'une machine de 10 Tflops dans un environnement propice (3 IR impliqués, animation scientifique et technique, aménagement de la salle et servitudes préparé, préparation des extensions et positionnement dans un paysage plus large)**
- **Dialogue Compétitif assez lourd à gérer mais extrêmement profitable à plusieurs niveaux**
- **Volonté de connexion avec la communauté des méso-centres (un gros merci à N. Renon et F. Gazelle + Formation (ANGD CNRS) CALCUL sur le sujet :Choix, installation, exploitation d'un calculateur, 2009)**
- **Pose la question de l'hébergement futur des machines, surtout dans le contexte de la multitude des projets en cours (Labex, Equipex)**
- **Question : comment établir un lien plus soutenu avec l'IDRIS et le CINES (plus poussé que simplement au niveau des nombreux projets qui tournent sur les machine des grands centres) ?**