

White Paper de Personal HPC

I. NOTRE OBJECTIF : FOCALISEZ-VOUS SUR LA SCIENCE, PAS SUR L'INFORMATIQUE

Vous utilisez le calcul scientifique comme support de votre recherche ?

Un cluster coûte cher et demande beaucoup de temps de gestion, administration et maintenance, très souvent pris en charge par des chercheurs. Nous voulons que l'informatique scientifique devienne transparente aux chercheurs, pour un coût réduit d'un ordre de grandeur.

II. POURQUOI ?

Beaucoup de codes scientifiques, qu'ils soient "maison" ou plus professionnels, sont pensés pour tourner sur 1 à 64 cœurs. Nos Personal HPC démontrent qu'il n'est plus nécessaire d'avoir recourt à des clusters pour ces codes. Nos solutions ne nécessitent ni réseau Infiniband coûteux, ni installation ou administration complexe. Ce sont de simples stations de travail de 64 cœurs. Ils coûtent seulement 10 k€.

III. UNE SOLUTION À BASE DE PROCESSEURS AMD

Les solutions à base de processeurs Intel sont beaucoup plus chères pour moins de cœur. Les solutions AMD ont des fréquences de fonctionnement plus faibles, mais se reposent sur de vrais cœurs physiques. Les cœurs Intel sont, pour la moitié, virtuels. C'est ce qu'on appelle l'hyperthreading. Ces cœurs hyperthreadé virtuels ne sont utilisables qu'à la condition de coder en utilisant des jeux d'instruction bas niveau spécifiques. Pour une station de travail simple et aussi parallèle que possible, la solution AMD à 4 processeurs de 16 vrais cœurs physiques chacun est le meilleur compromis. Nos tests le prouvent.

IV. COMPARAISON ENTRE PERSONAL HPC, CLUSTER, ET STATION DE TRAVAIL HAUT-DE-GAMME

	station de travail haut-de-gamme	cluster	Personal HPC γ
nb coeurs physiques vrais	4 à 12	48 à 512	64
mémoire vive (GB/coeur)	0.5 à 4	1 à 16	4 à 64
lieu	bureau (1 par chercheur)	salle dédiée avec clim	salle dédiée sans clim
coeur par chercheur	4 à 12	4-32 (queue pour lancer, durée limitée)	64
amortissement réel (ans)	4-6	10-15	4-6
gestion	quasi-nulle	compétences pro nécessaires	quasi-nulle
type de calcul	série	1 à 64 coeurs	1 à 64 coeurs
coût (k€)	6 à 8	40-100 ini. + 20-40/an + maintenance	10-15

FIGURE 1: Comparatif des moyens de calculs locaux : la station de travail haut-de-gamme de type DELL ou HP, le cluster mutualisé du labo, et Personal HPC γ .

V. PERSONAL HPC

Nos centrales HPC personnelles γ permettent de s'affranchir des clusters et de tous leurs inconvénients. Pas de climatisation, pas de gestion complexe des communications inter-noeuds, pas de mémoire partagée ou de serveur maître ... tout est dans une unique machine, **de la taille d'une station de travail**, à un prix extrêmement avantageux : **10 k€**.

VI. NOTRE GAMME γ

- **64 coeurs** cpu de 3 GHz crête chacun, soit **presque 200 GHz effectifs** par γ
- Mémoire cache totale de 64 MO pour une parallélisation facile OpenMP unique,
- **Mémoire RAM 128 GB** dernière génération, extensible jusque 1 TB
- **Disque dur 3 TB**, extensible jusque 24 TB.
- Tous les coeurs étant sur la même carte mère, la communication inter-noeuds est des ordres de grandeurs plus rapide que par cable ethernet ou Infiniband,
- Un service **dédié à la recherche** : oubliez vos relations avec nos concurrents. Nous sommes issus de la recherche. Certains sont même encore chercheurs.

VII. ÉTUDES DE CAS

A. Dynamiques moléculaires ab initio avec CPMD

CPMD a de forts besoins en mémoire RAM et sait parfaitement utiliser la parallélisation jusque quelques dizaines de processeurs. Nous vous proposons une γ de 256 GB de mémoire à moins de 15 k€, sur laquelle vous lancez 2 jobs de 32 coeurs. Ils peuvent durer aussi longtemps que vous le souhaitez, alors que les clusters imposent souvent des limites de 24 à 48 h. La γ est basée sur une très simple Ubuntu Server ou n'importe quelle distribution Linux que vous connaissez. MPI s'installe d'une ligne de commande (`sudo apt-get install openmpi`), tout comme LAPACK et SCALAPACK. Un jeu d'enfant.

B. Farming séquentiel

Votre code "maison" n'est pas parallélisé. Vous utilisez votre station de travail personnelle pour lancer de nombreux runs séquentiels pour obtenir une meilleure statistique. Si le cluster autorise les jobs sur 1 coeur (ce qui est rare), vous n'avez aucune utilité de la communication internoeud rapide InfiniBand qui coûte très cher. Nous vous proposons une γ de 128 GB et un disque dur SSD ultra-rapide pour moins de 14 k€ que vous utilisez comme vous le feriez avec votre station de travail DELL ou HP avec votre linux favori.

C. Analyse d'images ou vidéos experimentales, par exemple de sonde tomographique X

Vous avez besoin de très grandes quantités de stockage pour récupérer les output des expériences, par exemple des images tri-dimensionnelles. Chacune pèse 1 GB qu'il faut mettre en mémoire vive. Vous faites ensuite une analyse topologique pour reconstituer le milieu initial tomographié. Les clusters vous sont le plus souvent inutiles car ne supportent pas tant de RAM dont vous auriez besoin, et le transfert de fichiers est de toutes manières insupportablement long. Vous faites donc du séquentiel, une image après l'autre, sur votre chère station de travail. Pourquoi ne pas la remplacer par une γ de 24 TB de disque dur (soit 24 000 images de 1 GB) et 1 TB de RAM à moins de 20 k€? Vous pouvez faire tourner en mode farming 64 analyses 3D d'images jusqu'à 64 GB chacune. Tout cela sous votre linux favori.

D. Programmer sur GPU

Vous aimez programmer et vous dites que les cartes graphiques, ou GPU, sont l'avenir du calcul? Pourquoi ne pas installer 1 à 4 cartes CUDA de dernière génération dans une γ qui vous permettront d'atteindre de très grandes puissances crêtes en calcul à virgule flottante.

VIII. QUI SOMMES-NOUS ?

Fondée en 2012 par deux jeunes physiciens et chimistes numériques, Personal HPC veut révolutionner le calcul haute performance à l'échelle du laboratoire.

Nous sommes des spécialistes de DFT, dynamique moléculaire, Monte Carlo, Lattice Boltzmann... et nous croyons que les clusters mutualisés tels qu'on les trouve dans nos labos ne sont pas adaptés à nos besoins de chercheurs. À ce binôme de spécialistes s'est joint fin 2012 un expert en développement de start-ups technologiques.

Fin 2011, une fin d'ANR permettait à l'un d'entre nous de construire la machine de calcul de ses rêves, dans la limite de 20 k€. Face à l'impossibilité de trouver une machine simple, efficace, peu exigeante en administration et gestion, et peu chère, "Lagrange" fut imaginée. 12 mois plus tard, Personal HPC était créé, la gamme γ développée, et les premières livraisons avaient lieu à l'École Normale Supérieure de Paris et à l'Université Pierre et Marie Curie (Paris 6). En avant !

Acknowledgments

Merci à l'École Normale Supérieure de Paris et à l'Université Paris 6 UPMC d'avoir été les premiers à nous faire confiance !

IX. CONTACT

www.personalhpc.com
contact@personalhpc.com
06 86 47 05 69