

Austral : architecture et gains procurés pour différents profils d'applications

Calculateur Austral

noeuds de calcul

5 nœuds GPU HPDA - accès interactif
40 GPU A100 80 Go SXM4 - accès 10 Gbit/s

6 nœuds GPU HPC
48 GPU A100 80 Go SXM4

124 nœuds de calcul parallèle
2x AMD Genoa 96 cœurs et 768 Go RAM DDR5
Total 23 808 cœurs@2.4 GHz

Un nœud SMP à 6 To de RAM DDR4
8 Intel Cooper Lake - total 224 cœurs@2.6 GHz

2 nœuds de veille technologique
2x AMD x4 MI210 (GPU AMD)

Interconnexion Slingshot **200 Gbit/s**

Stockage rapide **2 Po dont 1 Po NVMe**

Access 12 x 100 Gbit/s
5 frontales - 5 nœuds de visualisation

RedHat - Slurm - Lustre

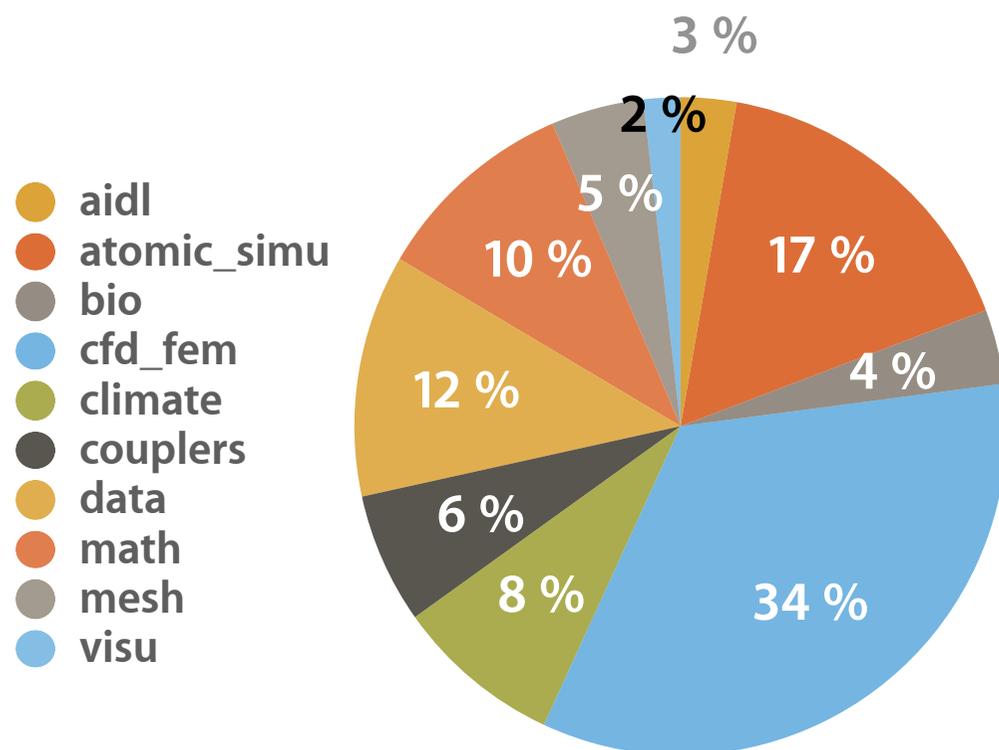
Calculateur Austral

- Sous-ensembles en cours de mise en service au 12 octobre 2023
 - Nœud SMP
 - Serveurs de visualisation
 - Serveurs de veille technologique
 - GPU AMD

Calculateur Austral

Logiciels scientifiques mis en exploitation (au 12/10/2023)

- > 100 modules de logiciels ou bibliothèques, présentés par domaine



aidl : PyTorch, TensorFlow

atomic_simu : NAMD, GROMACS, Quantum Espresso, Lammmps, VASP (privé), etc.

cfdfem : OpenFOAM, Foam-extend, Telemac, StarCCM+ (privé), Cast3M, HyperWorks (privé), LS-DYNA (privé), etc.

climate : WRF, cdo, nco,, ncl, wgrib, gdal

couplers : OASIS, Precice

data : HDF5, NETCDF

math : R, Octave, Boost, Petsc/Slepc, Mumps, etc.

mesh : metis, parmetis, scotch, mmg, med

etc.

Calculateur Austral

Environnement de programmation

- Cray Programming Environment (CPE)
 - Compilateurs de Cray, Gnu et Intel, Python 3, profilers et débogueurs
 - Bibliothèque MPI Cray MPICH pour le réseau Slingshot
 - BLAS, LAPACK, SCALAPACK, FFTW, HDF5, NETCDF
- Intel OneAPI
- SDK NVIDIA : CUDA 11.7, OpenACC et OpenMP target
- ROCM pour GPU AMD (à déployer)

Calculateur Austral

Guide utilisateur

<https://services.criann.fr/services/hpc/cluster-austral/guide/>

Passer de Myria à Austral

Compiler

Lire entièrement le paragraphe [Compilation](#)

Pour les raisons développées dans ce dernier : dans vos fichiers makefile, vous devez **remplacer**

- `icc`, `gcc`, `mpicc` ou `mpiicc` par `cc`
- `icpc`, `g++`, `mpicxx` ou `mpicpc` par `CC`
- `ifort`, `g77`, `gfortran`, `mpif90` ou `mpiifort` par `ftn`

Nomenclature des modules d'applications ou de bibliothèques

Sur Austral, la nomenclature des modules mentionne leur catégorie scientifique ou technique.

Par exemple, les modules pour `NAMD` ne se nomment plus `namd/version` comme sur Myria, mais `atomic_simu/namd/version`, les modules pour `OpenFOAM` ne se nomment pas `openfoam/version` mais `cfdfem/openfoam/version`. Les modules pour PyTorch se nomment `aidl/pytorch/version`.

Lire le paragraphe [Logiciels disponibles](#)

Intelligence Artificielle / apprentissage profond

Lire la page dédiée au domaine [IA - Deep Learning](#) pour Austral

Scripts d'exécution par Slurm : `/soft/slurm/Modeles_scripts`

Table des matières

Architecture

Se connecter

Firewall

Gestion de vos données

[Suivi des consommations](#)

Passer de Myria à Austral

Compiler

Nomenclature des modules d'applications ou de bibliothèques

Intelligence Artificielle / apprentissage profond

Scripts d'exécution par Slurm :
`/soft/slurm/Modeles_scripts`

Compilation

Environnement

Bibliothèques scientifiques directement intégrées au CPE (Cray Programming Environment)

Codes GPU

Environnement de soumission (Slurm)

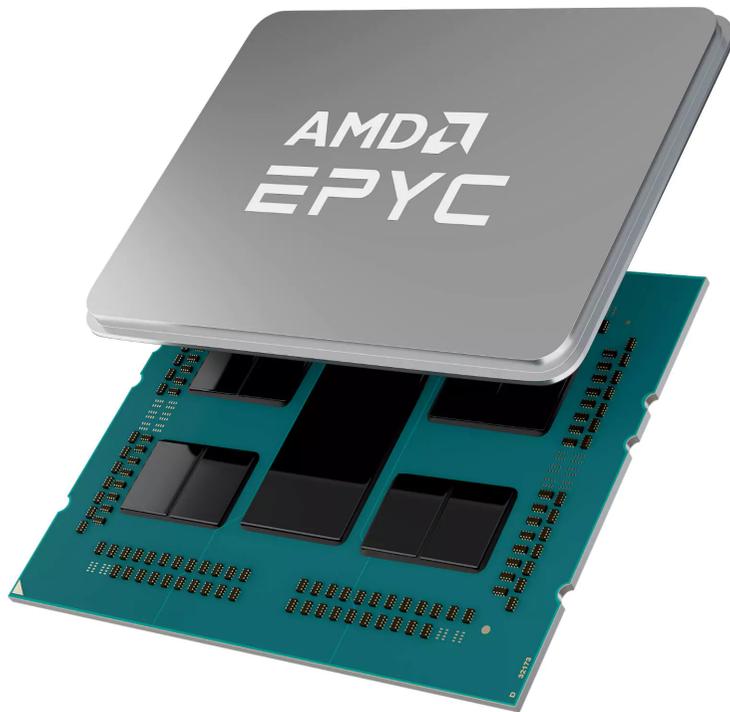
Commandes

Les partitions (classes de soumission)

Logiciels disponibles

Calculateur Austral

Processeur travaux parallèles HPC



- AMD Genoa 96 cœurs (2,4 GHz)
 - Mémoire DDR5
 - 2 x (12 canaux x 32 Go) = 768 Go de RAM par nœud de calcul
 - 4,8 Go/s de bande passante/cœur
 - Maintenu par rapport aux cœurs Intel Broadwell de Myria (mais 14 cœurs par puce Broadwell)

Processeur de la partition parallèle

De Myria à Austral

	Myria (2016)	Austral (2023)
Puce	Intel Broadwell (Xeon E5-2680 v4)	AMD Genoa (EPYC 9694)
# cœurs / puce	14	96
Gravure	14 nm	5 nm
Bande passante mémoire (1)	5,4 GB/s / cœur	4,8 GB/s / cœur
Fréquence	2,4 GHz	2,4 GHz
Jeu d'instructions (2)	AVX2	AVX-512
Flops par cycle (pic)	16	16
Configuration (3)	Turbo OFF	Turbo ON

(1) Maintien d'architecture pour passages d'applications liées à la mémoire

(2) et (3) : gains potentiels pour passages d'applications liées au CPU

(3) Comportement du mode turbo devenu reproductible quant aux performances

GPU pour la production

De Myria à Austral

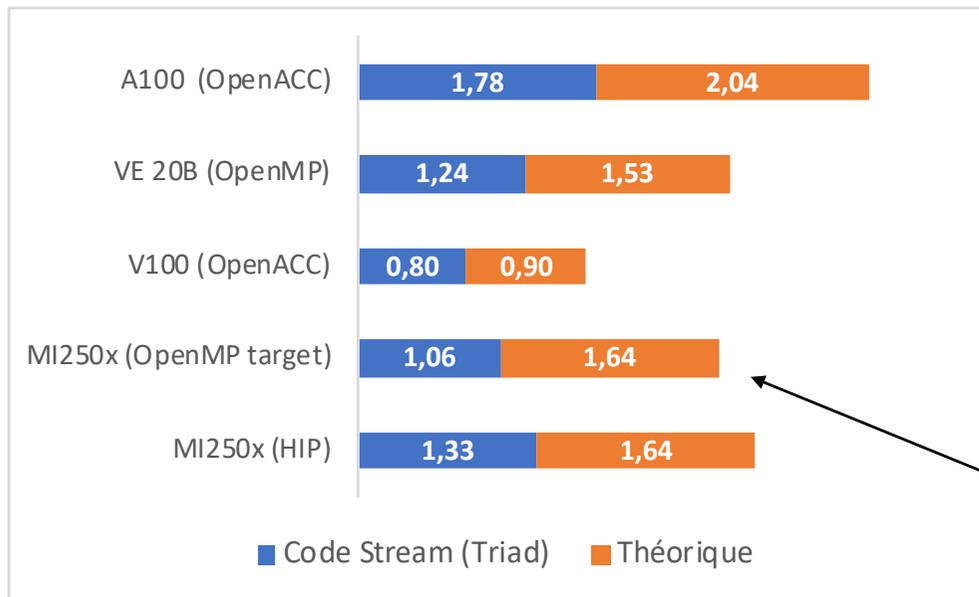
	Myria (V100 acquis en 2019)	Austral (2023)
GPU (NVIDIA)	V100-SXM2-32GB (4 / serveur)	A100-SXM4-80GB (8 / serveur)
# Multiprocesseurs / GPU	80 (x128 cores / MP)	108 (x128 cores / MP)
MIG (Multi Instance GPU)	n/a	à configurer
Bande passante mémoire	0,9 TB/s / GPU	2 TB/s / GPU
Interconnexion GPU-GPU	NVLink2	NVLink3 + NVSwitch
Jeu d'instructions	Tensor-core (TC) en HP (Half-precision)	Tensor-core en DP, SP, HP
Flops théoriques	7,8 TFlops DP 15,7 TFlops SP (1) 125 TFlops HP	9,7 TFlops DP / 19,5 TFlops DP TC 19,5 TFlops SP / 156 TFlops SP TC (1) 312 TFlops HP

(1) Apport de l'architecture Ampere pour cible Intelligence Artificielle / deep learning

GPU AMD

Veille technologique

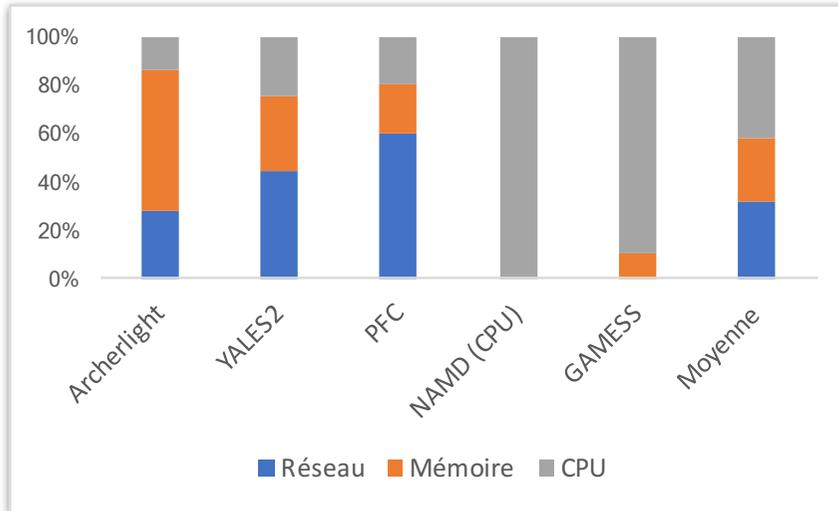
Bande passante mémoire (TB/s)



- MI250x au Cines, machine Adastra
 - MI210 à venir dans Austral
- HIP : interface pour traduction de codes CUDA (plus bas niveau que directives OpenACC ou OpenMP target)
- Niveau de performance des directives : à suivre pour les GPU AMD
 - car souhaitées par une partie de la communauté HPC

Benchmarks HPC et IA fournis dès 2021

Benchmarks CRIANN 2016 : profils des applications



- ← Evolution de ceux de 2016
 - Profils restant variés/ complémentaires en 2021

Application	Domaine	Localisation laboratoires concernés	Profil informatique	Taille maximale de test
OpenFOAM	Mécanique des fluides	Rouen, Caen, Cherbourg, Le Havre	Mixte (à quantifier par candidats)	1024 cœurs
YALES2	Mécanique des fluides	Rouen	Réseau (latence) et mémoire	4096 cœurs
PFC	Physique des matériaux	Rouen	Réseau (débit)	1024 cœurs
NAMD	Dynamique moléculaire	Caen	lié au CPU / GPU	512 cœurs 4 GPUs
PyTorch (CNN)	Intelligence Artificielle	Caen, Rouen	GPU	8 GPUs

Objectifs 2021

- Garder nécessaire variété / complémentarité de profils informatiques
- Prendre en compte l'importance prise par OpenFOAM dans la communauté d'utilisateurs du CRIANN
- Ajouter benchmark IA

Benchmarks

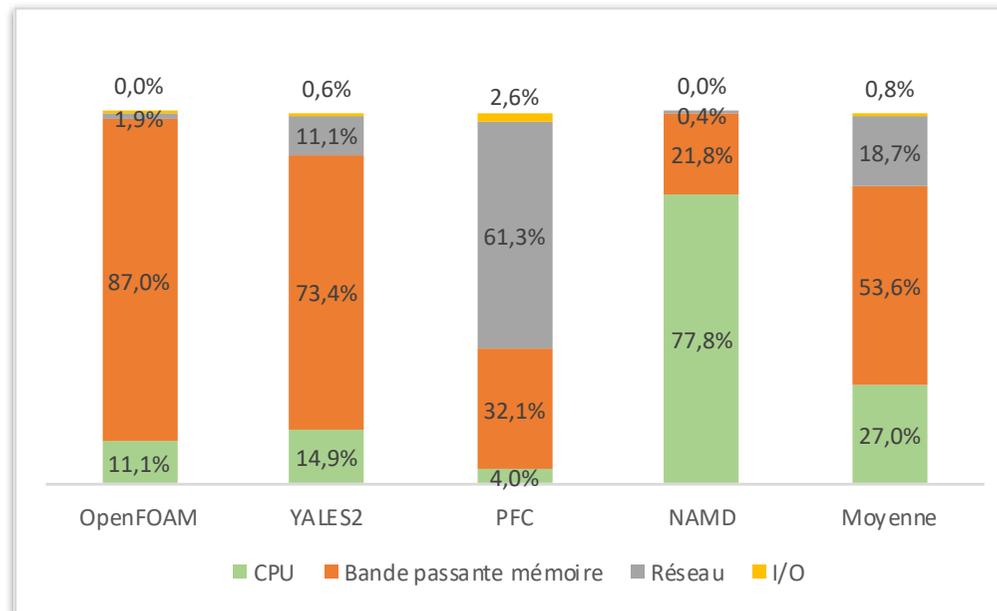
Nature scientifique des cas tests

OpenFOAM 7	Injection de carburant dans un injecteur typique d'un moteur Diesel, maillage de 180M cellules
YALES2	Ecoulement incompressible et non réactif pour la modélisation d'un brûleur, maillages de 14M à 878M cellules
PFC	Croissance de cristaux par la méthode du champ de phase, maillage 2048 ³
NAMD	Dynamique moléculaire sur un STMV (Satellite Tobacco Mosaic Virus), 1,06M atomes
PyTorch (CNN)	Entraînement d'un modèle resnet0 sur un échantillon de 17000 images de la banque Imagenet, réseau de neurones convolutif (CNN)

Benchmarks CPU

Sensibilité CPU / mémoire / réseau

- Approximation fondée sur des mesures sur CPU AMD 7763
 - « Milan » 64 cœurs - 2,45 GHz (Austral : « Genoa » 96 cœurs - 2,4 GHz)
 - Turbo ON et OFF (pour sensibilité à la fréquence CPU)



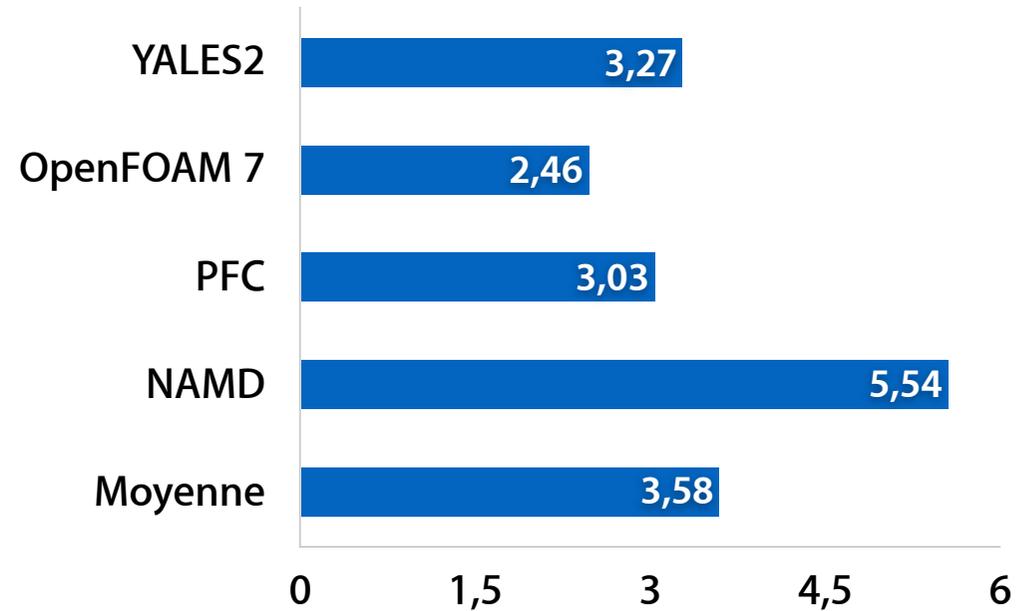
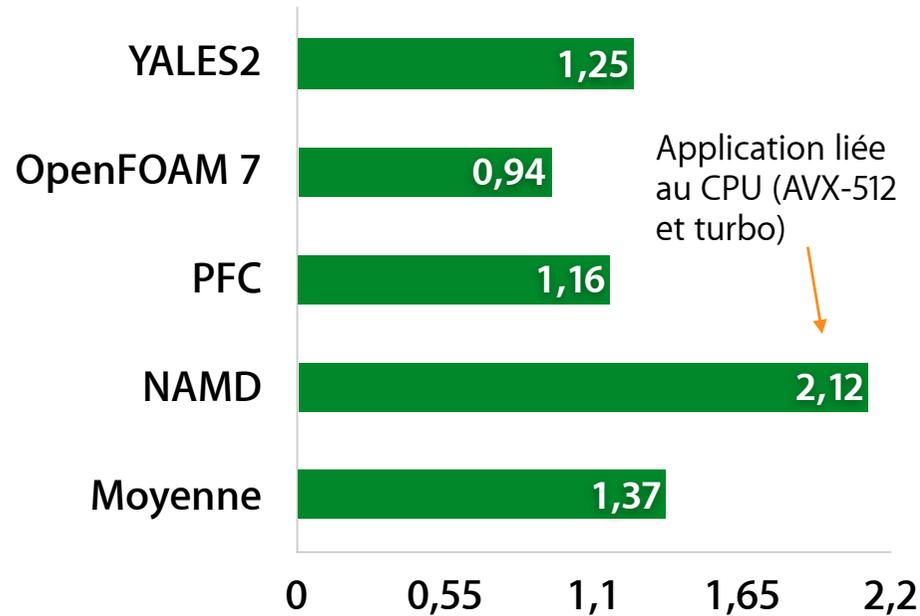
Applications scientifiques

Benchmarks CPU sur Austral (recette)

x 23808 / 9100 (= ~2,53)

Gain cœur à cœur Austral vs Myria

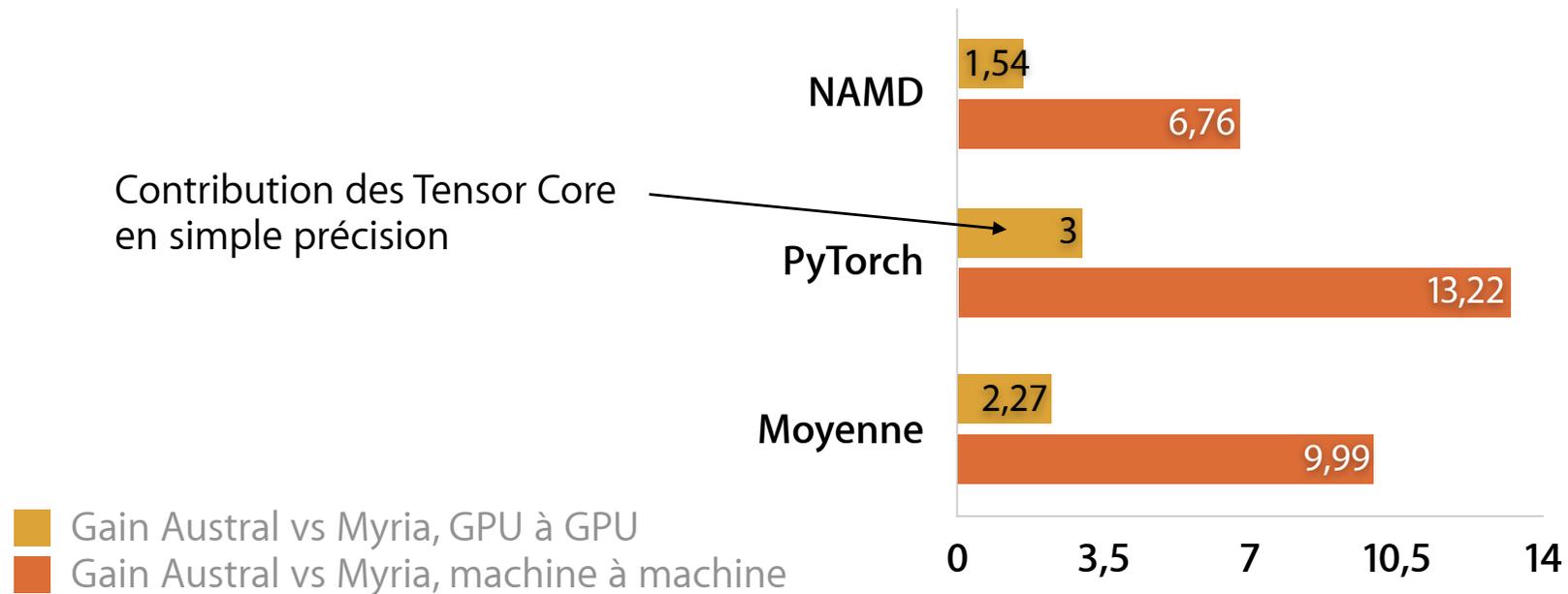
Gain machine à machine Austral vs Myria



Applications scientifiques

Benchmarks GPU sur Austral (recette)

- Comparaison avec le sous-ensemble V100 de Myria
 - Myria : 20 GPU V100, Austral : 88 GPU A100





Le Pôle Régional de Modélisation Numérique,
le réseau régional pour l'éducation et la recherche
et la Maison Normande des Sciences du Numérique
sont des actions cofinancées par la Région Normandie, l'État et l'Union européenne



Centre Régional Informatique et d'Applications Numériques de Normandie
www.criann.fr

 @criannormandie