

CIMENT
CIMENT - GRID
Calcul Intensif Modélisation
Expérimentation Numérique et
Technologique

L.Desbat,
TIMC-IMAG
UJF
13/01/2003



Ordre du jour

- 10h20 Tour de table
- 10h30 L'ACI GRID : Michel Cosnard
- 11h00 Présentation du projet CIMENT GRID
- 12h30 Discussion
 - ◆ 12h45-14h00 repas au Magellan
- 14h00-14h15 Point technique
- 14h15-14h30 Quelques actions transversales
- 14h30-16h00 3 présentations scientifiques
- 16h30 Délibération du Conseil

Ordre du jour

- 10h20 Tour de table
- 10h30 *L'ACI GRID : Michel Cosnard*
- 11h00 Présentation du projet CIMENT GRID
- 12h30 Discussion
 - ◆ 12h45-14h00 repas au Magellan
- 14h00-14h15 Point technique
- 14h15-14h30 Quelques actions transversales
- 14h30-16h00 3 présentations scientifiques
- 16h30 Délibération du Conseil

Ordre du jour

- 10h20 Tour de table
- 10h30 L'ACI GRID : Michel Cosnard
- 11h00 *Présentation du projet CIMENT GRID*
- 12h30 Discussion
 - ◆ 12h45-14h00 repas au Magellan
- 14h00-14h15 Point technique
- 14h15-14h30 Quelques actions transversales
- 14h30-16h00 3 présentations scientifiques
- 16h30 Délibération du Conseil

CiGri

CIMENT - GRID

Calcul Intensif Modélisation
Expérimentation Numérique et
Technologique

N.Capit, F.Berthoud, L.Desbat, O.Francois,
A.Pasturel, O.Richard, F.Roch, P.Valiron,
... et les autres ...



Contexte général calcul

- Utilisation des centres de calculs nationaux
 - IDRIS, CINES
- Partenariat avec le CEA
 - Financement 2000-2006 (Région - CEA) 7MF
 - Maintien du partenariat dans le contexte du déménagement vers Paris du centre de calcul du CEA
- Développement de projets « calcul » mésoscopiques au sein des universités de Grenoble



Équipement mésoscopique pour le calcul

■ Financement

- Appel à projet national de Guy René Perrin, Nov 98 : 2MF
- CPER 2000/2006 : 15MF
- Compléments CNRS, IMAG, INPG, INRIA, etc.

■ Projets

- Observatoire, MIRAGE, Grappe de PC, Chimie calculatoire (CECIC), BioIMAGE, PhyNum
- Formation transversale au niveau des écoles doctorales, formation continue
- Construction d'une grille de calcul (2003-2004) grenobloise, participation à des grilles



Coordination du projet

- Comité de pilotage du projet : définit les grandes orientations
- Conseil Scientifique + Suivi Régional + suivi ACI GRID
- Participation aux journées CINES-IDRIS + comité scientifiques d'attribution d'heures + CEA.
- Mise en place d'un séminaire trimestriel (2000)
<http://ujf-grenoble.fr/CIMENT> => demi-journée thématique.
- Mise en place de formations doctorales transversales
 - Introduction aux méthodes du calcul intensif
 - Modélisation et Calcul en Physique/mécanique/biologie
- Formation permanente du CNRS (avril-2003)

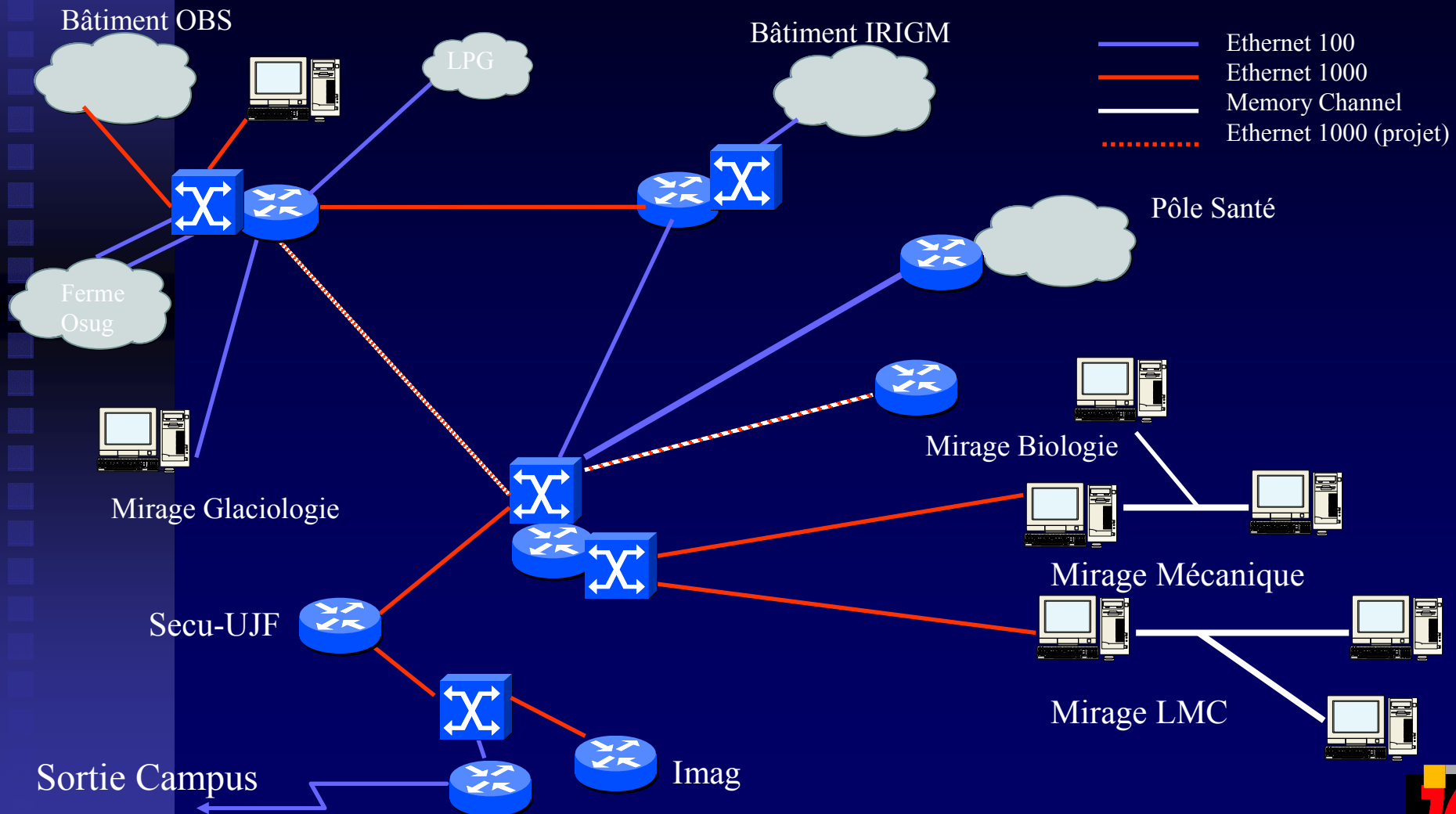


Coordination du projet

- Structuration des projets de calcul au niveau des universités grenobloises par des regroupements de projets :
 - “ Couplage modélisation hydrologique et météorologique ” inclus dans *MIRAGE*.
 - Génétique, bio-informatique et imagerie médicale (*BioIMAGE*).
 - Création du CECIC : Centre d'Expérimentation du Calcul Intensif en Chimie.
 - Regroupement du projet *PhyNum* au *SCCIOG*.
- Recrutement d'un Ingénieur de Recherche UJF pour le projet *MIRAGE* : **Laurence Viry** + 3 promotions IE->IR et IR2->IR1 (*dont 1 création de poste CNRS*)
- Accès prioritaire aux réseaux rapides au niveau du campus

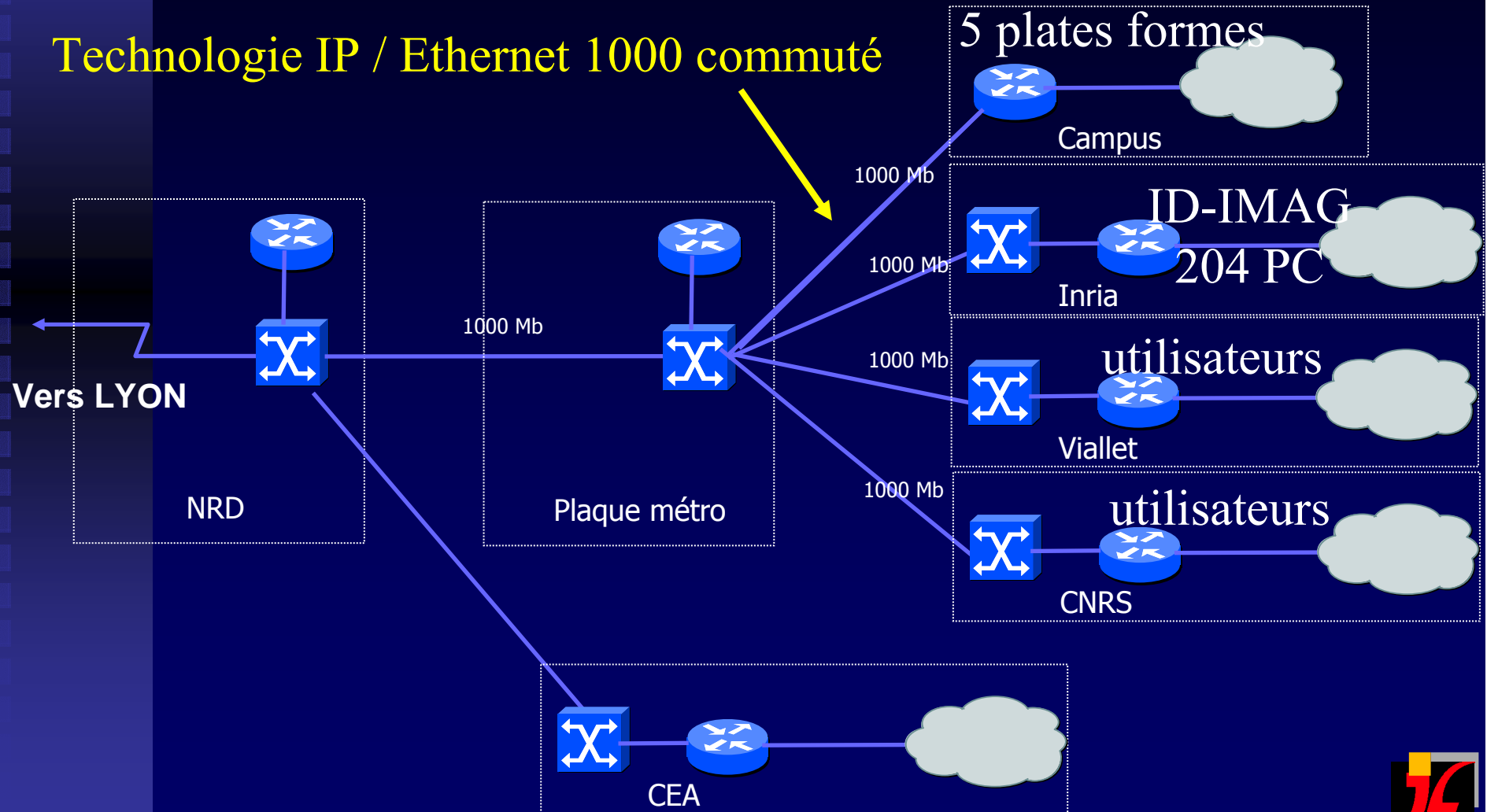


CIMENT Campus Cœur Giga/Eth100



Le réseau métropolitain Grenoblois TIGRE : Q4-2002

Technologie IP / Ethernet 1000 commuté



Observatoire de Grenoble

P. Valiron et F. Roch

LAOG, LGIT, SGEP du LIS



- *Projet* : calcul intensif en astrophysique et géophysique.
- *Solution retenue* : IBM (SMP 16 procs 375MHz, 16Go, 24Gflops crête et 2 Quadri-Pro, SMP, 4 Go). Solution centralisée.
- *Financement* : 500kF COMI CNRS +165kF quadriennal UJF ; 600kF Ministère (CIMENT) + 495 KF quadriennal UJF (soutien du ministère quadriennal 400kF/an)
- *État d'avancement* : fin de mise en place juillet 2000 (coût 1,76MF)
- *Projets scientifiques* (une vingtaine de thésards) : évolution stellaire, disque proto-planétaire, astrochimie quantique : dynamiques microphysique, simulation numérique MHD et hautes énergies, propagation des ondes sismiques, reconstruction en sismologie, champs magnétique terrestre, modélisation de l'ionosphère dans les zones polaires, Interactions cinétiques soleil/terre, ...



Plate forme Mirage

E. Blayo, L. Viry



LMC, LEGI, LTHE, LGGE, LEA

- *Projet* : modélisation, calcul, visualisation dans les problèmes d'environnement et climat.
- *Solution retenue* : 7 DS20 (bi-pro alpha EV67, 7x2,5Go, Memory Channel) et 3x100Go DD ; LSF et TotalView. Solution répartie sur 3 sites.
- *État d'avancement* : En exploitation depuis janvier 2000 (1,5MF)
- *Financement* : 1,75MF [600kF MENRT, 650kF COMI CNRS, 100kF BQR INPG, 60kF CNES, 200kF des laboratoires] + 200kF INRIA, soutien du ministère (quadriennal 60kF/an)
- *Projets scientifiques* (une quinzaine de thésard) : modélisation des calottes polaires, couplage glace-atmosphère, Modélisation océanique, assimilation de données océaniques, modélisation interface sol-végétation atmosphère, hydrologie en zone montagneuse, assimilation de données avec Mésos-NH.



Pôle de chimie calculatoire



S.Perez et P.Vatton

LEDSS, CERMAV, Cristallographie, LEOPR, DPM

- *Projet* : création du CECIC : Centre d 'Expérimentation du Calcul Intensif en Chimie
- *Solution* : Une machine IBM SP (3 quadri Pro Power III 3x8Go) + une machine SGI 0200 quadri pro,4Go (logiciels de modélisation moléculaire)
- *Avancement* : En exploitation depuis Octobre 2001
- *Financement* : 1.5MF dans le cadre du CPER + 0,5MF CNRS + 462kF sur fonds propres labo
- *Projets scientifiques* (une dizaine de thésards) : Chimie quantique, Mécanique/Dynamique Moléculaires, Méthode mixte, Etat condensé, Recherches des conformations Bio-Actives.



Projet *BIOIMAGE*

L. Desbat G. Bourrel

TIMC-IMAG, Unité INSERM 438, RMN Bioclinique,
Laboratoire de Biologie des Populations d'Altitude



- *Projet* : Imagerie et modélisation biomécanique médicales
Biologie informatique et analyse génétique spatialisée.
- *Solution* : modifiée au printemps 2001 pour migrer d'une
solution à base d'alpha vers une grappe de 24 PC bi-pro, 3Go,
en réseau ethernet 100.
- *Avancement* : Mise en place printemps 2002.
- *Financement* : deux tranches CPER 800kF 2001, 1MF 2003(?)
- *Projets scientifiques* (une quinzaine de thésards) : reconstruction
rapide en imagerie 3D, atténuation et diffusion en imagerie nucléaire
(quantification),IRMfonctionnelle 3D, modélisation biomécanique
d'organes, Equations de Maxwell pour la modélisation de neurones, pôle
bio-informatique (étude des structures génétiques spatiales, identification de
matrices d'interaction génique, modélisation du génome,...)



Projet *PHYNUM*

A. Pasturel et F. Berthoud



IPMC (Louis Néel, Basses Températures et Physique Numérique)

- *Solution envisagée* : Evolution d'une solution à base d'IBM power III ou IV vers 40 Bi-pro Athlon MP 2000+, 2Go, Ethernet 1000.
- *Avancement* : Automne 2003, couplage réalisé avec l'Observatoire.
- *Financement* : Dans le cadre du CPER (1+0,5MF 2003)
- *Projet scientifiques* (une quinzaine de thésards)
 - Simulations de la propagation des ondes sismiques dans la croûte terrestre
 - Etude de la diffusion multiple de la lumière en milieu complexe
 - Supraconductivité dans des systèmes de dimension réduite
 - Transport thermique dans un conducteur mésoscopique
 - Manipulation des états quantiques dans des nanocircuits supraconducteurs
 - Elasticité de la croissance cristalline et auto-organisation de nanostructures
 - Structures d'équilibre et dynamique réactionnelle de surfaces
 - Thermodynamique et Transition de Phases.
 - ...



Grappe de PC (ID, SARDES et ReMaP)



D. Trystram, P. Augerat

- *Projet* : expérimentation des systèmes et du calcul distribué sur une grappe de PC.
- *Solution technique* : 104 PC bi-pro Itanium2, 900Mhz, 1.5Mo cache, 3Go, 72Go, disposant d'un réseau rapide de technologie myrinet. Solution massivement distribuée+ stockage plusieurs TO.
- *État d'avancement* : machine commandée (Compaq-HP) + expérimentation locale le i-cluster (225 PIII en réseau, plus de cent utilisateurs issus de 50 projets de recherche).
- *Financement* : 5MF (0,8MF MENRT, 0,3MF ENSL + CPER : 2,5MF INRIA et 1,2MF Région)
- *Projets scientifiques* (une quinzaine de thésards) : outils d'exploitation, supports d'exécution et méthodes de programmation



Bilan scientifique

- Une communauté d'une centaine de chercheurs et d'environ 70 thésards
- Contribue à une centaine de publications par an dans des revues à comité de lecture et des conférences internationales
- Perspectives riches dans chacune des disciplines avec des enjeux sociétaux, économiques importants



CiGri : GRILLE CIMENT

- **Projet de l'ACI GRID :**
 - **Projet CIMENT GRID**
 - **Début : 25 octobre 2002 ; durée 24 mois**
 - **Un ingénieur en CDD (23 mois, Nicolas Capit)**
- **Projet**
 - **Mise en place d'une grille de calcul « grenobloise »**
 - **Expérimentation de calcul de type Monte Carlo**
 - **Première réalisation/expérimentation : juin 2003**
 - **Développements juin 2003/2004**
 - **Exploitation à partir de mi-2004**
 - **Participation à des grilles plus larges**



PLAN

- 11h15-12h00 Applications pour une grille de calcul
 - Méthodes de Monte Carlo pour la Physique [Alain Pasturel]
 - Chimie quantique sur grappe [Pierre Valiron]
 - Méthodes de Monte Carlo en génétique [Olivier François]
- 12h.00-12h30, Middleware pour grilles et applications de type Monte Carlo [Olivier Richard et Nicolas Capit]

Ordre du jour

- 10h20 Tour de table
- 10h30 L'ACI GRID : Michel Cosnard
- 11h00 Présentation du projet CIMENT GRID
- 12h30 Discussion
 - ◆ 12h45-14h00 repas au Magellan
- 14h00-14h15 Point technique
- 14h15-14h30 Quelques actions transversales
- 14h30-16h00 3 présentations scientifiques
- 16h30 Délibération du Conseil

Ordre du jour

- 10h20 Tour de table
- 10h30 L'ACI GRID : Michel Cosnard
- 11h00 Présentation du projet CIMENT GRID
- 12h30 Discussion
 - ◆ 12h45-14h00 repas au Magellan
- 14h00-14h15 Point technique
- 14h15-14h30 Quelques actions transversales
- 14h30-16h00 3 présentations scientifiques
- 16h30 Délibération du Conseil

Ordre du jour

- 10h20 Tour de table
- 10h30 L'ACI GRID : Michel Cosnard
- 11h00 Présentation du projet CIMENT GRID
- 12h30 Discussion
 - ◆ 12h45-14h00 repas au Magellan
- 14h00-14h15 *Point technique*
- 14h15-14h30 Quelques actions transversales
- 14h30-16h00 3 présentations scientifiques
- 16h30 Délibération du Conseil

Architecture Matérielle de Mirage

LMC

2 clusters

* 2 DS20
1 Memory Channel
1 Baie Disque

* 1 DS20 + 1 ES45
Réseau LAN

LTHE / LEGI

4 DS20

1 Memory Channel
1 Baie Disque

Réseau LAN



Memory Channel



Memory Channel



1 Liaison Gigabit

MIRAGE
2003

DS20 : bi-processeurs EV6, 2.5 Go RAM, 4 Mo Cache L1
ES45 : quadri-processeur EV68, 4 Go RAM, 16Mo Cache L1

Réseau UJF

Pôle de Chimie Calculatoire

CECIC

(P. Vatton)

Matériel: En plus du matériel existant

- ◆ Installation SGI Origin 300 (ccNUMA))
- ◆ Installation d'une mini-ferme de PC

Logiciels: Tests et validation des logiciels:

- ◆ Dynamique moléculaire sur SGI (ccNUMA)
- ◆ NWChem sur IBM SP (MPI)
- ◆ DeMon sur architecture ferme de PC

BioIMAGe

BIOLOGIE INFORMATIQUE

IMAGERIE

MODELISATION BIOMEDICALE

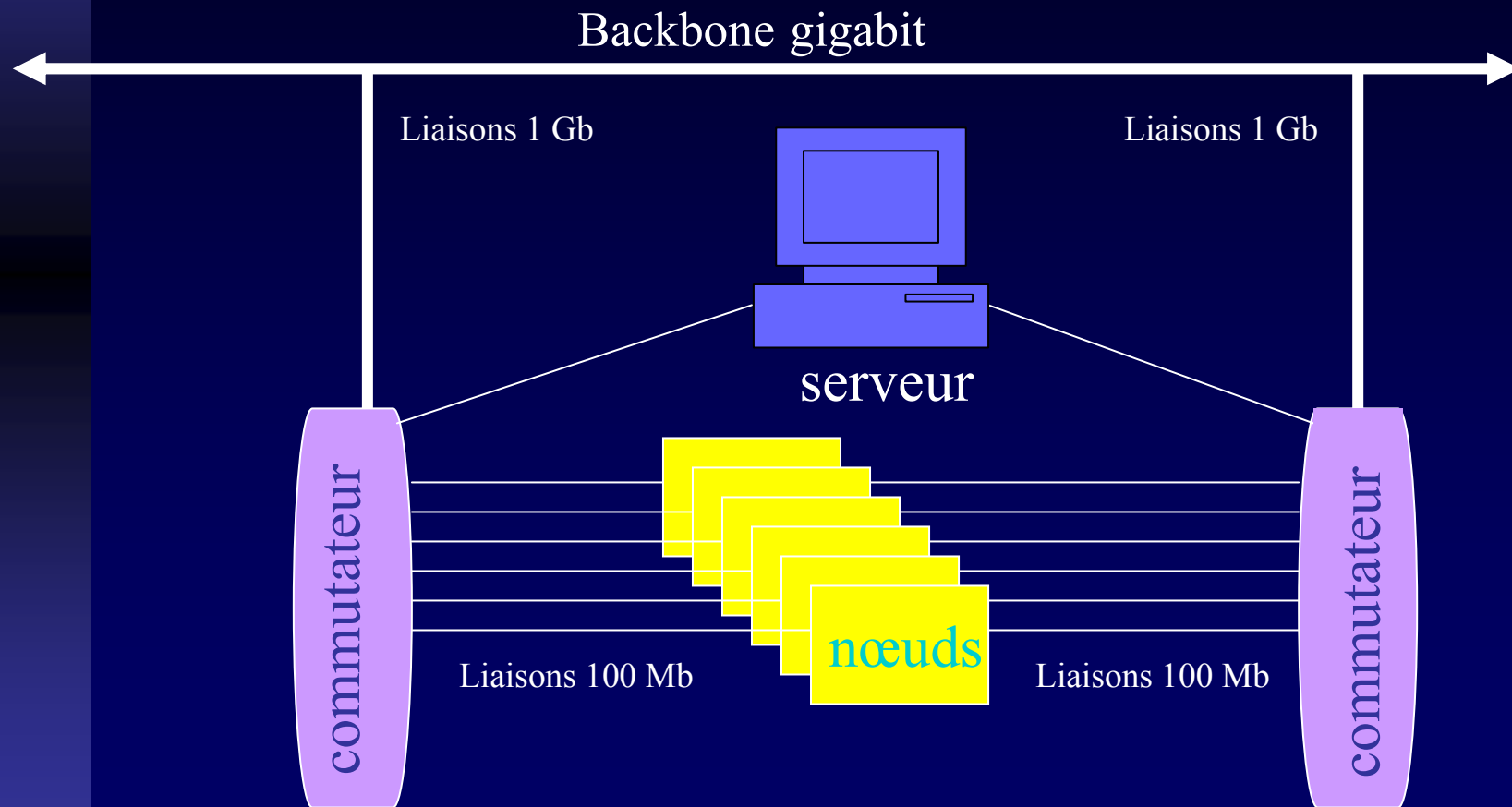
ANALYSE GENETIQUE

Cluster de 24 PC biprocesseurs ATHLON MP
1800+ (3 Gb de mémoire ECC)

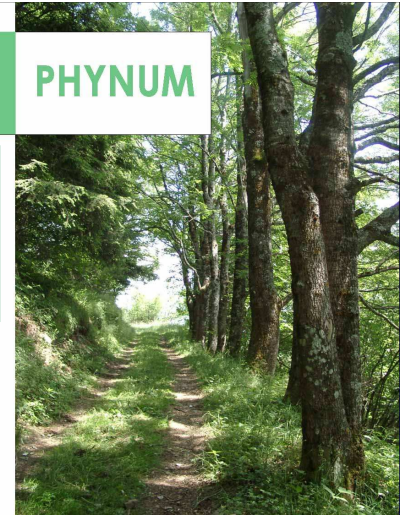
- Phase de démarrage longue (retards + problèmes hardware + climatisation + déménagement à l'Observatoire en attendant Pav. D)
- Configuration de base :
 - ◆ Linux Mandrake CLIC
 - ◆ Logiciels « classiques » : compilateurs gnu, pbs compilateurs Intel...
 - ◆ Serveur frontal avec baie RAID (1 To)
 - ◆ 24 Nœuds de calcul
- Logiciels spécifiques :
 - ◆ Marc MSC (éléments finis)
 - ◆ R (gnu S)
 - ◆ ...

Configuration réseau (à terme sept 2003)

Channel bonding



Physique Numérique communauté des physiciens de la matière condensée

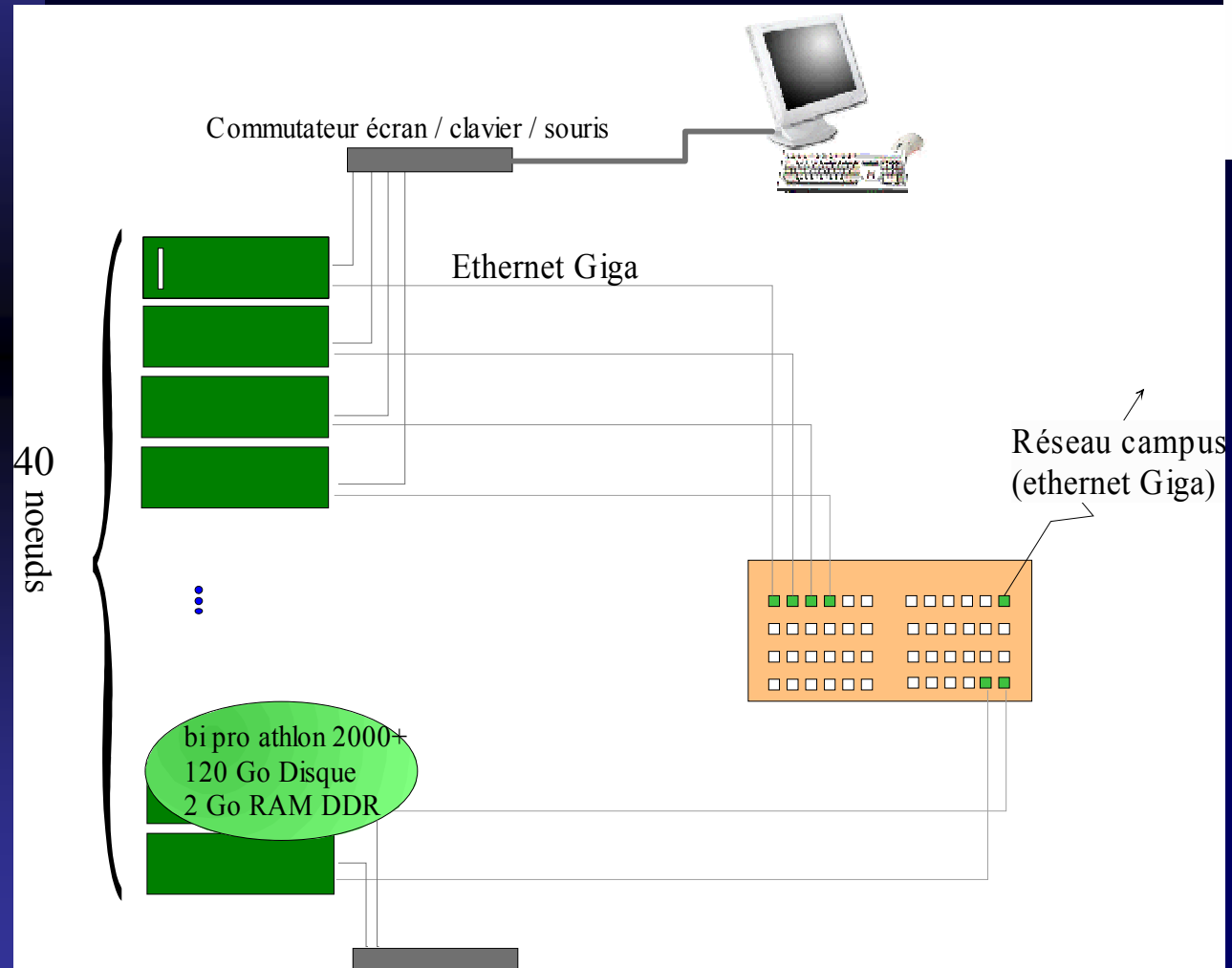
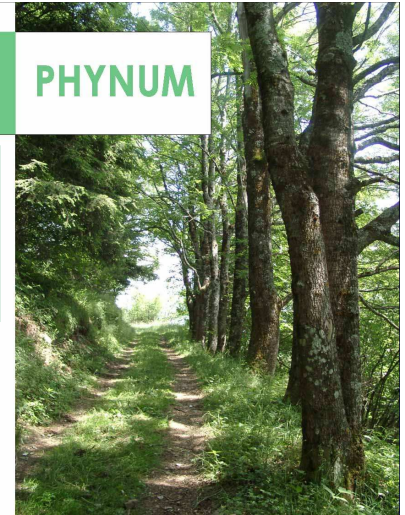


Choix techniques : cluster de PCs (excellent rapport performance / prix , solution d'administration système efficace)

Méthode d'acquisition : procédure de mise en concurrence simplifiée pour les nœuds.

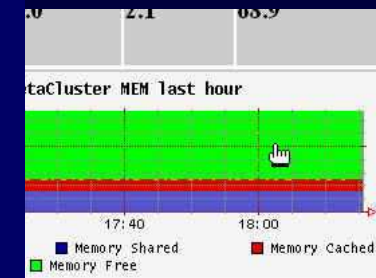
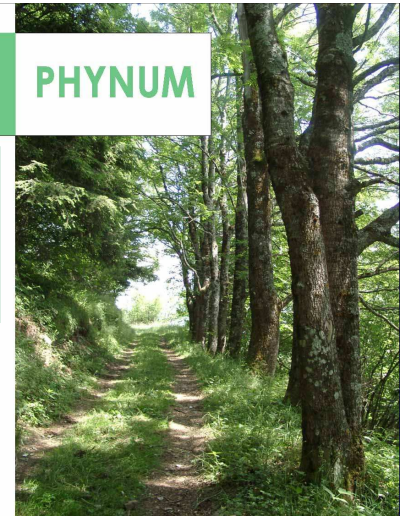
- définition de critères de choix
- test du matériel proposé par les fournisseurs préselectionnés.
- achat conforme à nos besoins (prix / stabilité des nœuds / bonne réactivité du fournisseur)

PhyNum architecture de la machine de calcul



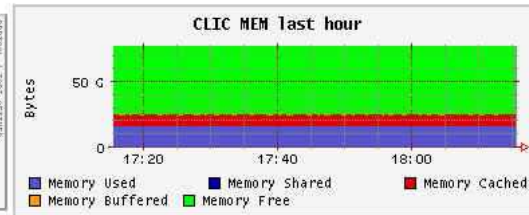
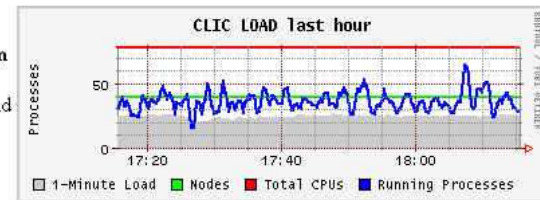
PhyNum architecture logicielle

- Système d'exploitation : linux mandrake clic (une image système par disque / des outils de gestion de l'ensemble du cluster)
- un serveur principal, un serveur de secours
 - ✓ Serveur de fichier (1 TeraByte)
 - ✓ Serveur web
 - ✓ Serveur de compilateurs et bibliothèques scientifiques
 - ✓ Station d'accueil
 - ✓ Serveur d'authentification
 - ✓ Serveur PBS
- 38 clients : nœuds de calcul exclusivement

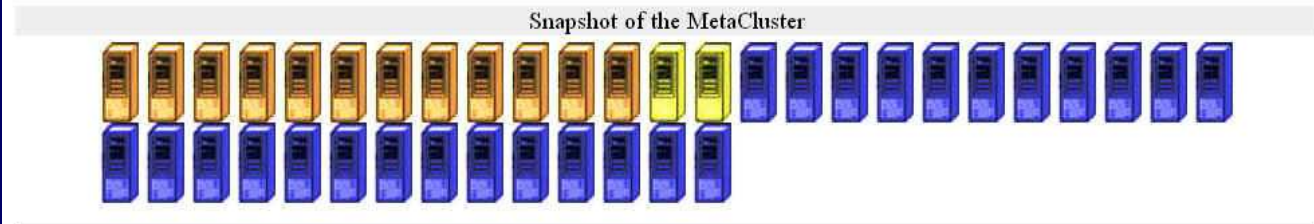


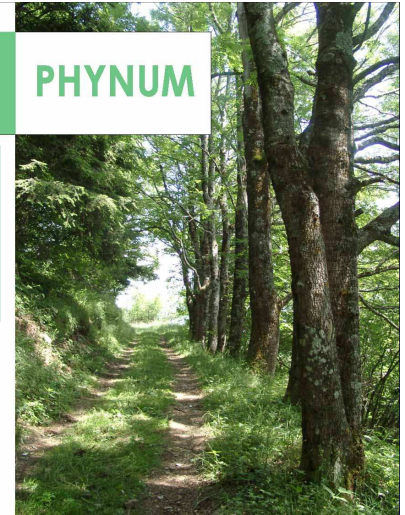
CLIC	25.27	24.82	24.21	28.1	0.0	2.1	68.9
-------------	-------	-------	-------	------	-----	-----	------

Cluster
Localtime:
January 3,
2003, 6:15 pm
39 hosts up and
running
(78 CPUs
Total)



0 hosts down

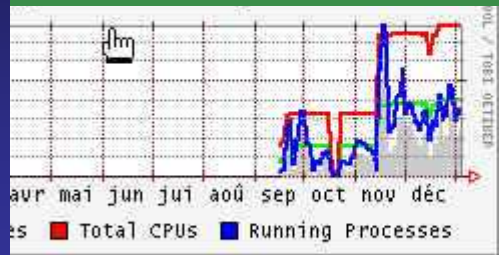




PhyNum calendrier

- mars 2002 démarrage de la procédure de mise en concurrence simplifiée
- avril à juin 2002 procédure / tests sur matériel
- juillet 2002 choix définitif du fournisseur
- fin août 2002 livraison du matériel
- fin août 2002 mise en route de la moitié du cluster (LPMCC)
- début novembre 2002 fin des travaux d'aménagement de la salle info à l'observatoire et déménagement de phynum
- depuis mi novembre 2002 production scientifique sur phynum : 2 publications soumises

Utilisation du cluster depuis son installation



.85

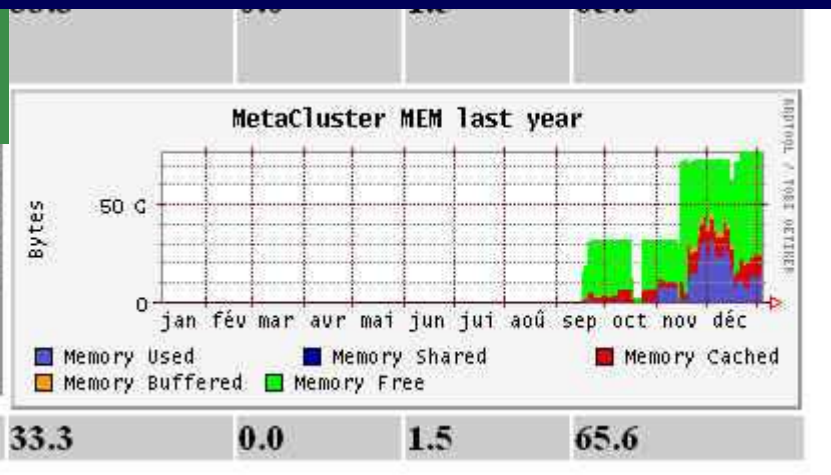
23.57

33.3

0.0

1.5

65.6



Projet Grappe 200

- La grappe qui sera installée bientôt :
 - ◆ 104 bi-processeurs Itanium-2, 900 Mhz, 3 giga-octets de mémoire, 72 giga-octets de disque
 - ◆ réseau Myrinet
 - ◆ 4 tera-octets de stockage
 - ◆ Distribution logicielle CLIC développé par ID, Mandrakesoft et Bull
- Pourquoi :
 - ◆ Aspect innovant
 - ◆ Adressage mémoire
 - ◆ Performances de l'architecture système
 - ◆ Complémentarité avec les investissements précédents
- Ouverture aux utilisateurs :
 - ◆ La continuité de icluster (une cinquantaine de projets de recherche)
 - ◆ L'essentiel de la communauté française en informatique distribuée
 - ◆ Des utilisateurs de calcul (CIMENT, INRIA)
 - ◆ Des partenaires industriels (HP, Bull, CEA, MGE-UPS) et universitaires

Ordre du jour

- 10h20 Tour de table
- 10h30 L'ACI GRID : Michel Cosnard
- 11h00 Présentation du projet CIMENT GRID
- 12h30 Discussion
 - ◆ 12h45-14h00 repas au Magellan
- 14h00-14h15 Point technique
- 14h15-14h30 *Quelques actions transversales*
- 14h30-16h00 3 présentations scientifiques
- 16h30 Délibération du Conseil

Actions transversales

- Partenariat avec Bull
- Formations permanentes CNRS :
 - ◆ introduction au calcul scientifique
 - ◆ administration de grappes
 - ⇒ Partenariat CNRS/INPG/UJF dans la mise en place de ces formations ?
 - ⇒ Harmonisation des accès à ces formations ?
 - ⇒ Projet d'une école d'automne UJF/INPG/CNRS ?

Partenariat CIMENT-BULL

- Prêt pour 4 semaines
 - ◆ d'une plateforme Itanium2
 - quadri-processeurs 1GHz, 4 Go de mémoire
 - ◆ et de son environnement logiciel
 - Systeme redhat7.2, compilateurs intel version 7.beta
- Formation initiale d'1/2 journée, support technique pour le portage des codes
- Evaluation éventuelle d'un système 16/32 voies

Objectifs CIMENT :

- Portage sur Itanium2
- évaluation architecture SMP Itanium2

Bilan d'évaluation du Tiger

■ Codes portés :

Codes de chimie : *Gaussian98a.11, deMon, Coupled Cluster explicitement corrélé*

Code de physique : *propagateur (en complexes) pour une particule quantique*

Code de simulation atmosphérique : *MAR (+ Netcdf)*

Benchmarks divers : *STREAM, tests latence et débit MPI, NAS, tests d'IOs, tests OpenMP*

■ Comportement général de la machine :

+ Très bonne stabilité

+ Bonnes performances du processeur : en général comparable au POWER4 et PentiumIV avec quelques exceptions plutôt en défaveur de l'Itanium2 (utilisation compilateur Intel indispensable)

+ Portage facile

- Mauvaise tenue en charge (accès mémoire intensifs, parallélisme)

STREAM/TRIAD : 3.5 Go/s sur 1 proc, 4 Go/s (cumulés) sur 4 procs

blasMxM : 3.2 Gflops par processeur (sur 4 procs)

- Mauvaises performances OpenMP

- Latences élevées MPICH et LamMPI

Introduction au développement d'une application de calcul scientifique

Formation permanente CNRS sur deux modules indépendants

- Module 1: Principes de bases (2jours: 3-4/04/03)
 - ◆ Outils de développement (make,débogueurs...)
 - ◆ Principes généraux d'optimisation (manuelle, compilateur)
 - ◆ Analyse de performance (principes, outils)
 - ◆ Langages de programmation (Fortran77/90,C++,...)
- Module 2: Parallélisme (3jours: 9-11/04/03)
 - ◆ Généralités
 - ◆ Taxonomie des architectures parallèles
 - ◆ Modèles de programmation (SPMD,MIMD,...)
 - ◆ Support des langages au parallélisme (HPF, F90...)
 - ◆ Programmation parallèle par échange de messages – MPI
 - ◆ Programmation par directives de compilation - OpenMP

Installation et exploitation d'un cluster de PC

Formation permanente CNRS (deux jours 7-8/04/03) :

- Planifier et installer un cluster de PC pour le calcul .
 - ◆ Introduction aux clusters de calcul sous LINUX : termes et concepts.
 - ◆ Présentation des différentes options de configuration matérielles et logicielles
 - ◆ Planification d'un cluster
 - ◆ Autorisation des échanges entre les nœuds du cluster
 - ◆ Utilisation de l'outil d'installation et de configuration « CLIC »
- Optimiser l'utilisation et l'administration d'un tel système.
 - ◆ Utilisation des outils de surveillance LINUX
 - ◆ Utilisation de MPI pour exécuter des applications parallèles
 - ◆ Utilisation du scheduler PBS
 - ◆ Optimisation de l'environnement : bibliothèques mathématiques, mouvement de données

Ordre du jour

- 10h20 Tour de table
- 10h30 L'ACI GRID : Michel Cosnard
- 11h00 Présentation du projet CIMENT GRID
- 12h30 Discussion
 - ◆ 12h45-14h00 repas au Magellan
- 14h00-14h15 Point technique
- 14h15-14h30 Quelques actions transversales
- 14h30-16h00 3 présentations scientifiques
- 16h30 Délibération du Conseil

Présentations scientifiques

- CECIC : Anne Milet, Réactivité et Interactions : Intérêt d'une structure méso-informatique
- MIRAGE : Eric Blayo, couplage de modèles océaniques.
- Physique Numérique : Philippe Peyla, Nano-mécanique d'un plan atomique de graphite en présence d'oxygène.

Ordre du jour

- 10h20 Tour de table
- 10h30 L'ACI GRID : Michel Cosnard
- 11h00 Présentation du projet CIMENT GRID
- 12h30 Discussion
 - ◆ 12h45-14h00 repas au Magellan
- 14h00-14h30 Quelques actions transversales
- 14h30-16h00 3 présentations scientifiques
- 16h30 *Délibération du Conseil*