



Action Concertée Incitative [ACI]
Globalisation des Ressources Informatiques
et des Données [GRID]

Projet CiGri

CIMENT GRID

Grille grenobloise

pour la simulation numérique

par méthodes de Monte Carlo

Laurent Desbat (coordinateur scientifique) et Nicolas Capit (responsable technique)
Françoise Berthoud, Françoise Roch, Pierre Valiron



Action Concertée Incitative
[ACI]
Globalisation des Ressources
Informatiques et des Données
[GRID]



INSTITUT NATIONAL
DE RECHERCHE EN
INFORMATIQUE ET
EN AUTOMATIQUE



GRENOBLE 1
UNIVERSITÉ
JOSEPH FOURIER
SCIENCES, TECHNOLOGIE, MÉDECINE

Présentation

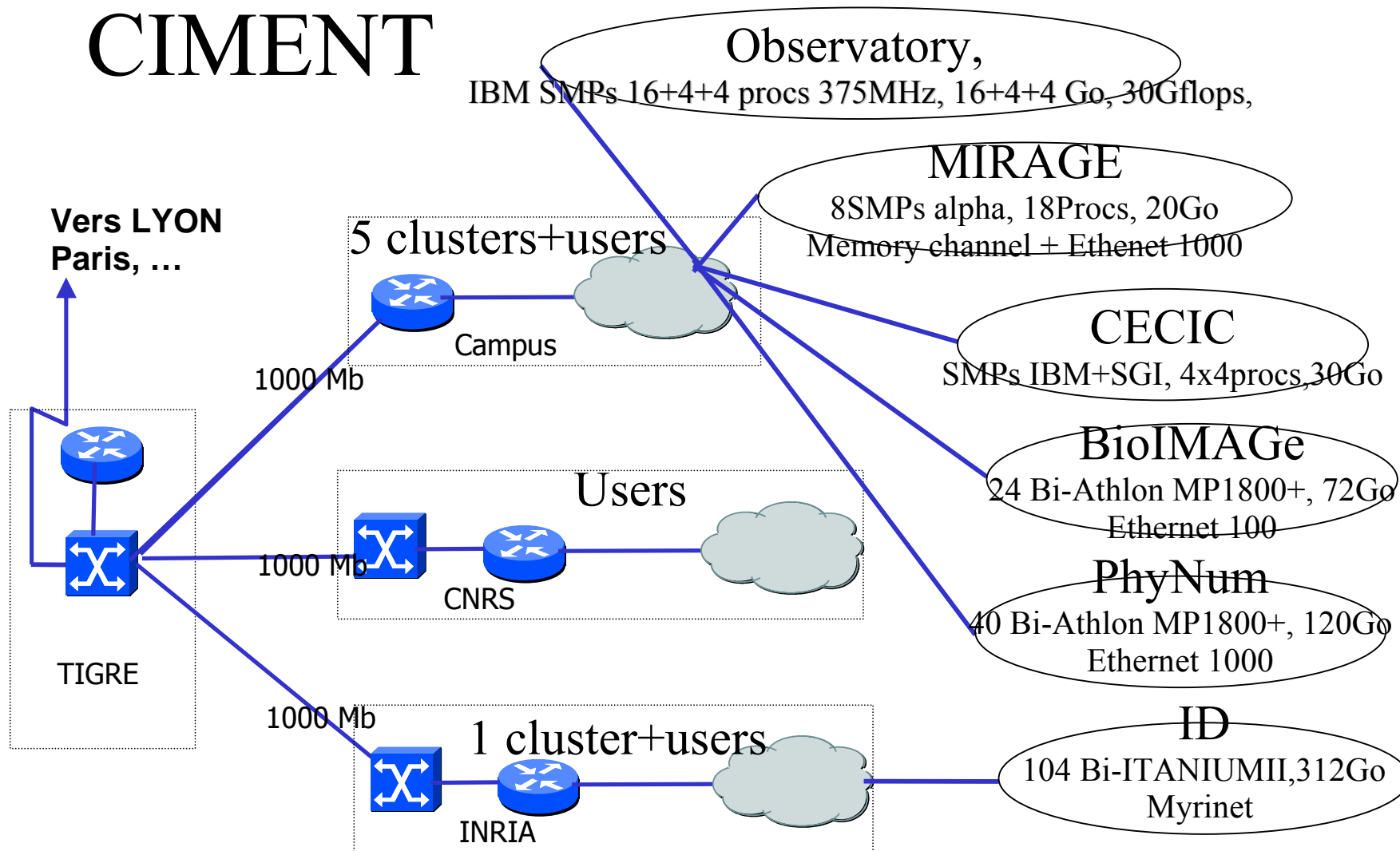
- ▶ Construction d'une grille grenobloise basée sur les clusters de calcul distribués de CIMENT
- ▶ Mise en place et développement d'un intergiciel d'utilisation d'une grille métropolitaine pour des calculs de type Monte Carlo
- ▶ Validation sur des applications réelles de modélisations par Monte Carlo
 - ▶ Science des matériaux : Croissance cristalline, croissance de SiC,...
 - ▶ Astronomie : dynamique des planètes, milieu interstellaire (chimie quantique),...
 - ▶ Géophysique : propagation des ondes sismiques, ...
 - ▶ Biologie et médecine: Analyse génétique spatialisée, imagerie médicale 3D,...



Action Concertée Incitative
[ACI]
Globalisation des Ressources
Informatiques et des Données
[GRID]



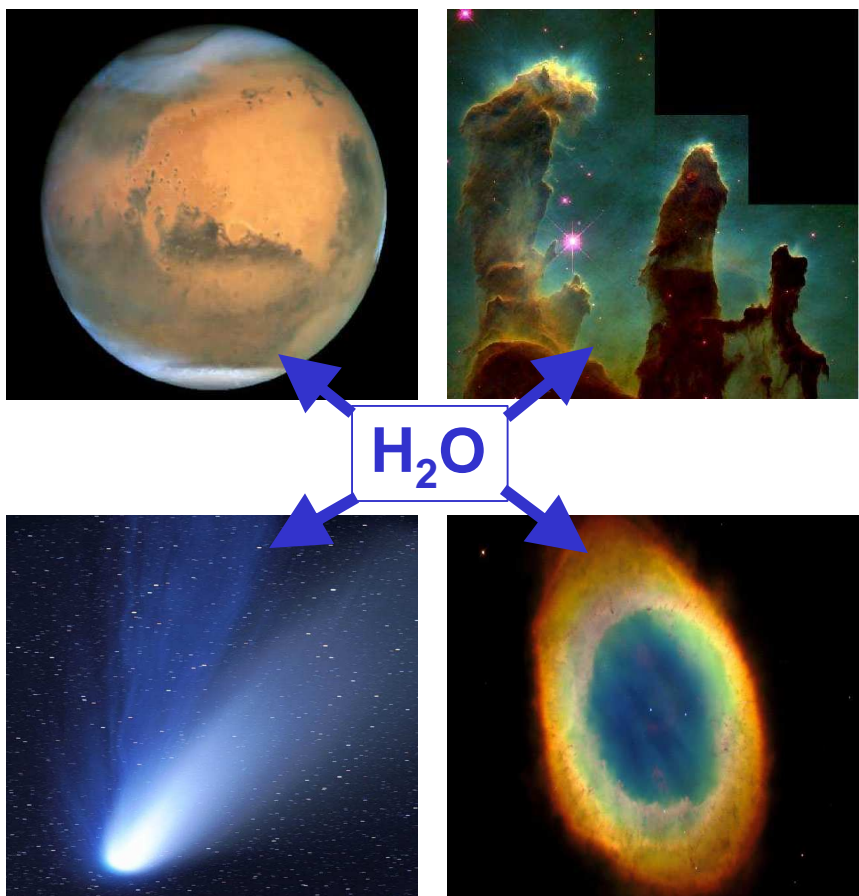
CiGri s'appuie sur l'infrastructure CIMENT



Action Concertée Incitative
[ACI]
Globalisation des Ressources
Informatiques et des Données
[GRID]



Premiers résultats



Application à la chimie quantique

- ▶ Ubiquité de l'eau dans l'univers
- ▶ Préparation de l'analyse des observations : étude de l'excitation collisionnelle de H₂O
- ▶ 10⁶ géométries, soit 200 000 heures de calcul sur PC 1GHz (échantillonnage d'une hyper surface à 9D)

Noga J., Valiron P., « Explicitly Correlated Coupled Cluster R12 Calculations », *Computational Chemistry: Reviews of Current Trends Vol. 7, 2002*, 131,



Action Concertée Incitative
[ACI]
Globalisation des Ressources
Informatiques et des Données
[GRID]



Premiers résultats

- ▶ Contexte
 - ▶ Clusters dédiés au calcul
 - ▶ Utilisation du temps libre des clusters (vol de tâches)
- ▶ Développement d'un environnement léger pour la soumission de job Monte Carlo
 - ▶ Basé sur des scripts et un programme de distribution de travaux (srun, prun, grun)
 - ▶ Outils standards : NFS, ssh, PBS
 - ▶ Mécanisme de tolérance à certaines pannes



Action Concertée Incitative
[ACI]
Globalisation des Ressources
Informatiques et des Données
[GRID]



Premiers résultats

- ▶ Résultats obtenus
 - ▶ Suite à l'installation du mode Grille sur les grappes Phynum, Icluster et Observatoire
 - ▶ Équivalent de **15000 Heures de calcul en 8 jours** sur des PIII 733MHz
 - ▶ En moyenne : 78 machines équivalentes à des PIII 733MHz allouées à la grille
 - ▶ Occupation des clusters
 - ▶ Icluster : de 0 à 80 % d'utilisation
 - ▶ Phynum : de 0 à 20 % d'utilisation
 - ▶ Autres : 18 machines de l'observatoire, le jour
24 machines de l'observatoire, la nuit



Action Concertée Incitative
[ACI]
Globalisation des Ressources
Informatiques et des Données
[GRID]



Partenaires

▶ Laboratoires

- ▶ Techniques de l'Imagerie de la Modélisation et de la Cognition (TIMC-IMAG)
- ▶ Informatique et Distribution (ID-IMAG)
- ▶ Laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés (LPMMC)
- ▶ Laboratoire d'AstrOphysique de Grenoble (LAOG)
- ▶ Laboratoire de Modélisation et Calcul (LMC-IMAG - plate forme MIRAGE)
- ▶ Centre d 'Expérimentation du Calcul Intensif en Chimie (CECIC)

▶ Etablissements concernés :

- ▶ Université Joseph Fourier de Grenoble (UJF)
- ▶ Institut National Polytechnique de Grenoble (INPG)
- ▶ INRIA Rhône-Alpes (INRIA)
- ▶ CNRS
- ▶ IMAG et Observatoire de Grenoble, Institut de la Matière Condensée



Action Concertée Incitative
[ACI]
Globalisation des Ressources
Informatiques et des Données
[GRID]

