

Calcul Intensif / Modélisation / Expérimentation Numérique & Technologique

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

Mésocentre grenoblois de calcul intensif (Tier-2) 18 Tflops/s

15 plateformes de 8 à 512 coeurs (total ~ 2000 coeurs)

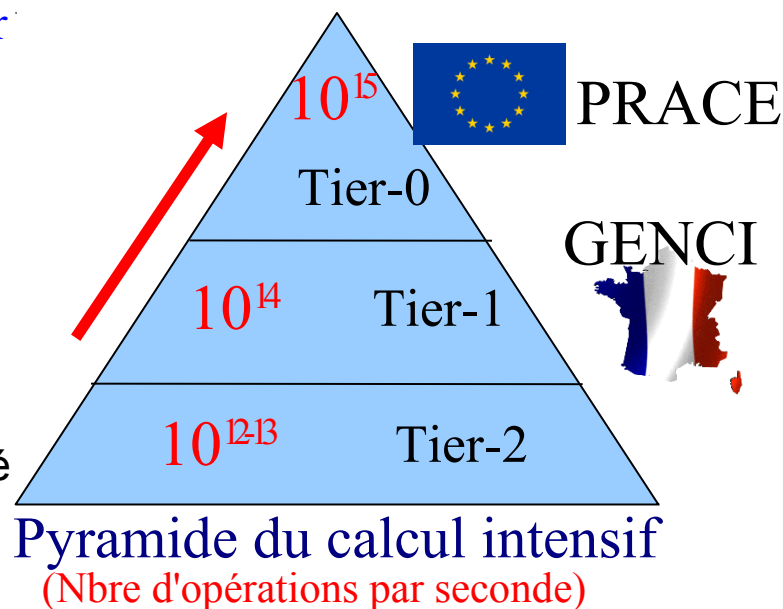
Réseau d'expertise et de formation en Calcul Intensif

5 Ingénieur(e)s de Recherche impliqué(e)s

Formation « calcul réparti » collège doctoral Grenoble Université

Lieu d'expérimentations numériques et technologiques

MUSCADE (GPU Bull-Fourier 2009) , Grille CiGRI, OAR (GSOC 2008,2009)



Structure Transversale Pilotée par la Recherche

Informatique : LIG

Biologie/Santé : TIMC-IMAG,LECA

Physique : SIMAP,LPMCM,LSP,IN,INAC

Terre-Univers : ISTerre,LAOG-LPG

Environnement : LTHE,LGGE,LEGI,LJK

Chimie : DCM,DPM,ICMG,CERMAV

Environ 200 chercheurs/thésards

>50 publications/an

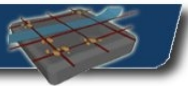
Analyse S W O T

S Réseau d'ingénieurs, interdisciplinarité, Ancrage régional, visibilité nationale

W Structure « sans mur », complexité budgétaire

O Dynamique Nationale (GENCI,IDG,GE) et Européenne (PRACE,EGI)

T Découplage Calcul Intensif / Modélisation



Organisation & pilotage

Structure PPF jusqu'à 2011 (UJF, INPG)

30 k€/an fonctionnement/missions

10% secrétariat service recherche UJF

Demande SF 2011-2014

Responsable :

Laurent DESBAT 1998-2009

Emmanuel CHALJUB 2009-2014

Pilotage

Bureau

Responsables pôles

Staff CIMENT

Représentants

CEA, INRIA,

CIRA, **MaiMoSiNE**

Staff

Bruno Bzeznik (CIMENT)

Laurence Viry (CIMENT)

Françoise Berthoud (PHYNUM)

Françoise Roch (SCCI)

Alain Rivet (CECIC)

Commissions

Formation

F. Roch & L. Viry

Rédaction web

E. Chaljub,
B. Bzeznik, L. Viry

Appels d'offre

F. Berthoud

Green Computing

F. Berthoud

Pôles scientifiques

Informatique

**Informatique
Distribuée**
O. Richard

Biologie-Santé

BioIMAGE
O. François

Physique

PHYNUM
A. Pasturel

Terre-Univers

SCCI-OSUG
E. Chaljub

Environnement

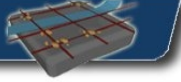
MIRAGE
E. Blayo

Chimie

CECIC
A. Milet

Implications locale-régionale-nationale-internationale

CIMENT



Local

Plateforme **RTRA** nanosciences (2007)



Régional

Membre de Calcul Intensif -**Rhône Alpes**

- + demandes **CPER** (600 k€ 2007-2013)
- + animation (séminaires, formation)
- + grille régionale



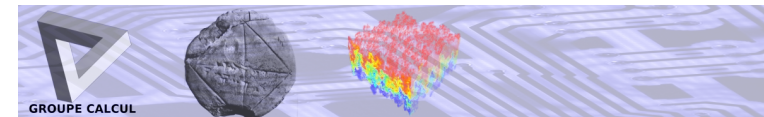
Participation au cluster **ISLE (CHPID)**

National

Participation Groupe calcul

Missions CPU, ministère (L. Desbat)

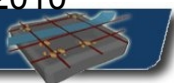
Animation groupe **EcoInfo** (F. Berthoud)



International

Participation des membres INRIA au laboratoire commun

INRIA-UIUC/NCSA Petaflop Computing (création Juin 2009)



Bilan Mésocentre : plateformes

Plateforme	Pôle	# coeurs	Hébergement	Année
R2D2	SCCI-OG	512	DSI	2008
Fostino	SCCI-OG	464	DSI	2008
Genepi	ID	272	INRIA	
Nanostar	PHYNUM	256	DSI	2007
Icare	SCCI-OG	168	OSUG	2004
Foehn	MIRAGE	128	DSI	2010
Healthphy	BioIMAGE/PHYNUM	100		2007
IDPOT	ID	48	INRIA	
Zephyr/Alizé	MIRAGE	32	OSUG	
MedetPhy	BioIMAGE/PHYNUM	32		
Browalle	PHYNUM	32		2007
IBM-CECIC	CECIC	32	CECIC	
Tomte	CECIC	28	CECIC	
SGI-CECIC	CECIC	8	CECIC	
Orcade	CECIC	8	CECIC	
TOTAL		2120 (1952)	DSI = 1360	
Edelweiss	ID	592	INRIA	2009
Iblis	ID	80	INRIA	2009
CIGRI		2792 (2624)		

Fin en 2010

Toutes les ressources sont accessibles en mode *besteffort* par la grille CiGRI
 Hébergement des machines les plus récentes à la DSI (**optimisation énergétique**)
 Fonctionnement DSI : ~45 k€ / an

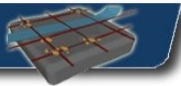


Réduction des impacts environnementaux pendant les **phases de production et recyclage** :

- lors des achats, exigence d'eco-label (**Energy star, 80plus gold**),
positionnement d'un critère de sélection des offres sur le **développement durable**
- **prolongation** de la durée de vie des matériels
- **recyclage** des matériel (via filière UJF ou constructeurs directement)

Réduction de la consommation d'énergie pendant la **phase d'usage** :

- consolidation des serveurs de calcul (mutualisation hébergement)
- réflexions et propositions d'organisation de la salle de la DSI
==> Forte volonté de s'impliquer dans les réflexions en cours avec BULL et l'UJF
- Politique de gestion des ressources qui prévoit l'extinction des serveurs qui ne sont pas utilisés sur une période supérieure à 1h (**prédiction**)
- travail de recherche sur le développement du gestionnaire de batch OAR utilisé sur les plateformes CIMENT (**optimisation** énergétique)



Bilan Mésocentre : usage

2008-2009

150 utilisateurs actifs en 2010

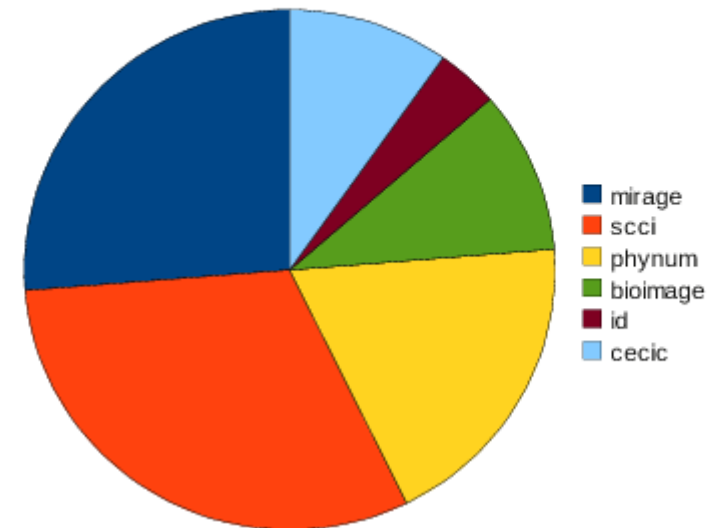
Utilisation principale : pôle/platforme

Utilisation croisées (ex. tests jouvence
MIRAGE et CECIC)

Utilisation **Rhône-Alpes** (ex. INSA-Lyon
sur R2D2)

Utilisateurs CIMENT par pôle et par labo au 12/05/2009

POLES	% users
mirage	26
scci	31
phylum	19
bioimage	10
id	4
cecic	10

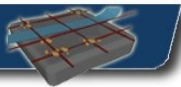


2009-2010

Fostino+r2d2+Nanostar+Healthphy+Genepi
(**1500 coeurs**) :

6 millions d'heures utilisées (inclus CiGRI)

= **50 %** total possible



Bilan Mésocentre : jouvences

2008

R2D2 (SCCI)

Financement: LGIT (80k€),

OSUG (45k€), INRIA (40k€)

Solution technique: IBM, 64 bi-quadricoeurs Xeon 2.5 GHz, Bus 1300 MHz. Réseau Infiniband

512 coeurs, hébergement DSI

Fostino (SCCI-LAOG)

Financement: ANR (125 k€)

Solution technique: IBM, 58 bi-quadcoeurs Xeon 2.8 Ghz, Bus 1600 MHz, Réseau Gigabit

464 coeurs, hébergement DSI

2008-2009

Nanostar (PHYNUM)

Financement: RTRA (~200 k€)

Solution: lames bi-quadcoeurs Xeon, Réseau Infiniband

256 coeurs, hébergement DSI

2009-2010

Foehn (Jouvence MIRAGE)

Financement: OSUG-IRD(30k€), **CPER CIRA (50k€)**, **Cluster ISLE (15k€)**

Solution: 16 lames (bi-pro), Nehalem quad-core 5450 intel 2.66 GHz, Réseau Infiniband,

Extension Nanostar,

128 coeurs, Hébergement DSI.

Digitalis-Edelweiss (ID)

Financement: **CPER INRIA (236 k€)**

Solution: 74 serveurs Blade biquadri-coeurs 2.26GHz, Réseau Infiniband

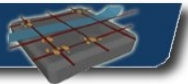
572 coeurs, Hébergement INRIA

Digitalis-Iblis (ID)

Financement: **CPER-INRIA (64k€)**

Solution: 10 serveurs bi-quadcoeurs 2.26Ghz + 10 Tesla Nvidia bi-procs/GPU

80 coeurs + GPU, Hébergement INRIA



Mésocentre : projets d'équipement 2010

Projet **Muscade** (RTRA Nanosciences) : **Multi Scale Design** of nanomaterials
with simulations on hybrid architectures

Etude de la croissance des nanomatériaux, implémentation sur machines hybrides

Collaboration internationale Canada-France/Grenoble :

CEA, INRIA, UJF, INPG, Univ. Montréal (Chaire d'excellence N. Mousseau)

Origine	Montant	Statut
INRIA	100 k€	Acquis
CPER-CIRA	50 k€	Acquis (2009)
CEA-INAC	50 k€	Acquis
INPG	50 k€	Acquis
UJF (SMING)	50 k€	Demandés
ANR Cosinus	40 k€	Demandés
TOTAL	340 k€	

Solution technique

Machine hybride CPU/GPU
Nvidia Fermi ?

Objectif 100 Tflops/s
GREEN500 et **TOP500**

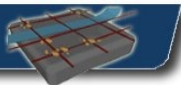
Hébergement INRIA



Université
de Montréal

nanoSCIENCES
FONDATION





Mésocentre : projets d'équipement 2010 (1)

Opération CECIC (Centre d'expérimentation pour le calcul intensif en Chimie)

Plateau Chimie Modélisation et Informatique de l'Institut de Chimie Moléculaire de Grenoble est une structure fédérative qui regroupe trois laboratoires de la chimie grenobloise : le CERMAV (Centre de Recherches sur les Macromolécules Végétales), le DCM (Département de Chimie Moléculaire) et le DPM (Département de Pharmacochimie Moléculaire).

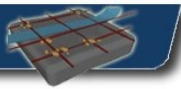
Plan de financement

Origine	Montant	Statut
CERMAV (ANR)	10 k€	Acquis
DCM (IUF)	15 k€	Acquis
DCM (ANR)	1 k€	Acquis
UJF (Fond Intervention)	25 k€	Acquis
ICMG	10 k€	Demandés
CPER CIRA	50 k€	Demandés
TOTAL	101 k€	

Solution Technique

Serveurs Linux, procs Intel Xeon/Nehalem/??
(~ **150 coeurs**),
réseau Infiniband

Hébergement CECIC



Opération couplée CIMENT-LPSC (Laboratoire de Physique Subatomique et de Cosmologie, IN2P3)

Interface Grille de Recherche – Grille de Production (EGEE)

Objectif :

Augmenter les capacités de stockage/système de CIGRI et la liaison DSI-INRIA

Rapprocher CIGRI des 900 coeurs du noeud grenoblois de Grid5000

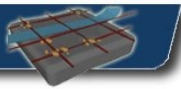
Développer le noeud EGEE du LPSC (vers un noeud de Tier-2)

170 k€ obtenus à l'Institut Des Grilles 2010

Rapprocher les communautés d'utilisateurs EGEE et CIGRI (renforcer le support)

Encourager la recherche à l'interface CIGRI-EGEE

Demande de CDD en cours



Articulation CIMENT-GENCI-PRACE

Participation au Grand Challenge CCRT-Titane (Eté 2009)

BigDFT (Nanosciences, GPU) **Application benchmark PRACE WP8**

SPECFEM3D (Sismologie, CPU)

Demandes GENCI (2008-2010)

+ *Nanosciences-PHYNUM*

- 1,25 million d'heures pour l'étude de la croissance dans le cadre de MUSCADE
- 1 million pour l'étude des défauts ponctuels dans Si et SiGe
- 1 million pour la dynamique moléculaire de l'eau (collaboration L. Genovese, ESRF)

+ *Environnement-MIRAGE*

Equipe d'océano (MEOM) du LEGI :

IDRIS - Brodie : ~ 30 000h ; IDRIS - Vargas : ~ 400 000h ; CINES - Jade : ~ 2 000 000h

Labo de glaciologie LGGE :

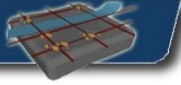
SX8/9 IDRIS : 20 000h/an ; CEA : 2500 h/an

+ *Terre/Univers-SCCI/OG*

Sismologie-LGIT: ~200000 h /an (Jade-CINES, Vargas-IDRIS, Titane-CCRT)

+...

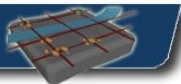
Heures CIMENT ~ Heures GENCI



Formation & Expertise : bilan 2009

Formation doctorale CIMENT

- Un module unique depuis 2009-2010 : **Introduction au calcul réparti**
Intervenants: B. Bzeznik, L. Viry, F. Roch, F. Pérignon, M. Oscipci, L. Genovese
- Proposé depuis 2009-2010 au collège doctoral unique de l'Université de Grenoble
- 6 x 6 heures de cours/TP : Parallélisme, HPC, OpenMP, MPI, **GPU**, **Grille**
- Travaux pratiques sur plateformes CIMENT
- Effectif de **25 à 35 étudiants toutes origines**. En 2009 : Maths applis, Ingénierie, Informatique, Physique, Environnement, Sciences de l'Univers [LJK\(3\)](#), [G2elab\(2\)](#), [TIMA \(3\)](#), [VERIMAG\(5\)](#), [GIPSAlab](#), [LTHE](#), [lab Physique](#), [LGIT \(3\)](#), [Institut Néel \(2\)](#), [LEGI](#), [LSP](#), [LECA \(2\)](#), [CEA](#)



Formation & Expertise : bilan 2008-2009

Local/régional

- *Atelier GPU* 19 Octobre 2009 (Méhaut, Deutsch, Genovese, Komatitsch...)
- *Atelier GPU-méthodes numériques* 10 Décembre 2009 **CHPID** (ISLE)

National

- *Informatique Scientifique pour le calcul*

ANGD, réseau resinfo, module 1&2 (29/09 au 02/10 et 01/12 au 04/12 2008),

Intervenants CIMENT : L. Viry, F. Roch, F. Berthoud

- *Choix, installation et exploitation d'un ordinateur*

Formation permanente CNRS (**Groupe Calcul**) 5-9 Octobre 2009

Intervenants CIMENT : F. Roch, F. Berthoud, B. Bzeznik, O. Richard

- *Impact de l'Informatique sur l'Environnement*

Journée **EcoInfo/CNRS** 17 Mars 2009

Intervenants CIMENT : F. Berthoud, O. Richard

- *Analyse spatio-temporelle pour les dynamiques spatio-temporelles,*

GdR Calcul, L. Viry.

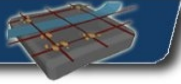
- *Mésocentres, quels outils pour aujourd'hui et pour demain ?*,

GdR Calcul, F. Roch, Juin 2010

- *OAR : un gestionnaire de ressources pour grappes de calcul,*

Journées réseaux 2009, B. Bzeznik.

• ...



Gestionnaire de ressources OAR

2 stagiaires au **Google Summer of Code** en 2008

4 stagiaires au **Google Summer of Code** en 2009



Prise en compte des architectures hybrides (CPU-GPU)

Gestion énergie : arrêt machines, heures pleines/creuses, option *powersaving* (changement fréquence CPU, désactivation périphériques)

Développement machines hybrides (CPU-GPU)

BigDFT

Prix Bull-Fourier 2009 : Luigi Genovese (ESRF)

Collaboration INRIA-CEA-UJF (CIMENT)

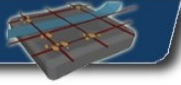
Benchmark **PRACE** WP8

Programmation architectures hybrides : bibliothèque **S_GPU**

Matthieu Ospici (CEA/LIG/INRIA/Bull)

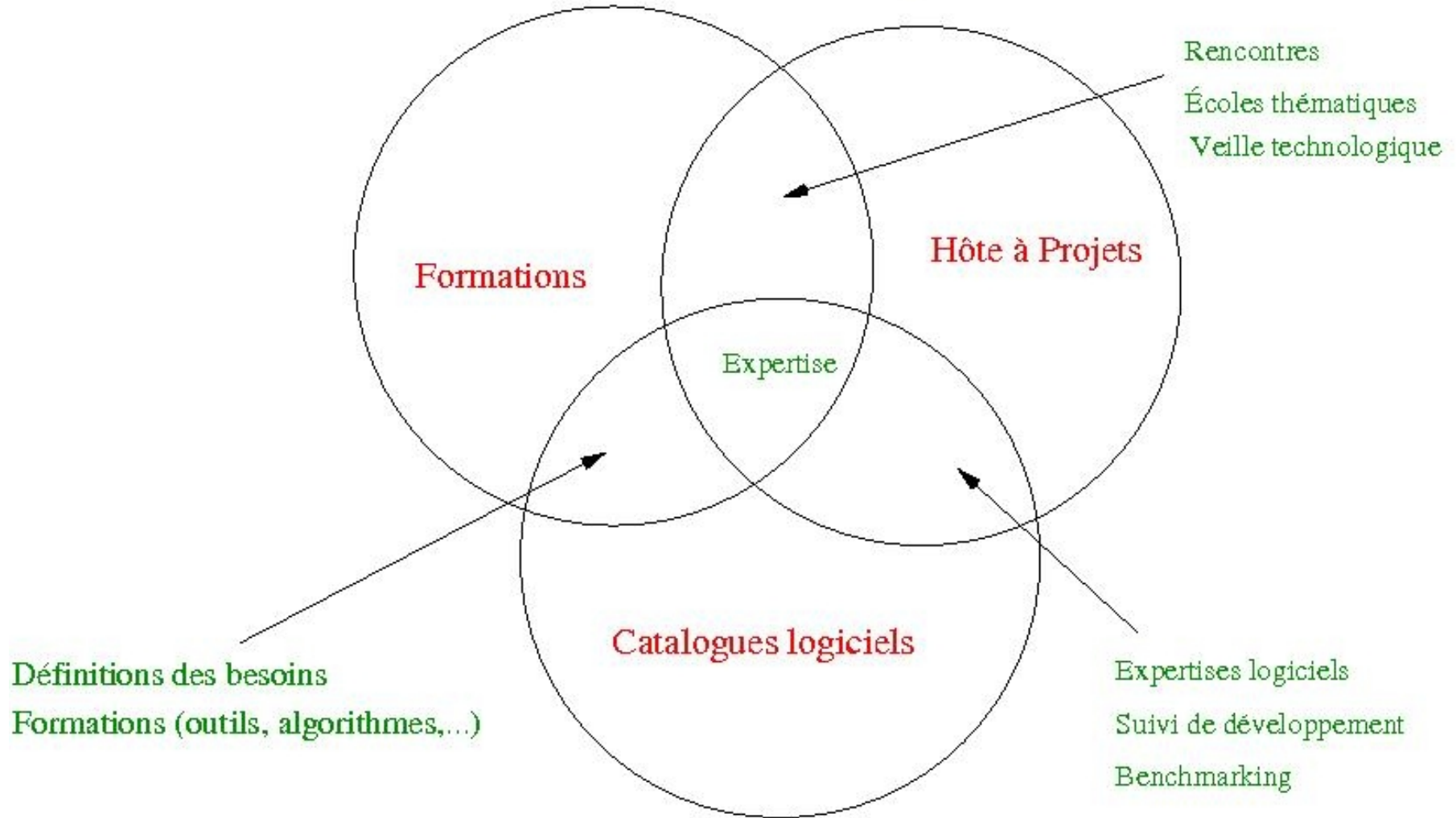
Profiling énergétique des applications hybrides (INRIA/LIG/Bull)



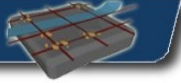


CIMENT et Modélisation

Création d'un lien fort entre CIMENT et MaiMoSiNE (Maison de la Modélisation et de la Simulation, Nanosciences, Environnement ; porteur S. Labbé, LJK, UJF)



**Hébergement du noeud Rhône-Alpin du CECAM (PRACAM) avec le CBP (Lyon)
+ CIMENT et FLCHP (FMSN)**



Création d'un lien fort entre CIMENT et MaiMoSiNE (Maison de la Modélisation et de la Simulation, Nanosciences, Environnement ; porteur S. Labbé, LJK, UJF)

Objectifs :

- Renforcer activités transversales Calcul Intensif – Modélisation (ex. plateforme MIRAGE et projet MUSCADE dans CIMENT, demandes ANR Cosinus)
- Lever verrous méthodologiques pour le passage à l'échelle des codes vers les plateformes petaflopiques émergentes
- Construire une offre (formation, expertise) à destination des PME/PMI en Rhône-Alpes

Actions engagées :

- « Mutualisation » de Laurence Viry
 - Demande commune Grand Emprunt National 2010 (en lien avec réseaux nationaux mésocentres et maisons de la simulation)
 - Projet PEPS: plateforme logicielle (C. Prud'homme)
- AAP Intéractions Mathématiques-Informatique-Ingénierie 2010.

Demandes ANR-Cosinus 2008-2010 :

Nanosciences

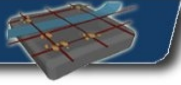
2008: **SAMSON et ProHMPT**
2009: CASTLE
2010: NEWCASTLE

Environnement

2008: **VODA**
2009: **COSTA-BRAVA**

Sciences de l'Univers

2010: SISCORE



Questions ?

Présentation générale : missions, structure, implications

Sur la base de la présentation à l'AERES

Mésocentre : bilan et perspectives

Plateformes, mutualisations, bilan d'utilisation (cf rapport GINP), utilisations transverses

Jouvences 2008-2010 (Nanostar/Foehn, Muscade, CECIC)

AO commun CIMENT-LPSC IDG 2010 (170 k€)

Hébergement/GreenIT : DSI, opérations Campus (EDD, PILSI)

Articulation mésocentre/national/européen : volume demandes GENCI, grands challenges CCRT 2009, BigDFT prototype PRACE.

Journée mésocentres

Expertise-Formation

Module école doctorale : volume, intervenants, public, plateformes utilisées.

Workshop local GPU (J.-F. Méhaut) (base de workshop CHPID)

Formation Vercors Octobre 2009 (groupe calcul/CNRS)

Journée EcoInfo/CNRS 17/03/2009

Expérimentation Technique/Numérique

GPU: code BigDFT (Prix Bull-Fourier 2009)

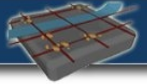
OAR : GSOC

CiGRI (voir RAGRID)

Modélisation

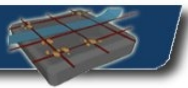
Construction du lien avec MaiMoSINE

ANR-COSINUS

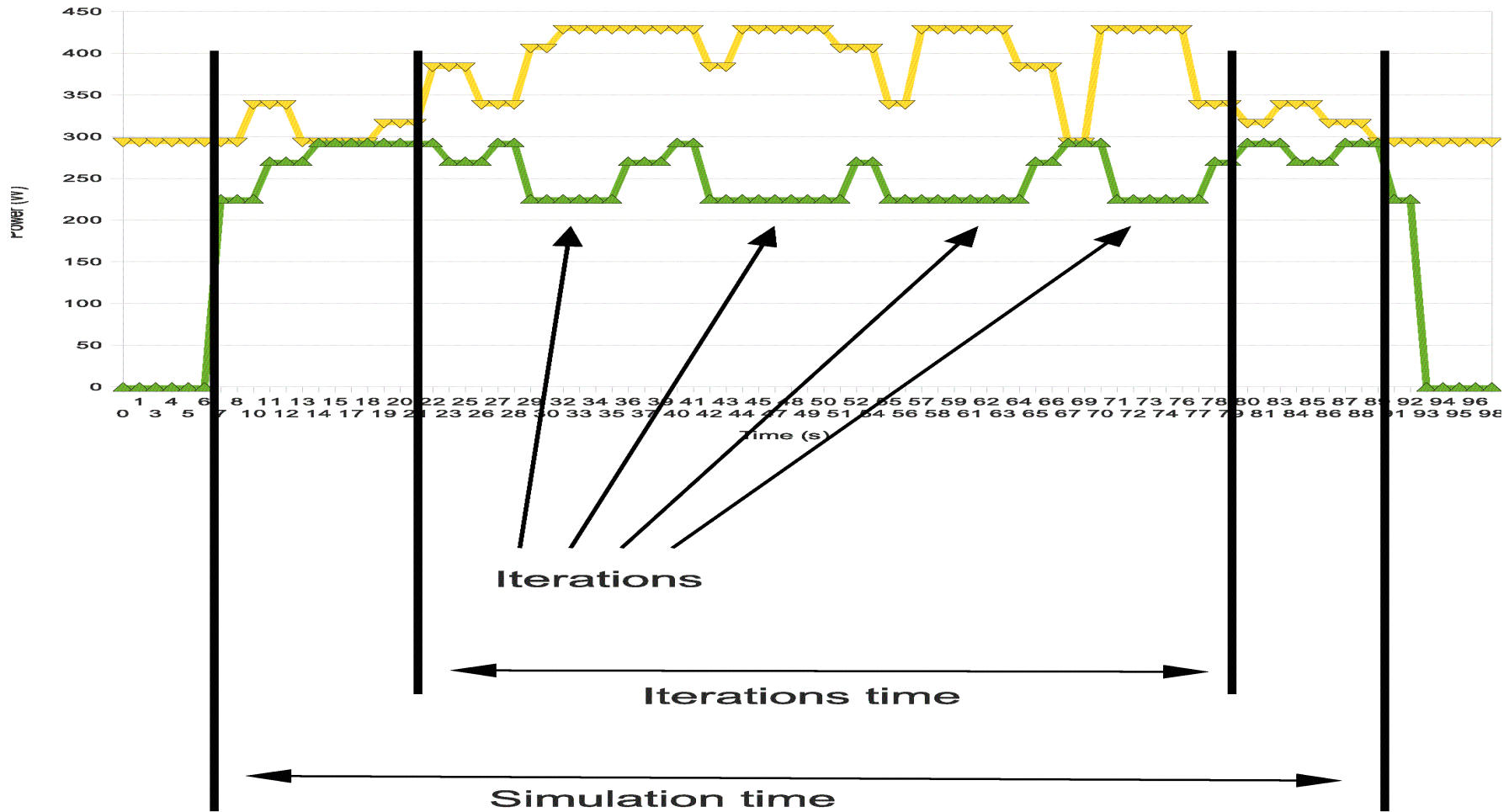


Thème du laboratoire commun: Calcul Pétaflopique

- Responsables: M. Snir (UIUC), F. Cappello (INRIA)
- Projet Blue Waters (IBM UIUC NCSA), démarrage en 2011
 - Machine pétaflopique à base de processeurs IBM Power 7
 - **BigDFT**: Application Benchmark de Blue Waters
- Environnement d'exécution Charm++ (L. Kalé, UIUC)
 - Portage de BigDFT sur Charm++/AMPI
 - **Couplage de S_GPU avec Charm++**
- Simulation de type QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Dynamics)
 - **Couplage BigDFT (CEA INAC) + NAMD (UIUC)**
 - Définition des interfaces et systèmes à simuler
 - Bio-molécules, Molécules dans des solvants...



Profiling énergétique de BigDFT (Plate-forme de mesure fournie par Bull)



Simulation of 100s

Rapport du Comité Stratégique pour le Calcul Intensif (2011-2014)

Maintenir l'offre de calcul du mésocentre à qqes % de GENCI (= 25 M€/an équipement)

Nature	Années	Equipement	Fonctionnement
Achat plateformes de calcul	2011-2014	250 k€/an	60 k€/an

Maîtriser l'empreinte environnementale (**ecoinfo**) => **Green500**

- + Achats sur critères développement durable et écolabels, prolongation durée de vie, recyclage
- + Hébergement mutualisé, optimisation salles machines **DSI, opération campus GUI (EDD, PILSI)**
- + Développement logiciels pour l'optimisation énergétique (OAR, GPU)

Développer l'offre de formation en calcul intensif (grilles, multicoeurs, GPU ...)

Servir de tremplin vers les moyens nationaux/européens **Besoin identifié : IR haut niveau**

Création d'un lien fort avec MaiMoSiNE (exemple Lyonnais : Fédération Modélisation & Sciences Numériques)

Mutualisation IR CIMENT



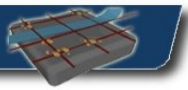
La Modélisation & CIMENT

Etat des lieux :

Lien entre modélisation (mathématique et numérique) et calcul intensif :

- Autour des codes dans les équipes/labos/communautés
- Partage d'expertise (ex. Atelier modélisation OSUG) **au sein des pôles**

Un exemple pluridisciplinaire : MIRAGE



Le projet MIRAGE

Méso-Informatique Répartie pour des Applications en Géophysique et Environnement

Né à la création de CIMENT en 1999.

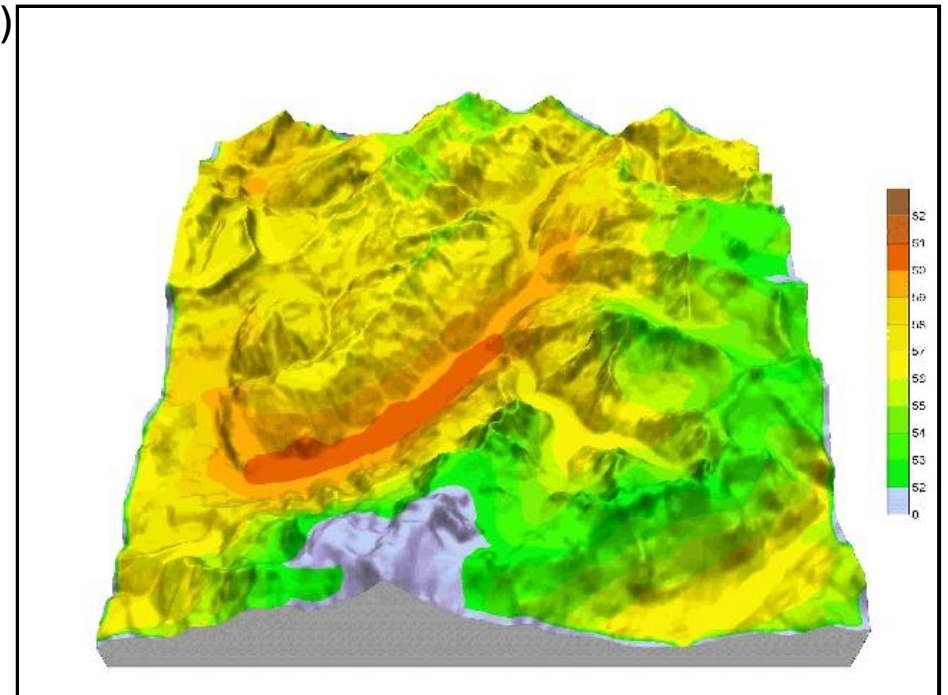
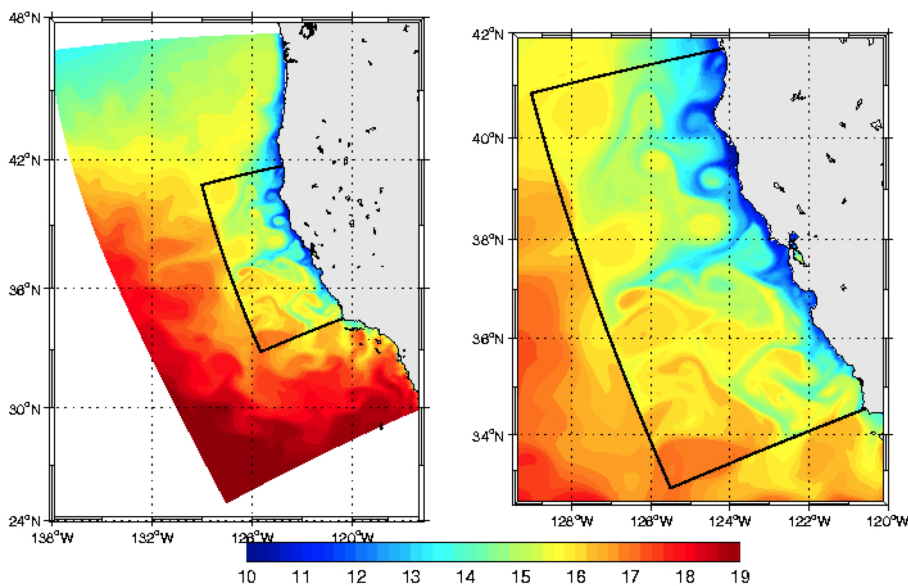
Regroupe les principaux acteurs grenoblois en modélisation en météorologie, océanographie, glaciologie, hydrologie : **LJK, LEGI, LGGE, LTHE**.

Au delà des simples moyens de calcul, MIRAGE est un des éléments fédérateurs de la communauté « **modélisation en géophysique** » grenobloise:

- ✓ Diffusion des méthodes mathématiques
- ✓ Partage d'expérimentations numériques et informatiques
- ✓ Échanges scientifiques, thèses co-dirigées, projets communs...
- ✓ Rôle central des mathématiciens appliqués

Moyens de calcul mis à jour régulièrement (00, 03, 05, 10).

Des applications spécifiques, et d'autres plus transverses (e.g. couplage de modèles, assimilation de données, analyse de sensibilité...)



Articulation CIMENT-MaiMoSiNE

CIRA 11/03/2010



- Lever des verrous méthodologiques pour permettre de porter des applications de Calcul Intensif vers les plateformes pétaflopiques.
- Participer à la construction de l'offre de formation, à la plateforme logicielle de MaiMoSiNE.
- Aider les industriels souhaitant tester le parallélisme massif en facilitant l'accès aux machines de grande taille (Projet INCITE, DOE, USA)

Besoins en moyens humains à identifier



Projet **Muscade** (Canada-France/Grenoble)

Multi Scale Design of nanomaterials with simulations on hybrid architectures



Jean-François Méhaut

Université Joseph Fourier

INRIA Grenoble Rhône-Alpes

Laboratoire d'Informatique de Grenoble

Muscade : Projet RTRA Nanosciences

Chaire d'Excellence: **Normand Mousseau**, Université de Montréal

CIMENT: Activités transverses pôles Phynum et Informatique

Thématique scientifique du projet

Etude de la croissance dans les nanosciences





Hybridation des codes de simulation (WP1 du projet Muscade)

- **Emergence des processeurs multi-coeurs**

- Processeurs généralistes (Intel, AMD)
- Accélérateurs (GPU, DSP,...)

- **Programmation hybride**

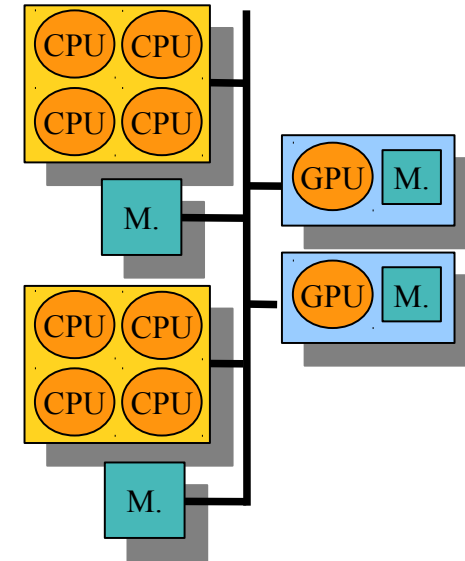
- Algorithmique
- Modèle d'exécution, partage de ressources
- Consommation énergétique de la simulation

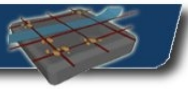
- **Une première expérience réussie avec BigDFT**

- Collaboration entre CEA/INAC et LIG/INRIA
- Méthode ab initio, ondelettes de Daubechies
- S_GPU: Exploitation efficace des GPUs
- Accélération globale des performances d'un **facteur 7**
- Prix Bull Fourier Genci 2009, L. Genovese (ESRF)
- Benchmark du projet Européen Prace

- **Muscade: Etendre cette expérience à d'autres codes de simulation**

- Vasp, Siesta, Abinit





S_GPU: Virtualisation et partage de GPU

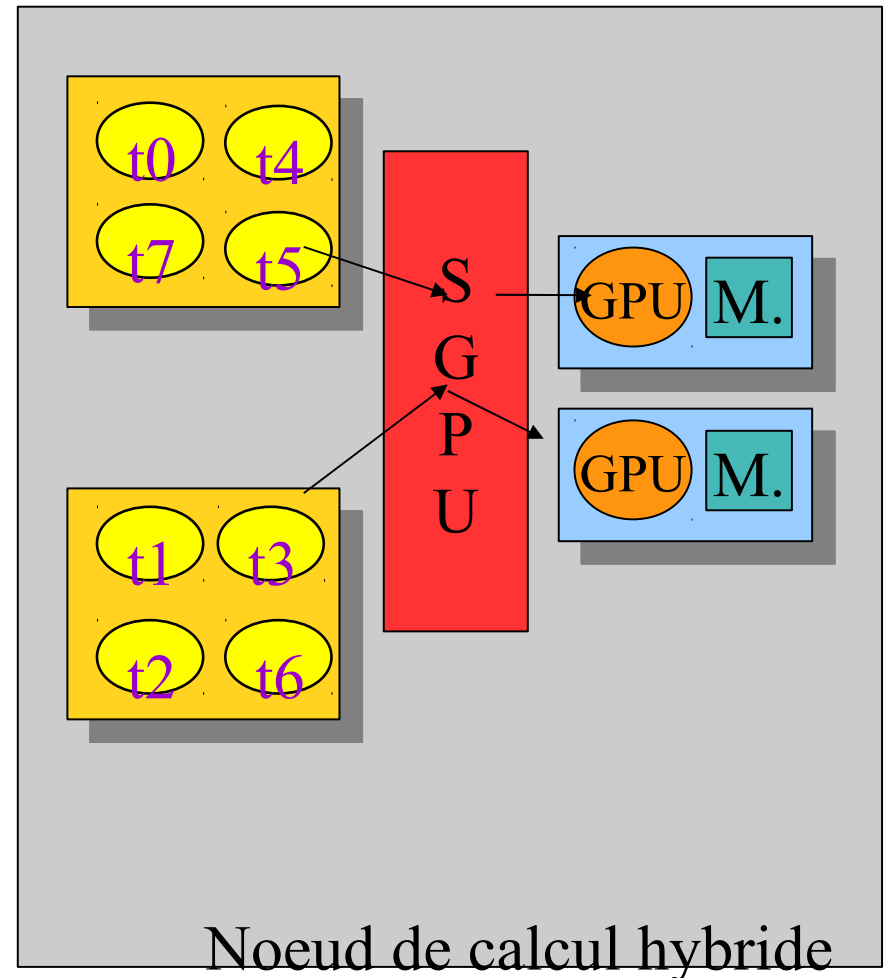
CEA INAC, LIG + industriel (Bull)

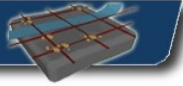
• Processeurs virtuels GPU

- Synchrone
- Ensemble de données
- Noyau de calcul
- Exécution prise en charge par S_GPU

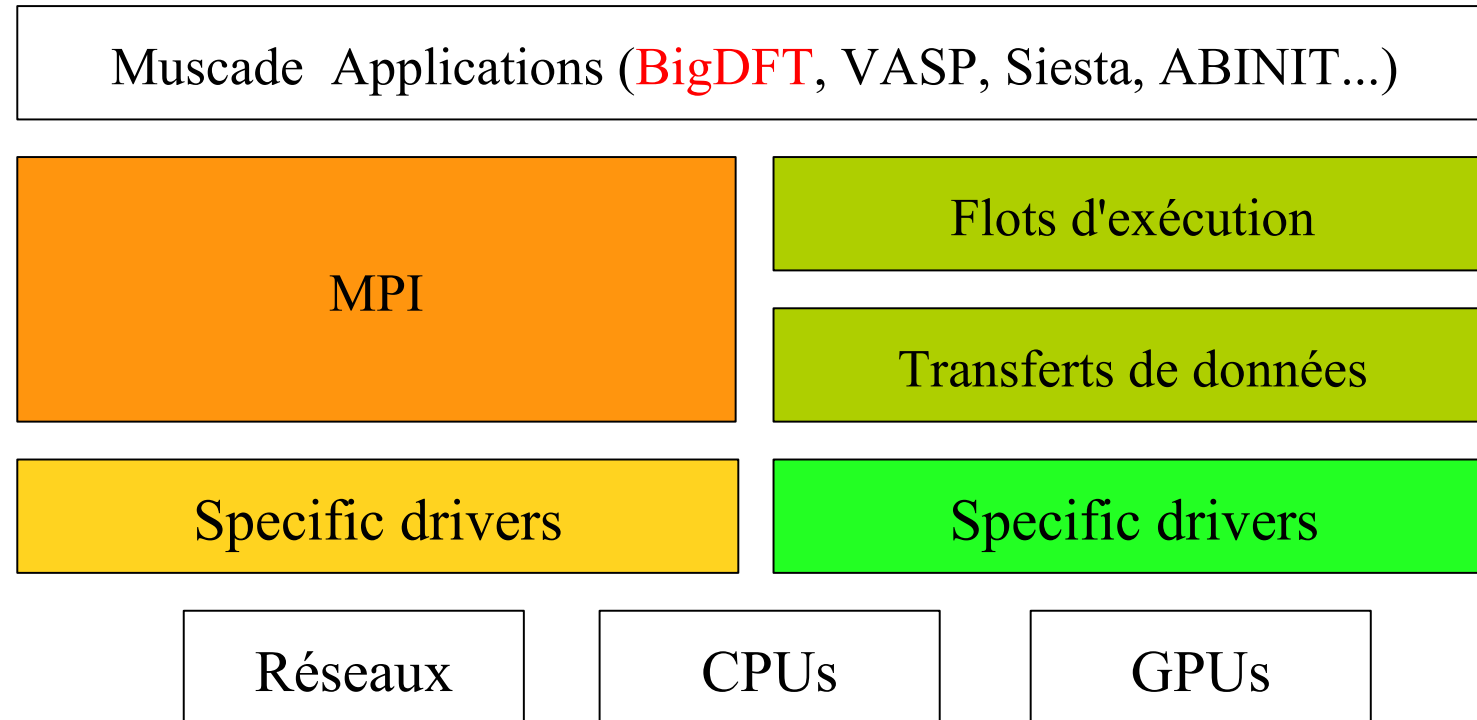
• Gestion des données de l'application

- Explicite (programmeur)
- Recouvrement transfert mémoire et calculs sur GPU

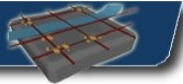




S_GPU utilisé dans Muscade



S_GPU: Virtualisation et partage de GPU dans des codes de simulation pour les nanosciences



Structure générale du projet Muscade

WP1: Simulation Software



Boost *ab initio* package

**Algorithms for rare event
ab initio based exploration**

Simulation tools for growth study in nanosciences
Normand Mousseau (Université de Montréal)

WP2: Application targets



Ge QD on Si

Si Nanowire

Graphene on SiC



Experimental validation

