Introduction au Calcul Haute Performance

Master DFE

Mathieu LOBET
Maison de la Simulation, CEA Saclay

Mathieu.lobet@cea.fr

Année 2023-2024

Qui suis-je ?

- La Maison de la Simulation est un laboratoire multi-tutelle CEA, CNRS, Université Paris-Saclay situé près du Campus au CEA Saclay

- Spécialisé dans le calcul scientifique : mathématique appliquée, développement de codes, développement de bibliothèques, calcul parallèle, analyse des données, IA pour le calcul scientifique

- Je suis ingénieur-chercheur :
  - Thèse en physique des plasmas
  - Optimisation CPU
  - Programmation GPU
  - Implication dans le développement de code de physiques (Smilei par exemple)
  - Traitement automatisé par l'IA

Ce cours est en accès libre sur la plateforme GitHub

https://github.com/Maison-de-la-Simulation/HPC-DFE-Paris-Saclay

I. Introduction au calcul parallèle

II. Prise en main d'un super-calculateur

III. Introduction au parallélisme par échange de message via MPI

IV. Mesure de la performance

V. Travaux pratiques

I. Introduction au calcul parallèle

1. Qu’est-ce que le Calcul Haute Performance

La simulation numérique utilise la physique, les mathématiques appliqués et l'informatique pour résoudre des problèmes scientifiques

Le jeu vidéo est une approximation du réel avec des contraintes artistiques, de jouabilité et de rendu de temps réel

Le monde de l'animation et des effets spéciaux est animé par la volonté d'un rendu artistique et l'illusion du réel

La simulation numérique est utilisée pour prédire le futur en se basant sur des paramètres présents (météorologie, climatologie, économie, sociologie)

La simulation numérique est utilisée pour aller là où l'humain, des cameras ou des sondes ne peuvent pas aller (astrophysique, physique de l'extrêmement petit, intérieur des plasmas, etc)

La simulation numérique est utilisée pour concevoir et optimiser des expériences ou des nouveaux produits (voitures, avions, etc)

La simulation numérique est utilisée pour réaliser beaucoup expériences coûteuses dans le monde (crash, optimisation de produis, etc) https://www.youtube.com/watch?v=LBMIzr0aPI8

La simulation numérique est utilisée pour réaliser beaucoup expériences coûteuses dans le monde (crash, optimisation de produis, etc) https://www.youtube.com/watch?v=LBMIzrOaPI8

- Imaginons que l'on souhaite simuler une simple goutte d'eau
- Nous devons calculer la trajectoire de 10^{21} molécules d'eau
- Si on fait l'approximation qu'il faut une opération informatique pour chaque molécule, un ordinateur de bureau véloce, avec une puissance de 10^{12} opérations à virgule flottante par seconde, aura besoin de 30 ans de calcul pour résoudre le problème

L’utilisation d’un super-calculateur devient nécessaire pour résoudre la plupart des problèmes scientifiques et industriels aujourd’hui

Image – Jean-Zay super-computer at IDRIS (France)

Définition de super-calculateur

Un super-calculateur ou super-ordinateur est un ordinateur d'une puissance largement supérieure à celle d'un ordinateur de bureau

Aujourd'hui, ce sont de grosses armoires (comme les data-center) connectant au travers d'un réseau extrêmement rapide un très grand nombre d'unités de calcul (processeur, GPU)

On parle de machine massivement parallèle

Super-calculateur Joliot-Curie au CEA

Définition de Calcul Haute Performance

Le Calcul Haute Performance est la discipline qui s'intéresse à la programmation et à l'utilisation des super- calculateurs dans le but d'exécuter de la manière la plus performante possible des algorithmes donnés.

Le HPC joue un rôle essentiel en simulation numérique en permettant l'élaboration de codes de simulation, principalement scientifiques, capables de tourner efficacement sur des très larges super-ordinateurs.

On utilise souvent l'abréviation HPC (High Performance Computing)

Super-calculateur Joliot-Curie au CEA

Simulation Gysela-X d'un plasma de Tokamak : a pris 20 jour sur 12 000 coeurs AMD Rome (TGCC) et aurait pris 10 ans sur un ordinateur de bureau

Convection dans l'atmosphère d'exo-planètes

Simulation effectuée grâce au code ARK sur carte GPU NVIDIA V100 GPUs (volume fini, MPI + Kokkos)

Grand challenge sur le super-calculateur Jean-Zay effectué par Simon Daley-Yates (https://arxiv.org/pdf/2106.08842.pdf)

Cette simulation aurait pris 14 ans sur un ordinateur de bureau

Pourquoi des super-calculateurs

Résoudre des problèmes inaccessibles avec la puissance de calcul ou la mémoire d'un simple ordinateur

En science :

- Résoudre des problèmes avec beaucoup d'éléments ou sur des temps très longs
- Effectuer un grand nombre de simulations (étude paramétrique, ensemble de simulations)
- Résoudre des problèmes multi-D complexes
- Résoudre des problèmes multi-physiques
- Traiter des données issues d'expériences (accélérateurs, satellites…)

Les choix technologiques et l'architecture des super-calculateurs dépendent principalement de leur utilisation finale (scientifique, traitement des données, IA, temps réel)

Le FUGAKU est l'un des super-ordinateurs les plus puissants du monde (416 Pflops). Il est équipé de processeur ARM Fujitsu A64FX.

Les métiers du HPC

- R&D faisant appel à la modélisation numérique : ingénieur calcul, CFD, matériaux, chimie…
- Recherche faisant appel à la modélisation numérique : CFD, astrophysique, fusion, chimie, biologie…
- Prédiction/statistique : finance, assurance…
- Traitement des données (big data)
- Intelligence artificielle (machine learning, deep learning)
-
- Rendu physique pour l'animation
- Optimisation dans le jeu vidéo

Notion de puissance de calcul

- La puissance de calcul d'une unité de calcul ou d'un ordinateur entier se mesure en opérations par seconde. Dans le cas d'une opération à virgule flottante on parle plus précisément de flops/s. Il faut préciser s'il s'agit de flottants à simple ou double précision.

- Le plus souvent les chiffres sont donnés pour des double précision.

- La puissance théorique est la somme de la puissance de chaque unité de calcul

- La puissance réelle est évaluée via des benchmarks

- Il existe un classement mondial des super- calculateurs les plus puissants appelé TOP500.

https://www.top500.org/

I. Introduction au calcul parallèle

2. Un peu d'histoire

Un peu d'histoire : 1940-1960, les prémices

L'histoire des ordinateurs démarrent doucement un peu avant la seconde guerre mondiale et voit ses premiers systèmes appliqués (électro-mécanique ou électronique) pendant la guerre

ENIAC (1945), l'un des premiers ordinateurs électroniques – 50 Kflops, 150 kW - USA

1960 – 1970 : la naissance d'une industrie

L'émergence des super-ordinateurs destinés au calcul scientifique au sens propre se fait au début des années 60. C'est aussi la naissance du Fortran.

CDC 6600 (1964), l'un des premiers vrais succès en termes de HPC – 0,5 Mflops, 30 kW - USA

1970-1990 : l'ère des machines vectorielles et de Cray

Cray, l'un des concepteurs du CDC, va fonder sa société et devenir l'un des leaders du marché pendant 15 ans

Le Cray utilise un processeur vectoriel, c'est-à-dire que le même calcul est effectué sur tous les éléments d'un vecteur de donnée en même temps

Cray 1 (1975), vectorisation très efficace, puissance équivalente à l'iphone 1, à la fois esthétique et performant – 160 Mflops, 115 kW - USA

1970-1990 : l'ère des machines vectorielles et de Cray

Cray, l'un des concepteurs du CDC, va fonder sa société et devenir l'un des leaders du marché pendant 15 ans

Le Cray utilise un processeur vectoriel, c'est-à-dire que le même calcul est effectué sur tous les éléments d'un vecteur de donnée en même temps

Cray Y-MP (1988), 2 à 8 processeurs vectoriels à mémoire partagée, 333 Mflops par processeur, puissance équivalente à l'iphone 5 – 2.6 Gflops - USA

1990 -aujourd'hui : le parallélisme massif distribué et la convergence avec l'industrie de la micro-informatique

D'un point de vue économique et technique, il devient de plus intéressant de mettre en réseau des processeurs aux technologies issues du grand public.
On utilise donc des processeurs d'ordinateur de la micro-informatique un peu adapté au monde du HPC :

- Homogénéisation des outils de développement
- Abaissement des coûts de R&D et de production
- Retour au processeur scalaire (une opération sur une donnée)

CM 5 (1993), 1024 processeurs, premier au top 500 en 1993, puissance équivalente à l'iphone 7 – 131 Gflops - USA

1990 -aujourd'hui : le parallélisme massif distribué et la convergence avec l'industrie de la micro-informatique

D'un point de vue économique et technique, il devient de plus intéressant de mettre en réseau des processeurs aux technologies issues du grand public.
On utilise donc des processeurs d'ordinateur de la micro-informatique un peu adapté au monde du HPC :

- Homogénéisation des outils de développement
- Abaissement des coûts de R&D et de production
- Retour au processeur scalaire (une opération sur une donnée)

Un exemple surprenant est la construction de véritables clusters de PS3 dans les années 2007-2010 grâce au processeur CELL d'IBM

2010-aujourd'hui : le retour en grâce de la vectorisation et du multi-coeur

Les processeurs deviennent multi-coeurs et redeviennent vectoriels comme c'était le cas sur les machines Cray

Quelques exemples de processeurs modernes en HPC:

- Intel Xeon Phi KNL (2013): 72 cœurs, 3 Tflops, 200 Watt
- AMD Epyc GENOA (20): 96 cœurs, 8 Tflops, 400W

2010 – aujourd'hui : l'émergence des accélérateurs GPU

La technologie GPU offre des ratios performance/prix/consommation électrique supérieurs à la technologie CPU pour du calcul pur.

Beaucoup de super-calculateurs parmi les plus puissants au monde utilisent cette technologie.
Les GPU sont des accélérateurs, ils complètent le CPU.

Quelques exemples de cartes accélératrices GPU modernes en HPC:

- NVIDIA A100 : 10 Tflops, 250 Watt
- AMD MI250 : 45 Tflops, 500W

La course à l'Exascale

Il existe une compétition à l'échelle mondiale pour atteindre la puissance de 10^{18} opérations (double précision) par seconde avec une enveloppe énergétique de 20 MW.

Ce seuil a été atteint par les Etats-Unis l'année dernière.

L'Europe devrait se doter de deux super-calculateurs exascale en 2024

Frontier est le premier super-ordinateur (USA) à atteindre une puissance exaflopique (10^{18} opérations par seconds en double précision)

I. Introduction au calcul parallèle

3. Mieux comprendre le fonctionnement d'un super-calculateur

Une machine parallèle avant tout

Un super-calculateur est avant tout une machine parallèle, c'est-à-dire une machine composée de plusieurs unités de calcul connectées.

Les processeurs de nos ordinateurs, de téléphones portables ou les cartes graphiques sont tous aujourd'hui des machines parallèles car composés de plusieurs cœurs de calcul.

Principe d’un super-calculateur

Principe d'un super-calculateur

Architecture mémoire : système à mémoire distribuée

Système composé d'un ensemble d'unités de calcul ou d'ordinateurs connectés entre eux par un réseau de communication rapide et possédant chacune une mémoire vive strictement privée.

Architecture mémoire : système à mémoire partagée

Système composé d'un ensemble d'unités de calcul partageant la même mémoire vive

Architecture mémoire des super-calculateurs : différents niveaux parallèles

Parallélisme inter-nœuds (*internode parallelism*) : modèle de parallélisme à mémoire distribuée

Parallélisme intra-noeud (*intranode parallelism*) : modèle de parallélisme à mémoire partagée

Notion de puissance de calcul

Être en mesure d'exploiter l'intégralité de la puissance de calcul dépend de beaucoup de paramètres :

- Caractéristiques du réseau reliant les nœuds entre eux (architecture, bande-passante, latence)
- Les couches logicielles utilisées
- Le type d'algorithme à paralléliser
- Le niveau d'optimisation des programmes
- C'est tout l'expertise du Calcul Haute-Performance.

Les langages de programmation en HPC

Les principaux langages utilisés pour le développement d'application scientifique sont :

- Fortran : historiquement le langage du calcul scientifique, en perte de vitesse aujourd'hui
- C/C++ : en particulier le C++ est de plus en plus utilisé et recommandé car il intègre de nombreuses fonctionnalités et de nombreuses bibliothèques
- Python : principalement utilisé pour le squelette des codes ou le post-traitement er l'analyse des données
- Julia : loin d'être le plus courant, il a l'avantage d'être facile à utiliser tout en étant performant
- D'autres langages existent mais sont moins utilisés couramment en production.

Les modèles de programmation parallèle pour le CPU

Il existe de nombreux modèles souvent liés à des bibliothèques ou fournis par le standard du langage. Les deux plus connus sont :

- MPI : l'un des plus utilisé car fonctionne à la fois en mémoire partagée et distribuée, c'est celui que nous allons apprendre
- OpenMP : très utilisé en mémoire partagée

Les modèles de programmation parallèle pour le GPU

Sur GPU, il existe des modèles de programmation spécifiques :

- CUDA : aujourd'hui le modèle le plus technique pour attaquer les GPUs NVIDIA et AMD
- OpenCL : concurrent de CUDA plus généraliste mais un peu moins performant
- OpenACC : vision par directive permettant un portage plus rapide et avec moins d'expertise que CUDA, réservé aux cartes NVIDIA
- OpenMP target : extension de OpenMP pour utiliser les GPU, très proche de OpenACC en plus généraliste mais moins performant
- Kokkos/RAJA : approche par meta-programmation basée sur le C++, offre un niveau de performance élevé tout en permettant une portabilité de la performance
- SYCL : modèle proche de Kokkos soutenu par Intel pour ses propres cartes GPU

Pour ce cours

Pour ce cours, nous utiliserons :

- Python come langage car c'est celui que vous avez le plus l'habitude d'utilisé
- MPI comme méthode programmation parallèle car c'est la plus courante aujourd'hui sur CPU