



MAISON DE LA SIMULATION



Optimisation et support au développement de codes HPC

M. KERN – F. HOUSSEN

Journée **Equip@Meso** Meso-Challenges
Institut Henri Poincaré
20 septembre 2013

Collaborations

- ✓ **LSI** / MDLS : code « **DP** » (F. SOTTILE, LSI, analyse spectroscopique de matériaux)
 - Accélération **GPU**



MAISON DE LA SIMULATION



Collaborations

- ✓ **LSI** / MDLS : code « **DP** » (F. SOTTILE, LSI, analyse spectroscopique de matériaux)
 - Accélération **GPU**
- ✓ **IMFS** (Université de Strasbourg) / MDLS: code « **NSIBM** » (Y. HOARAU, IMFS, CFD)
 - Couplage avec **PETSc**
 - Couplage « live » avec **VisIt**

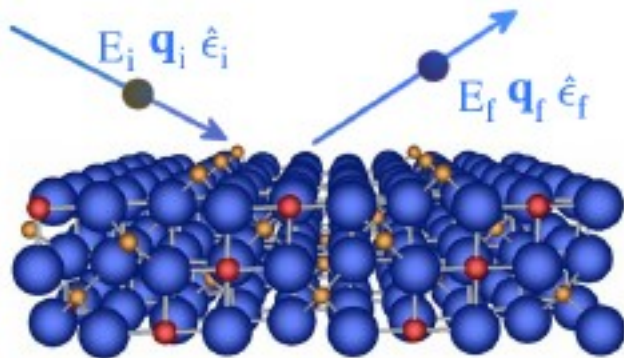


MAISON DE LA SIMULATION



Le code DP (Dielectric Properties)

- Problème physique : polarisabilité du système
- DP **Théorie de la Fonctionnelle de Densité Transitoire** (TDDFT)



$$\delta\rho = \chi \delta V_{\text{ext}}$$

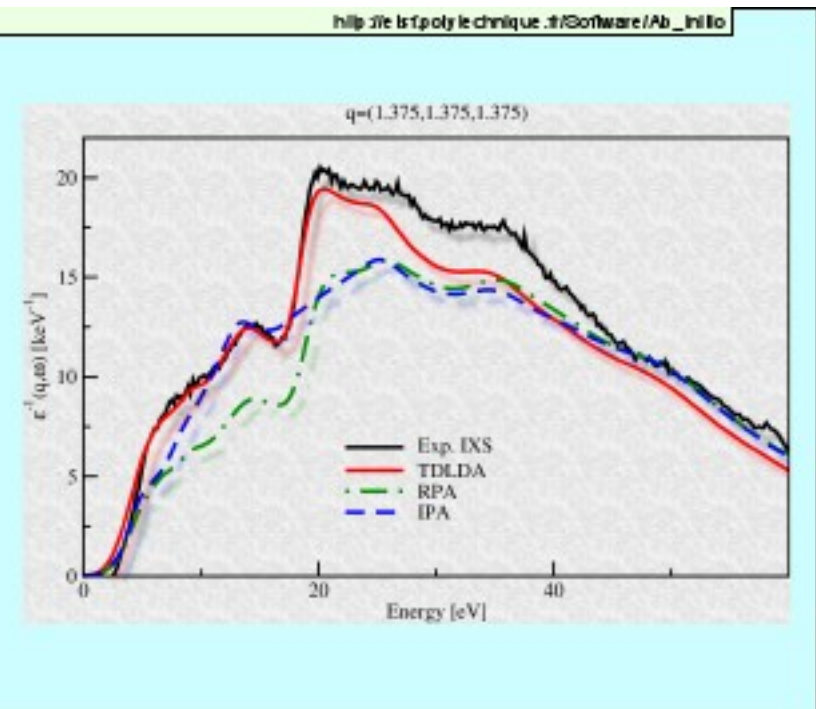
(fluctuations) $\delta\rho$ = χ δV_{ext} (polarizability (linear response))

Code Fortran	Spectre d'absorption
Domaine fréquentiel	Refléctivité
Cond. limites périodiques	Diffusion anélastique de rayons-X
Parallélisation MPI/OPenMP	Spectroscopie perte d'énergie



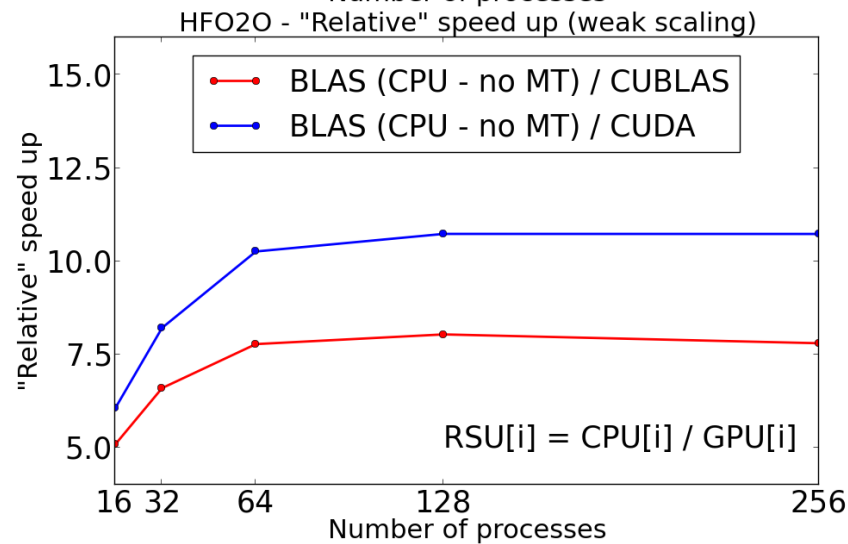
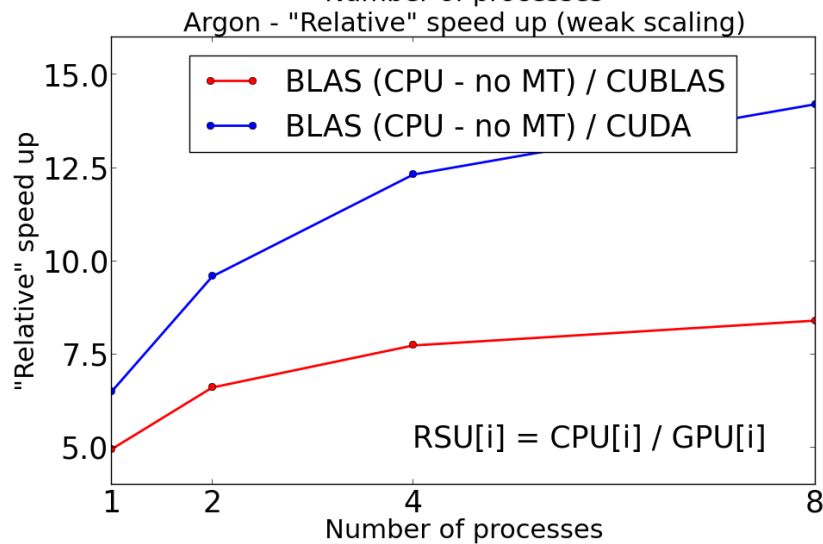
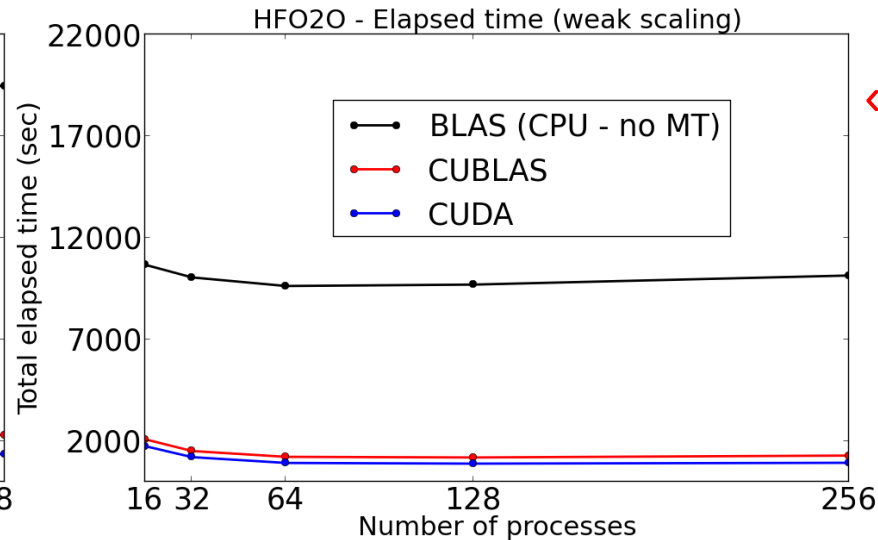
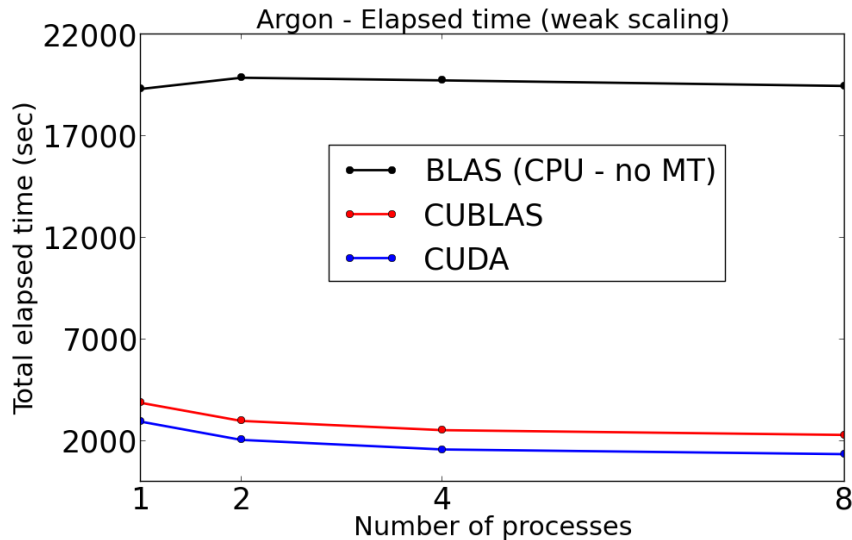
Measurements done at the ID 16 (ESRF)

Phys. Rev. B 81, 085104 (2010)



LSI / MDLS : accélération GPU

Identification
des
« bottlenecks »
=> BLAS



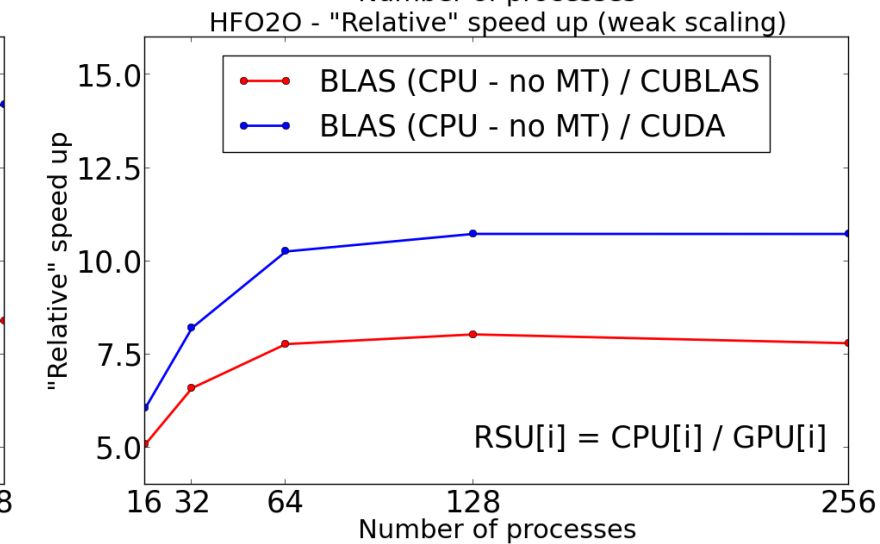
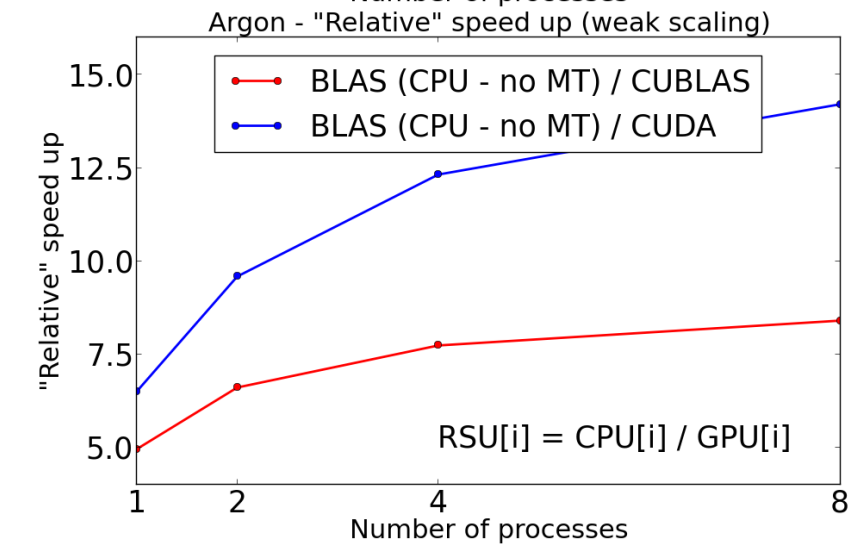
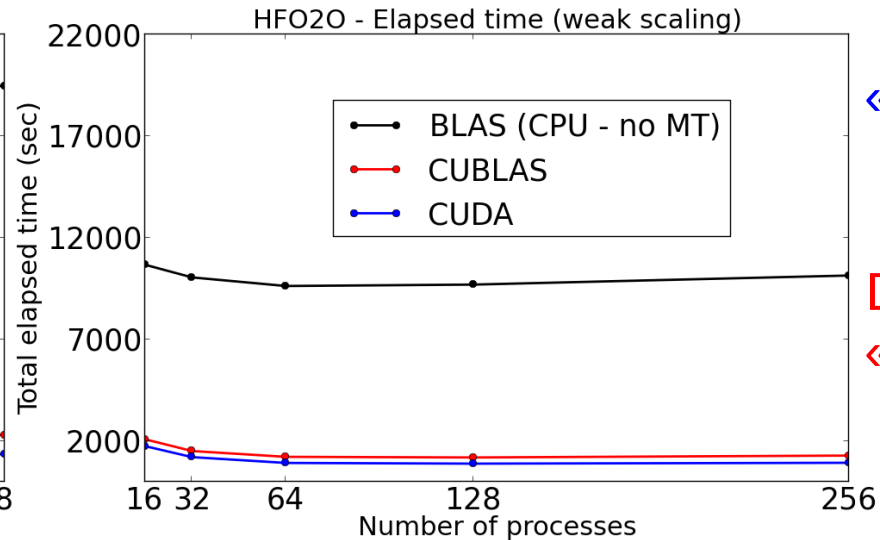
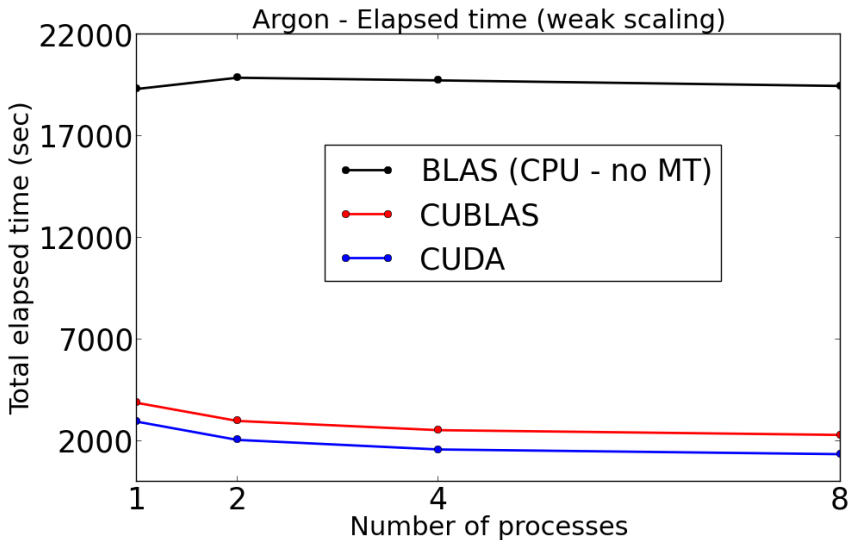
Code : « DP »



LSI / MDLS : accélération GPU

Identification
des
« bottlenecks »
=> BLAS

Délégation des
« bottlenecks »
au GPU



Code : « DP »

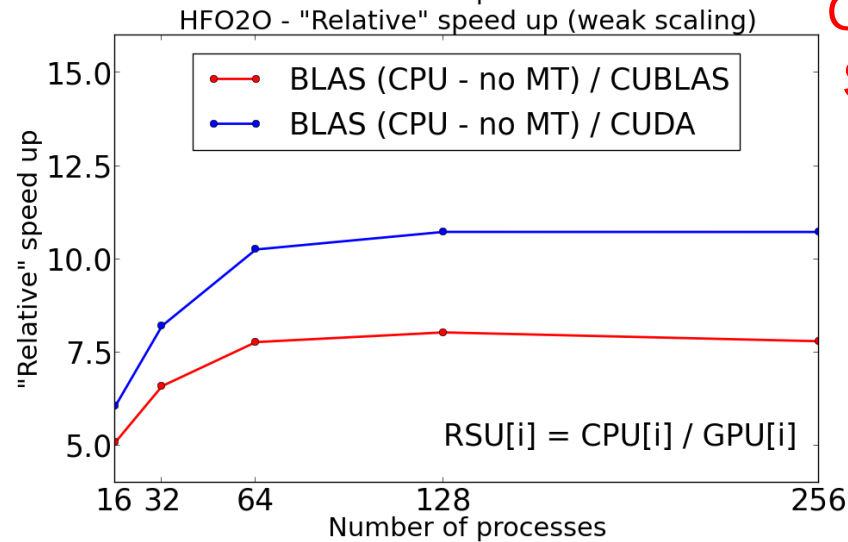
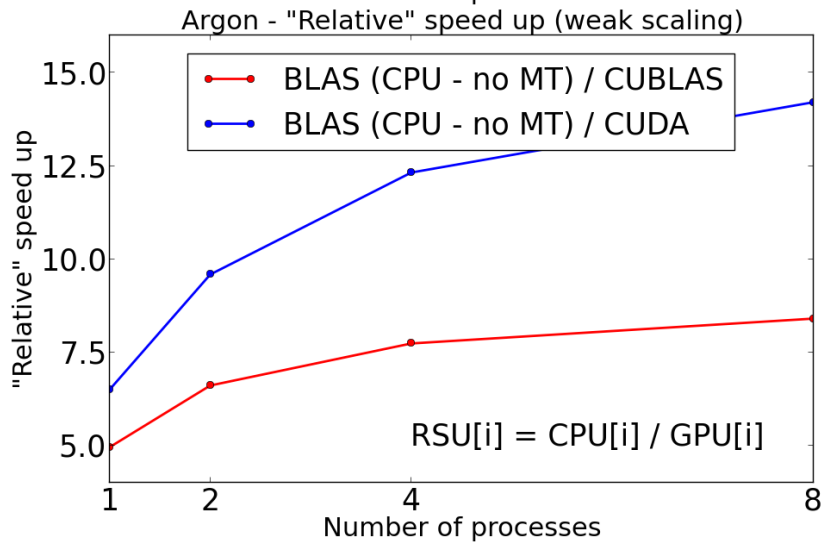
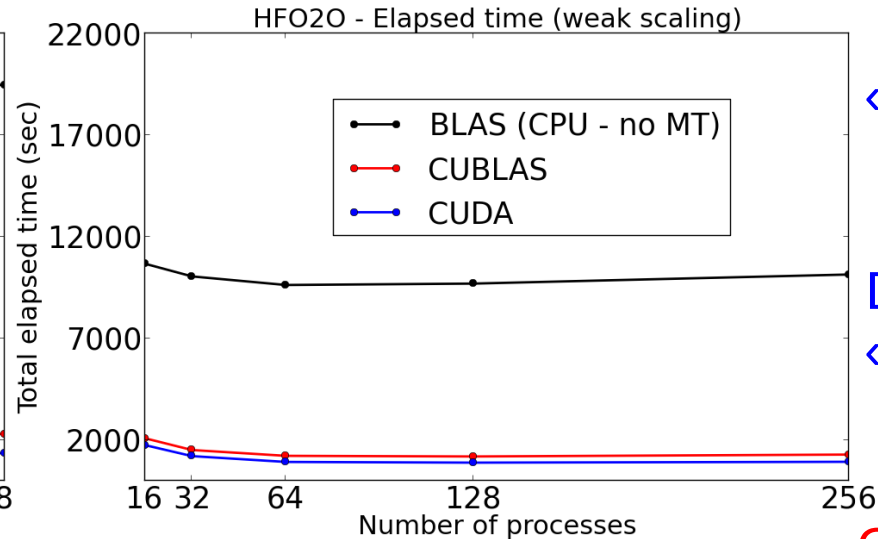
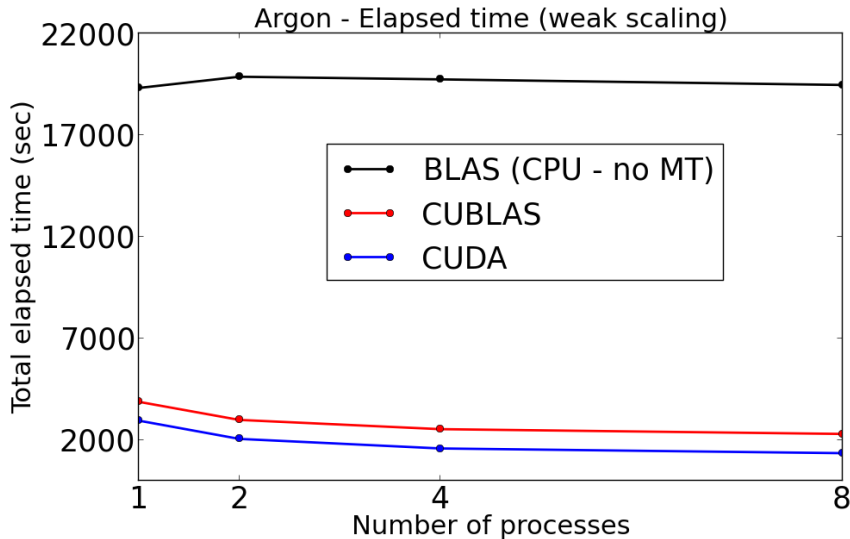


LSI / MDLS : accélération GPU

Identification
des
« bottlenecks »
=> BLAS

Délégation des
« bottlenecks »
au GPU

CUDA / cuBLAS
Speed-up : 14x



Code : « DP »



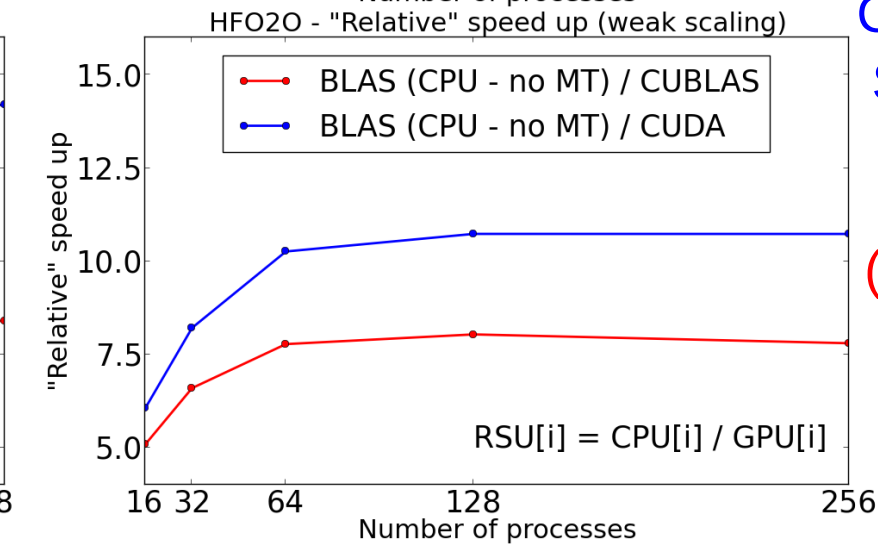
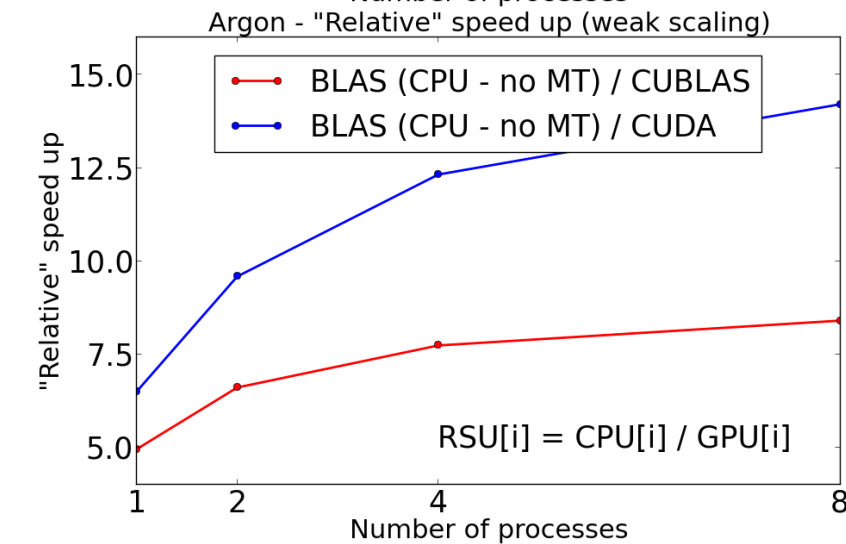
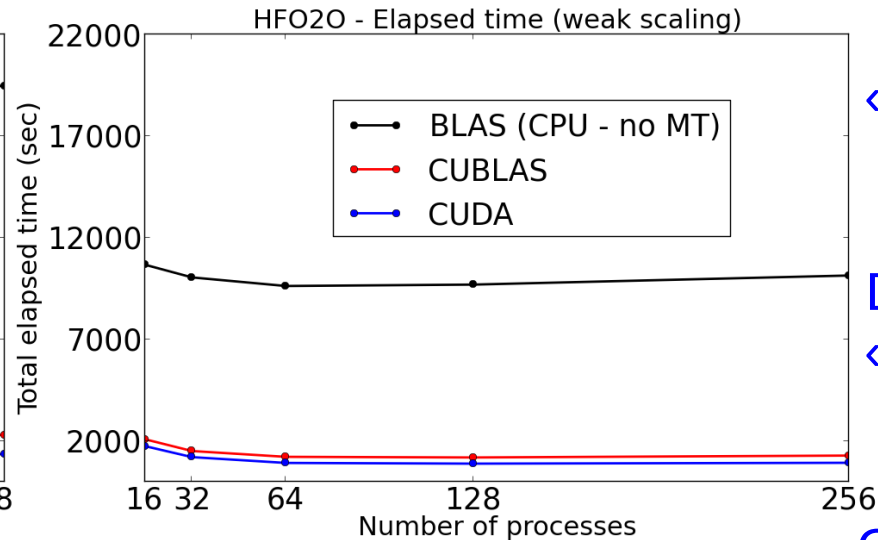
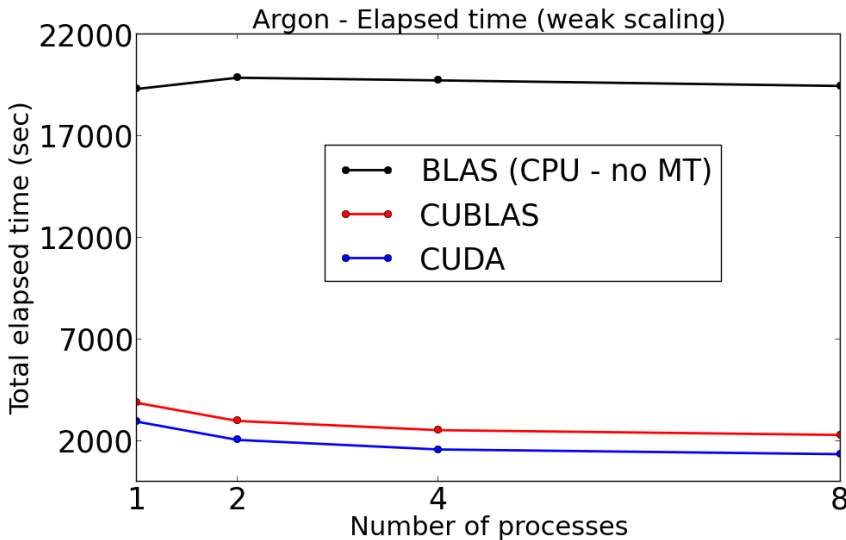
LSI / MDLS : accélération GPU

Identification des « bottlenecks » => BLAS

Délégation des « bottlenecks » au GPU

CUDA / cuBLAS
Speed-up : 14x

Dev : poincaré (Equip@MESO)



Code : « DP »



LSI / MDLS : accélération GPU

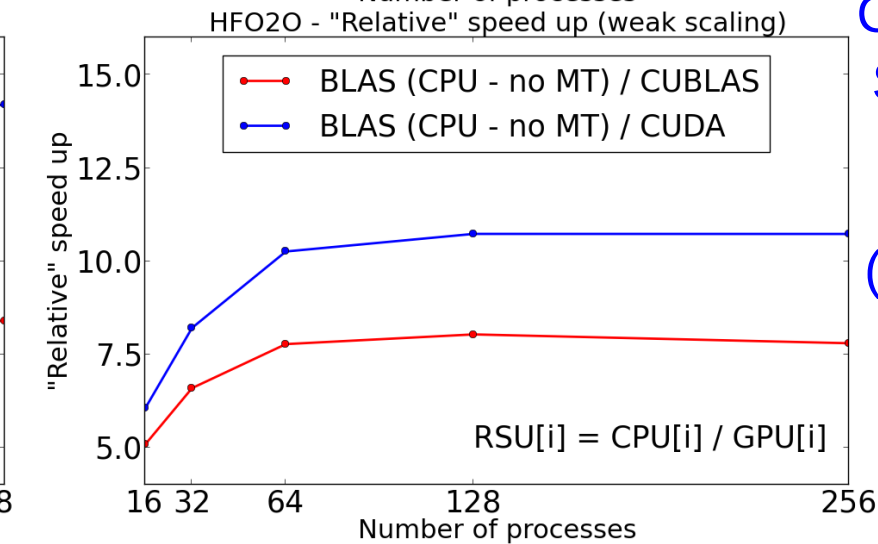
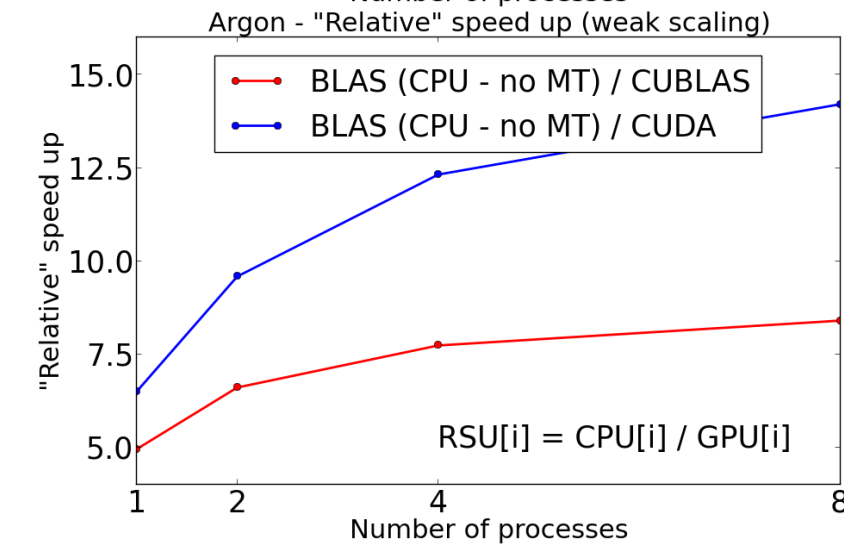
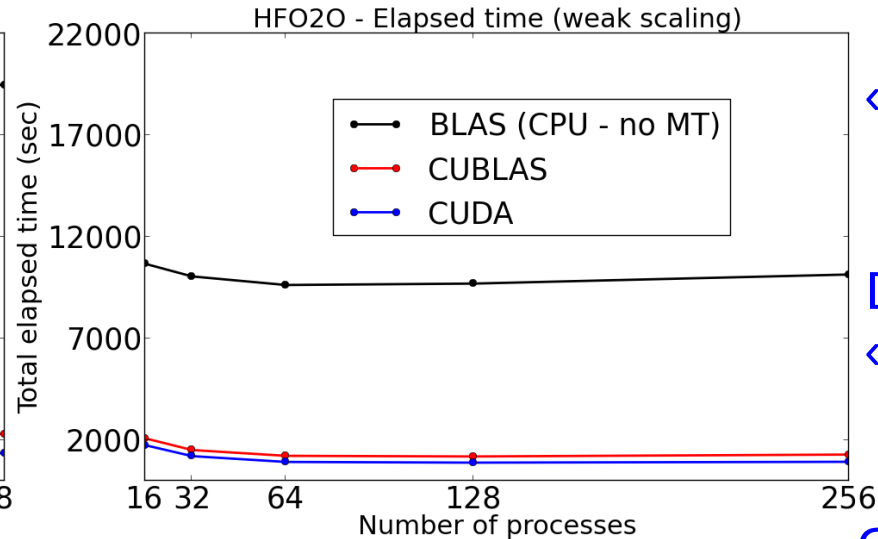
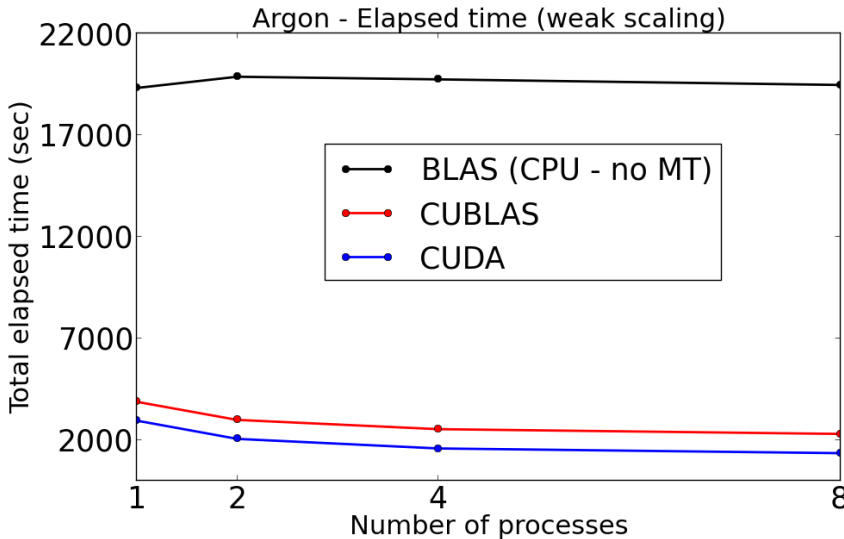
Identification
des
« bottlenecks »
=> BLAS

Délégation des
« bottlenecks »
au GPU

CUDA / cuBLAS
Speed-up : 14x

Dev : poincaré
(Equip@MESO)

Prod : curie
(PRACE)



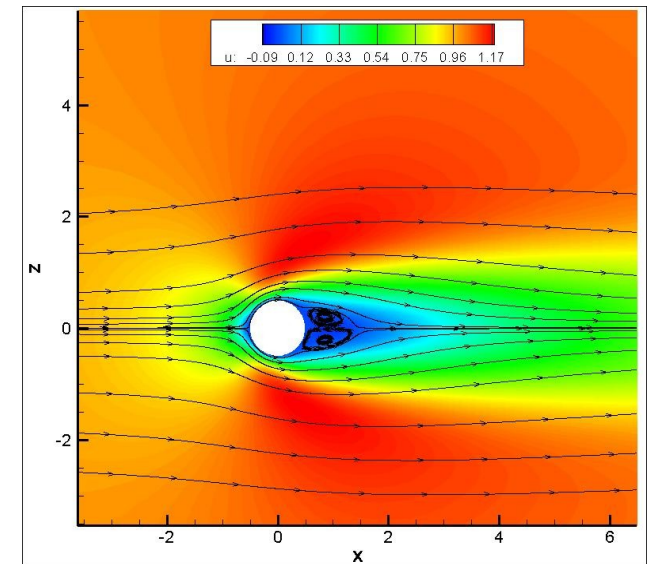
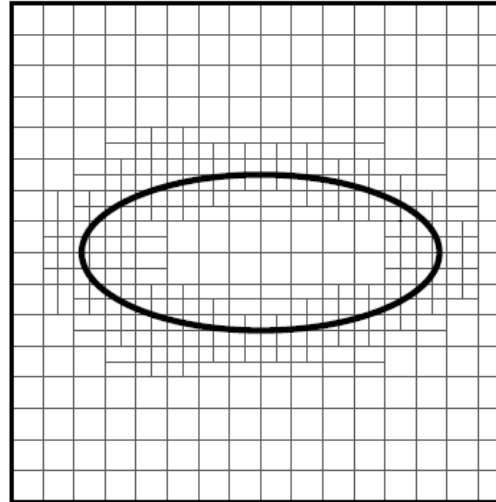
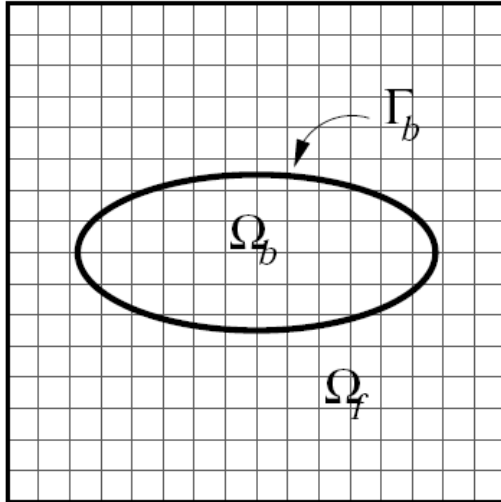
Code : « DP »



Le code NSIBM

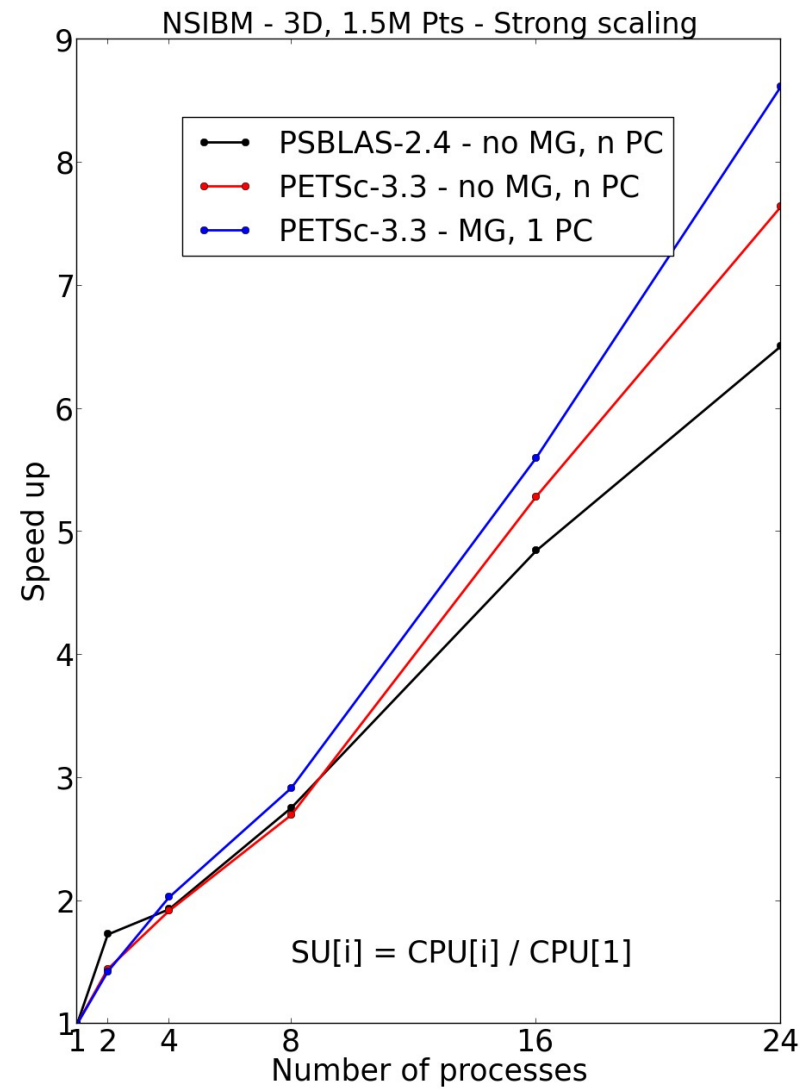
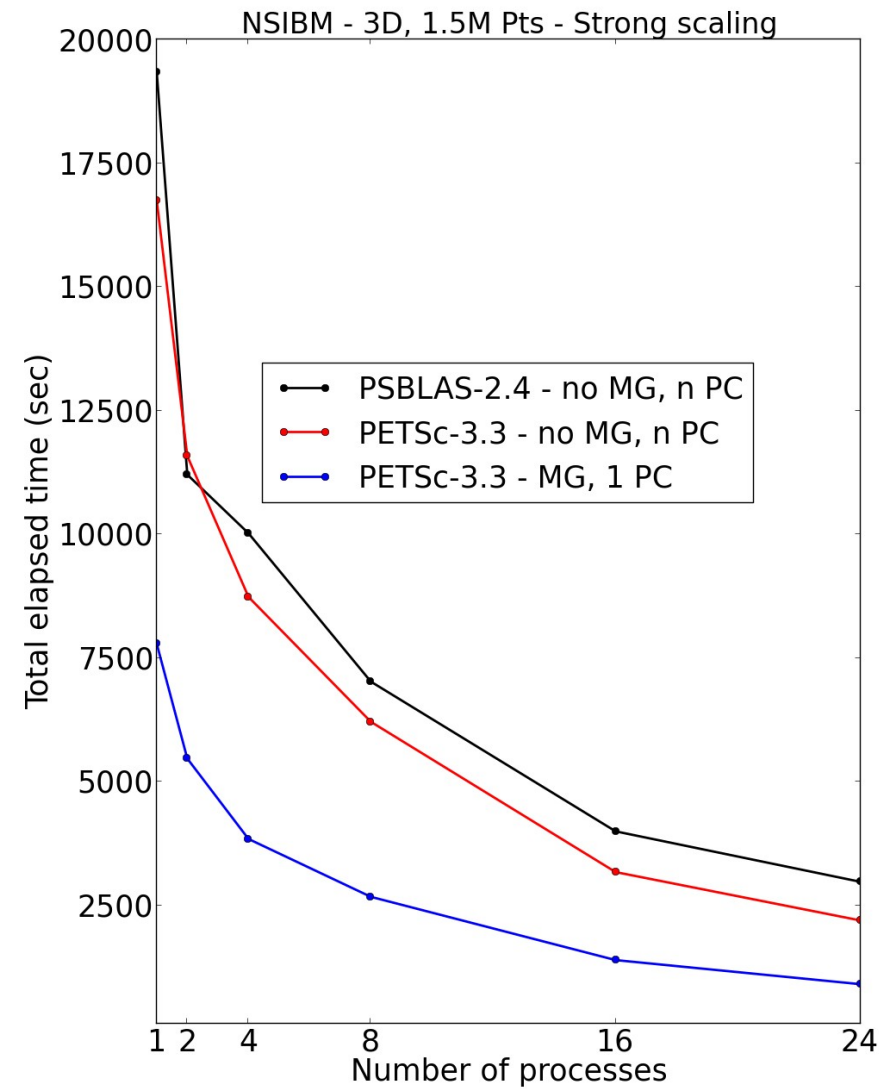
Incompressible Navier-Stokes Finite Volume flow solver,
based on Immersed Boundary Method,

Y. Hoarau, D. Durrenberger (Icube)



IMFS / MDLS : couplage PETSc

Identification
des
« bottlenecks »
=> solve



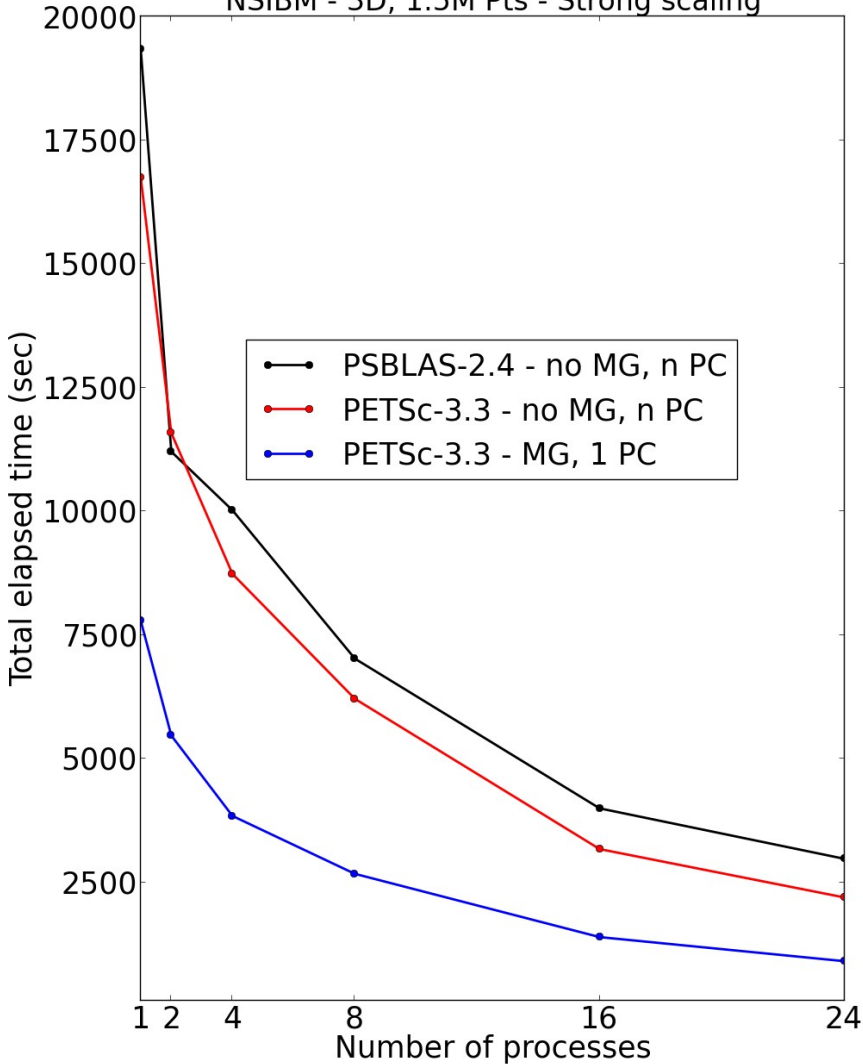
Code : « NSIBM »
(IMFS)

IMFS / MDLS : couplage PETSc

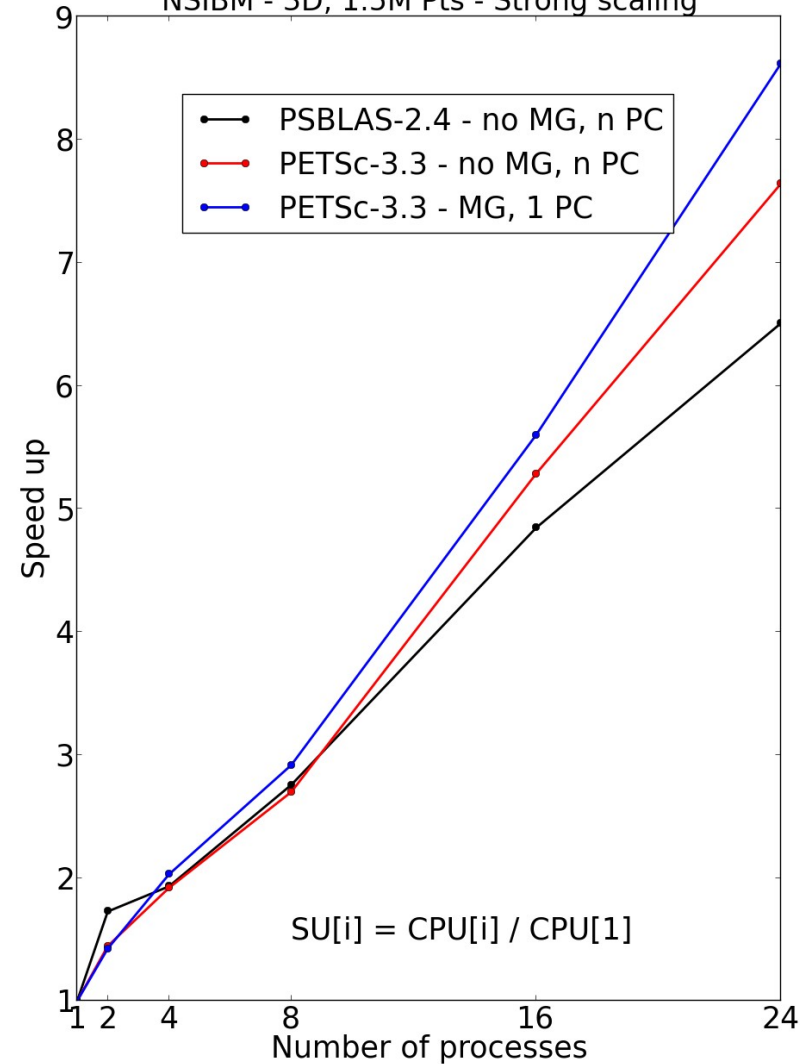
Identification
des
« bottlenecks »
=> solve

PETSc :
Multi-grille (MG)

NSIBM - 3D, 1.5M Pts - Strong scaling



NSIBM - 3D, 1.5M Pts - Strong scaling

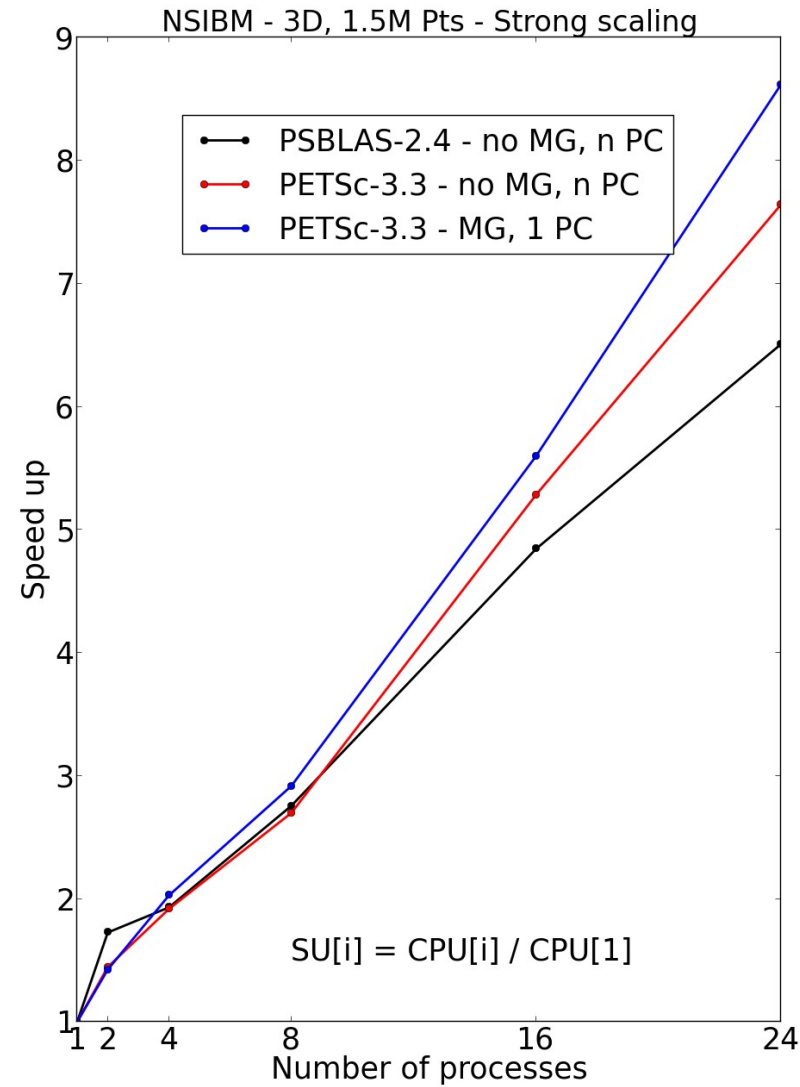
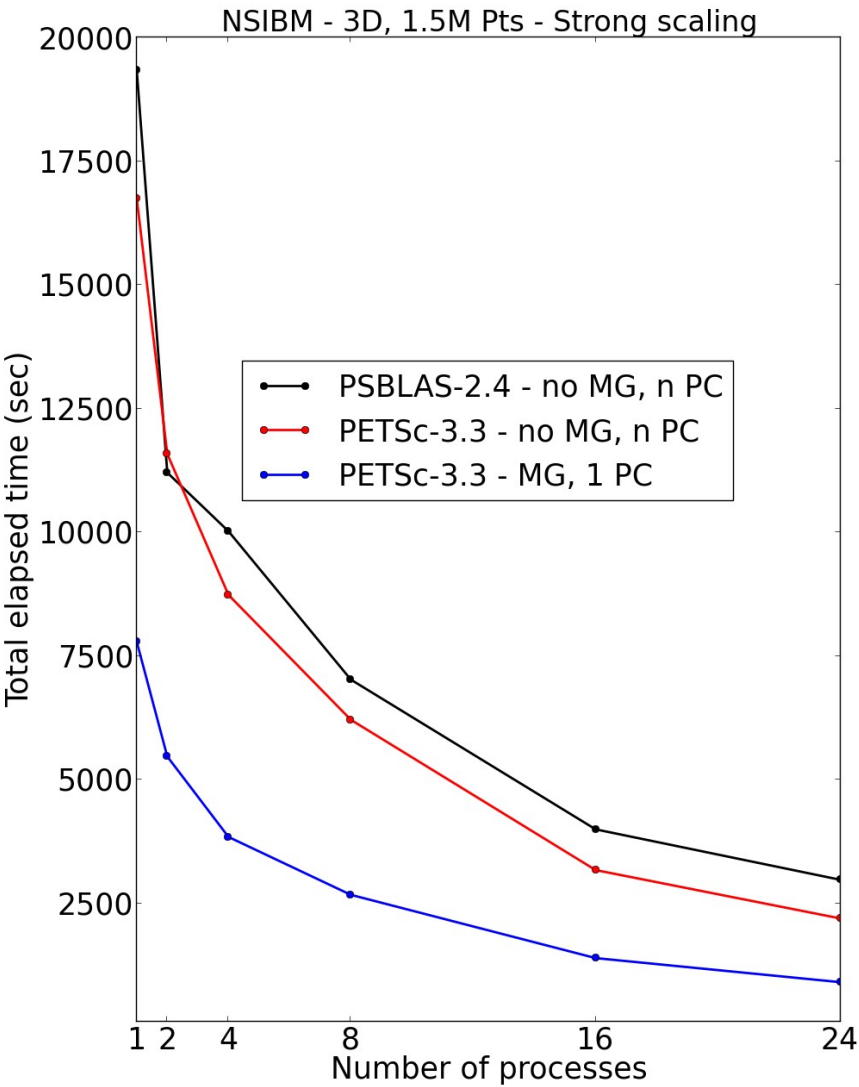


$$SU[i] = CPU[i] / CPU[1]$$



Code : « NSIBM »
(IMFS)

IMFS / MDLS : couplage PETSc



Identification
des
« bottlenecks »
=> solve

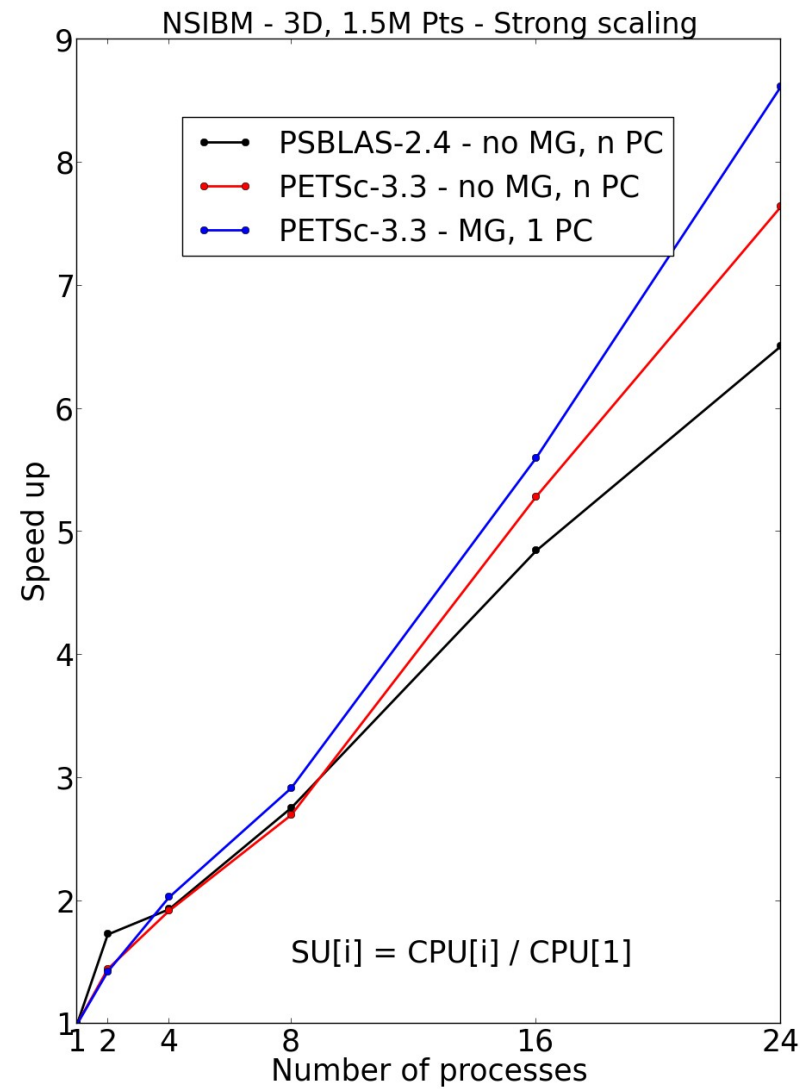
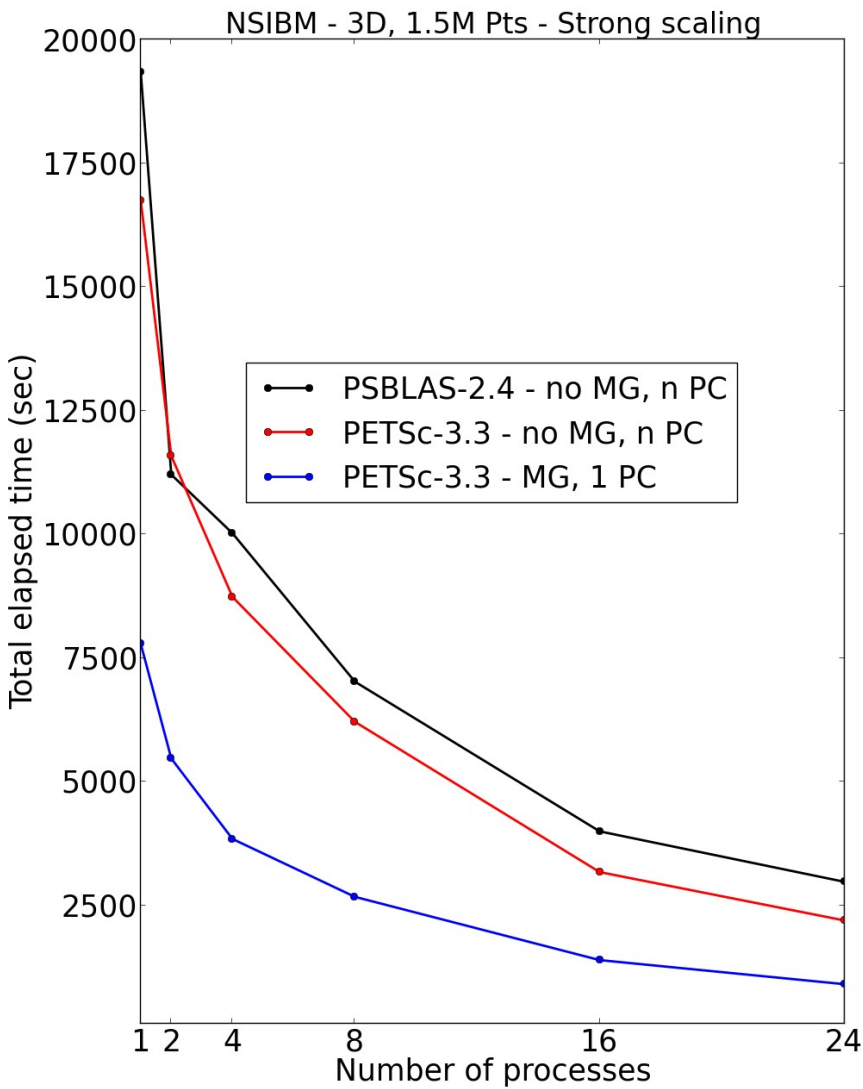
PETSc :
Multi-grille (MG)

PETSc :
ré-utilisation
du PC



Code : « NSIBM »
(IMFS)

IMFS / MDLS : couplage PETSc



Identification
des
« bottlenecks »
=> solve

PETSc :
Multi-grille (MG)

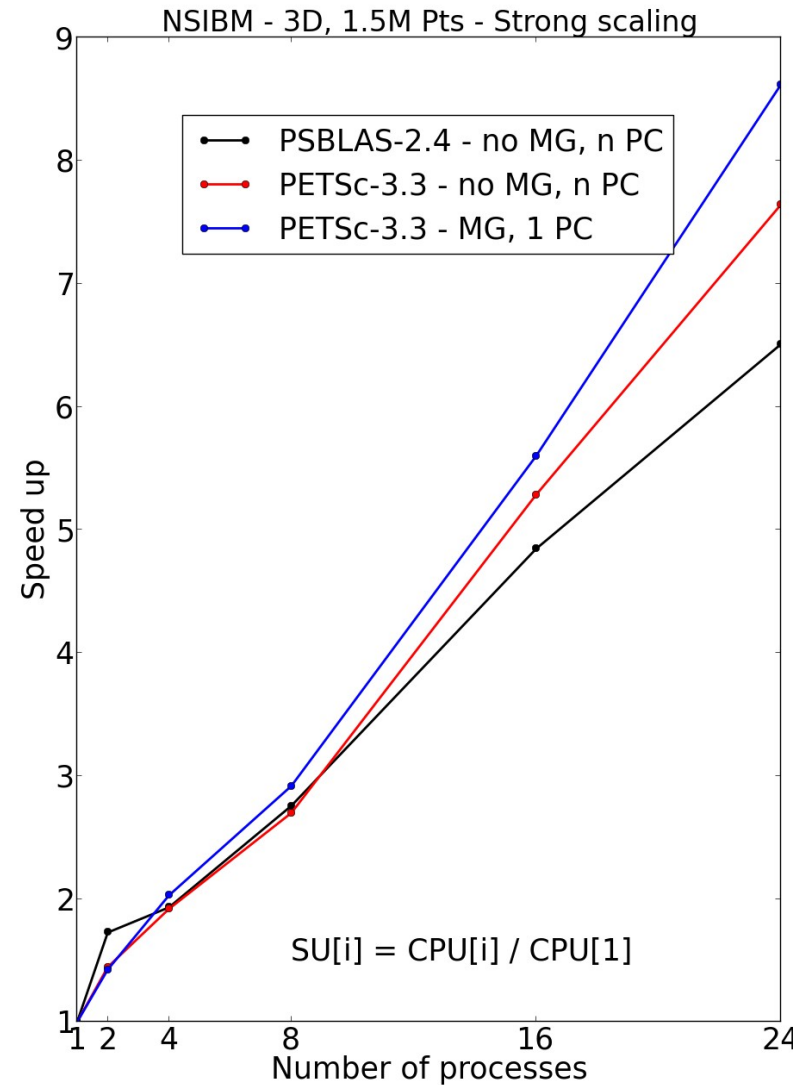
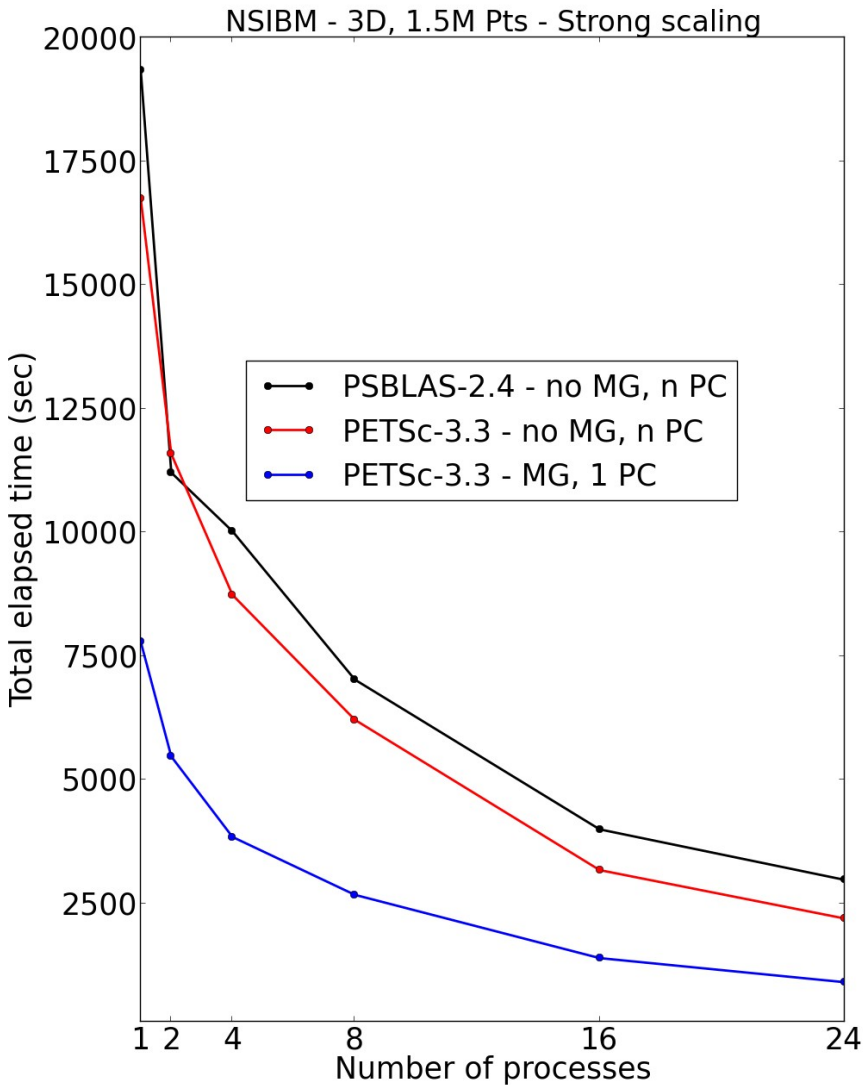
PETSc :
ré-utilisation
du PC

Amélioration :
✓ « elapsed »
✓ « speed-up »



Code : « NSIBM »
(IMFS)

IMFS / MDLS : couplage PETSc



Identification
des
« bottlenecks »
=> solve

PETSc :
Multi-grille (MG)

PETSc :
ré-utilisation
du PC

Amélioration :
✓ « elapsed »
✓ « speed-up »

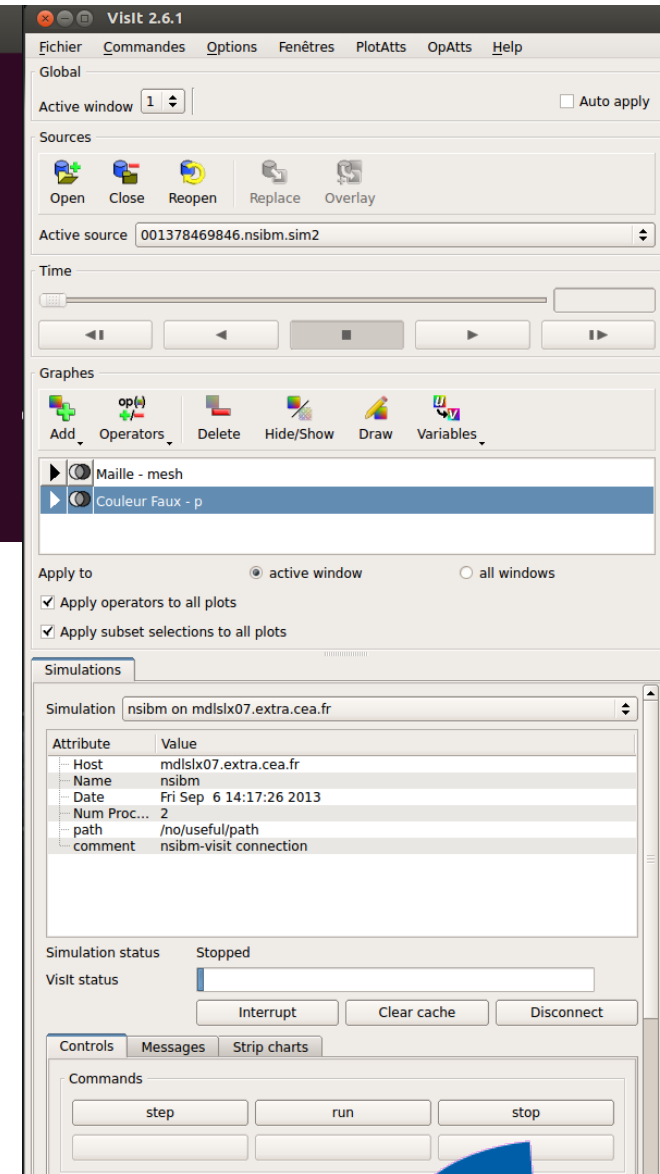
Dev : HPC
(Equip@MESO)



Code : « NSIBM »
(IMFS)

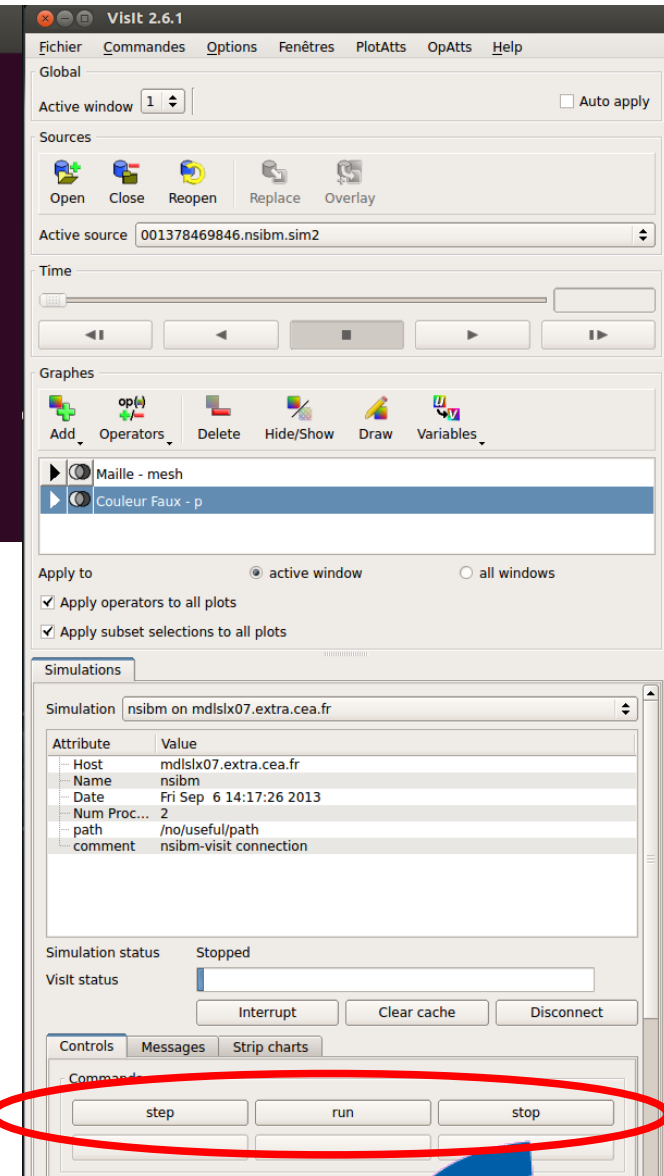
IMFS / MDLS : couplage « live » Visit

```
Terminal
~/Documents/MDLS/IMFS/NSIBM/2013.07.01/NSIBM/2D>mpirun -n 2 ../bin/NSIBMV -wv
  Router  Ninner  Continuity      U          V          W
nsibm#    0      : waits for visit...
nsibm#    0      : visit connection OK
nsibm#    0      : waits for visit...
nsibm#    1      : visit connection OK
nsibm#    0      : waits for visit...
  1       1      0.6271E-03     0.1895E-03    0.2535E-03    0.0000E+00
nsibm#    0      : waits for visit...
  2       1      0.5398E-03     0.1057E-02    0.1121E-03    0.0000E+00
nsibm#    0      : waits for visit...
  3       1      0.5002E-04     0.5638E-04    0.3359E-04    0.0000E+00
nsibm#    0      : waits for visit...
  4       1      0.1067E-05     0.1592E-04    0.2662E-04    0.0000E+00
```



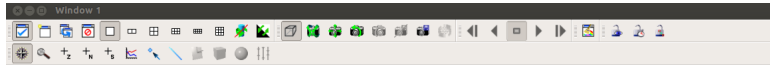
IMFS / MDLS : couplage « live » VisIt

```
Terminal
~/Documents/MDLS/IMFS/NSIBM/2013.07.01/NSIBM/2D>mpirun -n 2 ../bin/NSIBMV -wv
Router  Ninner  Continuity      U              V              W
nsibm#   0      : waits for visit...
nsibm#   0      : visit connection OK
nsibm#   0      : waits for visit...
nsibm#   1      : visit connection OK
nsibm#   0      : waits for visit...
nsibm#   1      1      0.6271E-03      0.1895E-03      0.2535E-03      0.0000E+00
nsibm#   0      : waits for visit...
nsibm#   2      1      0.5398E-03      0.1057E-02      0.1121E-03      0.0000E+00
nsibm#   0      : waits for visit...
nsibm#   3      1      0.5002E-04      0.5638E-04      0.3359E-04      0.0000E+00
nsibm#   0      : waits for visit...
nsibm#   4      1      0.1067E-05      0.1592E-04      0.2662E-04      0.0000E+00
```

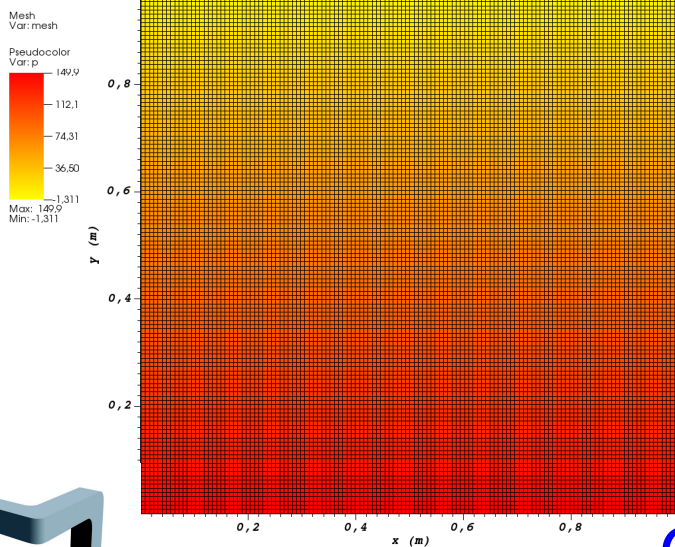


Interactions « live »
(step, run, stop)
entre la simulation
en cours et VisIt

Code : « NSIBM »
(IMFS)

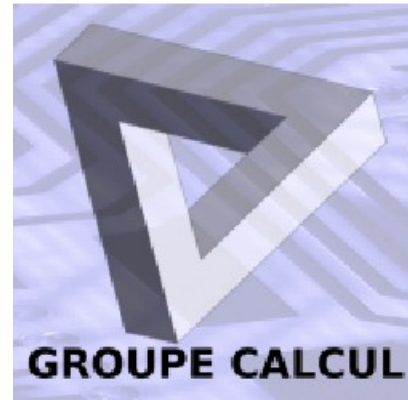


DB: 001378469846.nsibm.sim2
Cycle: 5
Time: 0.04





MAISON DE LA SIMULATION



Formations

M. KERN

Journée **Equip@Meso** Meso-Challenges
Institut Henri Poincaré
20 septembre 2013

Organisation

- ✓ Maison de la Simulation, avec Cerfacs et Groupe Calcul
- ✓ Groupe formation dans **Equip@Meso** (1 représentant par partenaire)

- ✓ Actions de formation (Debug, PETSc, ...)
- ✓ Journée scientifique annuelle :
Strasbourg (2012), Rouen (2013), Lyon (2014)



MAISON DE LA SIMULATION



A venir

- ✓ Hierarchical methods in linear algebra
(Multigrid and H-matrices)
2-4 Oct, Maison de la Simulation
- ✓ Optimisation (avec Groupe Calcul)
7-11 Oct, MdS **COMPLET**

Programme 2013-2014 à définir



MAISON DE LA SIMULATION

