

SOMMAIRE

Forums ORAP

Le HPC en France : ça bouge !
Le CNRS crée un Institut des grilles
10 ans de calcul parallèle à Strasbourg
Simulation et connaissance de l'Univers
EDF évalue Blue Gene/L
Nouveaux systèmes HPC chez nos voisins
La NSF finance un système de 10 PetaFlops
Lire, visiter, participer
Nouvelles brèves
Agenda

Forums ORAP

Le 22ème Forum aura lieu le 29 novembre 2007 à Strasbourg. L'un des objectifs du choix de ce lieu est l'ouverture vers les communautés scientifiques et industrielles des pays européens. Les thèmes retenus sont les suivants :

- Nouveaux paradigmes de programmation pour les applications pétaflopiques
- Visualisation scientifique et analyse des résultats

Rappelons que la participation aux forums d'ORAP est gratuite mais l'inscription est obligatoire, pour des raisons d'organisation. Le programme, les informations pratiques et le formulaire d'inscription sont disponibles sur le site ORAP :

<http://www.irisa.fr/orap>

Informations complémentaires :
Chantal Le Tonquéze
chantal.letonqueze@irisa.fr

Le HPC en France : ça bouge !

La position de la France dans le domaine du calcul de haute performance s'est constamment dégradée depuis près de dix ans, ceci par manque de volonté politique ou de « pilote ». Ceci a été souligné par divers rapports, les derniers étant le livre marquant le 10^{ème} anniversaire d'ORAP en 2004, le rapport « *La politique Française dans le domaine du calcul scien-*

tifique » rédigé par Emmanuel Sartorius et Michel Héon, à la demande du Ministre chargé de la recherche (mars 2005), ou encore le rapport du groupe de travail "Simulation" de l'Académie des technologies : "Enquête sur les frontières de la simulation numérique : la situation en France et dans le monde ; diagnostic et propositions" (mai 2005).

Si l'on se réfère au TOP500, classement des plus grands systèmes installés dans le monde, le classement de novembre 2003 ne citait que deux sites « académiques » français : l'IDRIS en 264^{ème} position et le CINES en 349. En novembre 2004, nous n'avons plus qu'un seul système. Depuis novembre 2005, aucun système destiné à la communauté scientifique académique française n'apparaît dans le TOP500, alors que les principaux pays européens ont poursuivi le renforcement des grands systèmes de calcul scientifique.

Cette dégradation des grands moyens de calcul n'a pas empêché le développement d'actions incitatives destinées à la recherche : actions concertées incitatives, dont l'ACI GRID (Globalisation des Ressources Informatiques et des Données) lancée en 2001 et l'initiative GRID5000, les programmes de recherche « Calcul intensif et grilles de calcul » et « Calcul intensif et simulation » lancés par l'Agence nationale de la recherche depuis 2005.

Deux ans après la publication du « rapport Héon-Sartorius », les premières actions destinées à offrir à la communauté scientifique académique les moyens qu'elle réclame se mettent en place et elles ont été présentées le 27 septembre à Paris par Catherine Rivière et Alain Lichniewsky dans le cadre de la première rencontre¹ GENCI-ORAP.

GENCI

GENCI (« Grand Equipement National de Calcul Intensif ») est une société civile créée en 2007 par quatre associés : le Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche (50%), le CEA (20%), le CNRS (20%) et les universités (10%). Son budget est de 25 millions d'euros par an pendant quatre ans.

Les principales missions de GENCI sont :

- Promouvoir la simulation et le calcul intensif dans la recherche fondamentale et industrielle,
- Promouvoir l'organisation d'un espace européen du calcul intensif,
- Mettre en place et assurer la coordination des principaux équipements des grands centres na-

¹ Les supports des présentations sont disponibles sur le site ORAP

tionaux civils dont elle assure le financement et dont elle est propriétaire.

GENCI aura donc un rôle de « maître d'ouvrage » permettant l'acquisition coordonnée des équipements de trois centres nationaux : IDRIS (Orsay), CINES (Montpellier) et CCRT (Bruyères le Châtel). GENCI mettra en place, dès 2009, une procédure unifiée d'attribution d'heures de calcul sur ces trois centres (2008 sera une période de transition basée sur la procédure existant déjà pour l'IDRIS et le CINES).

La première opération lancée par GENCI est le renouvellement des matériels du CINES (Centre informatique national de l'enseignement supérieur) à Montpellier. Un système de 50 TFlops, au minimum, devrait être installé à la fin du deuxième trimestre 2008, pour être opérationnel en septembre 2008.

Comité stratégique du calcul intensif

Un arrêté² du 28 juin a créé, auprès du ministre chargé de l'enseignement supérieur et de la recherche, le **comité stratégique du calcul intensif**. Il est chargé de conduire des études et des réflexions ainsi que de formuler des propositions sur l'organisation et le renouvellement des équipements de calcul intensif. Il examine les mesures permettant l'utilisation optimale de ces équipements en tenant compte notamment des activités de recherche et des besoins de la communauté scientifique. Il étudie les questions relatives à la participation française aux programmes internationaux utilisant l'infrastructure de calcul intensif et la simulation numérique ou portant sur ces domaines. Il aura donc un rôle important vis-à-vis des actions de GENCI.

Composé de 21 membres, il est présidé par Olivier Pironneau.

PACE

Le « Partnership for Advanced Computing in Europe » avait été présenté dans le précédent numéro de Bi-ORAP. Il fait suite aux travaux et rapports de plusieurs groupes, dont l'ESFRI (*European Strategy Forum for Research Infrastructure*). Son objectif est de créer, dès 2010, une infrastructure pérenne pan européenne de calcul intensif, composée de 3 à 5 centres disposant de moyens de haute performance (de l'ordre du Pflops), ayant une structure et une personnalité morale permettant une gouvernance et un pilotage appropriés. Parmi les 14 pays associés dans ce projet, 5 (Allemagne, Espagne, France, Pays-Bas, Royaume Uni) sont candidats à accueillir un centre « pétaflopique » (mais ces pays devront confirmer leur engagement financier en 2008 !).

La phase préparatoire, « PRACE », a fait l'objet d'un projet déposé le 2 mai 2007 dans le cadre du programme européen « Capacités ».

GENCI est le représentant français dans cette initiative européenne.

Jean-Loïc Delhaye

²<http://www.admi.net/jo/20070712/ESRR0757401A.html>

Le CNRS crée un Institut des grilles

Le CNRS vient de créer l'Institut des grilles pour fédérer l'ensemble de ses actions dans ce domaine dont l'importance est reconnue par tous. Plus de 15 laboratoires du CNRS et deux instituts nationaux y participent. L'objectif est de consolider les infrastructures existantes dans le domaine des grilles de calcul, de renforcer la recherche sur ce thème et d'augmenter la synergie entre les différents acteurs.

Cette action s'intègre dans une démarche plus générale de mise à disposition de moyens de calcul extrêmement puissants au service des communautés scientifiques. L'Institut des grilles est une unité propre du CNRS (UPS3107) rattachée au département MPPU ; il est dirigé par Guy Wormser.

<http://www.idgrilles.fr>

10 ans de calcul parallèle à Strasbourg

Introduction

Depuis 1997, un centre de compétences en calcul parallèle met à disposition des ressources de calcul et fédère une communauté d'utilisateurs utilisateurs de puissance de calcul (chimistes, physiciens, mécaniciens, mathématiciens). Cet article fait le point sur 10 ans de fonctionnement, présente l'état actuel du centre et ébauche des perspectives d'avenir.

1 - Passé : de la mise en œuvre à la structuration

1.1 – Au tout début ...

Une des missions de Guy-René Perrin lors de sa nomination sur un poste de professeur à l'Université Louis Pasteur (ULP) était de mettre en place une opération d'achat d'équipement de calcul parallèle. Cela a débouché en 1997 sur l'installation d'une Origin 2000 à 32 processeurs R10000@195MHz, 4GO de RAM. Trois ans après, cette machine s'est vue ajouter 20 processeurs (R12000@300MHz) et 16 GO de Ram (Figure ci-dessous). La machine sera utilisée jusqu'à fin 2003.



Fig. 1 : Origin2000 en l'an ... 2000

Un ingénieur, recruté successivement sur différents types de contrats (droit privé, fonctionnaire contractuel puis titulaire) est chargé du travail de développement d'applications et du service aux utilisateurs.

Très utilisée dès sa mise en production, la machine est perçue comme la machine de l'ICPS (l'équipe de recherche accueillant les budgets, le responsable scientifique). Une meilleure visibilité étant nécessaire, un Programme Pluri-Formations donne en 2001 un cadre formel à ce qui s'appelle désormais le CECP (Centre d'Études du Calcul Parallèle). Les budgets ne sont pas encore séparés de ceux de l'équipe de recherche. Ils le seront à partir de 2003, dès lors que la responsabilité scientifique sera assurée par Éric Sonnendrücker. Le CECP est à partir de ce moment-là un service rattaché à l'UFR de Mathématiques et d'Informatique de l'ULP.

1.2 – Cap sur la visualisation

En 2001, afin de mettre à disposition un équipement incitatif permettant de développer les activités de visualisation scientifique et de recherche en infographie, un plan de travail virtuel Barco à 2 écrans est installé (voir figure ci-dessous). Relié à l'Origin2000 encore en place, il sert de support à de nombreuses thèses. Les performances des *pipes graphiques* (IR2) devenues plus que modestes face à la puissance croissantes des cartes graphiques grand public conduisent à une remise à niveau des machines reliées à l'holobench.



Fig. 2 : Plan de travail virtuel (photo Barco)

L'engouement pour ce dispositif se manifeste principalement en recherche. À ce titre, de nombreux dispositifs de capture de mouvement et de retour d'effort ont été acquis sur fonds propres par les équipes utilisant l'équipement. Des partenariats avec l'industrie ont également été noués à ce moment-là, en particulier avec la société Ar-Tracking.

Pour afficher clairement cette vocation, le CECP devient le CECPV (Centre d'Études du Calcul Parallèle et de la Visualisation).

2 – Présent : choix des clusters

2.1 – Un cluster par le CPER

En 2003, une deuxième phase du Contrat de Plan État-Région alors en cours prévoyait le renouvellement des équipements de calcul de l'ULP. Cela s'est traduit par l'acquisition de 60 processeurs Itanium 2@1300Mhz, 8GO de RAM, réseau d'interconnexion Myrinet 2000, 1TO d'espace disque partagé.



Fig. 3 : cluster en 2003

La transition entre une machine Numa comme l'Origin 2000 et ce cluster a été rendue simple et possible par le fait que l'ensemble des applications tournant sur l'Origin 2000 utilisaient MPI.

2.2 – Deux clusters mutualisés

La nouvelle machine du CECPV a permis de mettre à disposition des laboratoires de l'ULP une puissance de calcul parallèle de proximité. Cette puissance a le double avantage pour les utilisateurs d'être totalement gratuite et administrée par le CECPV. L'inconvénient est de ne pas toujours être disponible immédiatement. Par contre, le fait que cette machine soit un cluster a rendu possible un nouveau mode d'utilisation encore plus souple.

En effet, pour étendre un cluster, il "suffit" d'y ajouter un nœud, d'un prix unitaire modique. Ce constat est à la base du projet de mutualisation, qui a permis de doubler la puissance de calcul disponible. Dans ce projet, des laboratoires ajoutent des machines dans un cluster mutualisé au fur et à mesure de leurs possibilités financières. L'opération de mutualisation est présentée dans Bi-Orap n° 47 et plus en détail

dans les Journées Réseaux (JRES) 2007. Elle s'est soldée par l'ajout de :

- 32 nœuds bi-opteron à 2.4 GHz, 4GO de Ram, Myrinet
- 17 nœuds Athlon 64 dual-core, 2GO de Ram, Gigabit Ethernet

Ces clusters sont ouverts à toute la communauté. Les laboratoires y ayant contribué financièrement disposent de fortes priorités sur les systèmes de files d'attente. Ils ont ainsi accès avec un temps d'attente très court à un nombre de nœuds plus importants que ceux qu'ils ont financés et n'ont pas à se préoccuper de l'administration de la machine.

Après cette opération, le CECPV peut proposer 160 cœurs (dont 100 sont mutualisés) à la communauté, répartis en 3 clusters. Le taux de charge des machines avoisine les 80%, comme dans les grands centres nationaux. Des collaborations portant sur le développement d'applications parallèles sont en place depuis de nombreuses années entre différentes équipes de recherche et le CECPV.

2.3 – Matériel et logiciels de visualisation

Le plan de travail virtuel présenté plus haut est relié à un petit cluster graphique de PC bi-processeurs. Les vidéo-projecteurs intégrés au plan de travail virtuel sont en cours de migration vers une technologie tri-DLP.

Au niveau applicatif, la bibliothèque VrJuggler est utilisée pour décrire la configuration des deux écrans du workbench et pour distribuer le rendu sur les nœuds du cluster. En dehors des travaux de recherche, des applications comme VMD (visualisation de dynamique moléculaire), adaptées à VrJuggler sont utilisées occasionnellement par les chercheurs.

Une adaptation du logiciel ParaView est actuellement en cours afin de le rendre opérationnel sur le plan de travail virtuel dans le but de proposer une application de visualisation scientifique généraliste.

2.4 – Structure administrative du CECPV

Le CECPV est actuellement dirigé par Éric Sonnendrücker, professeur en mathématiques à l'ULP, spécialisé en calcul scientifique. Il dispose, de plus, de 2 ingénieurs. Responsable technique du CECPV, Romaric David, ingénieur de recherche, est chargé plus particulièrement des aspects calcul parallèle. Thiébaud Mochel, ingénieur d'études est quant à lui chargé de la visualisation, en particulier du développement d'applications.

Le CECPV organise régulièrement des formations sur des outils logiciels associés à ses équipements. Il vient également en aide aux utilisateurs intéressés par la parallélisation ou le portage de codes.

3 – Futur : quel avenir pour le CECPV ?

Le CECPV a maintenant trouvé un mode de fonctionnement de centre de ressources de proximité, au niveau d'une université de bonne taille, qui semble donner satisfaction aux utilisateurs.

Ce mode de fonctionnement repose au niveau matériel sur l'existence d'une infrastructure et d'un nombre suffisamment important de processeurs - acquis sur des ressources centrales - pour qu'il soit intéres-

sant pour les utilisateurs de s'y rattacher en contribuant au coût des nœuds.

Un autre atout du CECPV est de disposer d'ingénieurs compétents et accessibles, ce qui d'une part soulage les chercheurs de toutes les tâches lourdes d'administration et d'autre part les aide à porter leurs applications sur les matériels du centre.

La proximité géographique est évidemment essentielle pour cette tâche, qui permet à de nombreux utilisateurs de franchir le premier pas vers la parallélisation ou la visualisation immersive avant de se diriger vers les centres nationaux.

Nous pouvons donc d'ores et déjà nous donner rendez-vous dans dix ans pour un nouveau bilan des activités du CECPV !

Romaric David, Éric Sonnendrücker

La simulation numérique repousse les limites de la connaissance de l'Univers

Une équipe de chercheurs français, sous la direction de Romain Teyssier, astrophysicien au CEA, a mené à terme, dans le cadre du « Projet Horizon »³, la plus grande simulation jamais réalisée de la formation des structures de l'Univers. Cette simulation s'est appuyée sur le nouveau supercalculateur BULL du Centre de Calcul Recherche et Technologie (CCRT).

En astrophysique, la résolution des équations de la mécanique des fluides autogravitants à l'aide d'algorithmes toujours plus efficaces et sur des supercalculateurs toujours plus puissants permet de modéliser la formation des structures de l'univers. « *Partant des "conditions initiales" de notre univers, que l'on peut observer directement sur le rayonnement fossile à 3 degrés K, il est possible de suivre les trajectoires individuelles d'un grand nombre de particules qui servent à décrire le fluide cosmologique* », explique Romain Teyssier.

Avec près de 70 milliards de particules et plus de 140 milliards de mailles, le calcul réalisé au CCRT représente le record absolu pour un système à N corps (ensemble de points matériels, ou "particules" qui subissent leur attraction gravitationnelle mutuelle) modélisé par ordinateur.

Pour simuler un tel volume avec autant de détails, les membres du Projet Horizon ont utilisé les 6144 processeurs Intel Itanium2® du calculateur BULL NovaScale 3045 récemment installé au CCRT pour faire fonctionner à plein régime le programme « RAMSES », développé au CEA en collaboration avec les astrophysiciens du Projet Horizon.

³ <http://www.projet-horizon.fr/rubrique3.html>

Le Calcul Massivement Parallèle à EDF R&D

Premiers retours d'utilisation de la machine *Frontier* BG/L

Jean-Yves Berthou, EDF R&D

1. Introduction

Plusieurs rapports récents confirment la prise de conscience mondiale que la simulation très hautes performances ouvre des perspectives entièrement nouvelles, non seulement aux métiers de la recherche mais aussi à un large spectre d'activités industrielles et de service. Pour un opérateur comme EDF, la simulation HPC représente un outil de compétitivité permettant, dans un environnement sans cesse plus complexe, de prendre de meilleures décisions d'exploitation et d'investissement tout en continuant à maîtriser le risque, qu'il soit technique ou financier. Les nouvelles capacités prédictives des modèles, leur aptitude croissante à compléter et à démultiplier la valeur des informations fournies par les mesures et l'expérimentation, la capacité des nouvelles classes de calculateurs à explorer des milliers ou des millions de scénarios constituent autant d'opportunités de création de valeur.

C'est dans cette perspective que EDF R&D a acquis à l'automne 2006 une machine IBM BG/L, que nous appelons *Frontier*, composée de 4096 processeurs, répartis sur 2048 nœuds de calcul disposant chacun de 1 Go de mémoire. Cette configuration a été doublée début 2007 ce qui en a fait, avec une puissance crête de 22,9 Tflops et 18,6 Tflops Linpack, la machine la plus puissante au monde dans la catégorie *Industry* du dernier TOP 500 de juin 2007.

Cette acquisition avait pour double objectif de permettre à court terme des calculs en rupture ayant un fort impact pour les métiers de l'entreprise et de préparer les codes et plus généralement les plates-formes de simulation à l'arrivée des machines Petaflopiques qui seront composées de plusieurs centaines de milliers de processeurs.

Quel bilan tirons-nous de ces premiers 9 mois d'utilisation de la machine *Frontier* ?

Les domaines des matériaux et de la thermohydraulique ont montré les premiers résultats de simulation obtenus sur des configurations allant de 1000 à 8000 processeurs. De telles puissances de calcul, de 10 à 100 fois plus importantes que ce à quoi les chercheurs de la R&D avaient accès il y a moins d'un an, ouvrent de nouvelles perspectives pour nos métiers. Ainsi une première simulation des écoulements dans un assemblage combustible prenant en compte la géométrie réelle d'une grille de mélange est en cours de réalisation. Ce calcul, sur 100 millions de cellules, a des retombées directes pour l'ingénierie nucléaire, pour l'étude du comportement vibratoire des assemblages combustibles. Il consommera de l'ordre de 6 millions d'heures.cpu.

Dans le domaine des matériaux, les chercheurs réalisent aujourd'hui quotidiennement des simulations à l'échelle atomique des dommages d'irradiation des matériaux de structure sur 1000 processeurs. Ce type de simulation, très gourmand en puissance de calcul, consomme de l'ordre de 20 millions d'heures.cpu, soit près de 2000 ans de calcul sur un ordinateur de bureau.

Nous présentons dans la suite de cet article le retour d'expérience et les perspectives du calcul massivement parallèle sur la machine *Frontier* dans quelques domaines puis nous concluons sur les défis scientifiques et techniques que nous devons relever pour transformer ces premiers résultats en bénéfices durables. La description technique de la machine *Frontier* est donnée en annexe.

2. Premiers retours d'expériences sur la machine *Frontier* BG/L

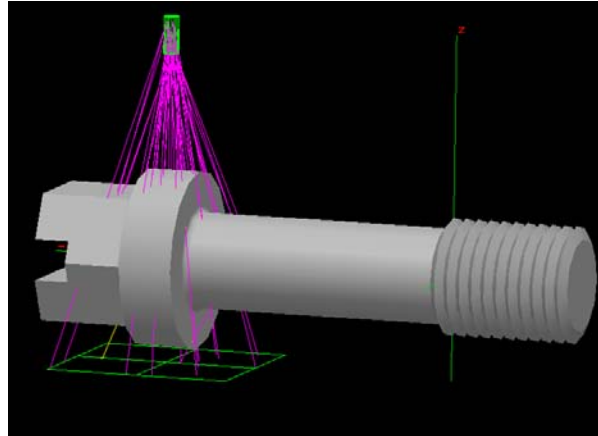
2.1 Contrôle non destructif

Thierry Fouquet, Véronique Duwig, Andréas Schumm, EDF R&D/SINETICS.

Le code *Moderato* simule un contrôle radiographique pour l'inspection en service des centrales. Il est principalement utilisé pour la qualification des procédures de contrôle, afin de démontrer leur performance, et permet également la mise au point et l'optimisation des procédures. Il constitue une aide à la compréhension des phénomènes physiques observés dans la réalité.

Le transport de particules (photons) est simulé par une méthode de Monte Carlo. Les particules sont indépendantes, ce qui permet une parallélisation « naturelle » du code. Les particules simulées peuvent soit traverser la pièce sans collision, soit être absorbées, soit être diffusées. Un encaissement enregistre les photons à leur arrivée sur le film.

Le rapport entre rayonnement direct et rayonnement diffusé est une donnée caractéristique pour une configuration donnée, et constitue le résultat principal du calcul Monte Carlo. Dans la pratique, la cartographie de ce rapport est obtenue par un lissage à partir d'un calcul partiel (méthode d'extrapolation). Un calcul complet, qui nécessite 5.10^{16} photons, n'est pas réalisable aujourd'hui. Il demanderait en effet plusieurs mois de calcul sur une machine Petaflopique.



Suivant la nature des pièces, le nombre de photons à envoyer, nécessaire pour obtenir une cartographie suffisamment convergée pour permettre une extrapolation par lissage, diffère énormément : pour une pièce de faible épaisseur, quelques dizaines de millions de photons peuvent s'avérer suffisants, tandis qu'une pièce épaisse nécessite au moins 150 milliards de photons.

L'utilisation du code Moderato sur la machine *Frontier* BG/L a permis plusieurs avancées en permettant des simulations jusqu'à un millier de processeurs. D'une part la méthode d'extrapolation (calcul réalisé avec 150 milliards de photons) a été validée par une simulation de cas de semi-référence nécessitant 1200 milliards de photons et 145 000 heures-cpu de calcul. D'autre part, des études sur la sensibilité de la source (ouverture du cône et nature) pour l'inspection des liaisons bimétalliques du circuit primaire des centrales nucléaires Françaises sont en cours. Ce dossier est un des plus lourds à traiter par simulation, du fait de l'exposition panoramique et de la forte épaisseur de la pièce. Il demandera également de l'ordre de 150 000 heures-cpu.

2.2 Simulation thermo-hydraulique au service de la productivité et de la sûreté du parc nucléaire

Yvan Fournier, Marc Sakiz, Ange Caruso EDF R&D/MFEE

Dans le domaine de la thermo-hydraulique, la modélisation numérique se positionne comme une approche complémentaire, voire alternative pour certaines applications, à la modélisation expérimentale. A EDF/R&D, son utilisation est croissante depuis de nombreuses années. Cette croissance est intimement liée à l'évolution des performances des moyens informatiques, des progrès réalisés sur la compréhension des phénomènes physiques mis en jeu et donc de leur modélisation. Concrètement, cela se traduit par la recherche d'informations de plus en plus fines, de plus en plus locales, souvent difficilement accessibles par l'approche expérimentale. Ces informations sont indispensables si on souhaite mieux maîtriser les conservatismes auparavant déterminés par l'approche expérimentale ou empirique.

L'optimisation du parc de production nucléaire ne peut désormais plus se passer de l'approche de modélisation numérique. Parmi les principales applications, on peut citer quelques exemples :

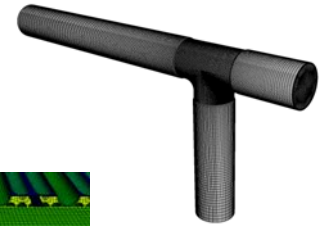
- la simulation des écoulements à travers les assemblages combustible d'une cuve de réacteur (estimation des efforts, tenue mécanique des composants -vibration et déformation-, influence de divers paramètres de fonctionnement, aide au design) ;
- la simulation des comportements incidentels de type réactivité du cœur (problématique de la dilution de bore dans le cœur) ou de choc froid sur cuve ;
- la simulation des phénomènes de fatigue thermique ;
- la simulation des écoulements dans les robinets des circuits hydrauliques.

Une caractéristique commune à l'ensemble de ces études est la nécessité de disposer de capacités calculatoires de plus en plus importantes. En effet, la détermination d'informations de plus en plus fines passe par l'utilisation de modèles de plus en plus sophistiqués (modélisation de la turbulence par exemple), de maillages (i.e. discrétisation des domaines de calculs) de plus en plus volumineux, qui se traduit concrètement par un nombre de degré de liberté de plus en plus important et d'un temps de calcul qui peut aujourd'hui aller de quelques minutes.....à quelques années !

Voici à travers quelques applications un historique des caractéristiques informatiques des études qui ne pouvaient pas être réalisées il y a encore quelques années.

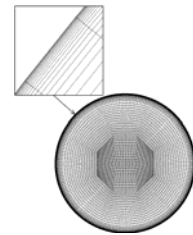
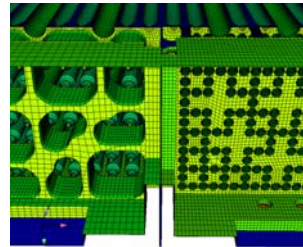
2003 fatigue thermique dans un piquage (10^6 cellules, 2 mois de calcul sur 1 processeur/4 du Fujitsu VPP 5000, de l'ordre de 1Go de stockage, 2 Go de mémoire, 3.10^{13} opérations)

→ *Meilleure compréhension du chargement thermique avec un piquage.*

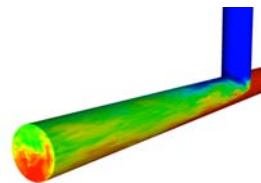


2004 : Assemblages combustibles (2.10^6 cellules, 4 jours de calcul sur 32 processeurs Alpha au CCRT)

→ *Meilleure compréhension de l'effet de l'embout sur l'écoulement en pied d'assemblage et de son influence sur le fretting*

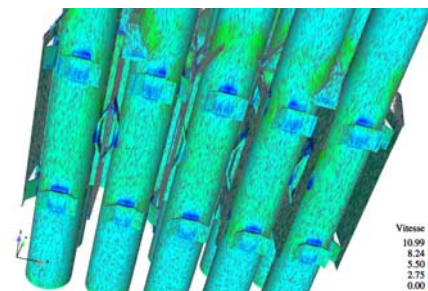


2006 : Amélioration de l'étude de la problématique de fatigue thermique, avec modèle de turbulence sophistiqué (LES), maillage raffiné en paroi (10^7 cellules, 9 jours de calcul sur 400 processeurs IBM Power 5, 15 Go de stockage, 25 Go de mémoire, 6.10^{14} opérations)



2007 : Partie d'un assemblage combustible, avec détail des grilles de mélange (10^8 cellules, 1 mois de calcul sur 8000 processeurs BG/L pour calcul instationnaire, 200 Go de stockage, 250 Go de mémoire distribuée, 60 Go de mémoire pour pré-traitement non encore parallèle, 10^{16} opérations)

→ *Meilleure compréhension de l'influence des grilles de mélange sur l'évaluation du chargement mécanique sur les crayons combustible.*



L'évolution de nos moyens de calcul vers le pétafloppique devrait nous permettre d'atteindre les cibles suivantes :

2010 : 9 assemblages combustibles (10^9 cellules, 1 mois machine avec 30 fois la puissance actuelle de la machine *Frontier* BG/L, 1 To de stockage, 2,5 To de mémoire distribuée, 10^{16} opérations)

→ *Permettra l'étude des interactions entre assemblages hétérogènes, très difficile à étudier de manière expérimentale avec des assemblages réels*

2015 : modélisation d'un cœur complet d'une cuve de réacteur (10^{10} cellules, 1 mois machine avec 500 fois la puissance actuelle de *Frontier* BG/L, soit 10 Ptflops, 10 To de stockage, 25 To de mémoire distribuée).

2.3 Simulation de phénomènes hydrauliques environnementaux

Estelle DESROCHES, Reza ISSA, EDF R&D/LNHE

Le Laboratoire National d'Hydraulique et Environnement (LNHE) développe depuis une quinzaine d'année des outils de simulation multidimensionnels dans le domaine des écoulements à surface libre et des écoulements souterrains. Ces outils, regroupés au sein du système TELEMAC, permettent de modéliser les principaux phénomènes hydrauliques environnementaux (marées, crues, vagues, transport de polluants, de sédiments dans les eaux de surface et souterraines...).

Pendant longtemps, les calculs ont essentiellement concerné des modèles de grande emprise bi-dimensionnels (bassin versant d'une rivière, océans...). Mais la tendance, ces dernières années, a été à la complexification des études :

- modélisation de problématiques locales tridimensionnelles (rejets de polluants, clapage de sédiments...)
- prise en compte de phénomènes physiques de formalisation mathématique complexe (turbulence / stratification, sillage...)
- intégration de géométries complexes dans les calculs d'écoulements à surface libre (évacuateurs de crue) ou souterrains (alvéoles, galeries d'un stockage de déchets nucléaires).

Les codes de la plate-forme TELEMAC et leur environnement ne cessent donc d'évoluer pour avoir recours à des moyens de calculs Haute Performance. Les principales perspectives de développement concernent :

1. Le **code eulérien TELEMAC-3D** destiné à la modélisation de l'hydraulique à surface libre tridimensionnelle et du transport de traceurs (chimique, thermique...).

Il est aujourd'hui particulièrement utilisé pour évaluer l'impact thermique des rejets des centrales nucléaires ou quantifier l'impact des rejets d'eau douce de la chaîne de la Durance sur la salinité de l'étang de Berre. Dans ce dernier cas, les calculs sont pour l'instant réalisés avec un modèle TELEMAC-3D simplifié (taille de mailles variant en horizontale de 10m à 1km et sur la verticale de 50cm à 1m donnant ainsi un maillage de l'ordre de 40000 mailles). Une simulation type d'une année physique nécessite de l'ordre 500000 pas de temps et une place mémoire de 2Go pour les fichiers résultats (sorties toutes les 3 heures). Pour tenir compte de la dynamique des marées, de la météo et du turbinage, on a recours à des simulations de plusieurs années (3 à 5 ans) et la durée de calculs sur 8 processeurs est de 5 jours.

Idéalement, les calculs devraient porter sur des modèles de quelques dizaines de millions de mailles pour des temps de restitution des calculs équivalents, voir inférieurs aux pratiques actuelles. Cela conduit à une estimation du volume de données à manipuler de l'ordre de 10 To et un nécessaire facteur d'accélération en temps de l'ordre de 250, ce que pourra fournir la machine *Frontier* BG/L. Le code TELEMAC a été porté sur *Frontier* et des travaux sont actuellement en cours pour optimiser la parallélisation.

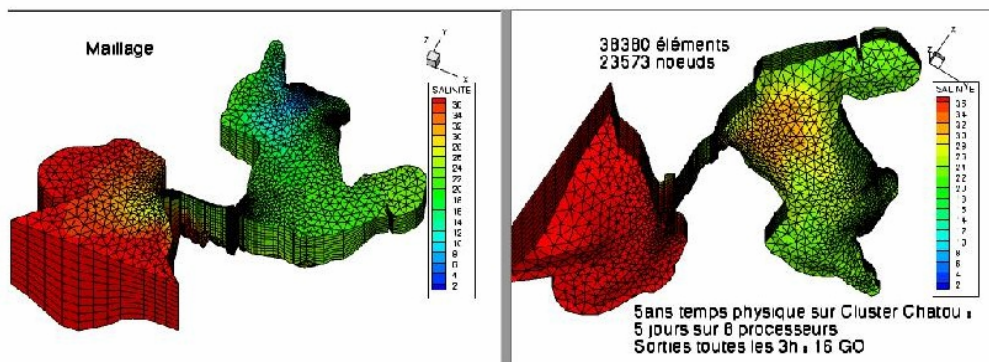
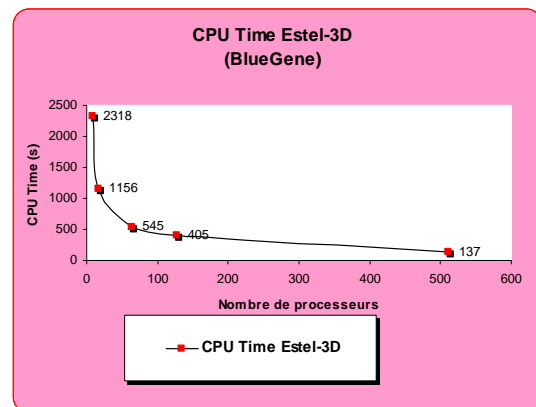


Figure 1 : Exemple de résultats de calculs obtenus pour l'étang de Berre

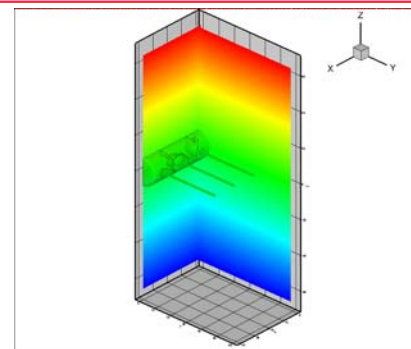
2. Le **code eulérien ESTEL-3D**, utilisé pour modéliser le transport des polluants dans les sous-sols et les nappes.

Il constitue un des maillons essentiels de la chaîne de calculs utilisée par EDF pour étudier avec l'ANDRA la problématique de tenue à long terme les stockages de déchets nucléaires. Les discussions en cours sur les architectures de stockages nécessitent de raffiner les calculs afin de mieux représenter le rôle des éléments ouvragés (alvéoles, galeries, bouchons) dans la sûreté du stockage. Les derniers calculs ont été réalisés sur des maillages de 10 millions de mailles.



Le portage sur *Frontier* BG/L a déjà permis de réduire les temps calculs de deux ordres de grandeur (calcul écoulements permanents).

Figure 2 : Performance du code ESTEL-3D sur BG/L – Calcul d'écoulement au niveau d'une alvéole de stockage →



3. Le **code lagrangien SPARTACUS-3D** destiné à la modélisation d'écoulements à surface libre complexe et des interactions fluide/structure

Le dimensionnement d'ouvrages de protection pour les centrales nucléaires tout comme l'optimisation de la géométrie d'évacuateurs de crue (figure ci-dessous) ou de passes à poissons pour les barrages nécessite de modéli-

ser des phénomènes à dynamique rapide et caractérisé par une surface libre complexe (ex : vagues déferlantes) et de mieux décrire les interactions fluide-structure.



Figure 3 : Vague déferlant sur une digue en enrochement (gauche) et modèle réduit d'un évacuateur de crue (droite).

Les techniques de simulation classiques (avec maillage) ne sont pas adaptées pour modéliser de telles phénomènes, le LNHE développe donc depuis 1999 un logiciel basé sur la méthode particulaire SPH (Smooth Particles Hydraulics), le logiciel SPARTACUS-3D. Le milieu considéré y est modélisé par des particules macroscopiques de matière : elles interagissent entre elles via des forces répulsives et sont déplacées à chaque pas de temps en fonction de l'impulsion reçue. La simulation d'une surface libre complexe devient alors moins problématique. En revanche, SPARTACUS-3D est très coûteux en temps calcul et ce malgré son architecture parallèle : la modélisation d'un évacuateur de crue nécessitant en moyenne 6 millions de particules, il faudrait 300 jours de calcul sur 32 processeurs d'un cluster classique pour simuler une minute de temps physique. Le portage sur *Frontier* BG/L ramènerait ce temps calcul à 1 jour en utilisant 8 000 processeurs. Actuellement, SPARTACUS-3D fonctionne sur BG/L mais n'exploite pas au mieux les capacités de la machine pour des raisons de mémoire requise : des modifications de la structure du code sont actuellement en cours et devraient conduire prochainement à une utilisation optimale, notamment en termes de speed-up et de nombre de particules.

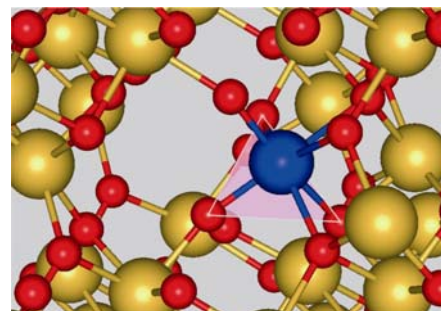
2.4 Apport de Blue Gene en simulation des matériaux : calculs *ab initio*

C. Domain, P. Olsson, G. Bencteux, EDF R&D/MCC-SINETICS

EDF mène des études sur le vieillissement des composants tels que la cuve, les internes de cuve ou encore les gaines des crayons combustibles des centrales afin d'anticiper les effets de leur usure à moyen terme. L'évolution des propriétés macroscopiques des matériaux, telles que les propriétés mécaniques requièrent la connaissance de l'évolution de la microstructure. La simulation et la prédiction de l'évolution de celle-ci à moyen et long terme sont basées sur les mécanismes physiques élémentaires.

Sous irradiation, des défauts ponctuels (lacune et interstitiels) se forment sous l'impact des neutrons, ceux-ci diffusent et/ou s'agglomèrent en amas et peuvent conduire à la formation d'amas d'éléments chimiques. Les principaux phénomènes élémentaires sont donc la formation de défauts et la diffusion de ceux-ci en présence des éléments chimiques constituant les alliages des composants. Ces phénomènes sont à l'échelle atomique (de l'ordre du nanomètre). La méthode la plus précise à ce jour pour les simuler sont les calculs quantiques, dits *ab initio* et basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Les calculs *ab initio* demandent des ressources informatiques importantes. Et par ailleurs, plus le nombre de phénomènes caractérisés précisément par *ab initio* est important, meilleure est la prédiction de l'évolution de la microstructure sur les plans qualitatifs et quantitatifs. La caractérisation de ces défauts en amas nécessite de traiter des systèmes avec plus de 1000 atomes. Ces calculs ont été pour la première fois possibles en 2007 sur la machine *Frontier* BG/L. Ils nécessiteront plus de 20 millions d'heures.cpu et permettront de caractériser les mécanismes élémentaires et de découvrir de nouveaux phénomènes importants. La machine *Frontier* permet ainsi d'améliorer significativement la prédiction de la simulation de la microstructure des matériaux de structure.



En parallèle, sur le plan méthodologique, les algorithmes standards des codes *ab initio* conduisent à des coûts de calculs variant comme le carré ou le cube du nombre d'atomes traités. Des travaux sont en cours pour mettre au point un nouvel algorithme de complexité linéaire et massivement parallèle (décomposition de domaine) afin d'exploiter au mieux les performances de *Frontier* BG/L. Une première version de cet algorithme a été testée avec un modèle moins précis que la DFT mais présentant une difficulté algorithmique semblable (modèle semi-empirique) : on a pu calculer une molécule linéaire comprenant plus d'un million d'atomes de carbone en utilisant 1024 processeurs sur moins d'une heure.

3. Conclusions

L'introduction de la machine *Frontier* BG/L a créé à EDF une dynamique autour du calcul Haute Performance et a permis de produire des résultats immédiats. Il ressort clairement qu'une mobilisation accrue de compétences nouvelles et l'émergence de nouveaux outils, méthodes et savoir faire est indispensable pour transformer l'essai de la simulation HPC. Nous avons ainsi identifié un certain nombre de verrous scientifiques et technologiques à relever :

- Scalabilité des codes de calcul et des algorithmes de résolution tirant parti des architectures massivement parallèles (x10 000 à x100 000 cœurs de calcul),
- Emergence d'architectures logicielles à composants, pour la simulation couplée, massivement parallèle, multi-physique, multi-échelle, adaptées à la complexité du réel,
- Disponibilité d'outils de pré-traitement parallèle pour la préparation des calculs intensifs,
- Disponibilité d'outils de visualisation et d'analyse de très gros volumes de données pour l'exploitation des résultats et l'aide à la décision dans des situations permettant la mobilisation collaborative d'experts répartis géographiquement,
- Développement d'outils logiciels pour la gestion des incertitudes et des aléas qui caractérisent la plupart des données des systèmes industriels et qui permettent d'intégrer toute l'information disponible (assimilation de données, lien avec l'expérimental) en vue de maximiser le caractère prédictif, la fiabilité et la qualité des simulations,
- Conception, déploiement et exploitation d'infrastructures matérielles et logicielles pour la préparation et l'exécution des simulations et l'exploitation des résultats.

Ce sont de formidables défis scientifiques et technologiques qui attendent dans les années qui viennent la communauté scientifique et les grands utilisateurs de la simulation avancée. Il nous faut collectivement développer une action d'impulsion sur la plupart de ces thèmes scientifiques et techniques majeurs qui conditionnent les sauts de performances indispensables aux progrès attendus sur les processus métiers industriels et la recherche scientifique.

4. Annexe : description technique de la machine *Frontier* BG/L

La Configuration BG/L installée sur le site EDF des Renardières comprend, pour la partie calcul, 4 armoires embarquant chacune 1024 Compute Nodes (CN). Chaque CN comprend deux processeurs PowerPC® 440 cadencés à 700 MHz, et 1 GB de mémoire principale. Au total 8192 processeurs équipent donc le calculateur et fournissent une puissance crête théorique de 22.9 Tflops. La performance soutenue obtenue sur un Linpack HPL est de 18.6 Tflops.



Deux "Service Nodes" (Système IBM POWER5 / Linux SUSE) servent le calculateur et assurent les aspects de gestions et chargement des 4 armoires. Ces 2 serveurs se backup mutuellement et confèrent une parfaitement redondance au système.

L'accès au calculateur est réalisé via deux Front-End Nodes (IBM POWER5 /Linux SUSE) disposant respectivement de 32 et 64 Go de mémoire principale. Ces serveurs à 4 processeurs permettent la mise au point, la compilation, la soumission et le "post traitement" des codes. Un petit Cluster de calcul indépendant, équipé de 8 Serveurs IBM POWER5 de type p505 à 2 processeurs est également disponible.

Les aspects entrées/sorties sont assurés par 8 serveurs de type IBM POWER5 p55A, embarquant chacun 2 cœurs de calcul Power5+@1.9 GHz et 2GO de mémoire. Ils assurent les fonctions de GPFS Servers pour l'ensemble des 4 armoires de calcul. La configuration disque s'appuie sur 8 baies DS4700 chacune disposant de 3 tiroirs d'extension de type EXP810. Chacun de ces tiroirs embarque 16 disques de 146 Go à 15k RPM. Les disques sont organisés en LUN (*Logical Unit Number*) de 5 disques. Au total la configuration disque est composée de 512 disques de 146 Go 15k RPM soit un total de 74,7 To. La connexion des serveurs aux disques se fait au moyen d'interfaces Fibre Channel à 4 Gbit/s (2 Cartes dual port par serveur). L'ensemble assure un débit de 5 Go/s (mesuré) entre les CPU et les disques.

Le réseau d'administration est construit sur un switch Cisco de type 6509 E, comprenant 6 cartes de 48 ports RJ45 10/100/1000Mbps. D'un point de vue logiciel, les aspects Administration Système sont assurés par le produit CSM (Cluster System Management), la gestion des travaux est dévolue à Loadleveler.

Nouveaux moyens HPC pour la recherche chez nos voisins européens

Grande Bretagne

L'Université de Reading dispose maintenant du système le plus puissant du pays dans le domaine académique, après avoir augmenté la configuration de son « IBM Blade Centre » qui comprend maintenant 700 lames JS21 et un total de 3040 processeurs PowerPC 970 (2,3 GHz). La performance crête est de 28 TeraFlops.

<http://www.acet.rdg.ac.uk/>

Suisse

Le gouvernement suisse a précisé sa stratégie dans le domaine du HPC pour la période 2008-2011. Un budget de 150 millions de francs suisses sera dégagé, dont 70 millions pour les investissements en superordinateurs (avec comme objectif la mise en place d'un système « pétaflopique » en 2010 ou 2011), 50 millions pour construire les bâtiments nécessaires à l'accueil de ces nouvelles machines, 30 millions pour développer la formation et la recherche dans ce domaine et renforcer les réseaux. Le CSCS se voit confirmé comme centre national de calcul de haute performance.

La NSF va financer un système de 10 PetaFlops

La National Science Foundation a annoncé⁴, le 8 août, les résultats d'un appel à propositions qu'elle avait lancé pour renforcer les moyens de calcul destinés à la recherche aux Etats-Unis. Cette opération se situe dans le contexte décrit dans un rapport intitulé « Cyberinfrastructure Vision for 21st Century Discovery »⁵.

Un premier système, d'une performance de 10 PetaFlops sera installé à l'Université de l'Illinois à Urbana-Champaign et géré par le NCSA (National Center for Supercomputing Applications). Il s'agit d'un système IBM PERCS, basé sur le processeur POWER7 et donc très proche du système qu'IBM développe dans le cadre du programme HPCS de la DARPA (voir BI-ORAP n°49). Le financement annoncé est de 208 millions de dollars sur 4 ans et demi ; il comprend des collaborations avec des industriels et des consortiums académiques. La machine, appelée « Blue Waters », devrait être installée en 2011.

Un second système, d'une performance proche du PetaFlops, sera installé à l'Université du Tennessee (Knoxville Joint Institute for Computational Science), associée au Oak Ridge National Laboratory (ORNL), au Texas Advanced Computing Center (TACC) et au National Center for Atmospheric Research (NCAR). Le budget est de 65 millions de dollars sur cinq ans. Il s'agirait d'un système Cray, de type

« Baker », précurseur de la machine « Cascade » que Cray développe dans le cadre du programme HPCS.

Certains commentateurs américains ont regretté le côté « conservateur » de ces choix puisqu'il s'agit de solutions à peu près identiques à celles retenues par la DARPA ; ils auraient souhaité qu'une de ces deux solutions soit plus « spéculative ».

Lire, visiter, participer

Lire :

- Les actes du symposium 2007 de CoreGRID : « Towards Next Generation Grids » (Ed : Thierry Priol, Marco Vanneschi). Springer.
- Les actes de la conférence Euro-Par 2007 (Ed : Anne-Marie Kermarrec, Luc Bougé, Thierry Priol). Springer.
- Le numéro d'octobre de la lettre d'information de DEISA
http://www.deisa.org/news_events/newsletter.php
- Le rapport annuel 2006 du CSCS (centre national suisse de calcul de haute performance)
<http://www.cscs.ch/publications/annualr/AR06def.pdf>

NOUVELLES BREVES

→ Dans les universités américaines

- Le « Cornell Theory Center », qui a eu un rôle important dans le calcul de haute performance depuis sa création en 1985, change de nom : il devient « Cornell Center for Advanced Computing ». La mission de mise à disposition de services pour les chercheurs de toutes disciplines est renforcée.
<http://www.cac.cornell.edu/>
- L'Université de l'Indiana a augmenté la configuration de son principal système dont la performance crête est maintenant de plus de 20 TeraFlops. Il s'agit d'un cluster composé de 512 lames IBM JS21 ayant deux PowerPC 970MP bi-cœur à 2,5 GHz.
<http://rc.uits.iu.edu/hps/research/bigred/>
- Le centre de compétence sur le processeur Cell/BE à Georgia Tech dispose d'un cluster de 28 processeurs (14 lames) destiné au développement de nouvelles applications (jeux, calcul scientifique, applications financières, ...) ; il est ouvert aux sociétés qui développent des logiciels pour le Cell/BE.
<http://sti.cc.gatech.edu>

→ Evaluation des performances

La National Science Foundation (NSF) a choisi de déployer, sur l'ensemble des centres de calcul de haute performance qui dépendent d'elle, un outil d'évaluation de la performance développé par David Skinner au NERSC. Ce logiciel, *Integrated Performance Monitoring* (IPM), analyse les performances des applications de type HPC et identifie les problèmes qui peuvent ralentir l'exécution de l'application.

<http://www.nersc.gov/nusers/resources/SP/ipm.php>

⁴ Voir <http://www.hpcwire.com/hpc/1715754.html>

⁵ <http://www.nsf.gov/pubs/2007/nsf0728/index.jsp>

→ Renault F1 et la CFD

Renault F1 a annoncé la mise en œuvre d'un programme d'investissements technologiques à long terme de l'ordre de cinquante millions de dollars. Ce programme comprendra notamment la création d'un nouveau centre d'analyse de la dynamique des fluides assistée par ordinateur (CFD) dont la capacité sera dix fois supérieure à celle dont l'équipe dispose à ce jour, et qui fera partie des 100 plus importantes installations de calcul au monde.

<http://www.ing-renaultf1.com/fr/newsdesk/news/news.php?news=tcn:4-63938>

→ Intel

Intel met la bibliothèque TBB (Threading Building Blocks) en open source (licence GPLv2). Cette bibliothèque permet de développer plus facilement des applications destinées à utiliser le parallélisme des processeurs multi-cœurs. Cette stratégie doit favoriser la diffusion de cette bibliothèque sur de nombreuses plates-formes matérielles.

<http://www.threadingbuildingblocks.org/>

→ SGI

SGI va fournir à la NASA un système Linux de 13 TeraFlops, composé de 1024 processeurs bi-cœurs Itanium 2. Ce sera le plus gros système fonctionnant en mode SSI (single system image).

AGENDA

17 au 19 octobre – **GRIDNets 2007** : 1st International Conference on Networks for Grid Applications (Lyon)

21 au 22 octobre – **NanoArch 2007** : The IEEE/ACM International Symposium on Nanoscale Architecture (Santa Clara, CA, USA)

24 au 27 octobre – **SBAC-PAS 2007** : 19th International Symposium on Computer Architecture and High Performance Computing (Gramado, RS, Brésil)

7 au 9 novembre – **FET 2007** : 7th IFAC International Conference on Fieldbuses and nETworks in industrial and embedded systems (Toulouse)

10 au 16 novembre – **SC'07** : International Conference on High Performance Computing (Reno, Nevada, Etats-Unis)

28 novembre – **RIAMS 2007** : Réseaux d'Interaction : Analyse, Modélisation et Simulation (Lyon)

3 au 6 décembre – **RTSS 2007** : Real-Time Systems Symposium (Tucson, Az, Etats-Unis)

10 au 13 décembre – **eScience 2007** : Third IEEE International Conference on e-Science and Grid Computing (Bengalore, Inde)

17 au 20 décembre – **OPODIS 2007** : 11th International Conference On Principles Of Distributed Systems (La Guadeloupe)

17 au 20 décembre – **EUC 2007** : The 2007 IFIP International Conference on Embedded and Ubiquitous Computing (Taipei, Taiwan)

17 au 20 décembre – **ESO 2007** : The 2nd International Workshop on Embedded Software Optimization (Taipei, Taiwan)

18 au 21 décembre – **HiPC 2007** : 14th IEEE International Conference on High Performance Computing (Goa, Inde)

27 au 29 janvier – **HiPEAC 2008** : 2008 International Conference on High Performance Embedded Architectures & Compilers (Göteborg, Suède)

27 janvier – **MULTIPROG** : Workshop on Programmability Issues for Multi-Core Computers (Göteborg, Suède)

11 au 13 février – **RenPar18** : Rencontres franco-phones du parallélisme (Fribourg, Suisse)

11 au 13 février – **Sympa 2008** : Symposium en architectures de machines (Fribourg, Suisse)

13 au 15 février – **Euromicro PDP 2008** : The Sixteen Euromicro Conference on Parallel, Distributed and Network-based Processing (Toulouse)

16 au 20 février – **HPCA 08** : 14th International Symposium on High-Performance Computer Architecture (Salt Lake City, Utah, Etats-Unis)

20 au 23 février – **PPoPP'08** : 13th ACM SIGPLAN Symposium on Principles and Practice of Parallel Programming (Salt Lake City, Utah, Etats-Unis)

1 au 5 mars – **ASPLOS XIII** : 13th International Conference on Architectural Support for Programming Languages and Operating Systems (Seattle, Wa, Etats-Unis)

16 au 20 mars – **SAC 2008** : 23rd Annual ACM Symposium on Applied Computing (Fortaleza, Brésil)

1 au 4 avril – **Eurosys 2008** : The European Conference on Computer Systems (Glasgow, UK)

Les sites de ces manifestations sont accessibles depuis le serveur ORAP.

Si vous souhaitez communiquer des informations sur vos activités dans le domaine du calcul de haute performance, contactez directement Jean-Loïc.Delhaye@irisa.fr

Les numéros de BI-ORAP sont disponibles en format pdf sur le site Web d'ORAP.

ORAP est partenaire de



ORAP

Structure de collaboration créée par le CEA, le CNRS et l'INRIA

Secrétariat : Chantal Le Tonquèze
Irisa, campus de Beaulieu, 35042 Rennes
Tél : 02 99 84 75 33, fax : 02 99 84 74 99
chantal.letonqueze@irisa.fr
<http://www.irisa.fr/orap>