

Optimisation du schéma numérique du code open-source thermohydraulique HPC TRUST par vectorisation

Labo d'accueil : ISAS/DES/DM2S/STMF/LGLS

Encadrant : Adrien BRUNETON (adrien.bruneton@cea.fr)

Démarrage : mars 2022

La plateforme open-source thermohydraulique TRUST, développée au sein du CEA/DES, permet entre autres la résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles. Dans le code le parallélisme repose pour l'instant exclusivement sur les mécanismes MPI (paradigme SPMD), permettant des simulations HPC montant jusqu'à plus de 50 000 processeurs, pour des maillages pouvant atteindre jusqu'à 2 milliards d'éléments.

Depuis plusieurs années, la loi de Moore sur la progression de la performance des processeurs est mise en défaut, et les gains actuels des CPUs ne se font notamment plus sur la fréquence d'horloge, mais principalement sur le parallélisme matériel implémenté dans le silicium : chaque socket bénéficie de plus de coeurs de calculs, et ces coeurs sont optimisés pour des instructions vectorisées. Une telle instruction permet d'effectuer les opérations arithmétiques de base de manière groupée. Ainsi, avec les bonnes instructions, le processeur peut par exemple effectuer la multiplication de 64 flottants dans plus ou moins le même nombre de cycles que ce qui était requis pour une unique multiplication scalaire.

TRUST n'utilise pour l'instant que très peu ces mécanismes, notamment pour des raisons structurelles. En effet, pour tous les maillages supportés par la plateforme, des calculs d'indirection d'indices sont fait à un niveau relativement bas, et cela empêche le traitement linéaire et contigu des données. Une des stratégies qui pourra être envisagée est la mise en place d'un mécanisme de "pre-fetching", par lequel les données sont copiées dans une structure contiguë, traitées de manière vectorielle, et ensuite re-dispatchées dans leur emplacement d'origine.

Le but de ce stage est donc:

- de consolider la mise en place d'une maquette représentative des éléments clefs du code en terme de performance et de fonctionnalités ("mini-TRUST") ;
- d'étudier dans un premier temps le gain de performance sur un opérateur simple de diffusion ;
- d'étendre le cas échéant le travail aux autres opérateurs et/ou de revoir l'architecture du code à un plus haut niveau (seulement sur "mini-TRUST") pour permettre une mise en place plus aisée de la vectorisation.

De nombreux cas d'applications concrets sur des calculs CFD serviront d'illustration à la démarche et permettront par ailleurs au stagiaire d'en apprendre plus sur ce domaine, notamment sur la modélisation numérique de la mécanique des fluides.

Lieu : le stage se déroulera dans les locaux du DES/ISAS/DM2S/STMF/LGLS au CEA Saclay. Un système de navette permet de s'y rendre depuis plusieurs points de départ autour de Paris, et en banlieue.

Compétences :

- bonne maîtrise du C++, avec des connaissances de base sur le parallélisme (idéalement la vectorisation),
- scripting Python, shell et une aisance avec l'environnement Linux en général,
- des connaissances sur la gestion de version GIT seront appréciées.

Rémunération : la rémunération est fixée par les grilles du CEA et dépend de la formation initiale du (de la) candidat(e) retenu(e).