

Faire évoluer les modèles océan/atmosphère pour le calcul intensif

L.Viry (MaiMoSiNE, Grenoble). Florian Lemarié (INRIA-LJK, Grenoble). Propos recueillis par Emilie Neveu.

Structuration des moyens pour le HPC

Le calcul haute-performance est structuré à l'échelle européenne autour du projet PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) porté au niveau français par le Grand Equipement National pour le Calcul Intensif (GENCI). PRACE est organisé via une pyramide des ressources en 3 niveaux : Tier-0 (centres européens), Tier-1 (centres nationaux), Tier-2 (centres régionaux). Le système Tier-0 français est le TGCC/CEA. 3 centres nationaux (CINES, IDRIS, CCRT) constituent le Tier-1 alors que 10 méso-centres régionaux soutenus par le projet Equip@Meso forment le Tier-2. Nous aboutissons donc à une multiplication massive et rapide des unités de calculs disponibles à des fins de recherche.

Descriptif et enjeux

Les architectures des calculateurs haute-performance est en perpétuelle évolution. Par conséquent, il est généralement extrêmement délicat de pouvoir prédire plusieurs années à l'avance les caractéristiques des calculateurs du futur. Nous observons cependant actuellement un tournant vers une architecture massivement parallèle, hiérarchique et hybride basée sur des architectures multi-coeurs (programmation hybride MPI/OpenMP) et des accélérateurs matériels (développement des GPUs).

Les performances en terme de coût de calcul et de gestion de données des codes numériques dépendent étroitement de l'architecture des calculateurs sur lesquels ces codes sont utilisés. L'évolution des architectures impose donc une contrainte forte sur le développement de ces codes numériques. Il est primordial de mettre en place les briques de base permettant une analyse investissement humain/bénéfice la plus précise possible avant de modifier en profondeur les paradigmes de programmation d'un code donné. Ceci afin de limiter les investissements humains vers des solutions qui deviendraient trop vite obsolètes. Cette analyse coût/bénéfice doit se faire à travers des interactions soutenues entre les mathématiciens-numériciens concevant les modèles, les physiciens utilisant le modèle, les spécialistes HPC et les constructeurs de machines. La structuration de ces interactions et les aspects liés à la formation sont au centre du projet Equip@Meso (lauréat Equipex 2010).

Problématiques

Les codes de calcul utilisés pour des applications concrètes de modélisation de l'océan et de l'atmosphère sont extrêmement complexes et n'ont pas nécessairement été initialement développés dans une optique HPC. Cependant, ceux-ci évoluent peu à peu et intègrent maintenant dans leur quasi-totalité des fonctionnalités MPI et OpenMP plus ou moins abouties. Il est important de souligner que les problématiques liées aux performances des codes numériques sur des architectures massivement parallèles ne sont pas seulement des problèmes informatiques incombant aux spécialistes HPC. Ils doivent au contraire impliquer spécialistes HPC ET mathématiciens/numériciens (voire même les physiciens utilisant ces modèles). En effet, si on veut créer des codes lisibles et aisément maintenables (pour pouvoir les faire évoluer), il est inconcevable de chercher à optimiser des codes de calcul dans une approche « boîte noire » sans avoir une connaissance fine des schémas numériques et de la structure du code. Il faut donc formuler ce problème comme un ensemble maths/numérique/informatique en intégrant le critère « architecture des codes » aux choix des méthodes.

Plus concrètement, si l'on veut tirer profit des nouvelles ressources de calcul, nous pouvons isoler une liste non-exhaustive d'enjeux :

- ▶ Etude des méthodes numériques pour plus de granularité. La majorité des codes est actuellement basée sur un découpage des tâches en sous-domaines spatiaux. De nouvelles directions pour augmenter la granularité des codes doivent être explorées.
- ▶ Modification des paradigmes de programmation. A titre d'illustration, les performances des modèles océaniques de climat sont fortement contraintes par la glace de mer qui compromet l'équilibrage des charges à l'exécution du code. En effet, le modèle de glace (très coûteux) est uniquement activé pour les points de grille contenant de la glace de mer.
- ▶ Techniques de parallélisation (hybride MPI/OpenMP, GPU ...). On observe encore très peu à l'heure actuelle d'amélioration de performances en hybride MPI/OpenMP comparativement au purement MPI.
- ▶ Généralisation des outils d'analyse de performance pour assister le développement du code et le « debugging ».
- ▶ Mise en place de maquettes "communautaires" représentative des difficultés d'un "vrai" code afin de pouvoir anticiper sur des problèmes simples les problèmes que l'on pourra rencontrer lors du passage à l'échelle.

Fonctionnement et animation

Les centres universitaires régionaux constituent la brique de base de l'écosystème HPC. L'accès des chercheurs aux équipements nationaux voire européens passe par le renforcement et la structuration des centres régionaux. Ils assurent la découverte, la formation et la prise en main du HPC par la communauté de recherche française. De plus, le rôle de laboratoires tels que le CERFACS est également très précieux pour la communauté scientifique.