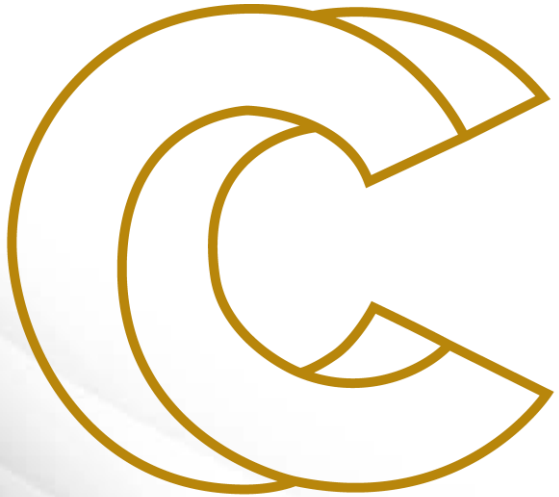


EURO^2

Introduction au calcul intensif

par EuroCC Belgium

Plan

PARTIE 1

- Introduction
  - Exemple d'applications du calcul intensif
  - EuroHPC JU et le projet EuroCC
- État actuel des infrastructures de calcul intensif
  - Performances et la liste TOP500
  - Supercalculateurs en Europe et en Belgique

PARTIE 2

- Comment fonctionne un supercalculateur
  - Architecture & composants
  - Interagir avec un supercalculateur
- Comment utiliser efficacement les ressources
  - Parallélisation
  - Problèmes liés à la parallélisation
  - Quels outils utiliser

PARTIE 1

Qu’est ce que le calcul intensif (HPC)

EURO²

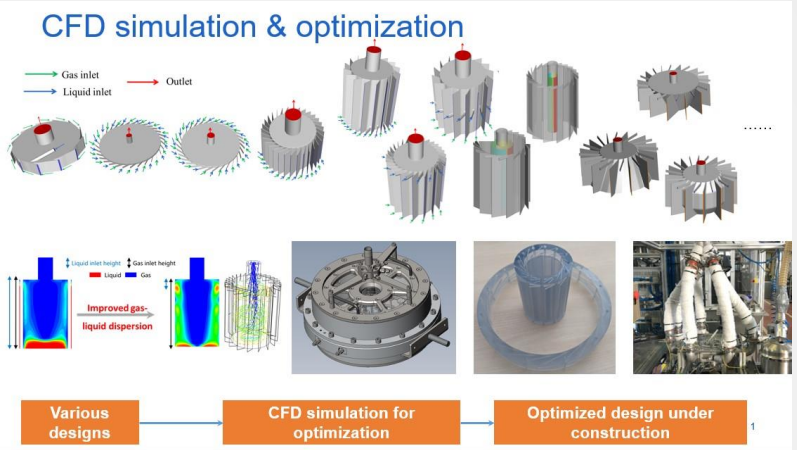
- Agrégation de la puissance informatique (sous la forme de superordinateurs ou de clusters de calculs) pour fournir des performances de calcul élevées, afin de résoudre des calculs très lourds.
- Les *Clusters* sont des ordinateurs reliés entre eux (= nœuds) qui fonctionnent ensemble, de sorte que, pour de nombreux aspects, ils ressemblent à un seul ordinateur.
- Le travail est réparti entre les différentes unités de calcul.

Exemples d’applications

Plus d’exemples sur www.enccb.be/stories

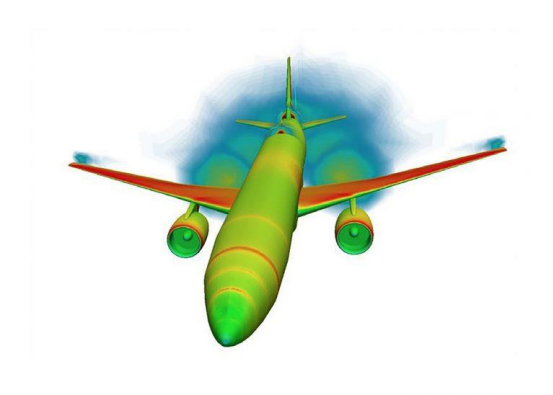
Exemples: Dynamique des fluides (CFD)

Optimisation de la capture du CO_2



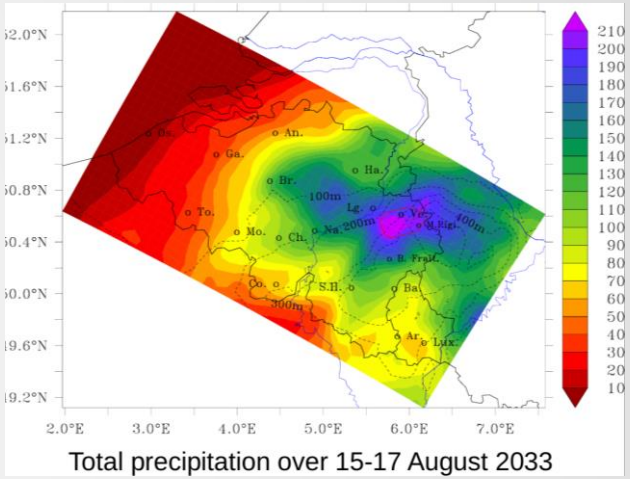
https://www.enccb.be/usvortexunit

Design d'avions



https://prace-ri.eu/automating-aircraft-design-and-optimisation/

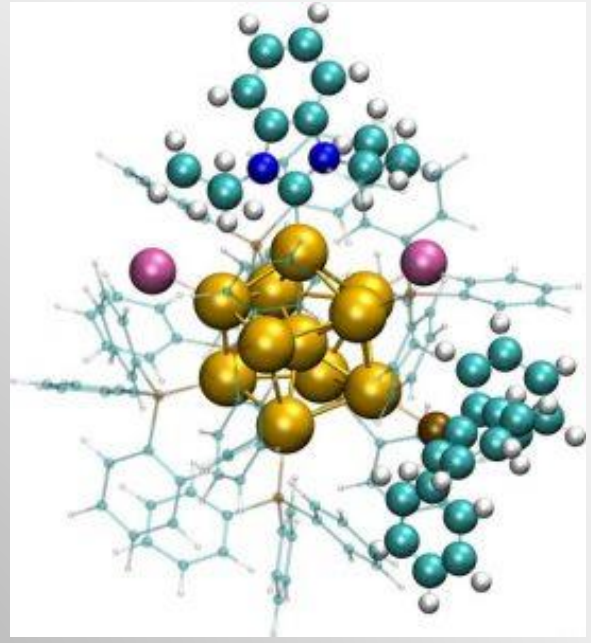
Prédiction du climat



https://www.enccb.be/usxavierfettweis

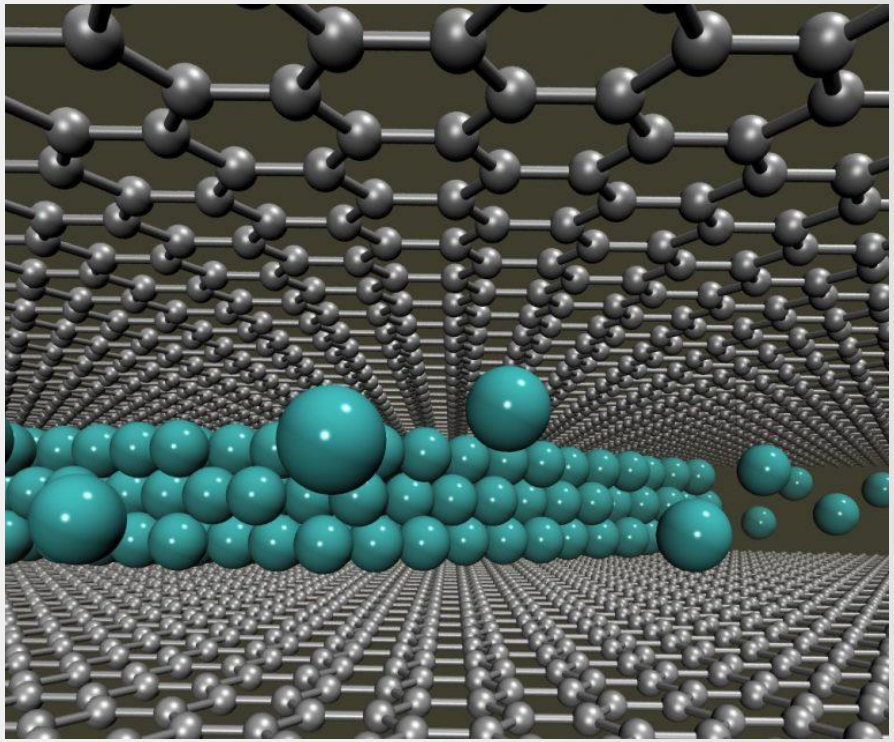
Exemples: Matériaux

Prédiction de la structure de clusters d'atomes d'or pour la décomposition du CO_2



https://prace-ri.eu/computer-simulations-gold-cluster/

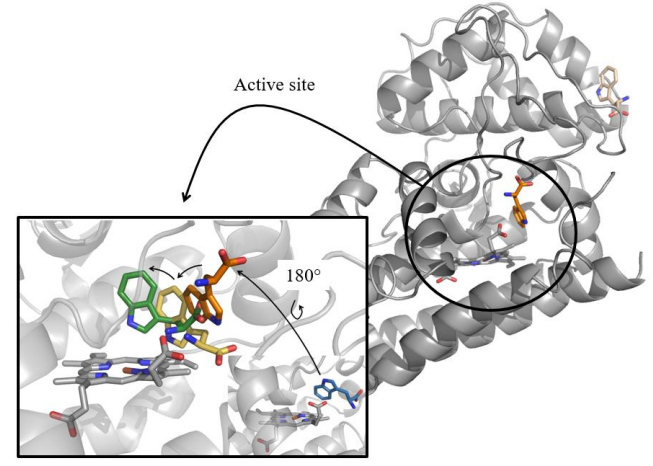
Adapter les propriétés des matériaux 2D



https://prace-ri.eu/simulations-help-to-tailor-the-properties-of-2d-materials/

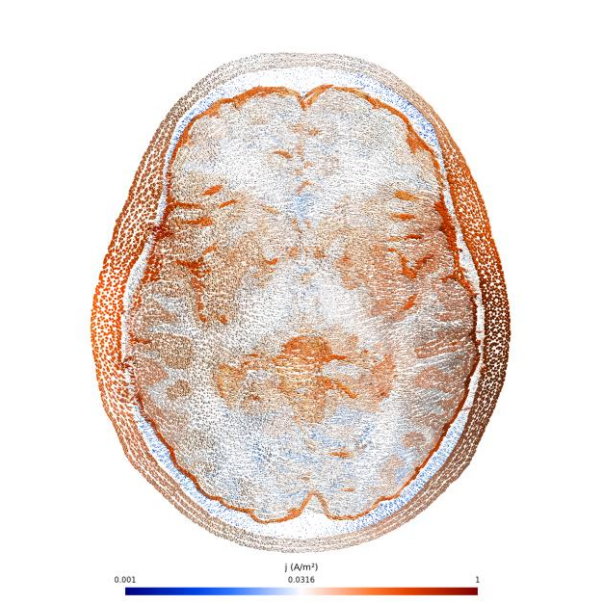
Exemples: Biologie

Décryptage du comportement de la protéine hIDO1



https://www.enccb.be/usmanonmirgaux

Comprendre la propagation des ondes radio dans la tête avec Shamo



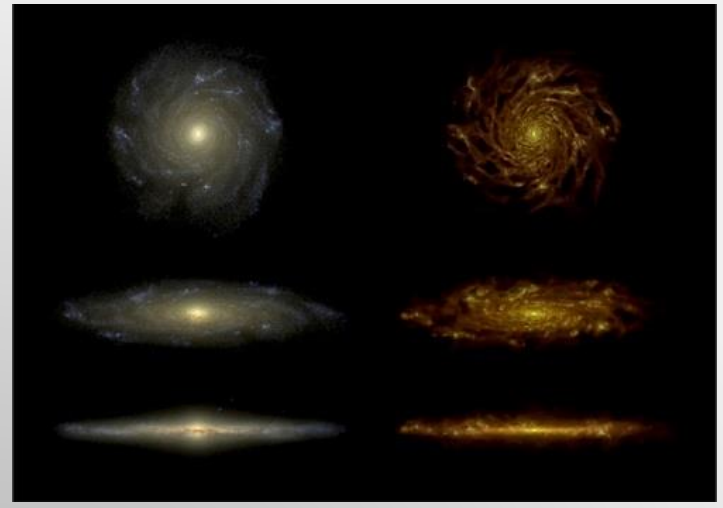
https://www.enccb.be/usshamo

Améliorer le chocolat grâce aux supercalculateurs

https://www.enccb.be/uschocolate

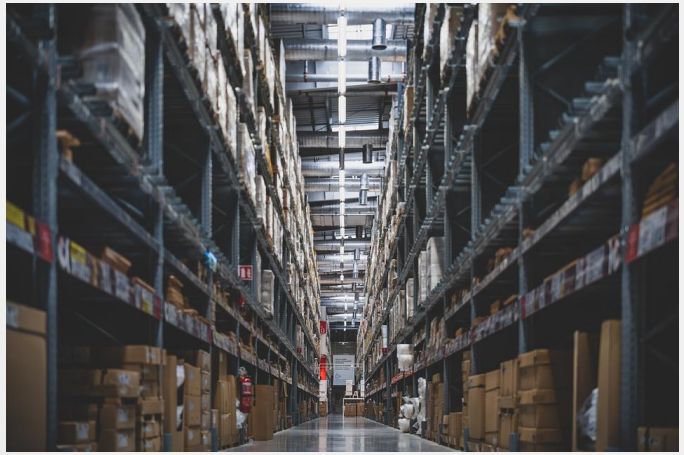
Exemples: Physique, mathématique, ingénierie,…

Simuler les galaxies



https://www.enccb.be/usuniverse

Dépasser les problèmes NP-difficiles



https://www.enccb.be/uslogisticsnphardness

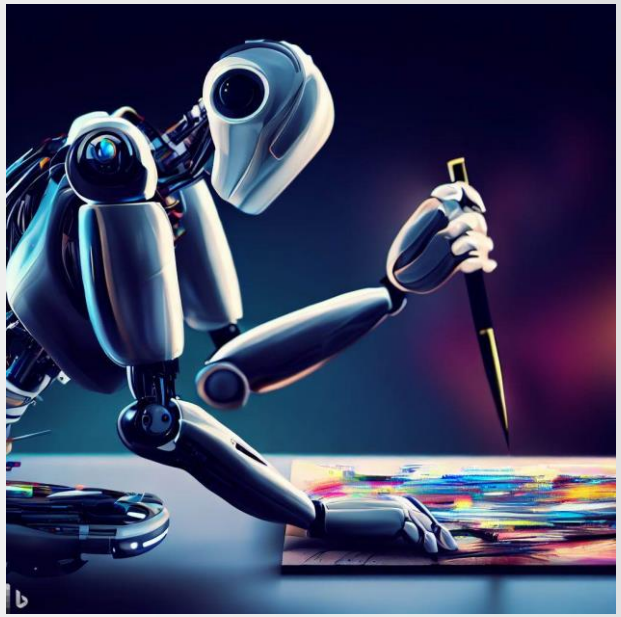
Optimisation des procédés de fabrication par la simulation avec MPacts

https://www.enccb.be/usmpacts

Exemples

Mais aussi:

- Intelligence artificielle
- Machine learning
- Analyse de données
- …



Qu’est-ce qu’EuroCC?

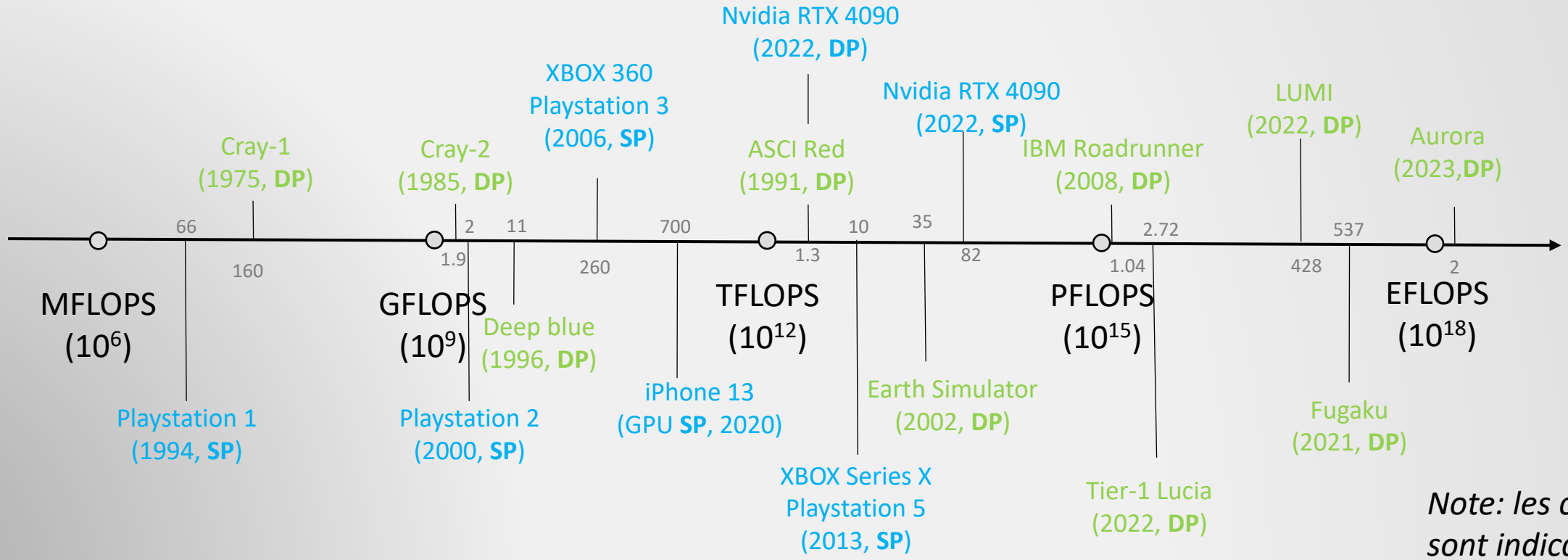
- EuroHPC Join Undertaking (JU) est une initiative conjointe entre des pays de l’UE et des partenaires privés pour développer un écosystème de calcul intensif de classe mondial en Europe.
- EuroCC est un projet d’EuroHPC JU, il a pour but d’amener les pays participants à créer des centres de compétences nationaux (NCC) qui coordonnent les activités dans les domaines HPC/HPDA/AI et servent de point de contact.
  → plus d’informations sur https://www.enccb.be/.
- Différentes missions, y compris le contact avec l’industrie, la sensibilisation et l’organisation de formation.

Où en sommes-nous aujourd'hui?

Quels supercalculateurs pour la Belgique

Performances

- Une façon de mesurer les performances: FLOPS = floating point operations per second (≃ vitesse)
- Ça dépend de la précision (SP: 32 bits; DP: 64 bits)!



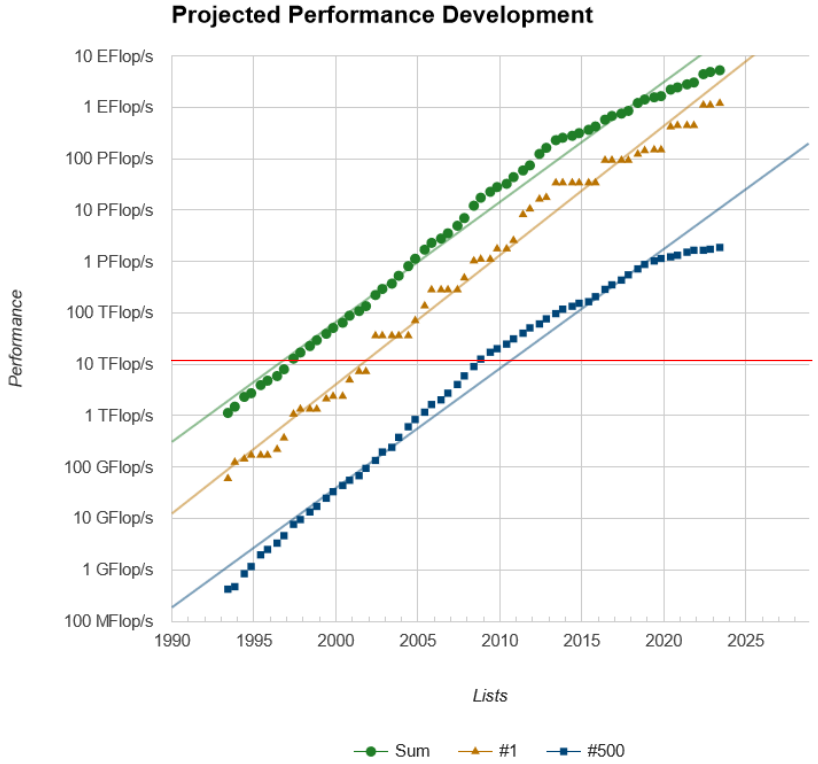
Note: les chiffres sont indicatifs

Le TOP500

EURO²

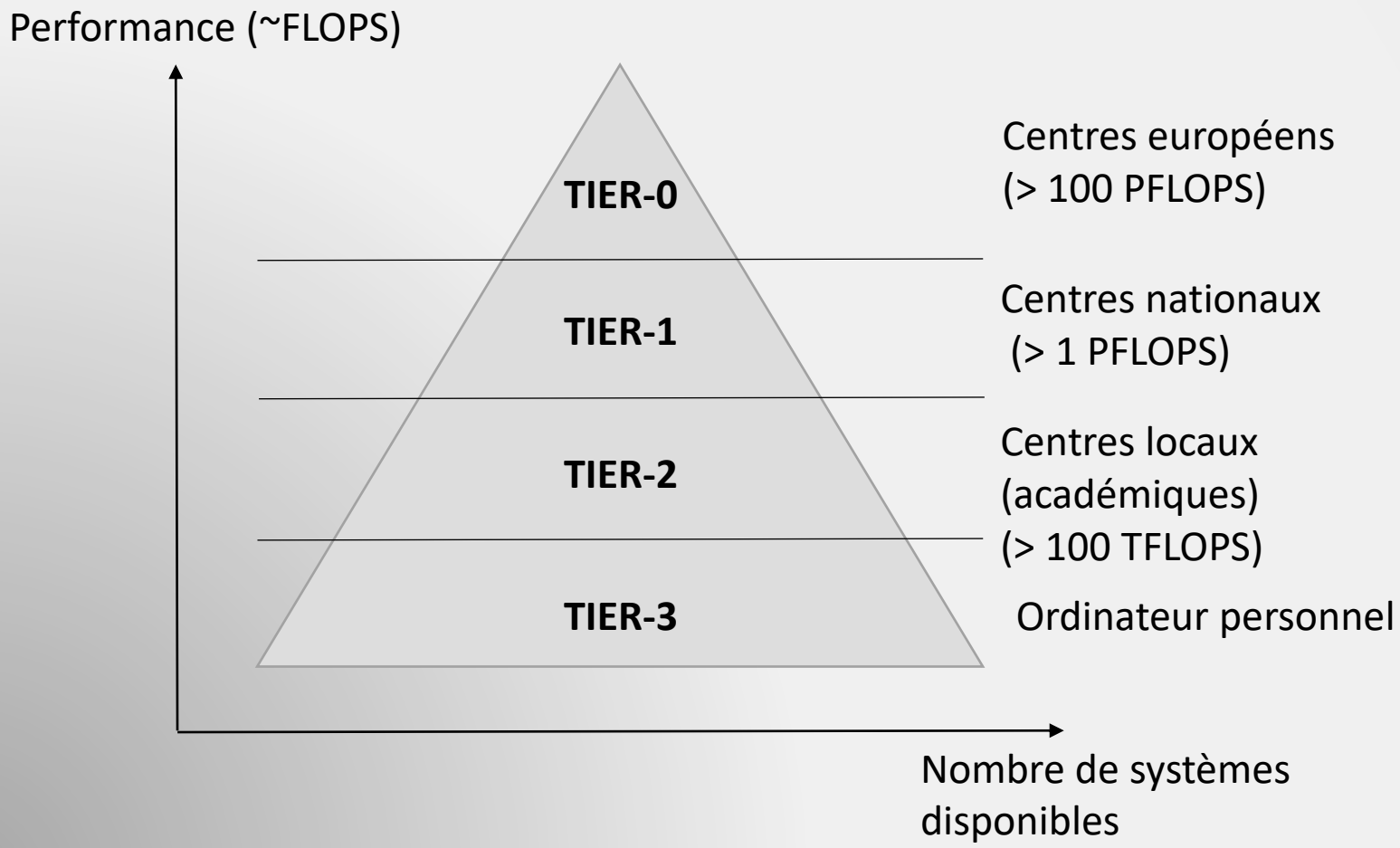
Le TOP500 est une liste des supercalculateurs les plus rapides

Rank	System	Cores	Rmax (PFlop/s)	Rpeak (PFlop/s)	Power (kW)
1	**Frontier** - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	8,699,904	1,194.00	1,679.82	22,703
2	**Supercomputer Fugaku** - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7,630,848	442.01	537.21	29,899
3	**LUMI** - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE EuroHPC/CSC Finland	2,220,288	309.10	428.70	6,016
4	**Leonardo** - BullSequana XH2000, Xeon Platinum 8358 32C 2.6GHz, NVIDIA A100 SXM4 64 GB, Quad-rail NVIDIA HDR100 Infiniband, Atos EuroHPC/CINECA Italy	1,824,768	238.70	304.47	7,404
5	**Summit** - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	2,414,592	148.60	200.79	10,096
6	**Sierra** - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM / NVIDIA / Mellanox DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,480	94.64	125.71	7,438



XBOX – PS5

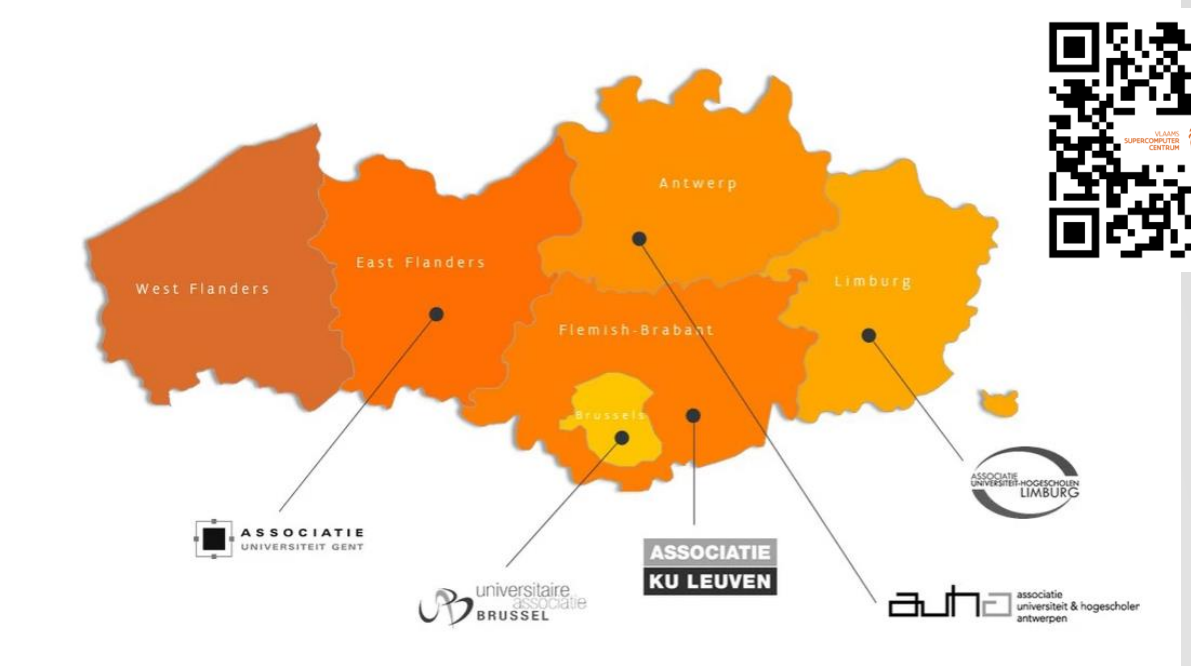
Supercalculateurs en Europe



Note: avoir accès aux niveaux supérieurs nécessite d'avoir démontrer l'efficacité de son programme

TIER-2 en Belgique (niveau académique)

*Wallonie: **CÉCI** (http://www.ceci-hpc.be/)*



*Flandre: Le **VSC** (https://www.vscentrum.be/)*

Accessible à tous les chercheurs des universités correspondantes. Des formations sont organisées tous les ans.

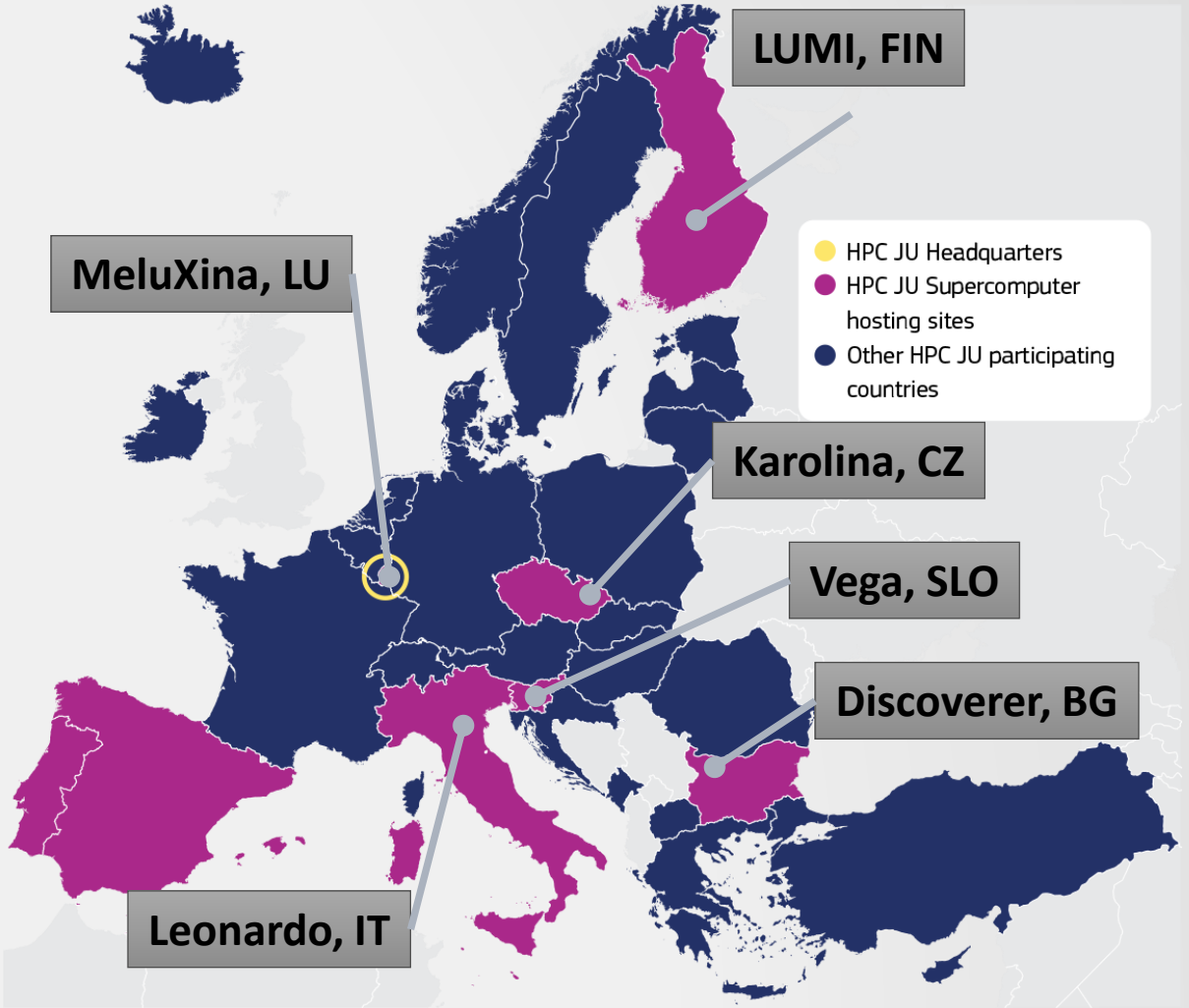
TIER-1 en Belgique

HORTENSE, exploité par le VSC (https://www.vscentrum.be/)

Lucia, exploité par Cenaero (https://www.cenaero.be/)

Accès possible via des appels réguliers

Infrastructures européennes (TIER-0)



LUMI

https://www.lumi-supercomputer.eu/
https://www.enccb.be/LUMI/

- Premier supercalculateur pre-exascale
- 100% hydroélectricité
- Formations régulières organisées en Belgique

Conclusions

Conclusions

- Le calcul intensif est important pour la recherche actuelle et future
- Le calcul intensif est un domaine en plein développement en Belgique
- La Belgique dispose de nombreuses ressources en matière de supercalculateurs.
- N'hésitez pas à nous contacter, nous sommes là pour vous aider !

→ Plus d'informations sur:

- https://www.enccb.be/
- https://www.ceci-hpc.be/
- https://www.vscentrum.be/

Merci!

Funded by
the European Union

EuroHPC
Joint Undertaking

Funded by the European Union. This work has received funding from the European High Performance Computing Joint Undertaking (JU) and Germany, Bulgaria, Austria, Croatia, Cyprus, Czech Republic, Denmark, Estonia, Finland, Greece, Hungary, Ireland, Italy, Lithuania, Latvia, Poland, Portugal, Romania, Slovenia, Spain, Sweden, France, Netherlands, Belgium, Luxembourg, Slovakia, Norway, Türkiye, Republic of North Macedonia, Iceland, Montenegro, Serbia under grant agreement No 101101903.