



Pôle Chimie

« L'invasion de FROGGY a commencé ... »

Pierre Girard (pierre.girard@ujf-grenoble.fr)

DCM-CT / CNRS

A-M des Utilisateurs CIMENT, Grenoble, le 13/05/2015

Plan

- Préambule
- CECIC/ICMG
- Utilisation de FROGGY
- Conclusions et perspectives

PRÉAMBULE

Préambule

- Qui je suis
 - Docteur en informatique (UJF)
 - Chef de projet dans le privé
 - Développement informatique (serveurs, site web, etc.)
 - IR au centre de calcul de l'IN2P3/CNRS à LYON
 - 12000 cœurs, +10 Po de disque, 40 Po de bandes
 - Participation au déploiement d'une grille de calcul mondiale
 - Responsable des activités de calcul du LHC (physique des particules... de Dieu)
 - IR dans l'équipe de Chimie Théorique au DCM depuis septembre 2012

- Qui je ne suis pas (encore ?)
 - Un chimiste
 - Un théoricien
 - Mais on me soigne... (à coup de formule magique $\hat{H}\psi = E\psi$)

CECIC/ICMG

Plateau CECIC de l'ICMG

- ICMG (Institut de Chimie Moléculaire de Grenoble)
 - <http://icmg.ujf-grenoble.fr>
 - Fédération de recherche (FR 2607)
 - CERMAV (Centre de Recherches sur les Macromolécules Végétales)
 - DCM (Département de Chimie Moléculaire)
 - DPM (Département de Pharmacochimie Moléculaire)
 - Gestion de plateaux techniques mutualisés
- Plateau CECIC (PCECIC) depuis janvier 2014
 - Centre d'Expérimentation et de Calcul Intensif en Chimie

Activités et méthodes

- Activités
 - Etude des propriétés chimiques et de la réactivité
 - Calcul d'énergie
 - Optimisation géométrique des minima et états de transition
 - Calcul de fréquences
 - Calcul de propriétés spectroscopiques
 - Etude de conformation, d'interactions et de chemin réactionnelle
 - Calcul d'amarrage moléculaire (docking)
 - Simulation de l'évolution d'un système
 - Dynamique moléculaire
 - Méta-dynamique moléculaire
- Méthodes
 - Mécanique quantique (Quantum Mechanics)
 - Ab initio
 - Semi-empirique
 - Mécanique Moléculaire (Molecular Mechanic)
 - Méthode hybride (QM/MM)

Activités et méthodes

- Activités

- Etude des propriétés chimiques et de la réactivité
 - Calcul d'énergie
 - Optimisation géométrique des minima et états de transition
 - Calcul de fréquences
 - Calcul de propriétés spectroscopiques
- Etude de conformation, d'interactions
 - Calcul d'amarrage moléculaire (docking)
 - Simulation de l'évolution d'un système
 - Dynamique moléculaire
 - Méta-dynamique moléculaire

Ces activités de calculs et de simulations utilisent un éventail de logiciels existants :

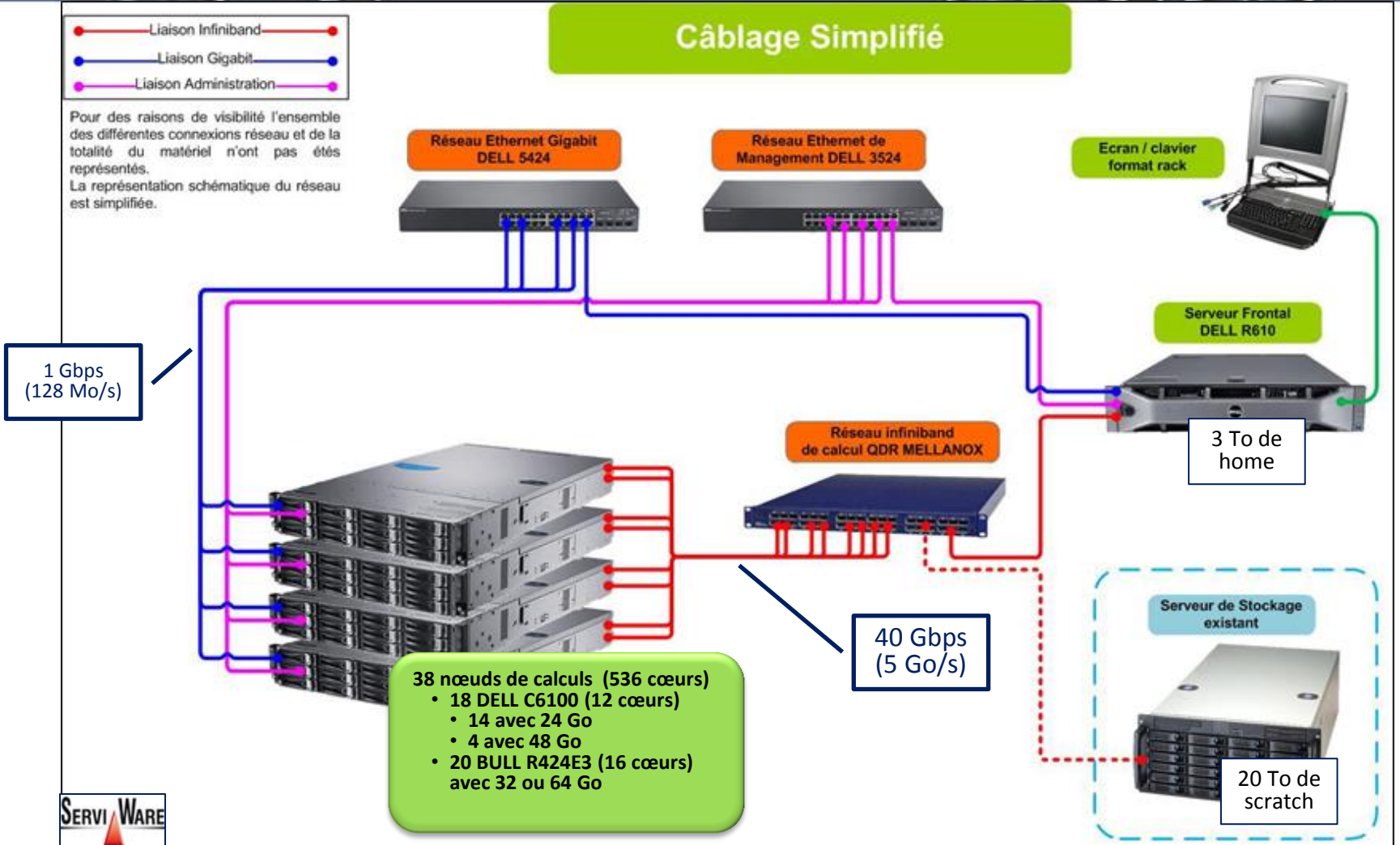
- Gaussian (licence de site)
- Amber (licence)
- CP2K
- Gromacs
- Orca
- ...

Leur installation est donc une condition nécessaire à leur travail

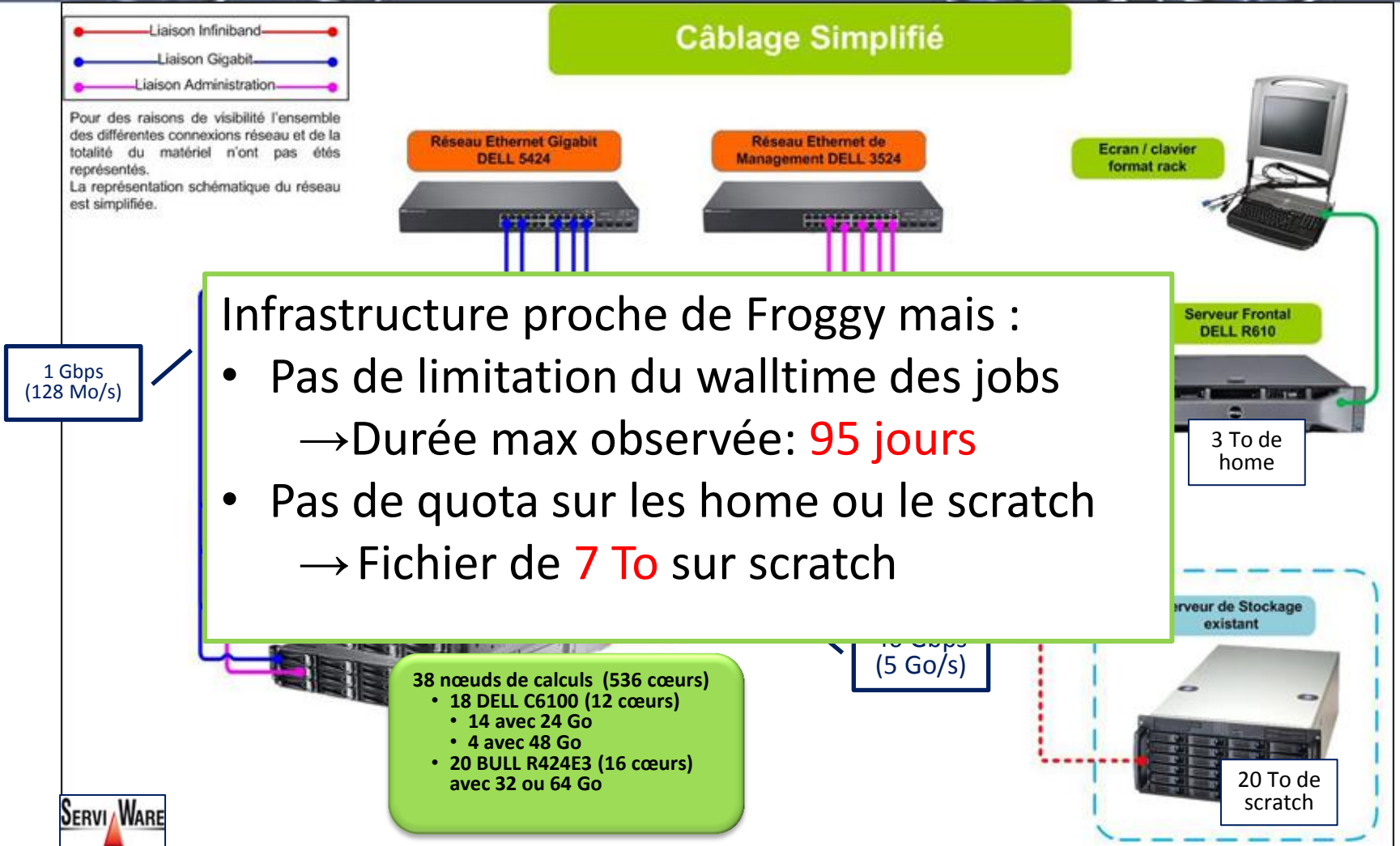
- Méthodes

- Mécanique quantique (Quantum Chemistry)
 - Ab initio
 - Semi-empirique
- Mécanique Moléculaire (Molecular Mechanics)
- Méthode hybride (QM/MM)

Infrastructure du Cluster CECIC

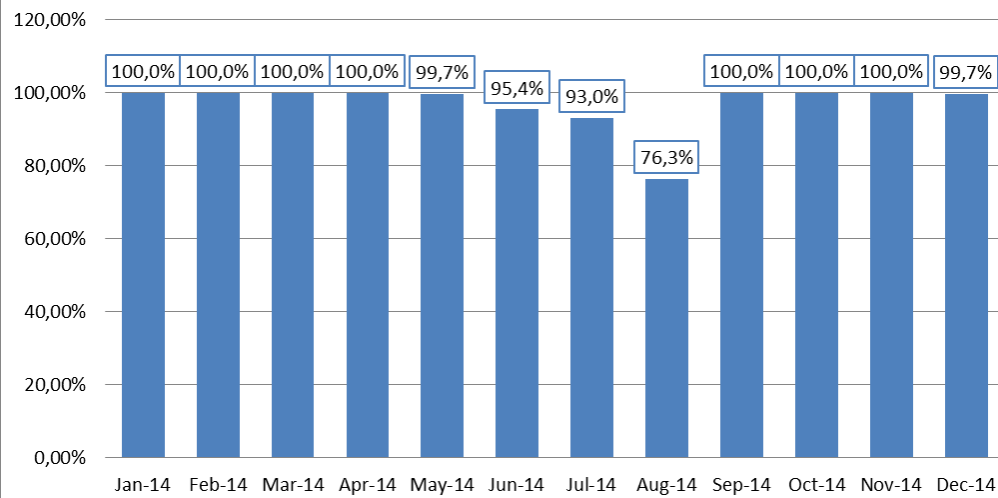


Infrastructure du Cluster CECIC



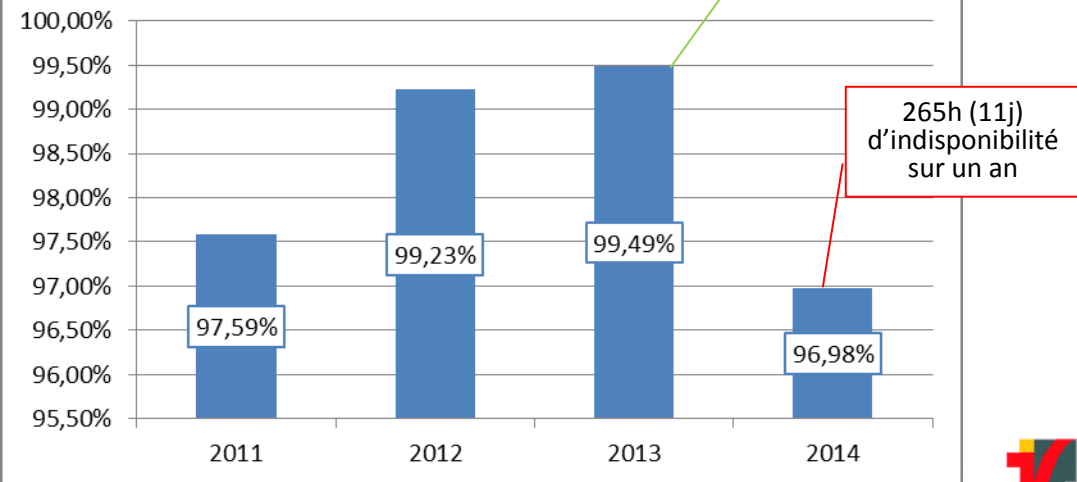
Disponibilité du Cluster CECIC

CECIC Availability for 2014



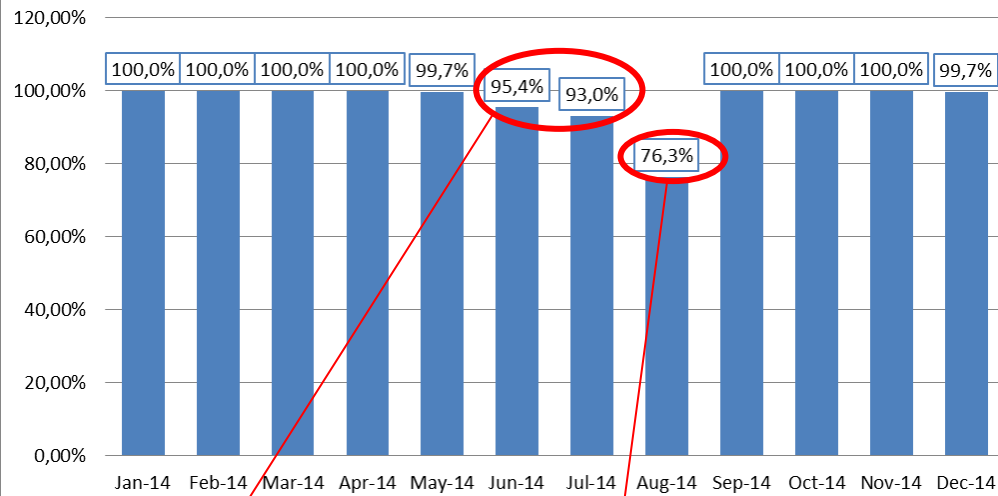
La disponibilité du cluster est le temps durant lequel les ressources ont été exploitables, l'idéal (100%) étant 24h/24 365J/365.

Yearly CECIC availability



Disponibilité du Cluster CECIC

CECIC Availability for 2014

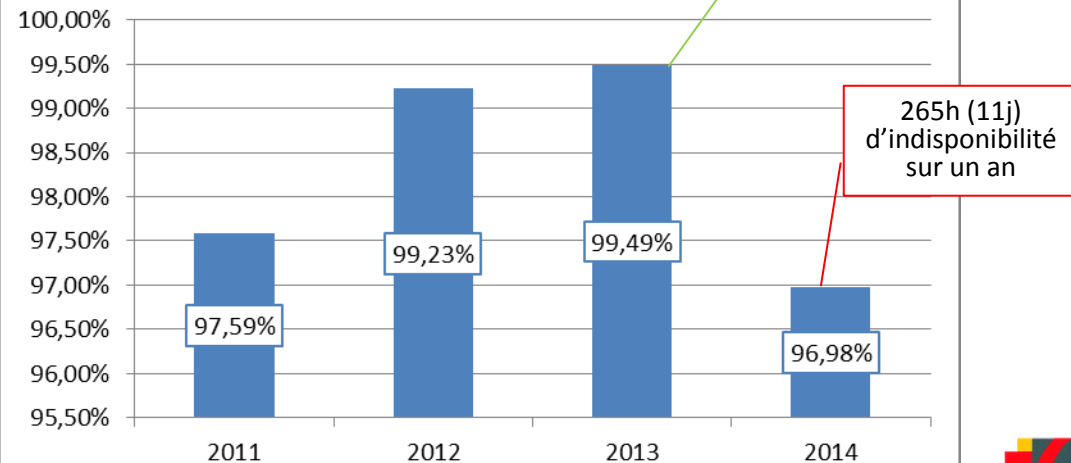


Surchauffe de la salle et sous-dimensionnement électrique du groupe froid

Coupures de courant le premier jour de la fermeture estivale

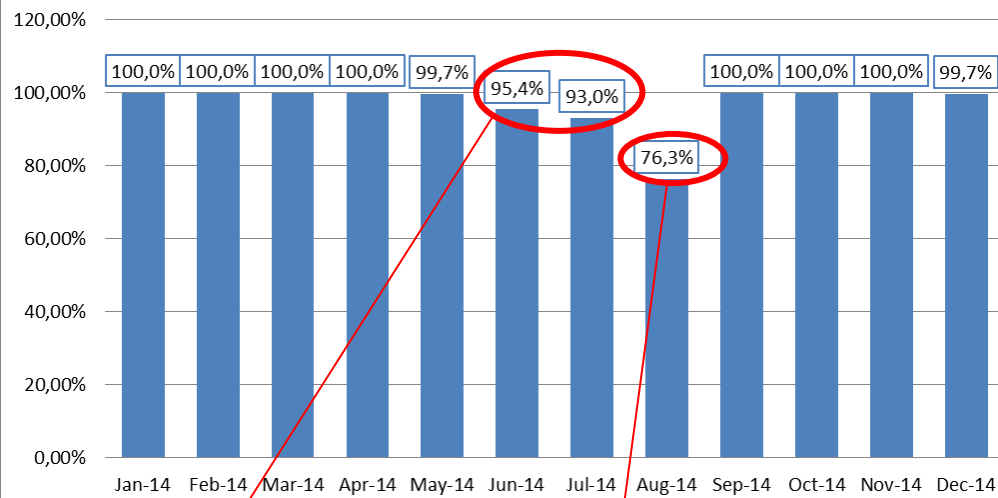
La disponibilité du cluster est le temps durant lequel les ressources ont été exploitables, l'idéal (100%) étant 24h/24 365J/365.

Yearly CECIC availability



Disponibilité du Cluster CECIC

CECIC Availability for 2014



La disponibilité du cluster est le temps durant lequel les ressources ont été exploitables, l'idéal (100%) étant 24h/24 365J/365.

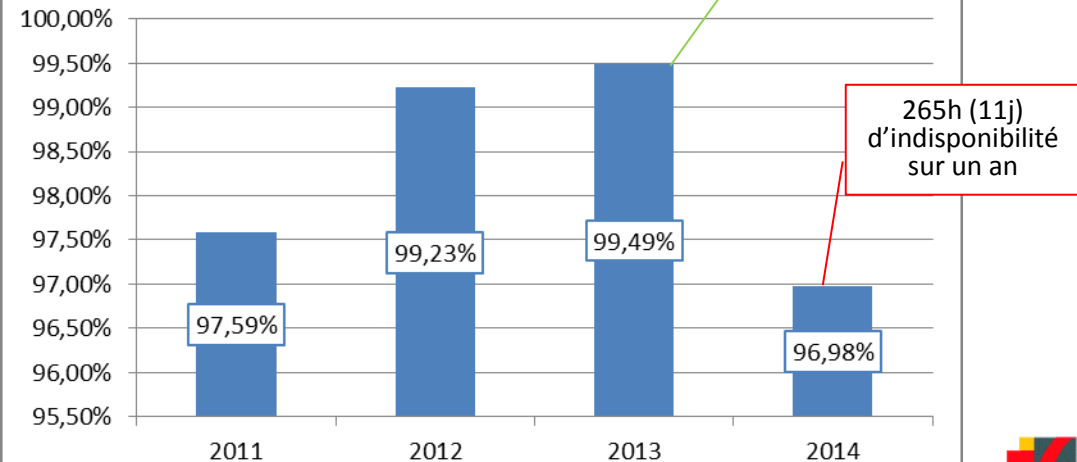
Surchauffe de la salle et sous-dimensionnement électrique du groupe froid

Coupures de courant le premier jour de la fermeture estivale

Cloisonnement de Froggy pour confiner la chaleur dégagée par les nœuds de calcul

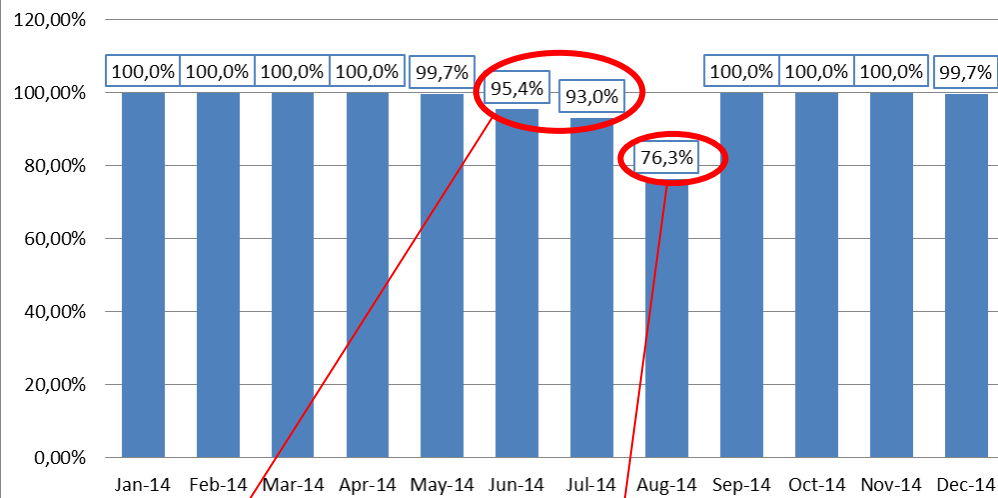
Mise à niveau électrique

Yearly CECIC availability



Disponibilité du Cluster CECIC

CECIC Availability for 2014



La disponibilité du cluster est le temps durant lequel les ressources ont été exploitables, l'idéal (100%) étant 24h/24 365J/365.

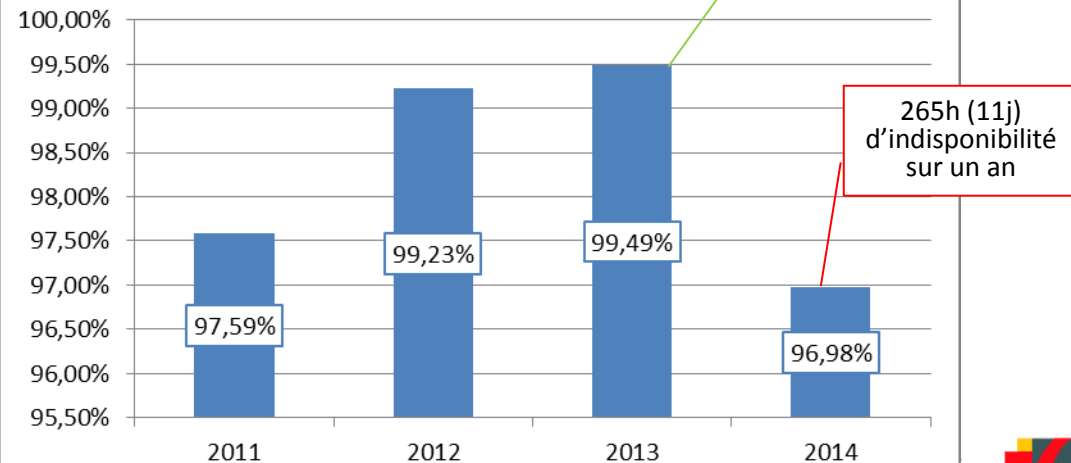
Surchauffe de la salle et sous-dimensionnement électrique du groupe froid

Coupures de courant le premier jour de la semaine estivale

Cloisonnement Froggy pour la chaleur dégagée par les nœuds calcul

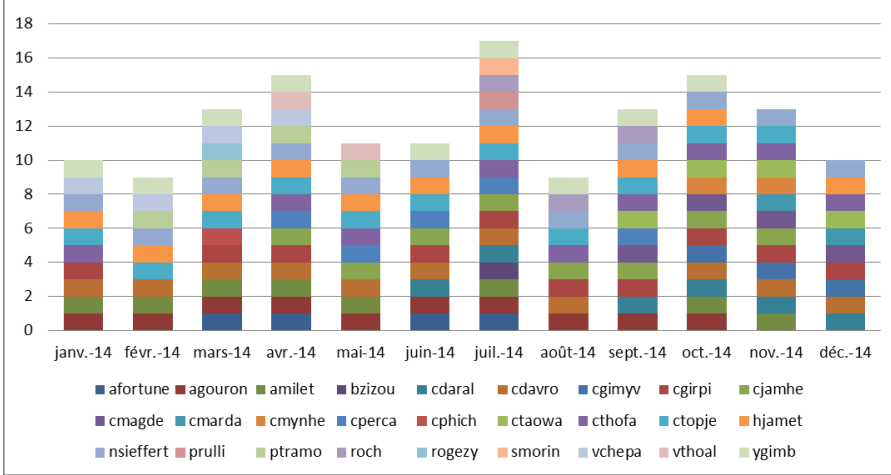
Merci au pôle infrastructure de la DSI de l'UJF

Yearly CECIC availability



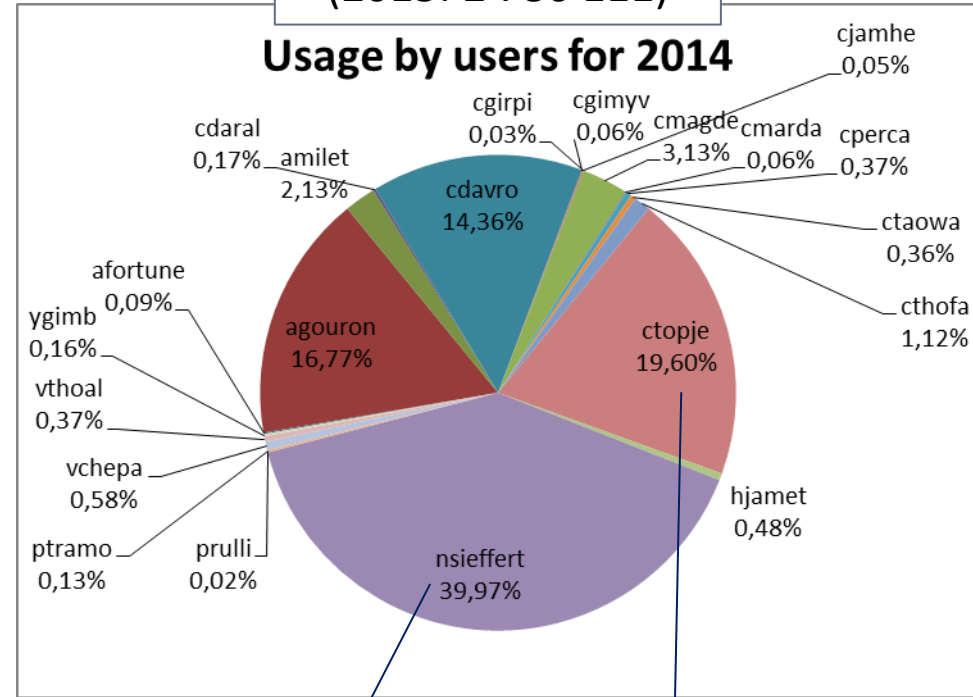
Jobs et utilisateurs

Number of distinct users for 2014

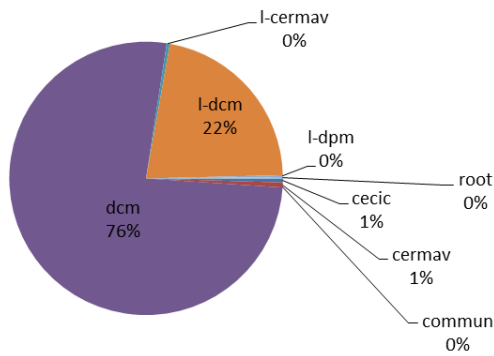


3 240 606 hours
(2013: 2 786 111)

Usage by users for 2014



Usage rate by groups for 2014



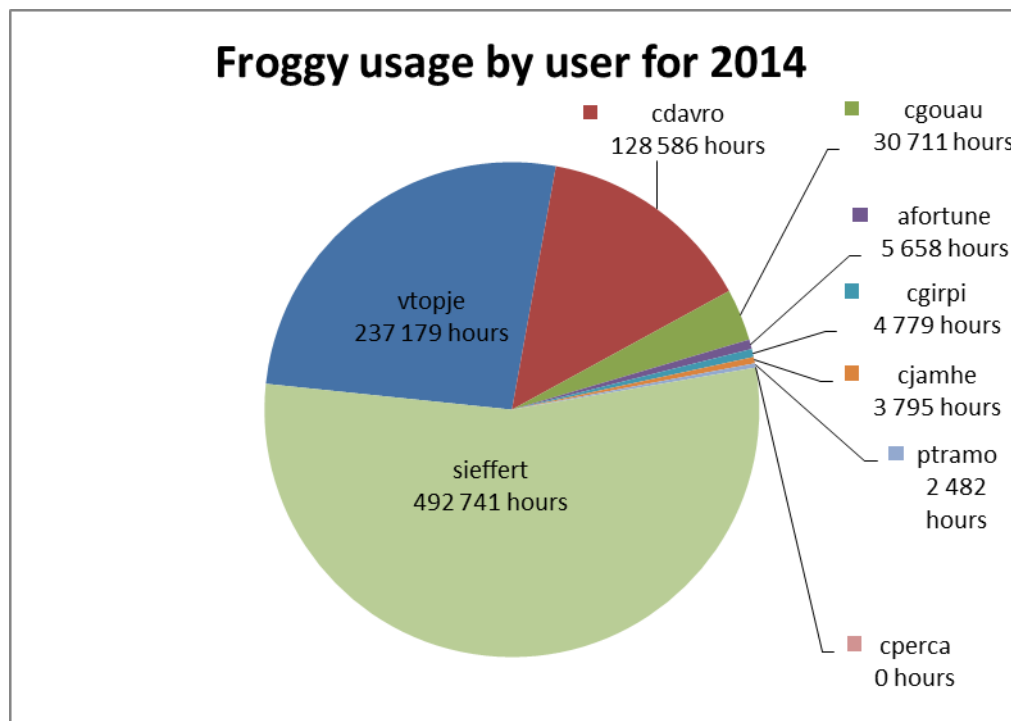
1 295 123 hours

635 167 hours


UTILISATION DE FROGGY

Jobs et projets de chimie

PERSEUS project	2013	2014
CECIPEX	1 669 hours	413 190 hours
LIQSIM	250 073 hours	492 741 hours
Total	251 742 hours	905 931 hours



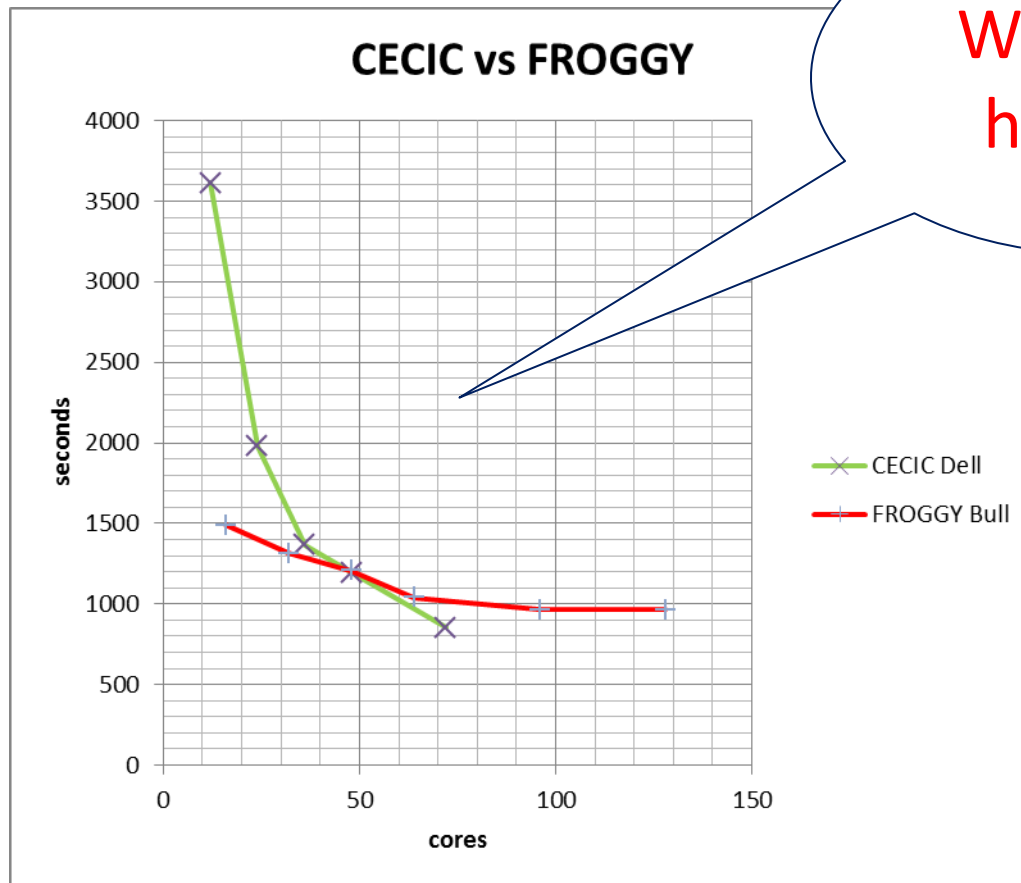
Logiciels installés

- Amber 12.0 (GPU+MPI)
- CP2K 2.5.1/2.6.0 (libint + libxc)
- Gaussian09 D.01
- Gromacs 4.6.5 (GPU+MPI)
- Namd 2.9 (GPU+SMP)
- Orca 3.0.3 (patché)
- Plumed 2.0.2
- plumed_gromacs 4.6.5/2.0.2
- Siesta 3.2  (à déboguer)
- Molden 5.1

- Compilation
- Tests et benchmark
- Exemple de jobs fournis aux utilisateurs

Problème des Jobs parallèles (MPI)

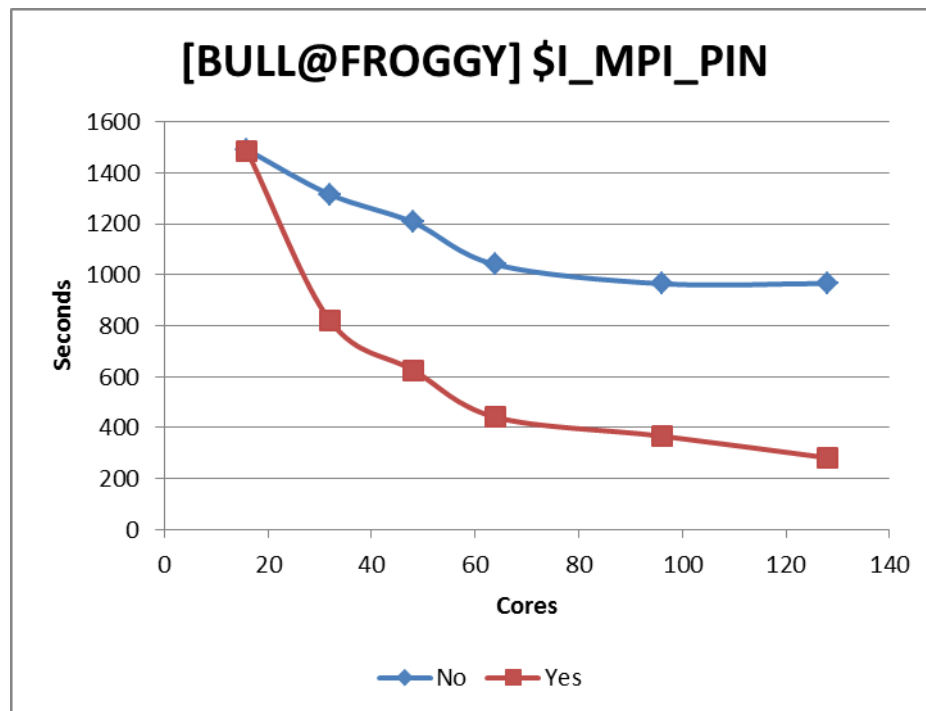
- CP2K-2.5.1 : H2O-256 (QS)



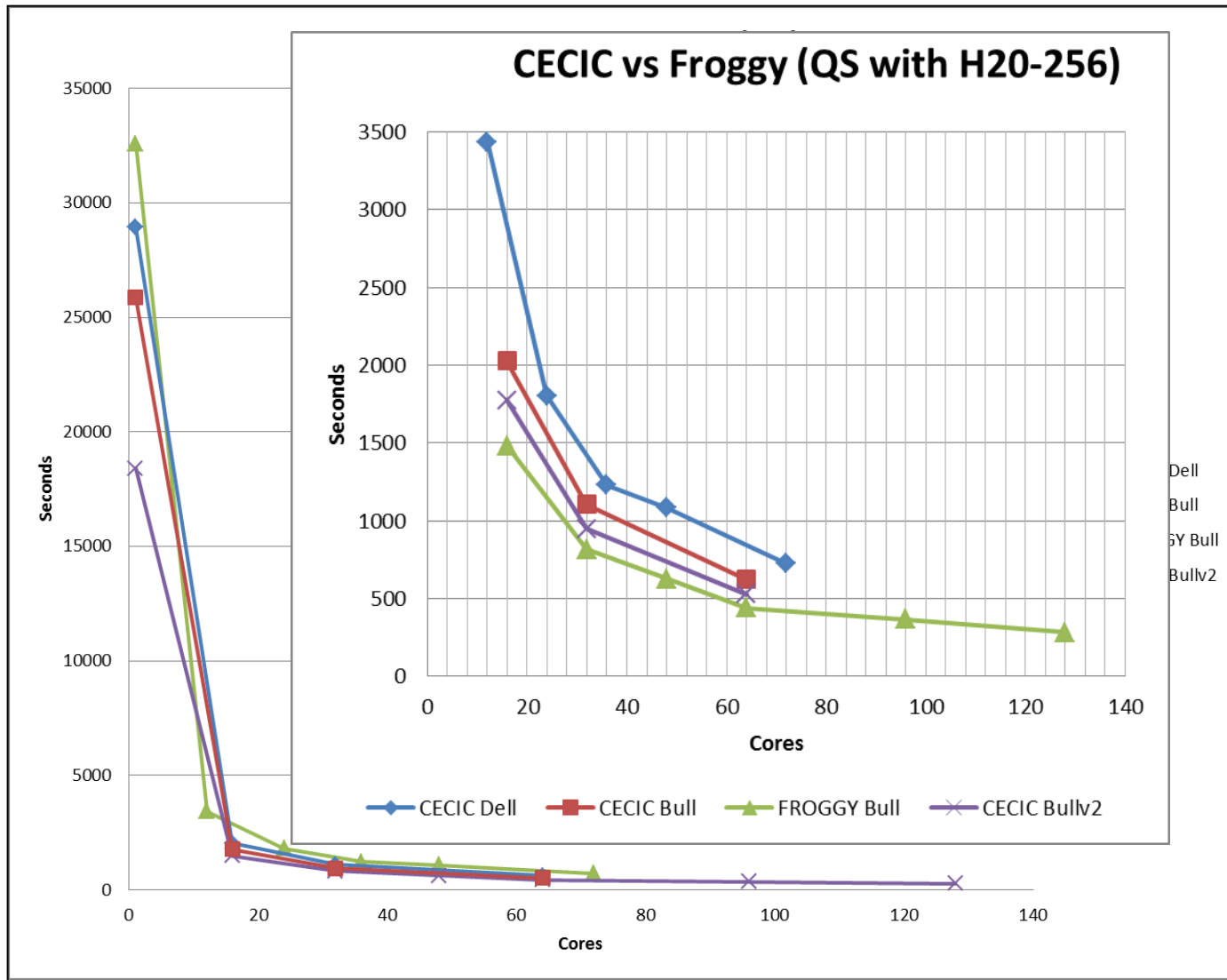
What the hell ???

Problème des Jobs parallèles (MPI)

- To I_MPI_PIN or not, that is the question !!
 - “Set this environment variable to turn off the process pinning feature of the Intel® MPI Library”
 - Yes: Enable process pinning. This is the default value.
 - No: Disable processes pinning.



Export I_MPI_PIN=Yes !!!



Dell
Bull
5Y Bull
Bullv2

GPU... calculer plus vite

- Pour certains calculs, le GPU s'avère très intéressant
 - Exemple d'un calcul avec AMBER 12
 - ©Rolf DAVID
 - Système de 30 000 atomes
 - Dynamique moléculaire (MM)
 - En MPI avec 64 cœurs (4 nœuds) :
 - 9,42 ns/jour
 - En CUDA avec 1 cœur (1 nœud) et 1 GPU :
 - 12,68 ns/jour

GPU... calculer plus vite

- Pour certains calculs, le GPU s'avère très intéressant

Mais, attention, OAR ne permet pas de réserver un GPU, donc s'il y a plusieurs jobs sur le même nœud, il peut y avoir une concurrence sur l'utilisation des GPUs. C'est contre-performant dans ce cas.

Avec CUDA, une variable d'environnement permet de choisir le GPU sur lequel on veut calculer. J'ai mis en place un script qui vérifie l'état des GPUs pour les utilisateurs.

```
...
# Select a Free GPU
export CUDA_VISIBLE_DEVICES=$( ${TOOLS_DIR}/GPU/selectGPUDevice.sh )
[ $? -ne 0 ] &&
{
  echo "ERROR: no free GPU device" 1>&2
  exit 1;
}
```

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Conclusions

- Les chimistes sont des utilisateurs de logiciels « clef en main »
 - Pas d'adaptation possible du logiciel à l'infrastructure et à la politique d'exploitation du cluster
 - Demande exceptionnelle pour dépasser certaines limites bloquantes (walltime, scratch)
 - FROGGY devient un outil de calcul intéressant pour les chimistes
 - Heures des chimistes sur FROGGY \approx 1/3 de celles sur CECIC
 - Problèmes du I_MPI_PIN résolu
 - Avantages
 - Offre logiciel de chimie croissante
 - Nombreuses ressources
 - Temps d'attente réduit
 - Nœuds plus puissants (benchmark)
 - Accès à des GPUs
 - Gestion de son compte via PERSEUS
 - Administrateurs à proximité, à l'écoute, souples et réactifs (Merci !!!)
 - Inconvénients
 - Quotas sur les espaces de stockage d'un utilisateur
 - Limite le nombre de jobs simultanés (ex.: Gaussian)
 - Temps d'exécution d'un job limité à 96h
- Quotas sur le scratch plus important mais par projet ?
- Outillage probablement nécessaire pour en faciliter l'usage
- Découpage des jobs longs en une séquence de jobs \leq 96h
- Formation et documentation à l'usage de Froggy
- Homogénéiser les environnements de CECIC et de FROGGY ?

Questions

?