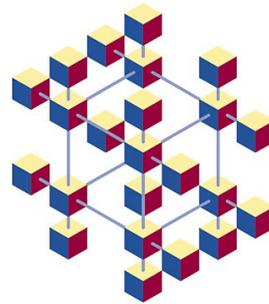


Mésocentre CALMIP, Université de Toulouse/Université Paul Sabatier : différents modèles de participation aux activités de recherche



calmip

Nicolas Renon, Ph. D.

Responsable Calcul Scientifique

(nicolas.renon@univ-tlse3.fr), <http://www.calmip.cict.fr>

- **CALMIP**

- Structuration du Mésocentre de Calcul
- Les labos partenaires
- Quelques chiffres

- **Différents modèles de collaborations**

- Exemple en Physique des Plasmas (laboratoire LAPLACE : Laboratoire Plasma et Conversion d'Énergie)
- Exemple en Mécanique des Fluides : Présentation par Annaïg Pedrono Ingénieur Calcul Scientifique à l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT)

Le Groupement Scientifique CALMIP : Historique

- ❑ Fondé en 1994 par 17 Laboratoires de Recherche Publics en Région Midi-Pyrénées
- ❑ Soutien des 6 établissements universitaires toulousains
 - ❑ Université Paul Sabatier (Sciences et Santé)
 - ❑ Institut National Polytechnique de Toulouse
 - ❑ Institut National des Sciences Appliquées
 - ❑ Université des Sciences Sociales
 - ❑ Université du Mirail , Lettres, Langues et Arts
 - ❑ Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace
- ❑ Positionnement : Mésocentre de Calcul
 - ❑ Promotion du calcul scientifique haute performance (contexte Multi-thématique)
 - ❑ Mise à disposition d'un environnement de Calcul Scientifique performant
 - ❑ Acquisition systèmes de calcul (contexte production)
 - ❑ Organisation de l'exploitation et du support aux utilisateurs (proximité)



Le Groupement Scientifique CALMIP : Organisation

✓ Pilotage

Comité d'Orientation

6 Vice-Présidents des conseils scientifiques des établissements
Le Président du Comité de Programmes
Région
3 Représentants de la communauté des utilisateurs (Pôles de Recherche)
Représentants Pôles de compétitivité

✓ Attribution des ressources :
✓ 2 AO par an
✓ Animation scientifique

Comité de Programme

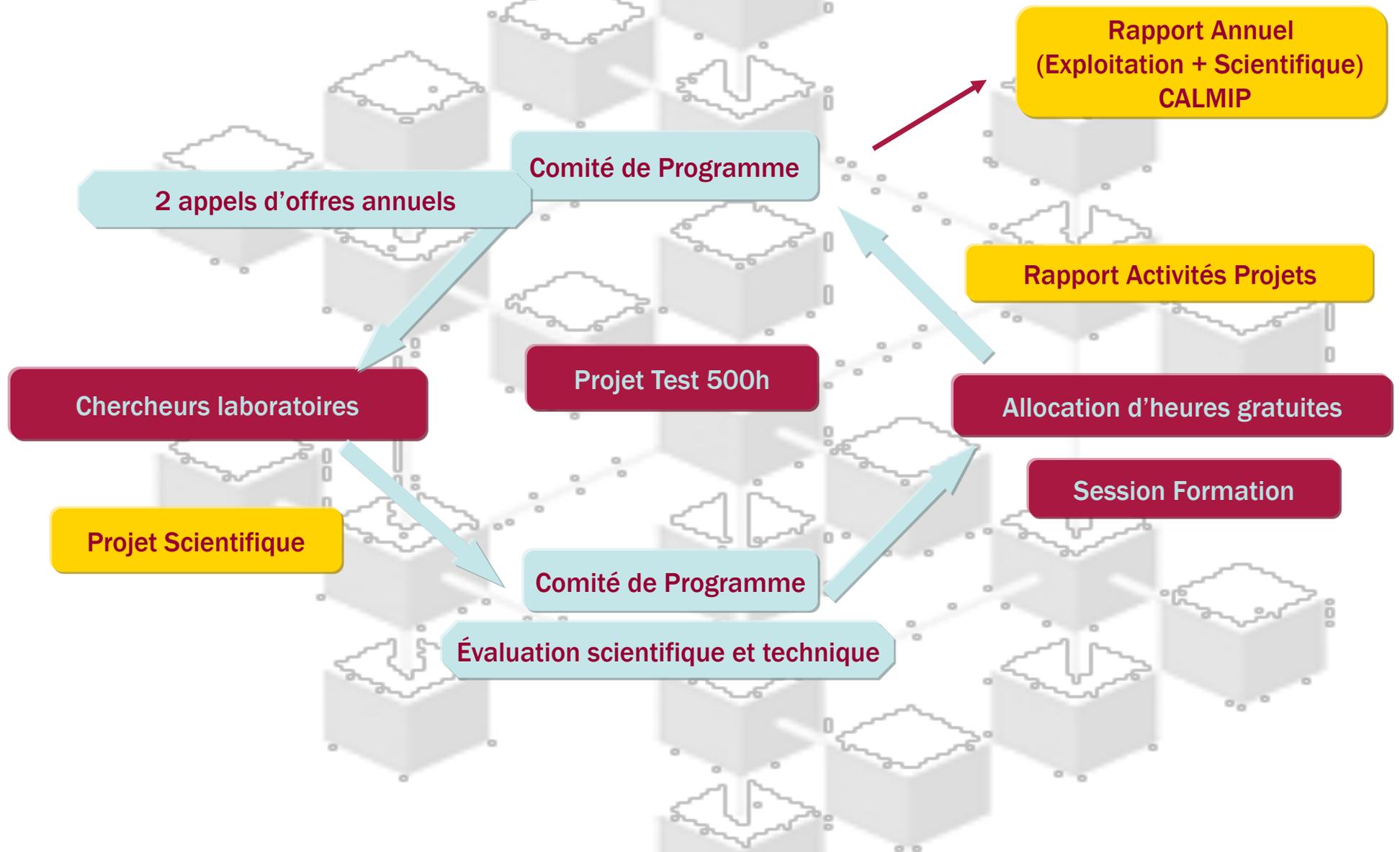
10 experts scientifiques issus des
laboratoires
7 thématiques scientifiques

✓ Support aux utilisateurs
✓ Support projets de Recherche
✓ Exploitation du supercalculateur

Université Paul Sabatier D.T.S.I.

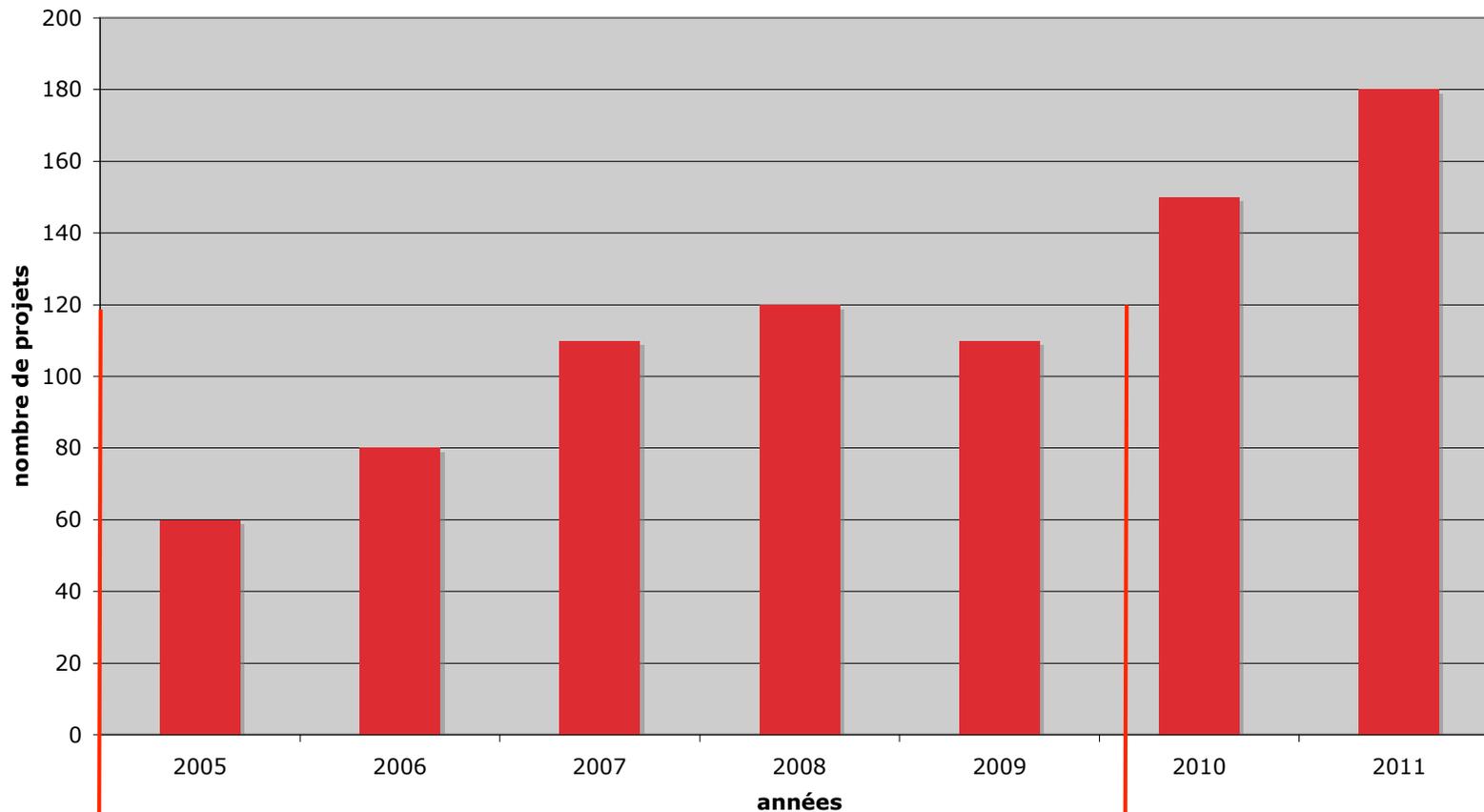
1 Ingénieur calcul scientifique
1,5 Ingénieurs système

CALMIP : Attribution des ressources pour la Recherche



CALMIP : évolutions nombre de projets Y2005-Y2011

nombre de projets - (2005-2011)



Ancien Système SOLEIL
256 cores / 1,5 TF

Nouveau Système
HYPERION
2912 cores/ 33,5 TF

CALMIP : Les Labos partenaires en 2011

Pôle Science de la Matière :

CEMES - Centre d'Elaboration de Materiaux et d'Etudes Structurales (UPR 8011)
CIRIMAT - Centre Inter-universitaire de Recherche et d'Ingénierie des Matériaux (UMR 5085)
IMRCP - Laboratoire des Intéractions Moléculaires et Réactivité Chimique et Photochimique (UMR 5623)
LCC - Laboratoire de Chimie de Coordination (UPR 8241)
LNCMI - Laboratoire National des Champs Magnétiques Intenses (UPR 3228)
LCAR - Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité (UMR 5589)
LCPQ - Laboratoire de Chimie et de Physique Quantiques (UMR 5626)
LPCNO - Laboratoire de Physique et Chimie des Nano-Objets (UMR 5215)
LPT - Laboratoire de Physique Théorique (UMR 5152)

Pôle Mathématiques Sciences et Technologies de l'Information et de l'Ingénierie :

ICA - Institut Clément Ader
IMFT - Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (UMR 5502)
IMT - Institut de Mathématiques de Toulouse (UMR 5219)
IRIT - Institut de Recherche en Informatique de Toulouse (UMR 5505)
LAAS - Laboratoire d'Analyse et d'Architecture des Systèmes (UPR 8001)
LGC - Laboratoire de Génie Chimique (UMR 5503)
LAPLACE - Laboratoire Plasma et Conversion d'Energie (UMR 5213)

Pôle Univers Planète Environnement Espace :

IRAP - Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie
CNRM/GAME - Centre National de Recherches Météorologiques (URA 1357)
LA - Laboratoire d'Aérodynamique (UMR 5560)
LEGOS - Laboratoire d'Etudes en Géophysique et Océanographie Spatiale (UMR 5566)
LMTG - Laboratoire des Mécanismes et Transferts en Géologie (UMR 5563)

Pôle Sciences du Vivant

IPBS - Institut de Pharmacologie et de Biologie Structurale (UMR 5089)
LIPM - Laboratoire des Interactions Plantes Micro-organismes (UMR 2594)
EDB - Evolution et Diversité Biologique (UMR 5174)
INSERM U563, dept oncologie

- CALMIP
 - Structuration du Mésocentre de Calcul
 - Les labos partenaires
 - Quelques chiffres
- **Différents modèles de collaborations**
 - Exemple en Physique des Plasmas (laboratoire LAPLACE)
 - Exemple en Mécanique des Fluides : Présentation par Annaïg Pedrono Ingénieur Calcul Scientifique à l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT)

CALMIP : différents types de collaborations

Implication Dev.

2 exemples

❑ Physique des Plasma - Laboratoire LAPLACE

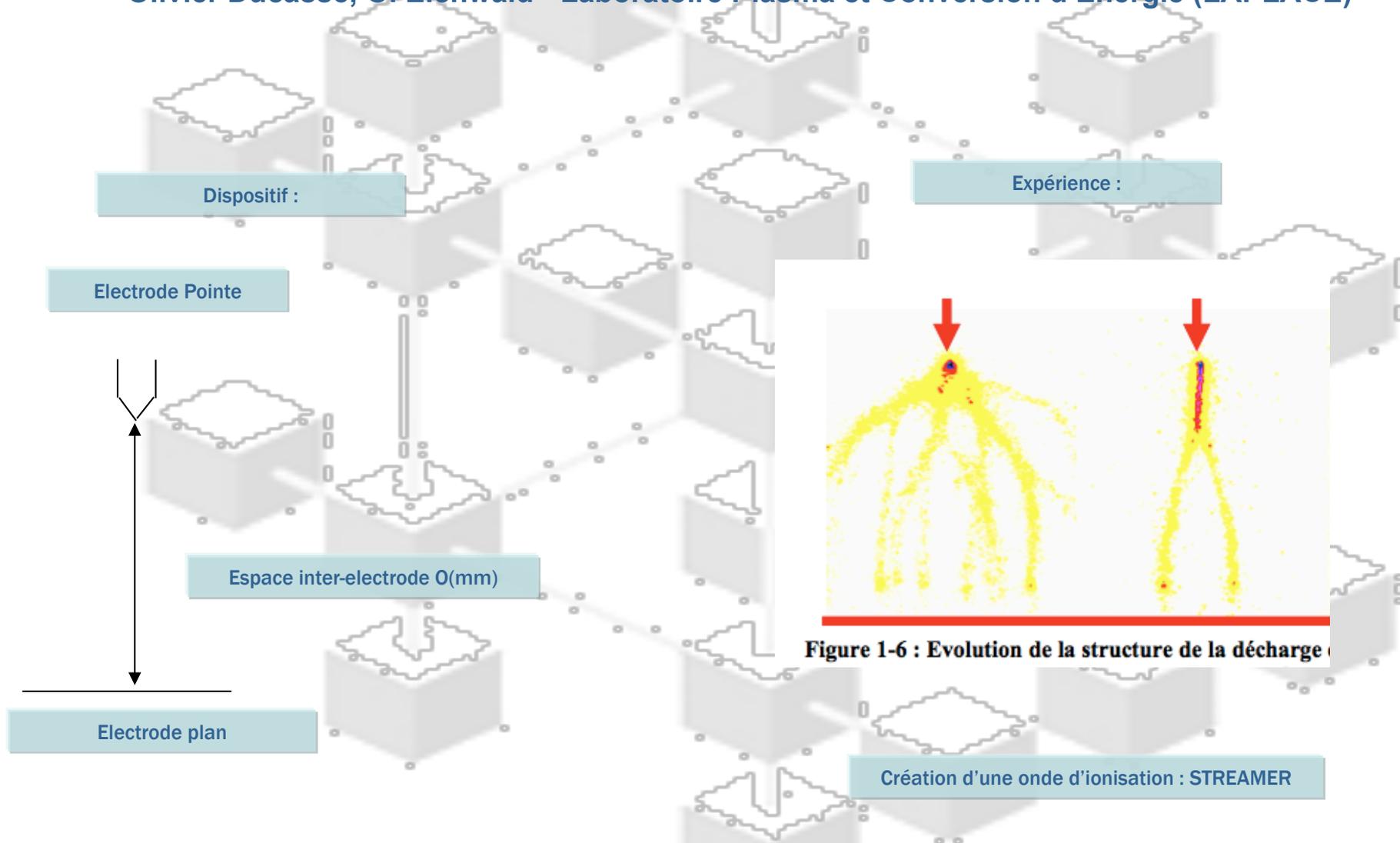
- ❑ Très forte implication dans les développements (parallélisation, optimisation) du code
- ❑ Intégration dans le projet de Recherche

❑ Code JADIM (Mécaflux) - Institut de mécanique des fluides de Toulouse

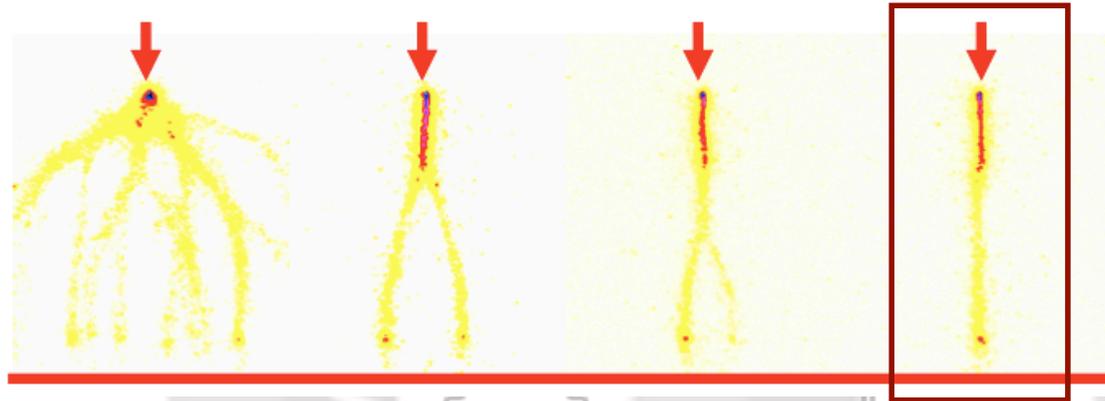
- ❑ Implication indirecte/implicite du mésocentre dans les développements du code

Exemple projet CALMIP : Physique des Plasmas

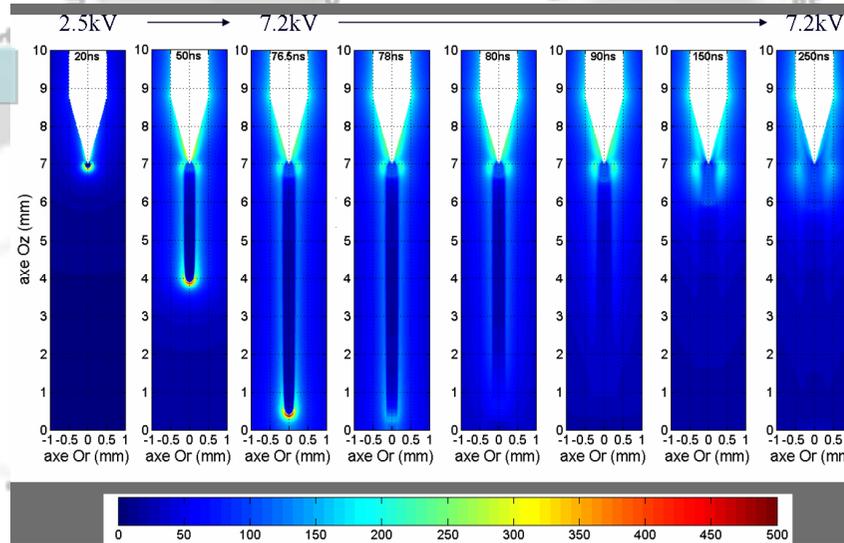
- Physique des Plasmas de Décharge Electrique (décharges électriques de type couronne)
- Olivier Ducasse, O. Eichwald - Laboratoire Plasma et Conversion d'Énergie (LAPLACE)



Expérimentation



Simulation (E - champ électrique)



Description macroscopique de la décharge électrique (modèle fluide)

Densité des espèces chimiques

Code 2D axisymétrique

Code STREAMER : Point de départ

❑ Point de départ : Juin 2005 une demande formulée par le doctorant : « Mon calcul dure 6 mois sur un PC linux »

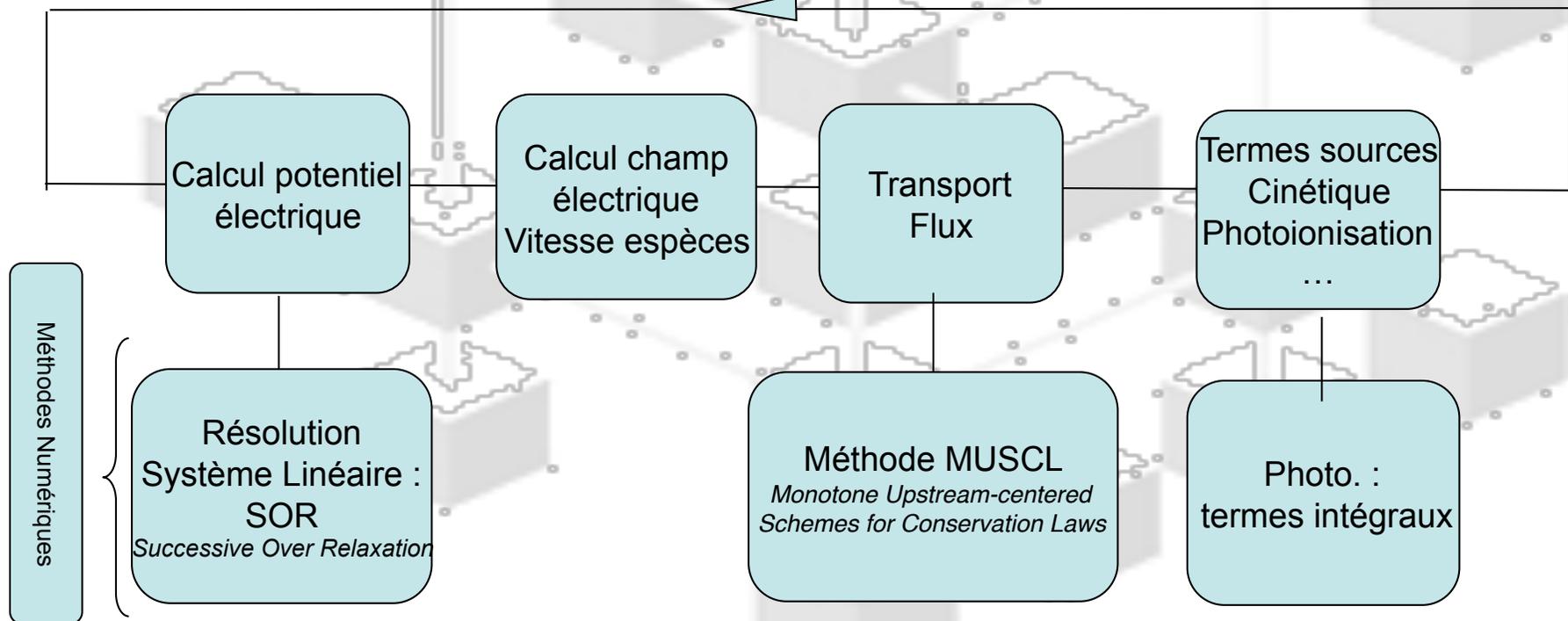
❑ code F77, alloc. Statique, implicite, pas de matrice assemblée,

❑ SEQUENTIEL ...

❑ très loin d'une confrontation expérimentale

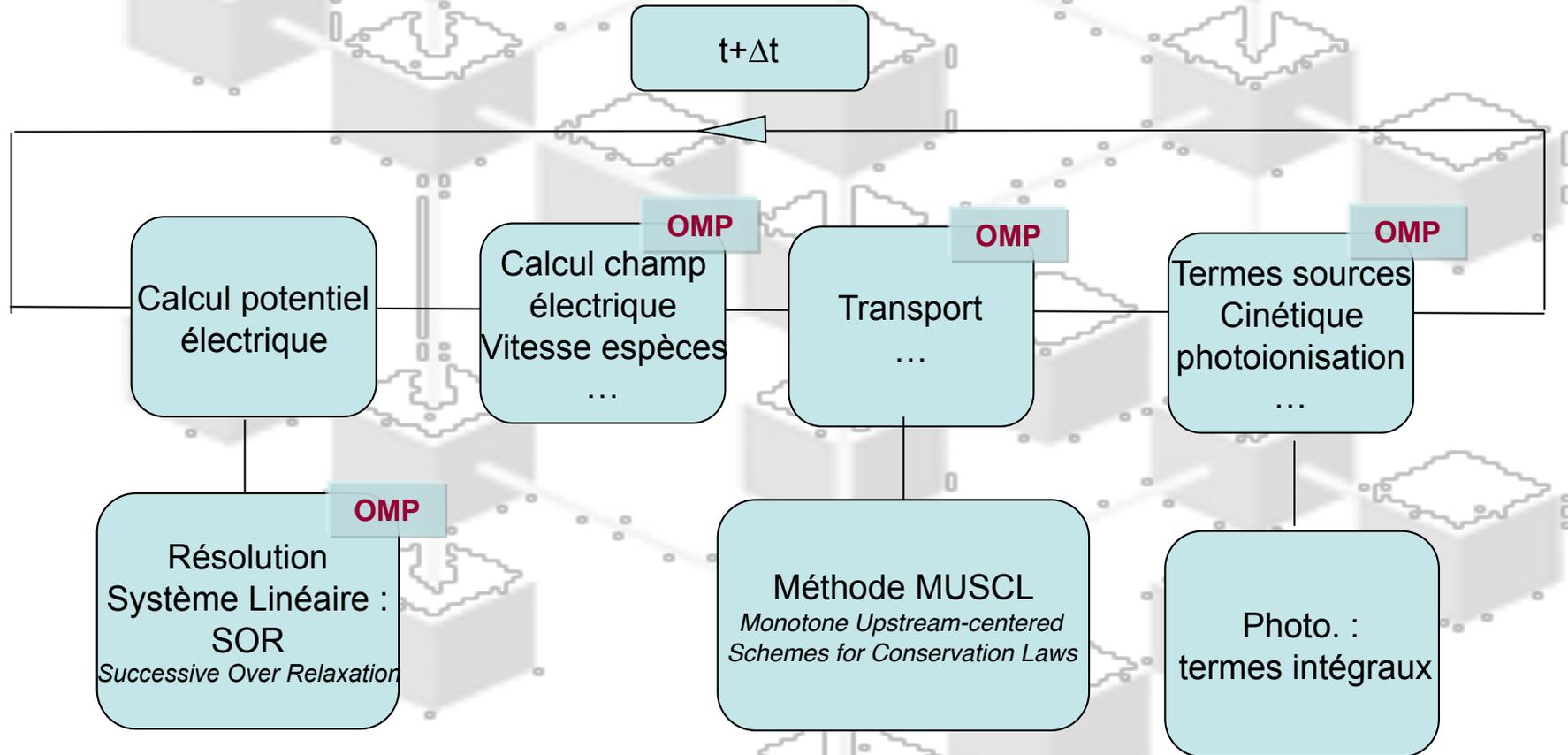
Pseudo-code

$t+\Delta t$

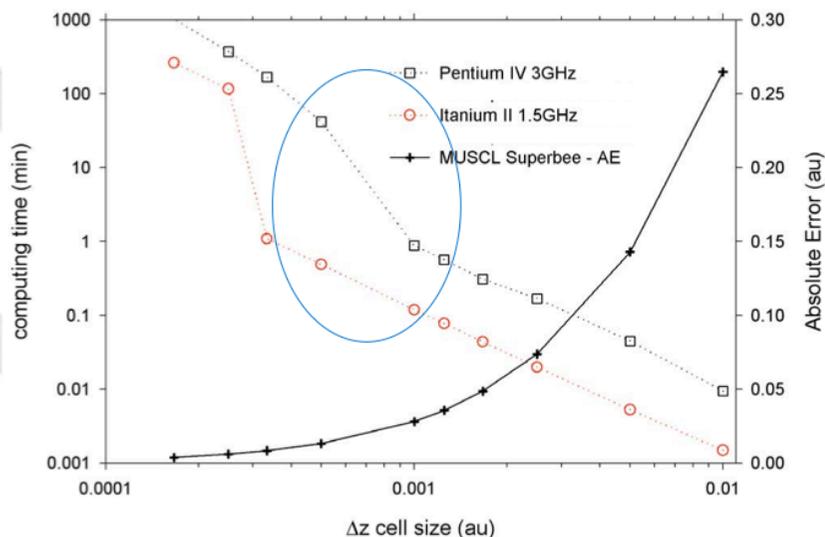


Code STREAMER : 1ere Approche

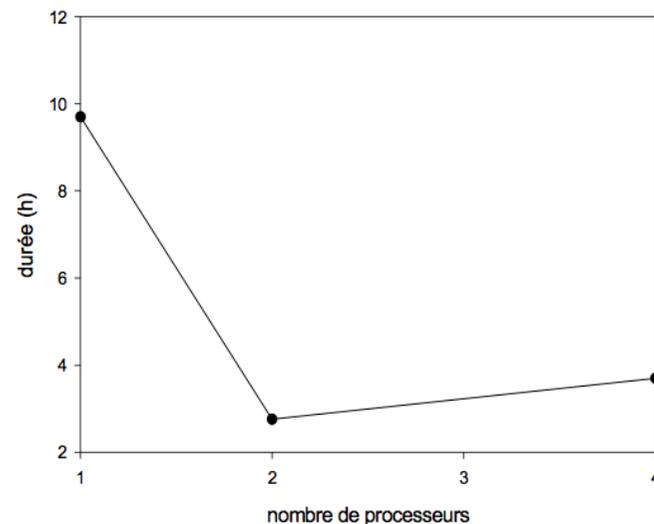
- ❑ (2005-2006) 1er approche : parallélisation mémoire partagée
 - ❑ Portage sur machine SMP Itanium (Altix 3700)
 - ❑ Analyse du code avec l'utilisateur
 - ❑ parallélisation OpenMP des routines les plus consommatrices (parallélisation des boucles exclusivement : espèces vs. espace)



Résultats obtenus sur ancien système « SOLEIL » : Machine SMP 68 processeurs Itanium



Effet de cache

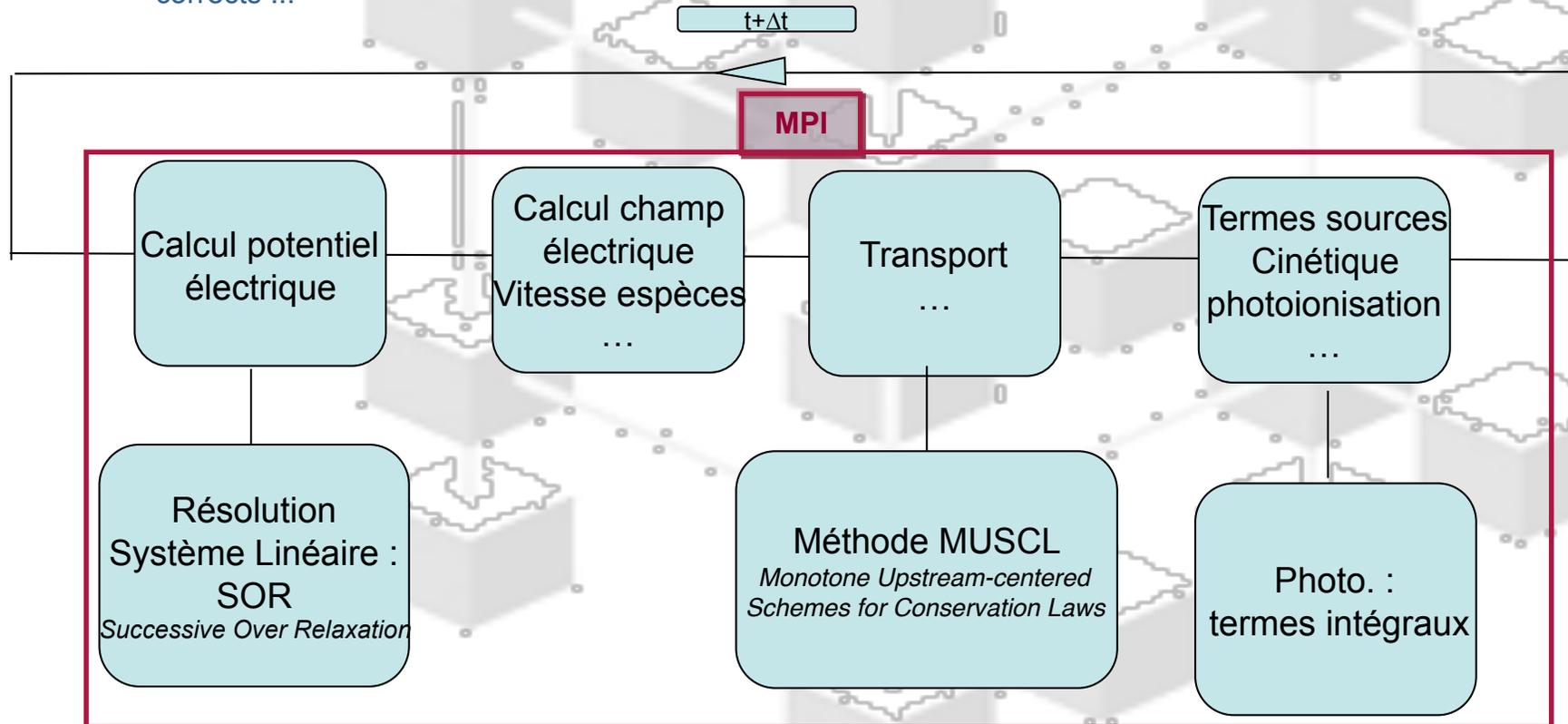


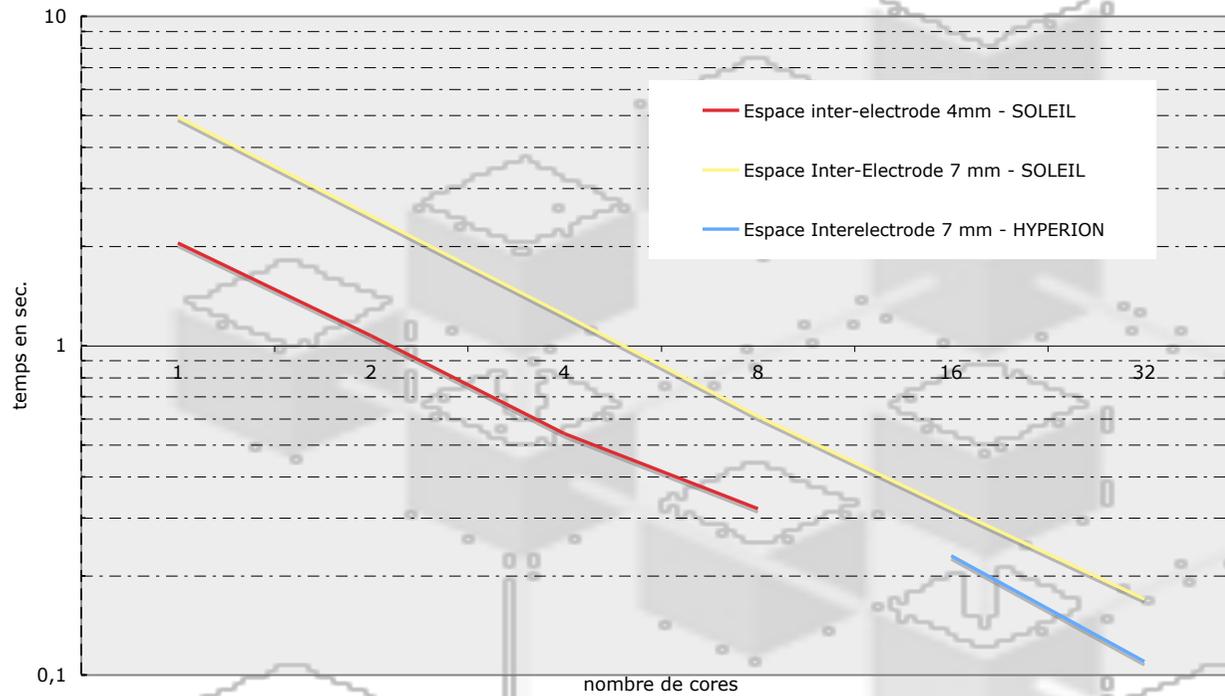
SpeedUp OMP

- ❑ Gains : 98,9% de diminution du temps de calcul !
 - ❑ Xeon 3,4 Ghz => Itanium 1,5 Ghz (50% peak Itanium) code rustique mais efficace, sensible au effets de cache .
 - ❑ Parallélisation OMP, effets de cache sur 2 threads, mauvaises perf au-delà de 4.
 - ❑ Compilo Intel IA 64 + OMP + compil O3 : BOF !!!
- ❑ Bénéfices : possibilité de simuler la géométrie du dispositif expérimental (espace inter-électrode)

Code STREAMER : 2eme Approche

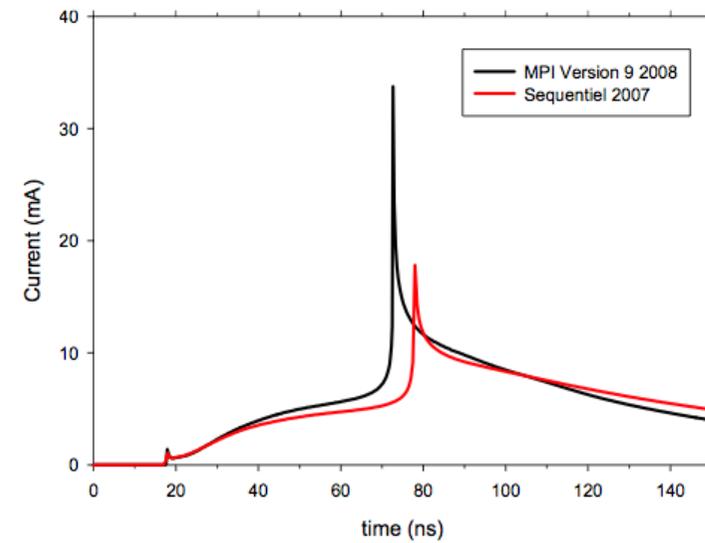
- ❑ 2007 - 2008 (Post-Doc à Mexico) - 2009 (MCF) : MPI
 - ❑ MPI : difficile pour l'utilisateur seul !
 - ❑ partition en tranche du domaine (espace), parallélisation du solveur SOR (coloring), validation, optimisation.
 - ❑ un long et douloureux chemin :
 - ❑ validation des dev. parallèle pas à pas.
 - ❑ squelette du code en perpétuel mouvement (meilleure prise en compte de la physique, génie logiciel)
 - ❑ 12 mois elapsed (1/2 journée /semaine en moyenne) pour une version MPI qui donne des résultats physiques corrects-!!!



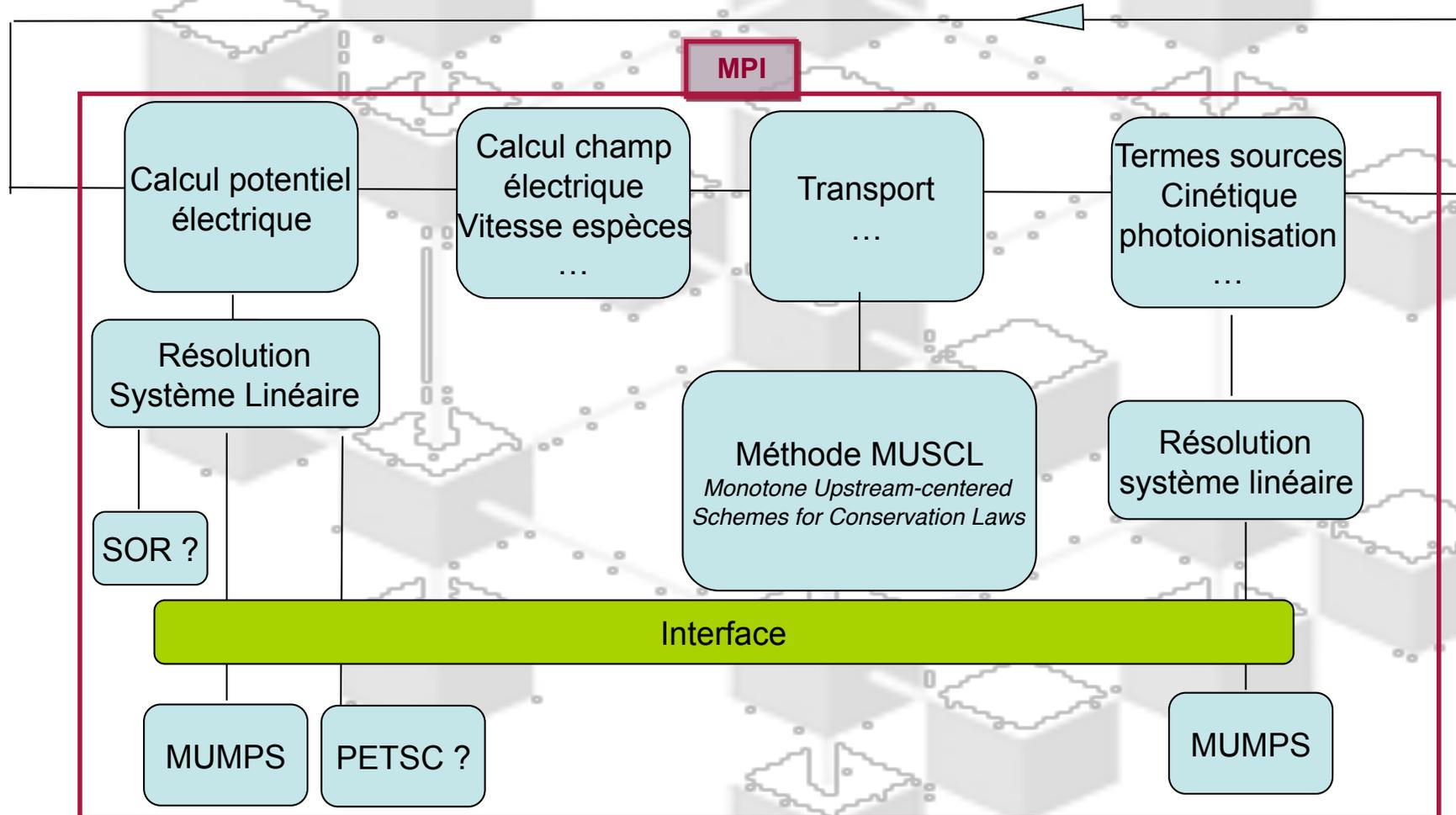


PUBLIS...

- [1] S. Kacem, O. Ducasse, O. Eichwald, N. Renon, H. Bensaad and M. Youfi, shock wave and gas dynamics simulation in Positive Point-to-plane air corona discharge, Conference Greifswald, (2010).
 [2] Full Multi Grid method for electric field computation in point-to-plane streamer discharge in air at atmospheric pressure, submitted at Journal of Computational Physics, in revision .



- ❑ (2010 - ...) 3ieme approche : 'analyse Numérique'
 - ❑ Besoin exprimé par l'utilisateur : vers le 3D ...
 - ❑ « moderniser le code » sur les aspects méthodes numériques (interfacer le code avec librairies)
 - ❑ proposition de nouvelle méthodes de résolutions de systèmes linéaire : itératif vs. Direct ?
 - ❑ pourquoi un solveur direct ? pourquoi MUMPS ?



Résultats HYPERION

Algorithme	Durée (s)	Détail des durées (s)	Norme
SOR	81.0		208.589587659663
MUMPS	5.20	CPU lecture matrice : 1.35 CPU MUMPS « Analyse » : 1.67 CPU MUMPS « Facto. LU » : 1.31 CPU MUMPS Solution : 0.204 CPU vecteur vers matrice : 4.04×10^{-3}	208.589456577209

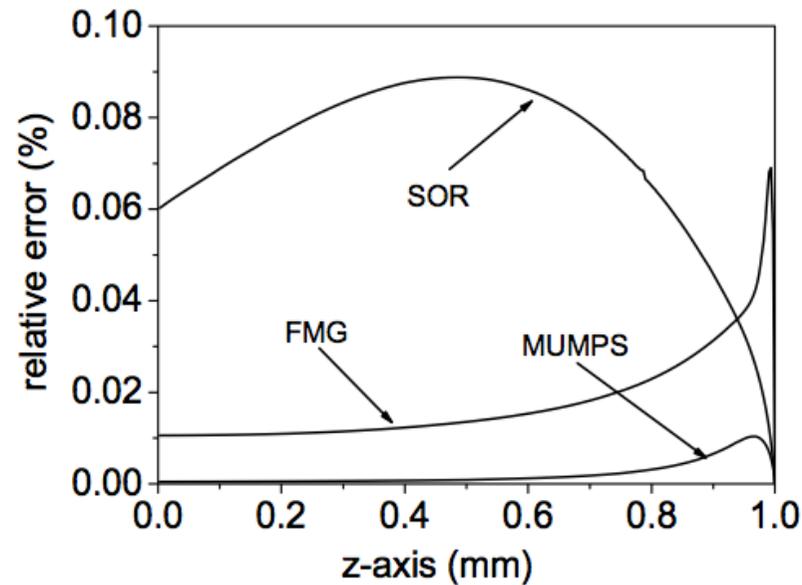


Figure 4: Relative error between the analytic and the FMG, SOR and MUMPS solutions along the z- axis.

Solveur Direct (MUMPS) : + rapide, + précis

Exemple collaboration CALMIP/ Physique des plasmas

Perspectives

Besoin utilisateur :

- Vers le full 3D
- + valoriser la collaboration

développement code STREAMER :

- passage code MPI 2D axis à un code MPI 3D
- code Hybride : Explorer la pertinence MPI +OMP

Mésocentre CALMIP collaborations

❑ Conclusions

❑ Différents modes de collaborations :

- ❑ s'adapter aux besoins

- ❑ spectre utilisateur large

- ❑ structuration des labos

- ❑ nature différente d'une interaction labo-labo

- ❑ ... vers une mise en relation d'équipes de recherche

❑ Importance d'une Relation dans la durée :

- ❑ Proximité

- ❑ Confiance

- ❑ Force de proposition

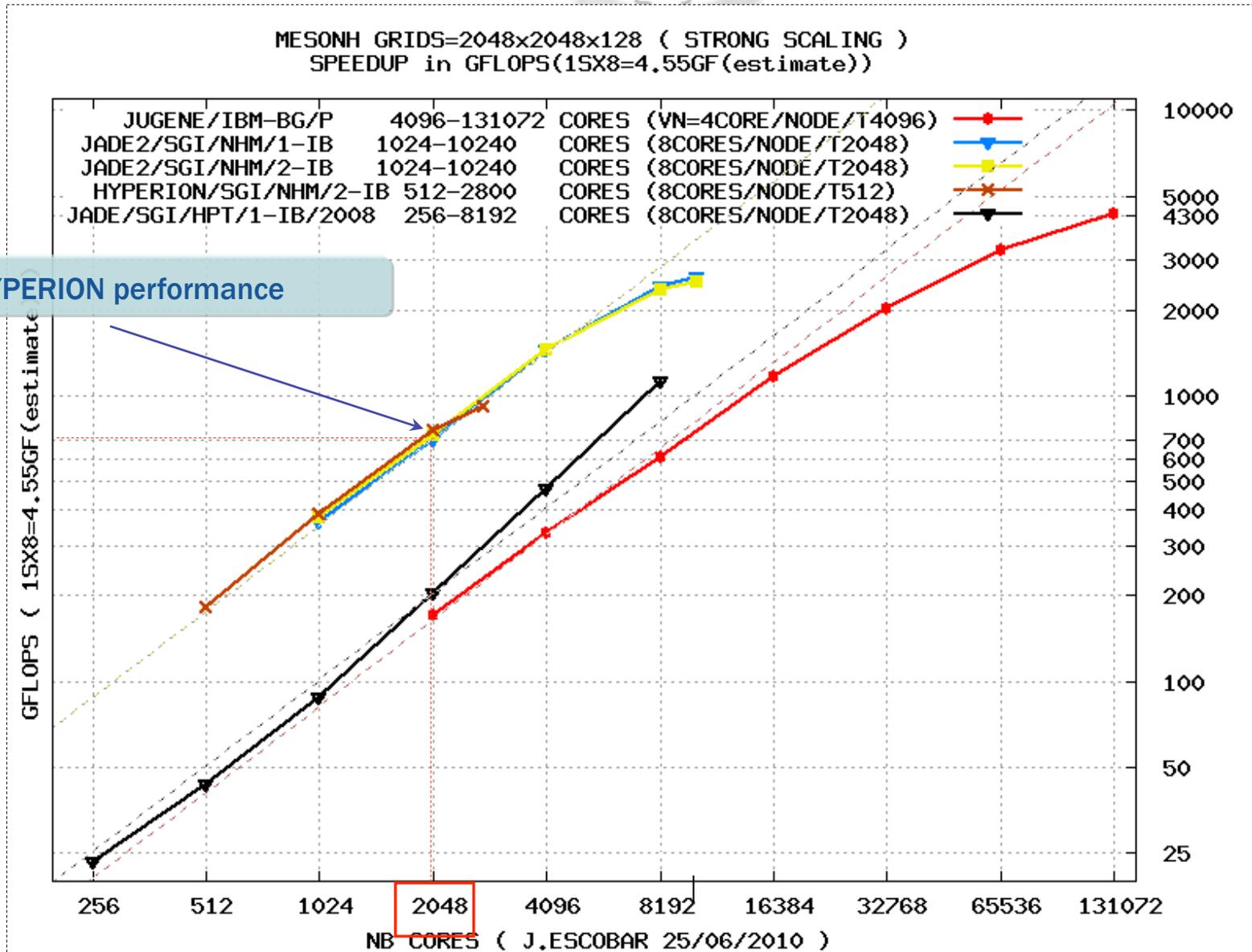
- ❑ Solveurs, Librairies, parallélisation Hybride, ...

❑ Comment + valoriser les collaborations ?

- ❑ citations ?

- ❑ co-auteur publication ?

- ❑ co-présentations/ séminaires ?



Courtesy of : JP Pinty & J. Escobar Laboratoire Aérodologie - Observatoire Midi-Pyrénées Université Paul Sabatier/ CNRS

❑ Exemple en Science du Vivant

❑ Etude de la fragmentation des populations

❑ On compte les poissons dans 2 rivières près de toulouse

❑ 12 000 h/cpu utilisées

❑ Traitement de données, Stat., code en C (Super !)



Chevaîne



Gandoise



Vairon



Code STREAMER : Equation du problème et Algorithme

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial n_s}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot n_s \vec{v}_s \left(\frac{E}{N} \right) = \sigma_s \left(\frac{E}{N} \right) \quad s = e, p, n \quad (1) \\ n_s \vec{v}_s = n_s \mu_s \left(\frac{E}{N} \right) \vec{E} - D_s \left(\frac{E}{N} \right) \vec{\nabla} n_s \quad s = e, p, n \quad (2) \\ \Delta V = \frac{q_e}{\epsilon_0} (n_p - n_e - n_n) \quad (3) \\ \vec{E} = -\vec{\nabla} V \quad (4) \end{array} \right.$$

Bilan particule pour chaque espèce (equation de transport ou equation de continuité)

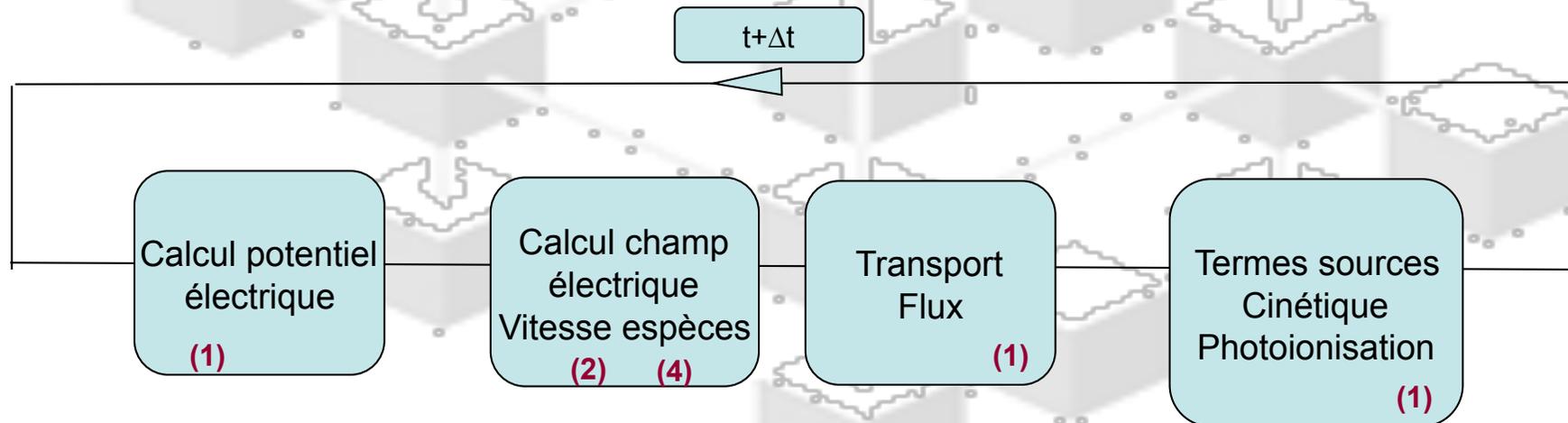
Approximation dérive-diffusion du transport de la quantité de mouvement

Equation de poisson calcul potentiel électrique

Relation champ-potential électrique

Domaine Ω semi-infini => condition dirichlet (plan) + Neuman (gradient nul)

Discrétisation Volume fini (2D axis) /Schéma en temps explicite



Stratégie de développement et de collaboration avec CALMIP : exemple du code JADIM

Annaïg Pédrone

Ingénieur d'Etudes en Calcul Scientifique - Service CoSiNus
Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse

4èmes journées mésocentres - 20 septembre 2011



Contexte

L'IMFT

Le service Cosinus

Le code JADIM

Présentation du code

Historique

Performances

Collaboration avec CALMIP

Intérêts pour l'IMFT

Intérêts pour CALMIP



L'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse

- ▶ 200 personnes dont 80 permanents
- ▶ 6 groupes de recherche
- ▶ 6 services d'intérêt général
- ▶ activités expérimentales et numériques (environ 50%-50%)



Le service CoSiNus

- ▶ Codes de calcul et Simulations Numériques : 4 ingénieurs en Calcul Scientifique (2IR, 2IE)
- ▶ activité "système et réseaux" assurée par un service informatique indépendant (4 à 5 personnes).
- ▶ mission principale : assurer le développement et le support d'outils de simulation et/ou de traitement numérique en mécanique des fluides pour l'ensemble du laboratoire.



Matériel informatique

- ▶ au niveau du laboratoire, quelques serveurs multi-processeurs pour le développement
- ▶ un parc uniforme (Linux Suse)
- ▶ pas de cluster de calcul (trop de contraintes : réseau électrique, climatisation et surtout administration + support technique...)
- ▶ exploitation des codes sur les centres de calcul CALMIP, CINES, IDRIS (heures de calcul + support technique)



Le code JADIM

JADIM : un code de calcul Volumes Finis pour simuler des écoulements incompressibles

- ▶ code recherche développé à l'IMFT depuis le début des années 90
- ▶ maillage structuré, orthogonal, cartésien ou curviligne
- ▶ turbulence (LES), multiphasique (VOF), suivi Lagrangien de particules, transfert thermique et réactif, IBM, FCM, ...
- ▶ une vingtaine de développeurs répartis sur 2 laboratoires (IMFT, Laboratoire de Génie Chimique)
- ▶ fortran 90
- ▶ parallélisation par décomposition de domaines (MPI)
- ▶ résolution de systèmes linéaires avec PETSc



Algorithme de résolution du solveur Navier-Stockes

Algorithme du code JADIM pour un maillage de n^3 cellules :

- ▶ initialisation
- ▶ boucle temporelle
 - ▶ intégration temporelle Runge-Kutta pour le calcul des vitesses (3 itérations) incluant une résolution semi-implicite des termes visqueux (schéma Cranck-Nicholson) : méthode ADI suivant les directions du maillage $3 \times n$ systèmes linéaires en n^2
 - ▶ méthode de projection pour la pression : un système linéaire creux (Poisson) $7 * n^3$ coefficients non nuls
- ▶ écriture des résultats (MPI-IO ou 1 binaire/processeur)



Historique (1)

- ▶ 2004 - JADIM séquentiel en fortran 77 (plusieurs versions du code par doctorants)
Passage en fortran 90, utilisation de CVS et fusion des versions existantes pour une version unique de référence
Exécution automatique (scripts unix) de tests de non-régression à chaque modification du code.



Historique (1)

- ▶ 2004 - JADIM séquentiel en fortran 77 (plusieurs versions du code par doctorants)
Passage en fortran 90, utilisation de CVS et fusion des versions existantes pour une version unique de référence
Exécution automatique (scripts unix) de tests de non-régression à chaque modification du code.
- ▶ 2004 - utilisation du solver MUMPS



Historique (1)

- ▶ 2004 - JADIM séquentiel en fortran 77 (plusieurs versions du code par doctorants)
Passage en fortran 90, utilisation de CVS et fusion des versions existantes pour une version unique de référence
Exécution automatique (scripts unix) de tests de non-régression à chaque modification du code.
- ▶ 2004 - utilisation du solver MUMPS
- ▶ 2005 - 1 calcul séquentiel, 96G de RAM sur l'Altix Itanium2 de Calmip!!! -> parallélisation MPI de la simulation des grandes échelles



Historique (2)

- ▶ 2007 - utilisation de PETSc pour résoudre la pression + parallélisation d'une grande partie du code (16 processeurs sur Altix Itanium 2)



Historique (2)

- ▶ 2007 - utilisation de PETSc pour résoudre la pression + parallélisation d'une grande partie du code (16 processeurs sur Altix Itanium 2)
- ▶ janvier 2009 - 512 coeurs pour la campagne de renouvellement (bench CALMIP)



Historique (2)

- ▶ 2007 - utilisation de PETSc pour résoudre la pression + parallélisation d'une grande partie du code (16 processeurs sur Altix Itanium 2)
- ▶ janvier 2009 - 512 coeurs pour la campagne de renouvellement (bench CALMIP)
- ▶ printemps 2009 - 2048 coeurs sur jade

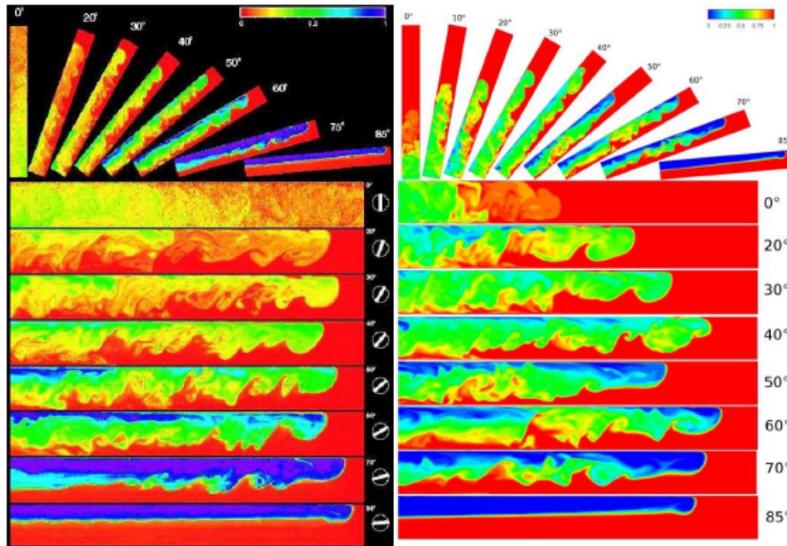


Historique (2)

- ▶ 2007 - utilisation de PETSc pour résoudre la pression + parallélisation d'une grande partie du code (16 processeurs sur Altix Itanium 2)
- ▶ janvier 2009 - 512 coeurs pour la campagne de renouvellement (bench CALMIP)
- ▶ printemps 2009 - 2048 coeurs sur jade
- ▶ intégration continue et parallélisation de nouveaux modules : viscoélasticité, couplage inverse pour les particules, ... (250 révisions Subversion depuis janvier 2011)



Courants de gravité en tubes inclinés (3D)

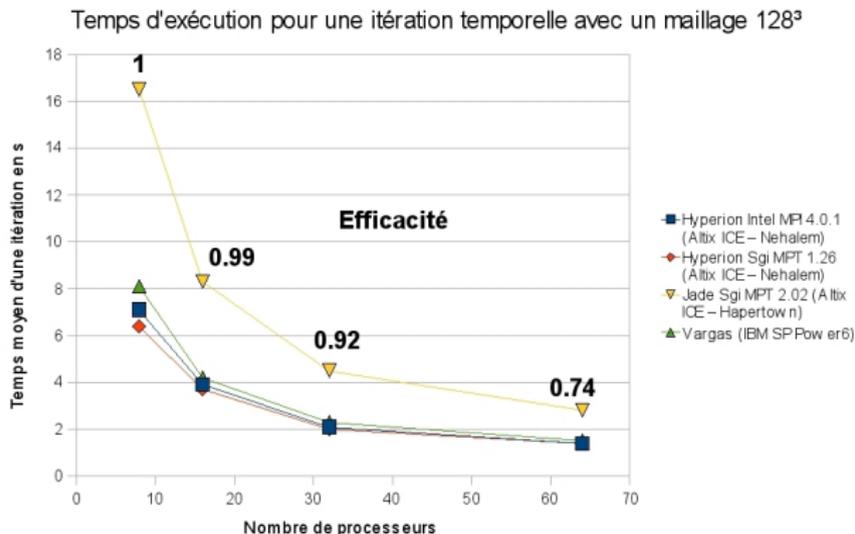


Expériences FAST/simulations IMFT - Y. Hallez
51 millions de cellules sur 1920 coeurs

Utilisation "standard"

Sondage septembre
 2011 (14 réponses)

Procs	Nb utilisateurs
1	12
2 - 8	13
8 - 32	8
64 et +	2



Interactions avec CALMIP

- ▶ développement, optimisation et parallélisation réalisés par l'IMFT et le LGC
- ▶ participation aux formations organisées par CALMIP (formation constructeur, visualisation, HMPP, ...)
- ▶ proximité permettant assistance ponctuelle et formation à la demande (ex : débogueur Alinéa DDT)
- ▶ support réactif
- ▶ un mode de fonctionnement souple (queue dédiée pour faire des tests, possibilité d'avoir 500h à la volée)



CALMIP : une source de motivation

- ▶ des ressources importantes pour l'IMFT :
 - ▶ 2009 - 450 mille heures demandées par l'IMFT (dont 80 000 heures pour le code JADIM)
 - ▶ 2010 - 1,7 millions d'heures demandées par l'IMFT (dont 250 000 heures pour le code JADIM)
 - ▶ 2011 - 3,9 millions d'heures demandées (dont 500 000 heures pour le code JADIM)
- ▶ conseils et expertise sur les outils du calcul scientifique (PETSc)
- ▶ tremplin vers les centres nationaux :
 - ▶ dossiers de demandes d'heures mieux justifiées (évaluation préalable des performances)
 - ▶ portage aisé au CINES (super-calculateur similaire)



Participation à la campagne de renouvellement en janvier 2009

- ▶ Le code JADIM a fait partie des 11 codes testés par les 6 constructeurs ayant répondu à l'appel d'offre
- ▶ Préparation de 3 cas de calcul -> du séquentiel à 512 processeurs
- ▶ Présence d'une demi-journée chez chaque constructeur
- ▶ Support du constructeur à l'issue des tests pour optimiser le code



Un relai "expert" dans un laboratoire

- ▶ beta-testeur après des mises à jour de la machine
- ▶ retour sur des dysfonctionnements
- ▶ filtre entre les utilisateurs finaux et le centre de calcul
- ▶ formation interne au calcul et incitation à suivre les formations proposées par CALMIP
- ▶ relation de proximité et de confiance



Mésocentre CALMIP collaborations

Conclusions

Différents modes de collaborations :

- s'adapter aux besoins
 - spectre utilisateur large
 - structuration des labos

nature différente d'une interaction labo-labo

... vers une mise en relation d'équipes de recherche

Importance d'une Relation dans la durée :

Proximité

Confiance

Force de proposition

Solveurs, Librairies, parallélisation Hybride, ...

Comment + valoriser les collaborations ?

citations ?

co-auteur publication ?

co-présentations/ séminaires ?