

# Journée des utilisateurs (actuels et futurs) de 14 Mai 2014, matin



**10h00** CIMENT, présentation & actualités (Emmanuel Chaljub)

**10h45** Nouveautés techniques (Bruno Bzeznik, Romain Cavagna & Françoise Roch)

- ✓ La nouvelle plateforme de traitement de données **Luke**

- ✓ La nouvelle version de la grille: **Cigri3**

**11h15** Formations / partenariat avec Bull (Laurence Viry)

**11h30** Les 10 choses à connaître pour bien utiliser Froggy

(Bruno Bzeznik, Romain Cavagna & Françoise Roch)

**12h** Questions/réponses

**12h15** Buffet

# Journée des utilisateurs (actuels et futurs) de 14 Mai 2014, après-midi



**14h00** Grid'5000 (Olivier Richard & Pierre Neyron.)

**14h20** Session utilisateurs

1. *A Flexible Framework for Asynchronous In Situ and In Transit Analytics for Scientific Simulations* (Mathieu Dreher & Bruno Raffin)
2. *Microscopic and mesoscopic simulations of amorphous systems using LAMMPS and GPU-based algorithms* (Ezequiel Ferrero & Francesco Puosi)
3. *Simulation numérique directe d'écoulements diphasiques : étude de la dynamique de jets liquides cisailés* (Nicolas Odier)

**16h00** Pause

**16h15** Table ronde

**17h30** Fin

# Présentation de CIMENT

<https://ciment.ujf-grenoble.fr>

# Modélisation, Simulation et Calcul Intensif à Grenoble



## 2 structures fédératives (UJF+INP) complémentaires...

**Maison de la Modélisation et de la Simulation : Nano Sciences et Environnement (2010)**

**Calcul Intensif / Modélisation / Expérimentation Numérique & Technologique (1998)**

## ...Pour construire et animer un axe transversal

Physique, Chimie, Univers,  
Environnement...  
Labos, PME/PMI



**Modélisation physique**

**Modélisation math & num**  
Analyse  
discrétisation de modèles

**Calcul Intensif**  
Modèles algorithmiques,  
Implémentation sur plateformes  
HPC, profiling et optimisation

# CIMENT = mésocentre grenoblois de calcul intensif



~1 Pflops/s sur une plateforme

**Jugene=1PF ; Marenstrum=1PF; Hermit=1PF ;  
Juqueen=1.6PF; Curie=2PF ; Fermi=2PF;  
SuperMuc=3PF**



~100 Tflops/s sur une plateforme

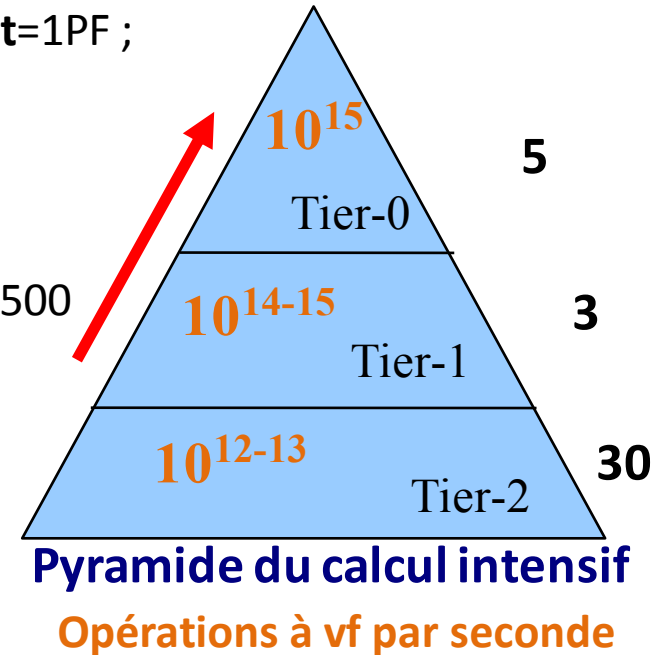
**Turing= 836, Ada=230 ; Jade=267 ; Curie=~500**



**118 Tflops/s** répartis sur **12**  
**plateformes** de 96 à 3184 cœurs  
Accessibles en mode grille (CiGRI)



Voir présentation cigri3



Des plateformes de calcul intensif avec un **accès souple**

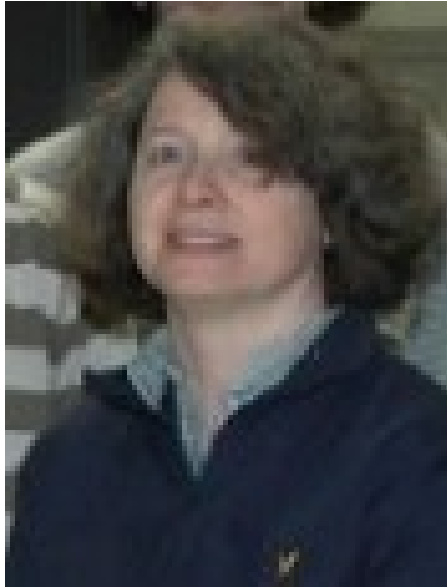
Un réseau d'ingénieurs et de chercheurs diffusant **expertise et formation**

Permettant d'**expérimenter** les outils et méthodes de calcul haute performance

Favorisant le passage vers les **centres nationaux et européens**

Une organisation en **pôles** : regroupement d'équipes de recherche, de laboratoires, qui ont développé une culture de **mutualisation** et de **partage** des ressources.

# Sciences de l'Univers (SCCI-OSUG)



**Resp.technique** : Françoise Roch



**Resp.scientifique** : Emmanuel Chaljub

**Laboratoires** : Observatoire des Sciences de l'Univers (**OSUG**), Institut des Sciences de la Terre (**ISTerre**), Institut de Planétologie et Astrophysique (**IPAG**), Image-Signal (**Gipsa-lab**).

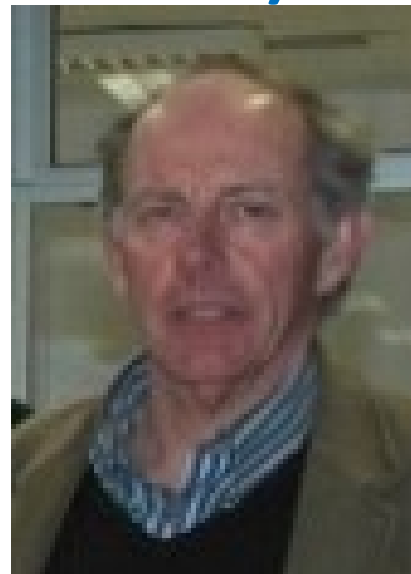
| Nom     | Marque | # cpus | RAM    | RAM/node | Interconnect      | Tflops/s | Année |
|---------|--------|--------|--------|----------|-------------------|----------|-------|
| Fostino | IBM    | 464    | 464Go  | 8Go      | Gbit              | 5.2      | 2008  |
| r2d2    | IBM    | 512    | 1088Go | 32Go     | $\infty$ band DDR | 5.1      | 2008  |
| Gofree  | Dell   | 336    | 2016Go | 72Go     | $\infty$ band QDR | 3.2      | 2011  |

**Machines accessibles par les utilisateurs du pôle**

# Physique Numérique (PHYNUM)



**Resp. technique** : Françoise Berthoud



**Resp. scientifique** : Alain Pasturel

**Laboratoires** : Sciences et Ingénierie des Matériaux et Procédés (**SIMAP**) , Physique et Modélisation des Milieux Condensés (**LPMMC**), Interdisciplinaire Physique (**LIPhy**), Institut Néel (**IN**), Simulation Atomistique (**CEA/INAC/LSIM**), Physique Subatomique et Cosmologie (**LPSC**)

| Nom      | Marque | cpus | RAM    | RAM/node | Interconnect | Tflops/s | Année |
|----------|--------|------|--------|----------|--------------|----------|-------|
| Airelle  | Dell   | 140  | 676 Go | 128 Go   | Gbit         | 2.5      | 2008  |
| Nanostar | SGI    | 256  | 512Go  | 16Go     | ∞band DDR    | 2.6      | 2009  |
| Fontaine | Dell   | 144  | 288Go  | 24Go     | ∞band QDR    | 1.3      | 2012  |

**Machines accessibles par les utilisateurs du pôle**

# Environnement (MIRAGE)



**Resp. technique** : Bruno Bzeznik



**Resp. scientifique** : Eric Blayo

**Laboratoires** : Jean Kuntzmann (**LJK**), Glaciologie et Géophysique de l'Environnement (**LGGE**), Transfert en Hydrologie et Environnement (**LTHE**), Ecoulements Géophysiques et Industriels (**LEGI**)

| Nom   | Marque | # cpus | RAM   | RAM/node | Interconnect | Tflops/s | Année |
|-------|--------|--------|-------|----------|--------------|----------|-------|
| Foehn | SGI    | 128    | 480Go | 48Go     | ∞band DDR    | 1.4      | 2010  |

**Machines accessibles par les utilisateurs du pôle**



# Biologie & Santé (BioIMAGE)



**Resp. technique**



**Resp. scientifique : Wilfried Thuiller**

**Laboratoires : Ingénierie Médicale et Complexité (TIMC-IMAG), Ecologie Alpine (LECA)**

| Nom | Marque | # cpus | RAM | RAM/node | Interconnect | Tflops/s | Année |
|-----|--------|--------|-----|----------|--------------|----------|-------|
|-----|--------|--------|-----|----------|--------------|----------|-------|

**Utilisation des ressources communes (essentiellement Cigri)**

# Informatique Distribuée (ID)



**Resp. technique** : Pierre Neyron



**Resp. scientifique** : Olivier Richard

**Laboratoires (équipes)** : Middleware Efficiently Scalable (**MESCAL/LIG**),  
Multiprogrammation et Ordonnancement (**MOAIS/LIG**)

[Voir présentation grid5k](#)

| Nom    | Marque | # cpus   | RAM    | RAM/node | Interconnect      | Tflops/s | Année |
|--------|--------|----------|--------|----------|-------------------|----------|-------|
| Genepi | Bull   | 272      | 272 Go | 8 Go     | $\infty$ band DDR | 2.7      | 2008  |
| Edel   | Bull   | 576      | 1728Go | 24Go     | $\infty$ band DDR | 5.2      | 2009  |
| Adonis | Bull   | 96 (GPU) | 288Go  | 24Go     | $\infty$ band DDR | 3.6      | 2010  |

**Machines accessibles par les utilisateurs du pôle**

# Chimie (CECIC)



**Resp. technique** : Alain Rivet



**Resp. scientifique** : Anne Milet

**Laboratoires** : Institut de Chimie Moléculaire (**ICMG**), Département de Chimie Moléculaire (**DCM**), PharmacoChimie Moléculaire (**DPM**), Macromolécules Végétales (**CERMAV**)

| Nom          | Marque | # cpus | RAM   | RAM/node | Interconnect | Tflops/s | Année |
|--------------|--------|--------|-------|----------|--------------|----------|-------|
| Ceciccluster | Dell   | 216    | 432Go | 24Go     | ∞band QDR    | 2        | 2011  |

**Machines accessibles par les utilisateurs du pôle**

# Pilotage : bureau CIMENT



**MaiMoSiNE**  
S. Iabbé



**CEA** : T. Deutsch



**INRIA** : O. Richard



**CIRA** : L. Desbat



**Resp. projet**  
E. Chaljub

## Responsables techniques



A. Rivet



B. Bzezniak

**UJF/CIMENT**



L. Viry



R. Cavagna

**Contrats**



F. Berthoud



F. Roch

## Responsables scientifiques



A. Milet



E. Blayo



W. Thuiller



A. Pasturel



P. Neyron

**CNRS**

# Adhérer à CIMENT

La participation d'un laboratoire à CIMENT est soumise à l'acceptation d'une **charte d'adhésion**

## Droits

- Accès aux ressources de CIMENT (plateformes communes, Cigri, IRODS) aux membres du laboratoire
- Hébergement des plateformes de calcul au sein de l'infrastructure mutualisée UJF
- Participation des ingénieurs des labos au **groupe de travail technique de CIMENT**

## Devoirs

- **Correspondant CIMENT** du laboratoire
- Acquisition et exploitation concertées des plateformes de calcul
- Intégration des ressources à la grille CIMENT en mode *best-effort*
- Accord de principe de participation aux **frais de fonctionnement**

# Actualités de CIMENT



Lauréat 2010

Phase 1 : 2011- 2013

Phase 2 : -2019



| Total  | Budget         | Grenoble |
|--------|----------------|----------|
| 9 M€   | équipement     | 994 k€   |
| 1,5 M€ | fonctionnement | 154 k€   |

**Coordinateur :** GENCI

**9 mésocentres partenaires :**

Rouen, Toulouse, Aix-Marseille, Lyon, Grenoble, Strasbourg, Reims, Paris (2)

**Animation scientifique :**

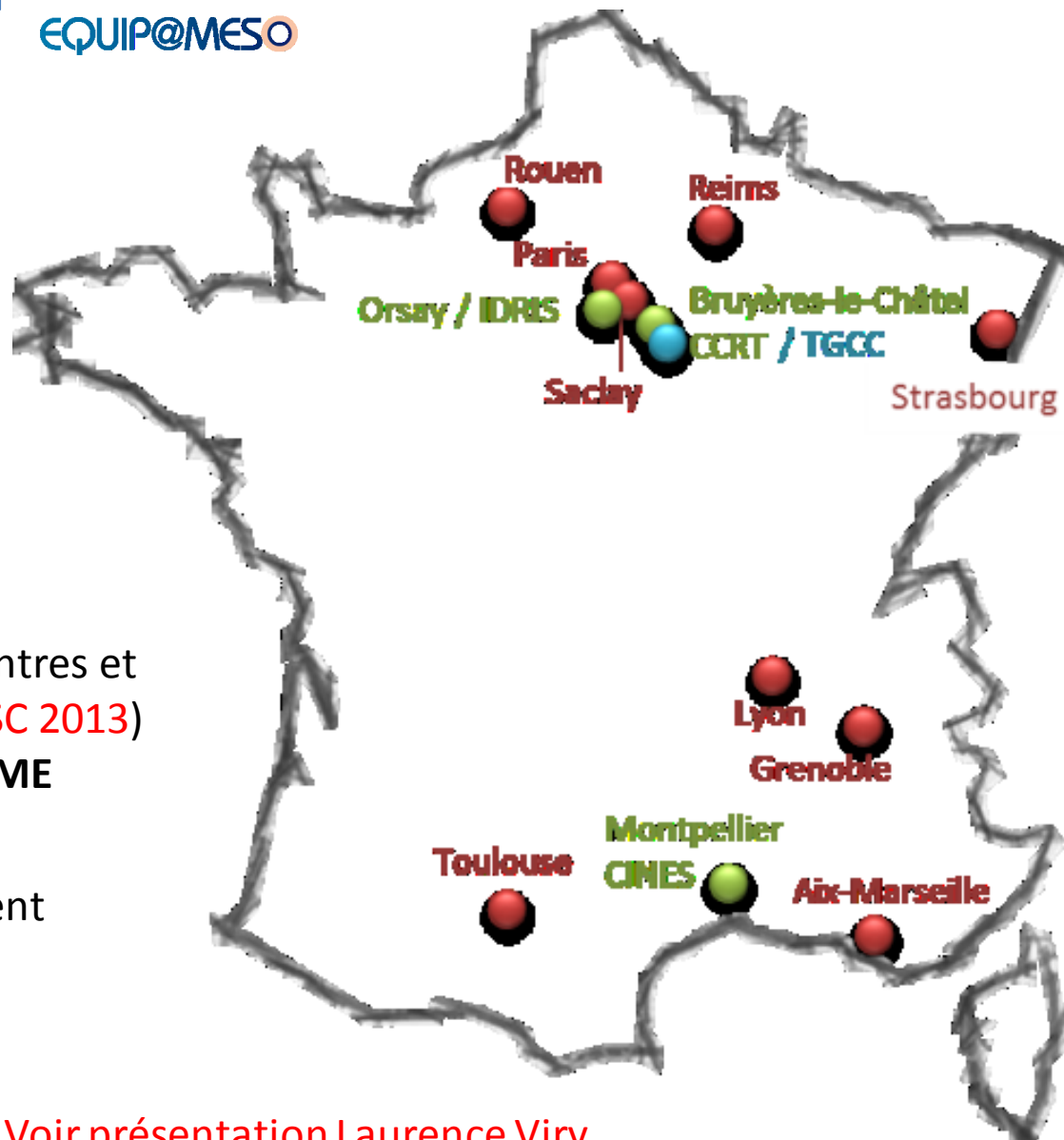
Maison de la simulation (CEA), Cerfacs  
GDR Calcul du CNRS, MaiMoSiNE, CBP

### Objectifs

- **Renforcer** la base de la pyramide
- Stimuler la **coordination** des mésocentres et l'articulation avec GENCI (**délégation SC 2013**)
- Relayer localement l'initiative **HPC-PME**

### Changement d'échelle

>6 ans d'investissement en équipement  
Capacité d'hébergement  
Partage d'une plateforme unique



**++ Collaboration Bull (CECP)**

**Voir présentation Laurence Viry**

# Nouvelle plateforme de calcul intensif mutualisée...

- Cofinancements

Equip@Meso

Région Rhône-Alpes (CPER-CIRA)

**Labex OSUG@2020**

**Juillet 2013**

Projet ERC Glassdef

Labex CEMAM

**...Projet ANR-Hamm**

**Décembre 2013**



EQUIP@MESO

Rhône-Alpes Région

LabEx OSUG@2020



« public »



« privé »



# Froggy: the greedy frog



**Juillet 2013**

©Fanny Bastien (MaiMoSiNE/IF)

Equip@Meso  
Région Rhône-Alpes (CPER-CIRA)  
**Labex OSUG@2020**

**46** Tflops/s puissance crête CPU  
**2176** cœurs Xeon Sandybridge  
4 Go/cœur, 20% 8 Go/c  
Infiniband non-bloquant FDR  
Système Lustre /scratch 3 Go/s  
Système de refroidissement **DLC**  
**PUE global 1,18**  
1 nœud SMP (**32c, 512 Go RAM**)  
1 nœud de visualisation

# Froggy: the greedy frog



**Décembre 2013**

©Fanny Bastien (MaiMoSiNE/IF)

Equip@Meso

Région Rhône-Alpes (CPER-CIRA)

**Labex OSUG@2020**

Projet ERC Glassdef

**Labex CEMAM**

**66** Tflops/s puissance crête CPU

**3040** cœurs Xeon Sandybridge

4 Go/cœur, 20% 8 Go/c

Infiniband non-bloquant FDR

Système Lustre /scratch 3 Go/s

Système de refroidissement **DLC**

**PUE global 1,18**

1 nœud SMP (**32c, 512 Go RAM**)

1 nœud de visualisation

**7 nœuds GPU (16c+2 K20/nœud)**

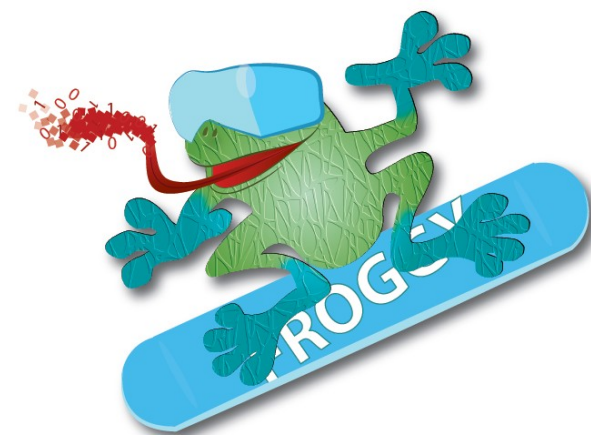
**16** Tflops/s GPU

**82.5** Tflops/s puissance crête totale

# Froggy: ouverture en mode

## « free-ride » Mars-Avril 2013

Exploitation à distance (Angers)



© Fanny Bastien (MaiMoSiNE/IF)

### 10 projets sélectionnés

4 projets en mode **free-ride** (2048 cœurs/1 semaine)

- ✓ Formation des disques autour des étoiles Be (G. Lesur)
- ✓ **Dynamique de l'écoulement calotte Antarctique (F. Gillet-Chaulet)**
- ✓ Génération numérique d'un polymère semi-cristallin (J.-L. Barrat)
- ✓ **Modélisation quantique des dispositifs à nanofils (Y.-M. Niquet)**

4 projets en mode **Benchmark** (2048 cœurs/24h)

2 projets en mode **développement** (128 cœurs + *fat node*)

Inauguration Froggy + journée mésochallenges 2013

Publication HPC-Magazine, Octobre 2013



# Froggy: Accès aux ressources

- ✓ Gestion des comptes par **projet** scientifique
- ✓ Porteur de projet = membre **permanent** d'un laboratoire grenoblois
- ✓ Membre d'un projet = collaborateur du porteur de projet

| Porteur de projet                              | Référents                                   |
|--|---|
| Membre permanent laboratoire adhérent à CIMENT | Responsables scientifique et technique pôle |
| Membre permanent laboratoire hors CIMENT       | Comité de Pilotage CIMENT                   |
| Membre permanent hors Grenoble (Région)*       | Responsable mésocentre origine + CP CIMENT  |
| Industriel*                                    | MaiMoSiNE (C. Picard)                       |

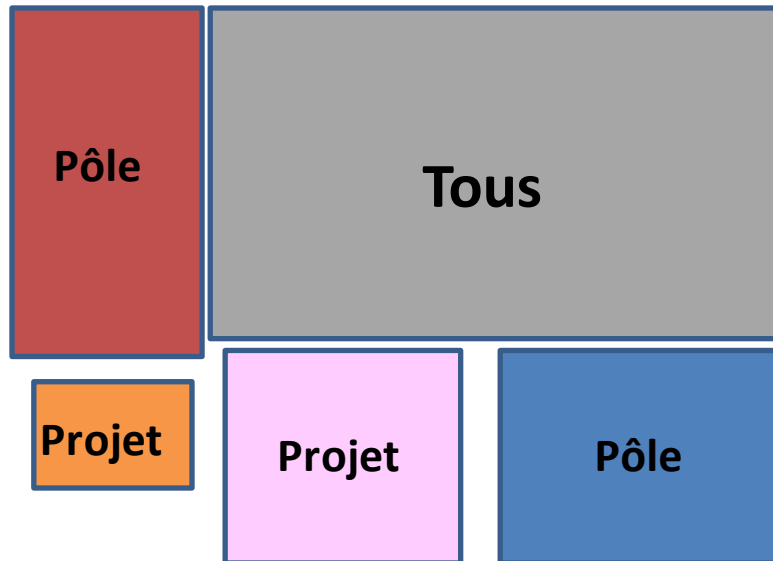
\*: ouverture jusqu'à 10% à la communauté hors CIMENT

- ✓ Ouverture d'un compte après validation de la **charte** utilisateur
- ✓ Accès aux ressources après **validation** scientifique et technique du projet
- ✓ Projets déposés au **fil de l'eau**, formulaire simplifié
- ✓ Mise à jour annuelle à date fixe (**bientôt !**)
- ✓ **Mode de fonctionnement étendu en 2014 à toutes les plateformes de CIMENT**

# Froggy: Partage des ressources

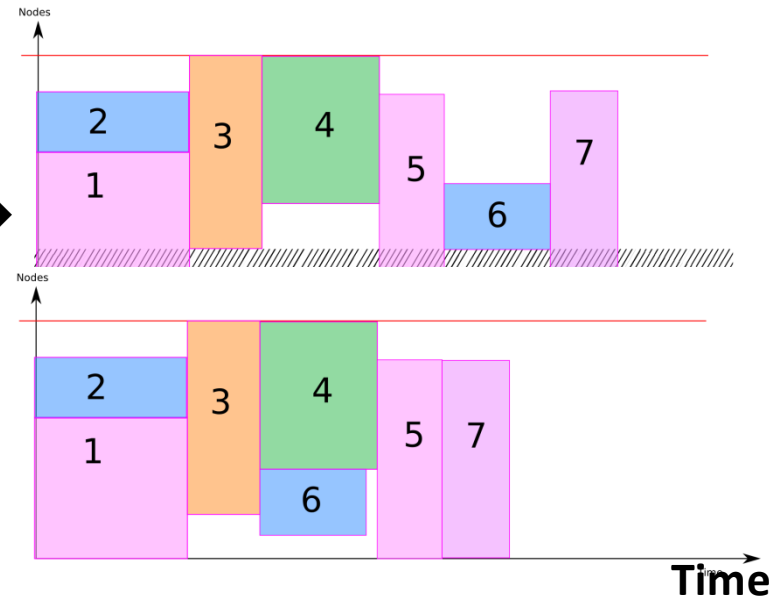
- ✓ 128 cœurs dédiés au **mode test** : 30 mn de *walltime*
- ✓ Jobs séquentiels autorisés en mode test, *best effort* et sur le nœud SMP
- ✓ Par défaut, jobs limités à un *walltime*  $\leq 96$  heures (4 jours)
- ✓ Par défaut, jobs limités à 8192 heures monocoeur
- ✓ *Fair-sharing* par utilisateur. **Pondération** suivant cofinancements.

| # cœurs   | Walltime |
|-----------|----------|
| $\leq 64$ | 96 h     |
| 128       | 64 h     |
| 256       | 32 h     |
| 512       | 16 h     |
| 1024      | 8 h      |
| 2048      | 4 h      |



Avec  
Réservation →

Fair-sharing  
Pondéré →



# Statistiques Froggy

10 mois : Juillet 2013 – Avril 2014

<https://ep-ciment.ujf-grenoble.fr>

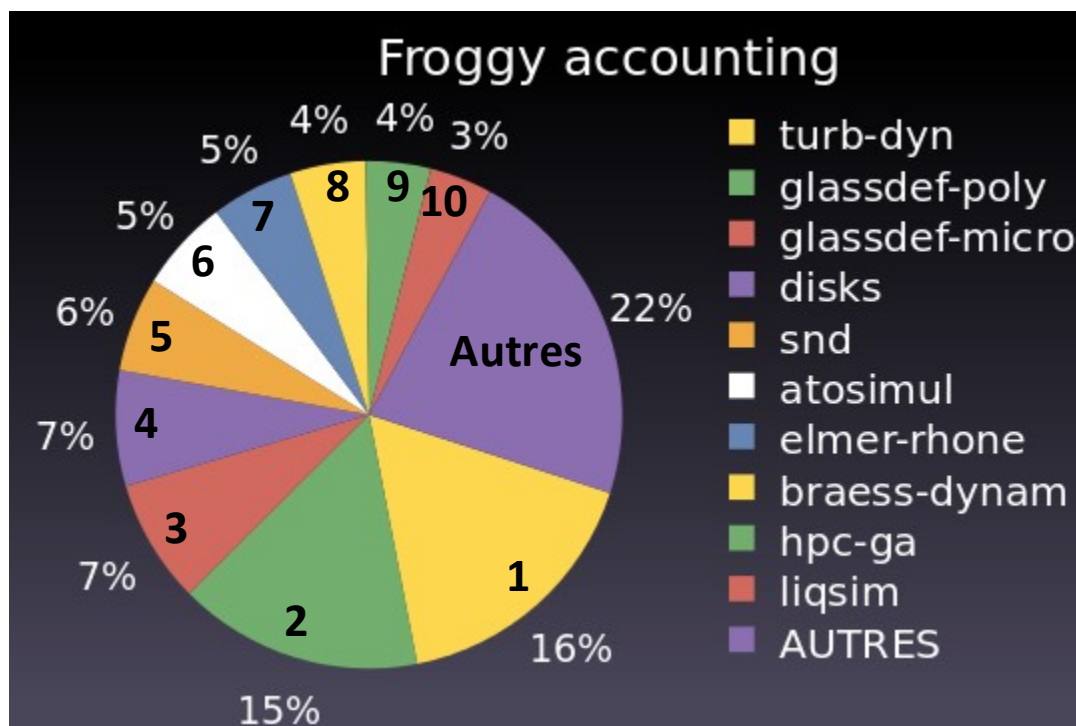


**TOTAL: 15.6 Mh** monocoeur distribuées  
(~2160 cœurs en continu)

**60** Projets actifs

**243** utilisateurs actifs (1-10 / projet)

|                   |           |
|-------------------|-----------|
| 1. turb-dyn       | 2 636 180 |
| 2. glassdef-poly  | 2 428 066 |
| 3. glassdef-micro | 1 228 774 |
| 4. disks          | 1 147 279 |
| 5. snd            | 935 898   |
| 6. atosimul       | 914 737   |
| 7. elmer-rhone    | 817 348   |
| 8. braess-dynam   | 750 613   |
| 9. hpc-ga         | 643 087   |
| 10. liqsim        | 621 307   |
| 11. seiscope      | 567 000   |
| 12. e2vp          | 413 603   |
| 13. voda          | 401 270   |



**SCCI-OSUG (35%)**

**MIRAGE (14%)**

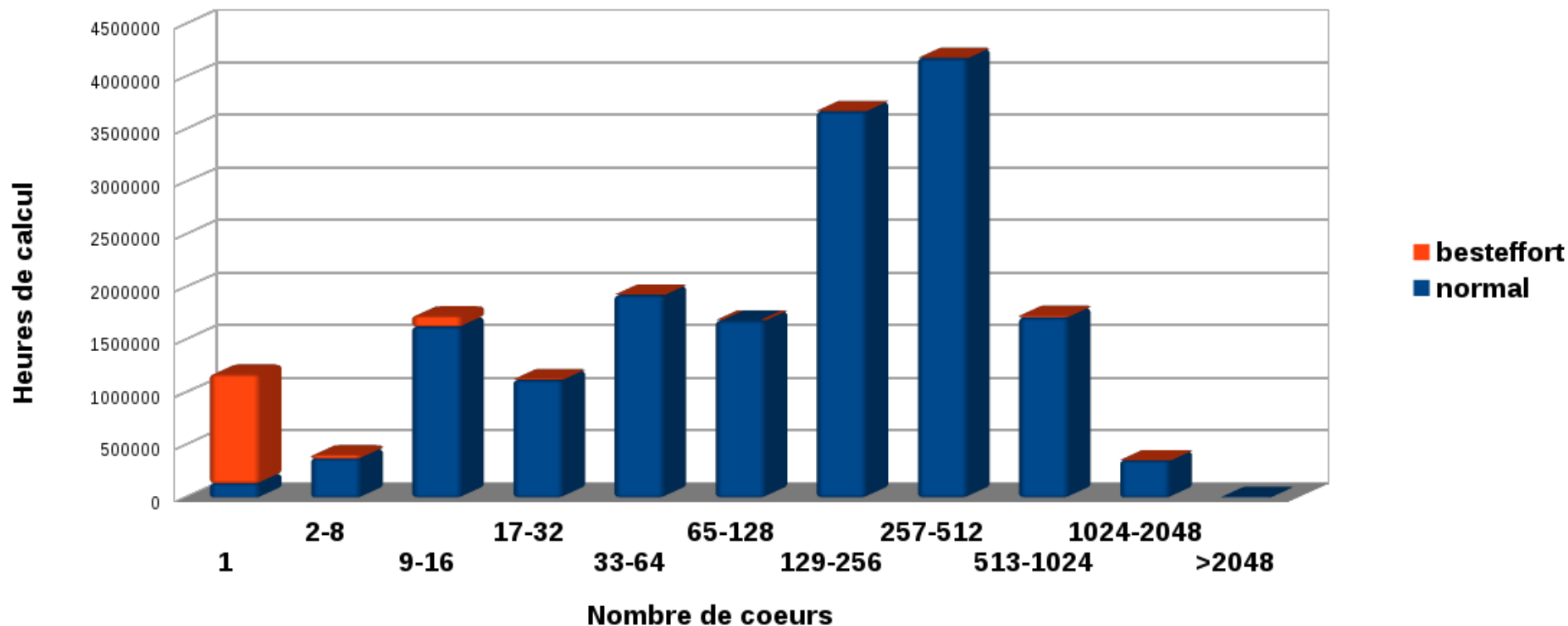
**PHYNUM (34%)**

**CECIC (4%)**

Utilisateurs CIMENT = 30 Mh accordées sur GENCI  
en 2014 (23 projets dont 1 à 12 Mh)

# Froggy : répartition des jobs par taille

Avril 2013 – Avril 2014



Augmentation notable de la taille des jobs (128c-512c) :

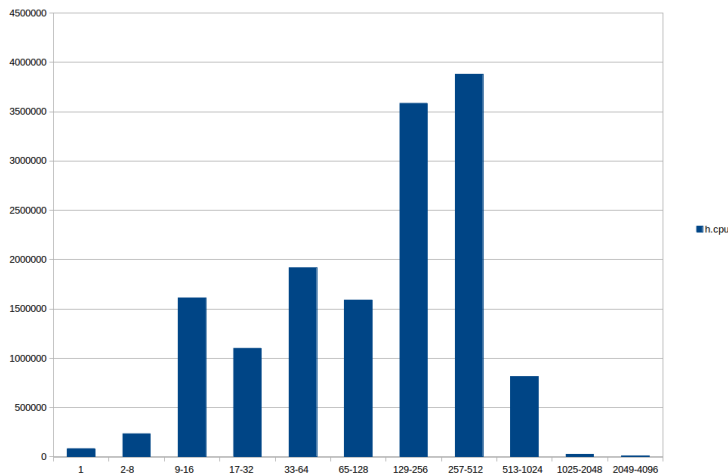
**60%** des heures consommées par des jobs à plus de **128 cœurs**

**50%** des heures consommées par des jobs à plus de **64 cœurs**

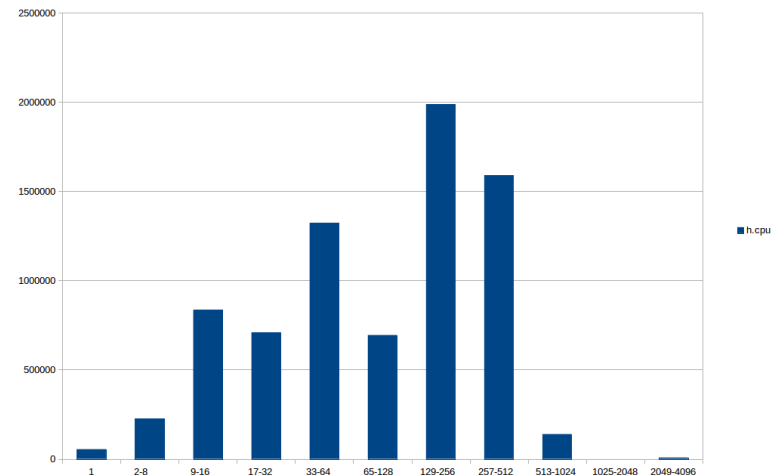
**Best-effort = 7.3 %** du total, essentiellement jobs séquentiels

# Froggy : évolution de la répartition des jobs

## Septembre 2013 - Avril 2014



## Janvier 2014 - Avril 2014

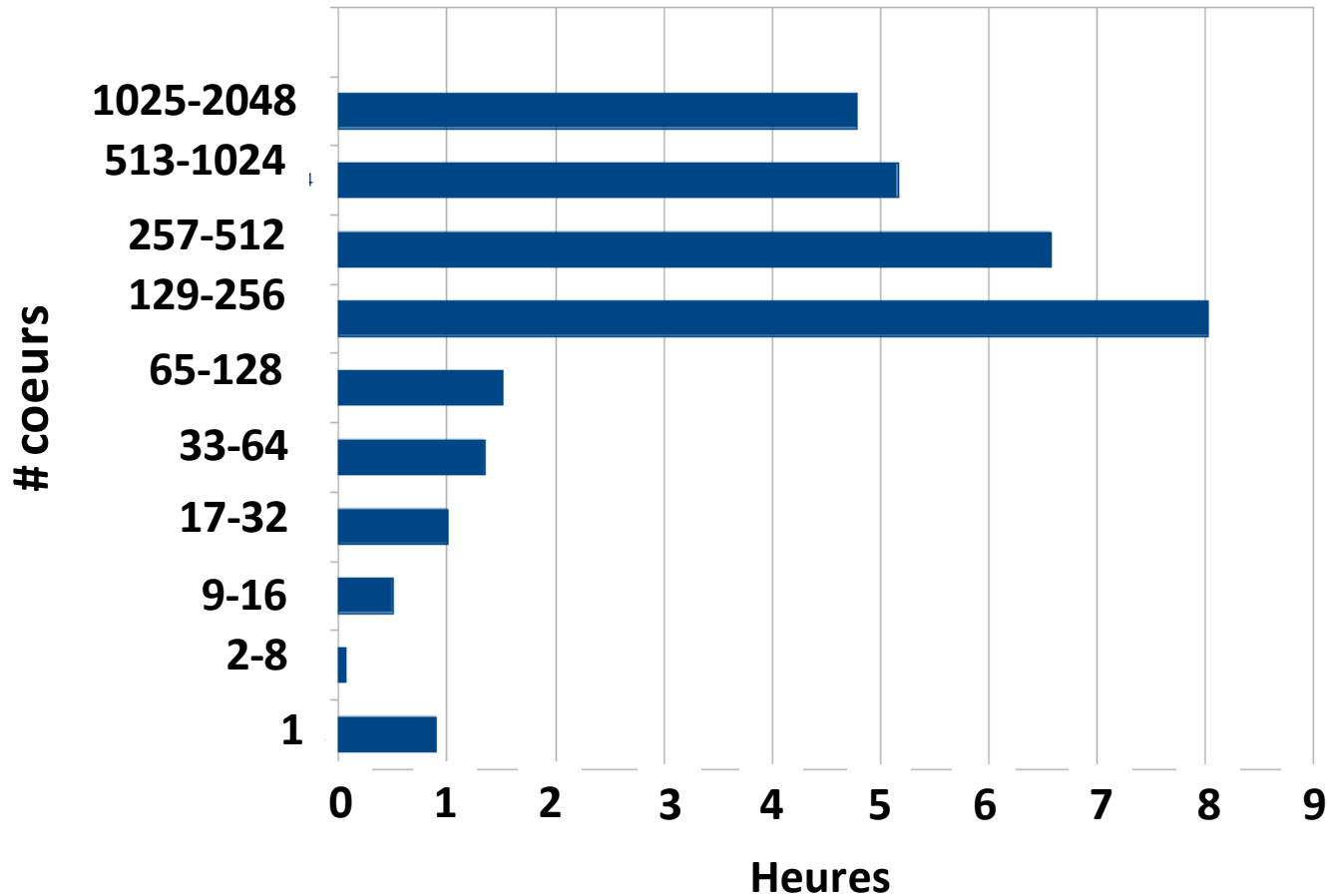


Même tendance en éliminant la période du free-ride et avec l'augmentation des ressources



# Froggy : temps d'attente des jobs par taille

Avril 2013 – Avril 2014



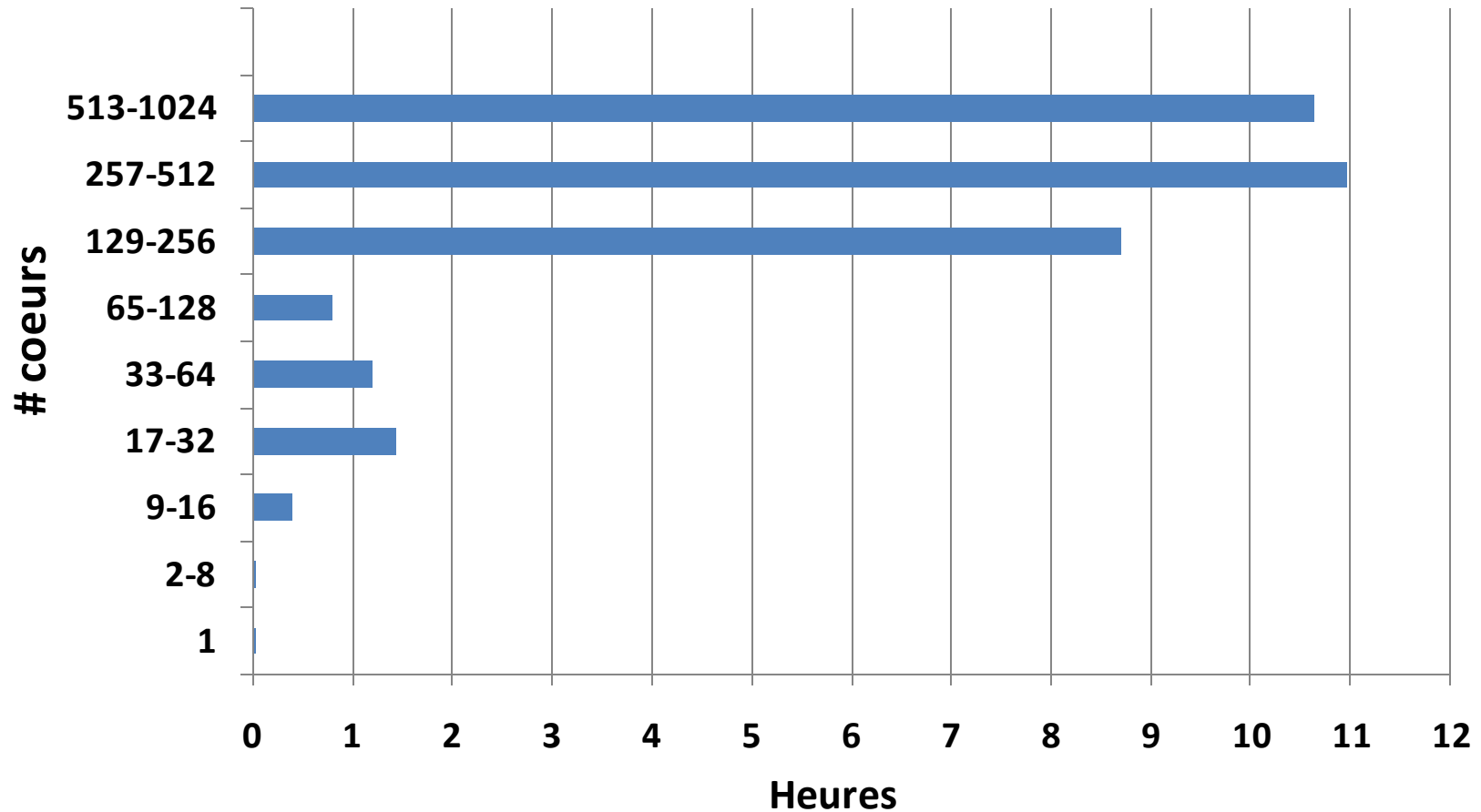
**Temps moyen bac-à-sable = 96 secondes**

Temps moyen hors *best-effort* = **50 minutes** (dominés par les petits jobs)

Influence du free-ride pour les jobs > 256 coeurs

# Froggy : temps d'attente des jobs par taille

Janvier 2014 – Avril 2014



Temps moyen hors *best-effort* = **15 minutes**

Augmentation temps d'attente pour les jobs > 128 cœurs

# Espace personnel des utilisateurs CIMENT : Perseus

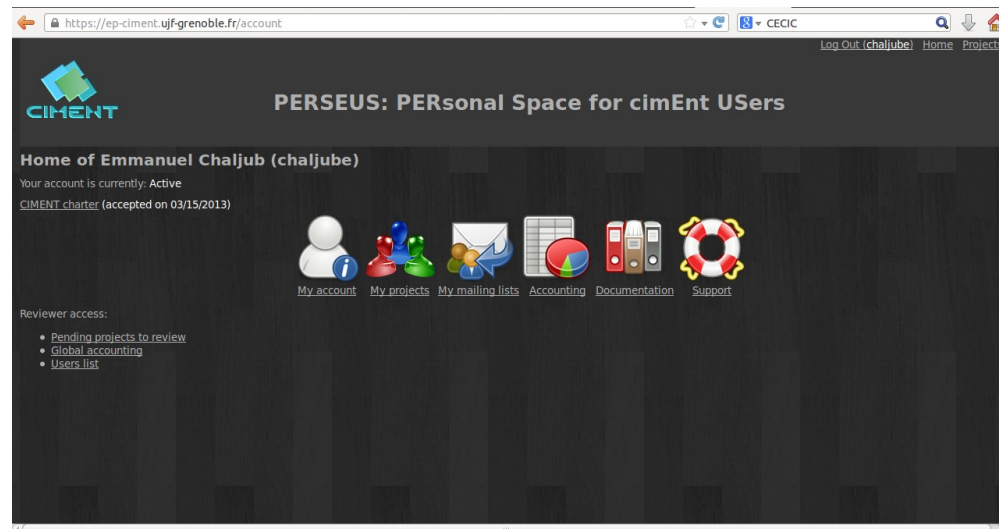
<https://ep-ciment.ujf-grenoble.fr>

## Point d'entrée unique aux services :

Documentation, support, gestion projets,  
Abonnement listes de diffusion...

## A venir :

- Gestion des publications (doi, bibtex)
- Espace wiki par projet



Développement : R. Cavagna & B. Bzeznik

**Citer CIMENT** : voir [ciment.ujf-grenoble.fr/wiki-pub/index.php/Cite\\_CIMENT](http://ciment.ujf-grenoble.fr/wiki-pub/index.php/Cite_CIMENT)

*All (or most of) the computations presented in this paper were performed using the Froggy platform of the CIMENT infrastructure (<https://ciment.ujf-grenoble.fr>), which is supported by the Rhône-Alpes region (GRANT CPER07\_13 CIRA) and the Equip@Meso project (reference ANR-10-EQPX-29-01) of the programme Investissements d'Avenir supervised by the Agence Nationale pour la Recherche.*

# Perspectives

- Projet Luke (grille de calcul et de traitement de données) **voir présentation à venir**
- Demande CPER CIDRA (Lyon/Grenoble/IN2P3)
- Structuration commune CIMENT-MaiMoSiNE

**Questions ?**