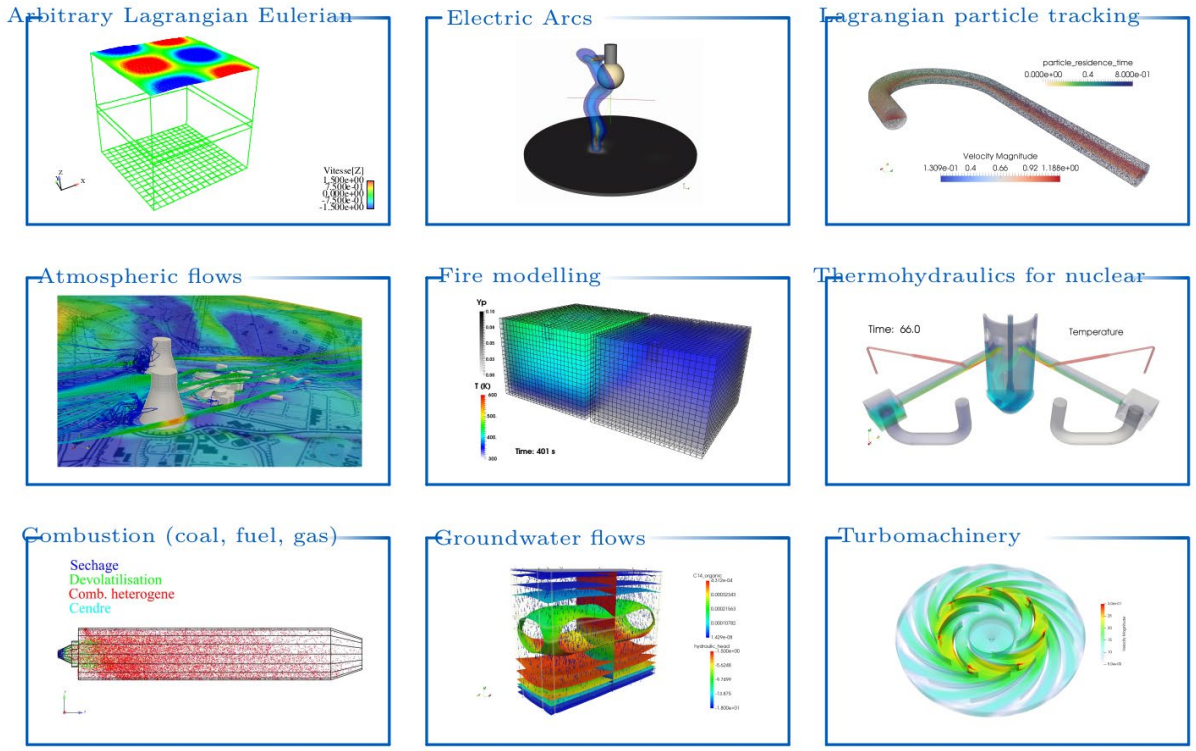
Optimisation de code_saturne sur ARM/AWS

Hackathon 2022

code_saturne: enjeux et context industriel

code_saturne est l'outil de référence à EDF pour les études de thermohydraulique monophasique

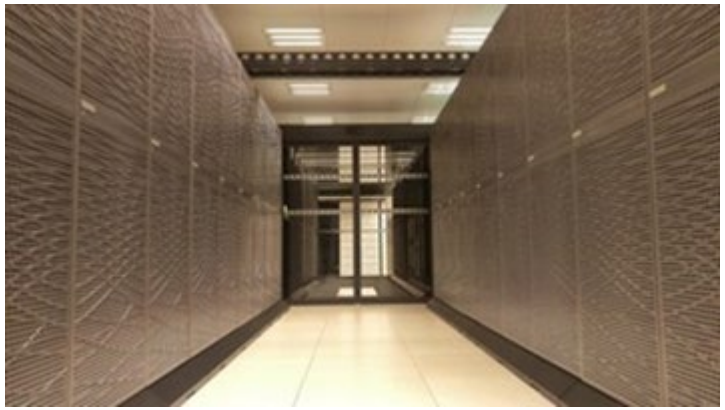
- Développé depuis 1997
  - Propriété EDF, distribué sous licence GPL depuis 2007.
    - Facilite les partenariats.
  - Sous assurance qualité, avec une base de validation et vérification importante.
  - Le module multiphasique neptune_cfd (non open-source) s'appuie sur la même architecture et étend le domaine d'application.
- De nombreuses applications EDF et externes, nucléaires ou non.
- https://code-saturne.org



code_saturne: enjeux et context industriel

Utilisation du calcul haute performance.

- En CFD, de nombreuses grandeurs ne sont accessibles que via des calculs à haute résolution, et souvent pour des scénarios instationnaires longs.
- Ceci se traduit par des calculs industriels sur maillages de quelques millions à plus d'un milliard de mailles.
  - Sur 10 à 20K processeurs (via MPI).
  - Scalabilité assurée si n cellules/cœur > 50000.
  - Il n'est pas rare qu'une étude totalise plusieurs semaines de calcul (et des millions d'heures CPU).
- Dans ce contexte, il est essentiel de suivre et s'adapter aux évolutions des calculateurs.



Besoins d'adaptation aux Nouvelles architectures

Le parallélisme actuel s'appuie principalement sur MPI. Un second niveau OpenMP est possible, mais doit être modernisé ou remplacé.

- Les travaux sur le parallélisme « local » (intra-nœud/mémoire partagée) doivent permettre d'améliorer la scalabilité forte
  - Pour augmenter le nombre de « threads », on devra s'affranchir des boucles nécessitant des numérotations statiques…
    - Même problématique que sur GPU, mais codage plus simple.
  - Le second niveau de parallélisme doit encore être déployé de manière plus systématique.
  - On s'appuiera par défaut sur OpenMP, mais des approches type DPC++/CUDA C++ sont localement possibles.
    - Le code actuel est à base de 80% C (en hausse), 20% Fortran (en baisse)
- Un portage initial sur ARM A64 FX a été réalisé.
  - On pourra se concentrer sur l'optimisation

Aspects pratiques

Support et conseils de l'équipe de développement de code_saturne

- EDF fournira un ou plusieurs cas « benchmark »
- Un accès privilégié aux développeurs sera assuré
  - Réunions à distance planifiées et à la demande
  - Mini-formation pour proposer des premières pistes
- Les contributeurs seront cités dans la liste des contributeurs
  - Fichier AUTHORS sous GitHub
    - Sauf si ils ne le souhaitent pas
  - Possibilité éventuelle de publication
  - Vous êtes les bienvenus !


Merci