

Quelques utilisations d'un pool Condor

Yann COSTES Bertrand MAILLOT
Guy TRAMBLY DE LAISSARDIERE

Université de Cergy-Pontoise

4èmes journées mésocentres, 2011

- ▶ Service rattaché à la DISI
- ▶ Existe depuis 12 ans
- ▶ Composé de 2 ingénieurs (Y. Costes, D. Domergue)
- ▶ Au service de tous les laboratoires de l'université

Un cluster de CPU

- ▶ Pour les simulations nécessitant beaucoup de ressources
- ▶ Dispose d'un réseau Infiniband dédié
- ▶ Support OpenMP / MPI
- ▶ Ouvert toute l'année

Un pool Condor

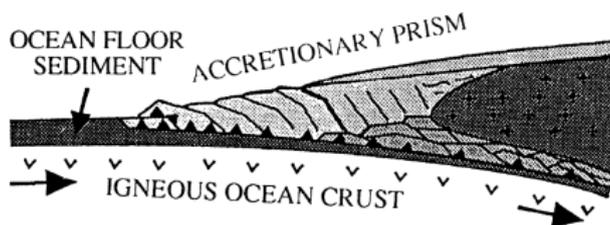
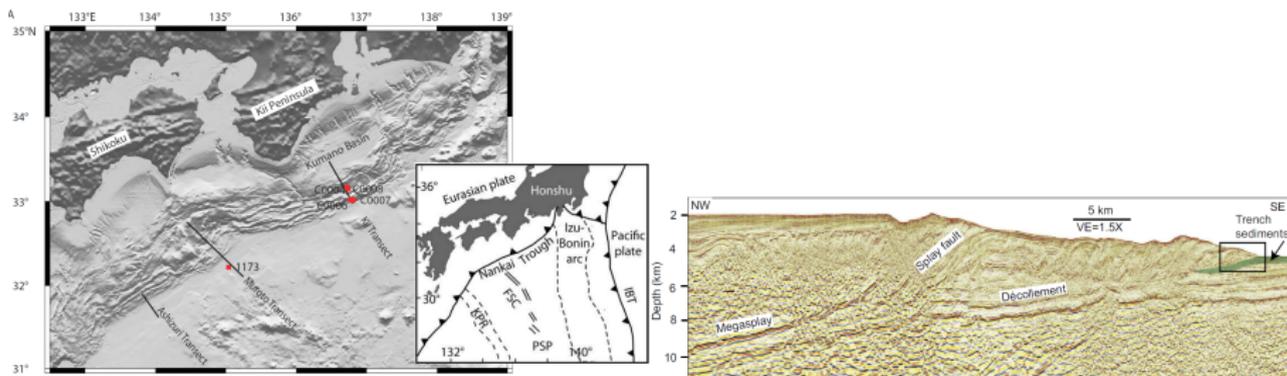
- ▶ Utilise les ressources disponibles dans les salles de TP sous Linux
- ▶ 14 salles, environ 300 coeurs en crête
- ▶ Utilise le réseau de l'université
- ▶ Ouvert pendant les périodes d'enseignement

- ▶ Utilisation du logiciel Condor, développé par l'université du Wisconsin
- ▶ Utilisation de l'univers standard de Condor
- ▶ Système de checkpoint et de migration automatique des jobs séquentiels
- ▶ Nécessité de recompiler le code avec les bibliothèques Condor
- ▶ Utilisation du mécanisme de Remote I/O, impliquant une installation minimale sur les postes clients :
 - Pas de système de fichiers partagé
 - Les logiciels scientifiques sont sur le serveur de soumission

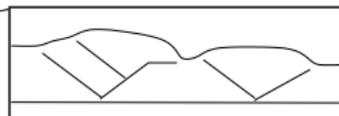
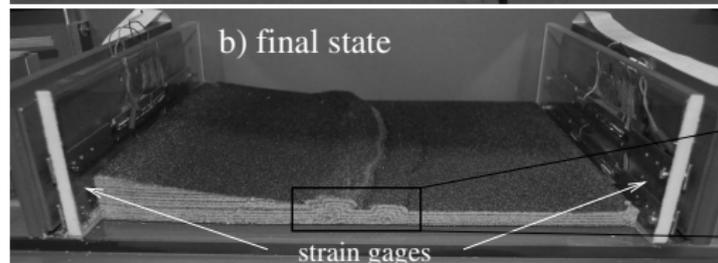
- ▶ Jobs séquentiels recompilés
- ▶ Pas de modification spécifique du code source
- ▶ Utilisation de peu de mémoire vive (jusqu'à 2 Go)
- ▶ Limiter les entrées-sorties
- ▶ Jobs sauvegardés et migrés rapidement à la connexion d'un utilisateur
- ▶ Sauvegarde périodique des jobs, en fonction de leur empreinte mémoire
- ▶ Un utilisateur a la possibilité d'exploiter tout le pool
- ▶ Pas de retour négatif de la part des enseignants

Exemple d'utilisation de Condor : Inversion d'une maquette de tectonique

Les objets naturels : prismes d'accrétion et chaînes de chevauchements-plissements



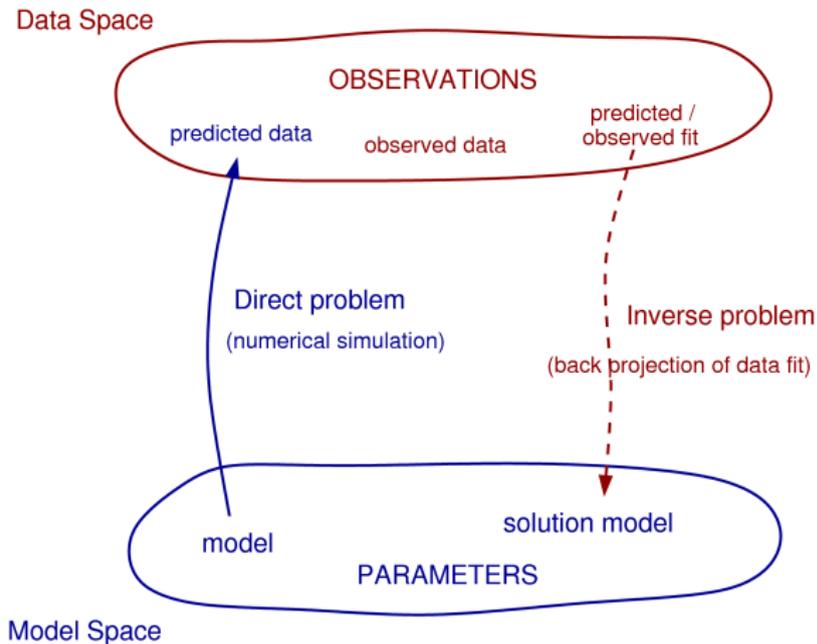
Le modèle physique



Représentation statistique de l'expérience



Définition d'un problème inverse



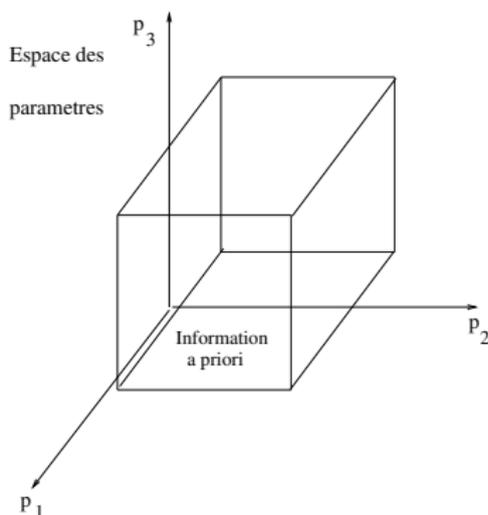
L'espace des paramètres

Paramètres rhéologiques :

densité

angles de friction ($\phi_B, \phi_D, \phi_{R_f}, \delta_R$)

cohésions



Information a priori

densité constante et connue $\rho = 1700 \text{ kg/m}^3$

cohésions nulles

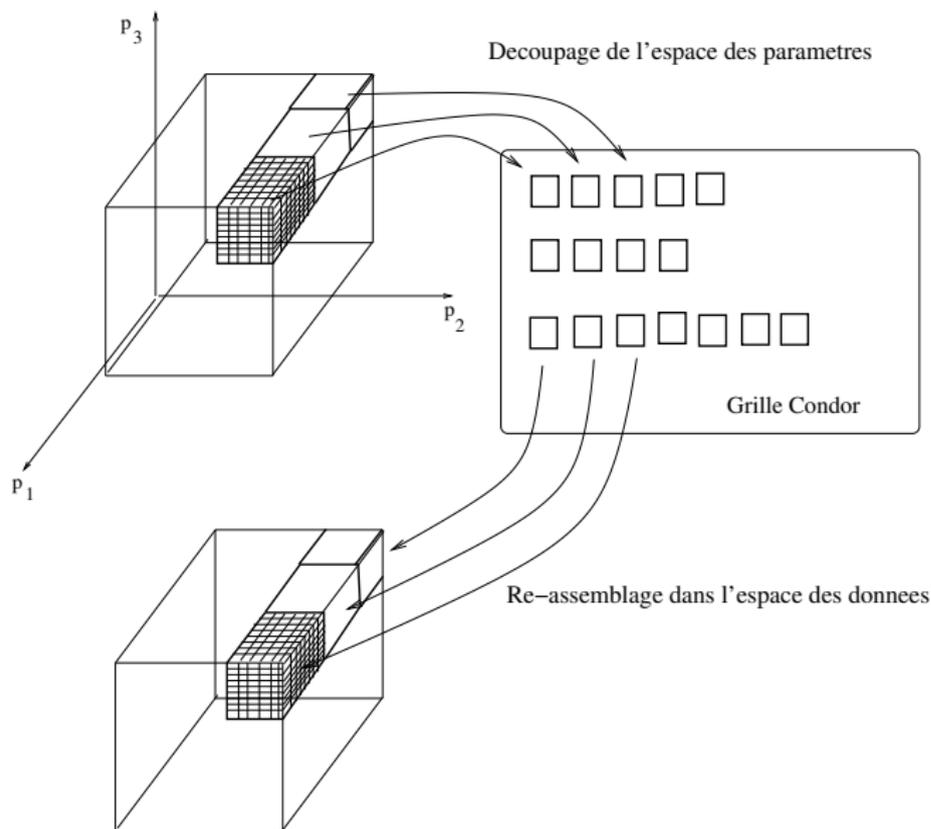
Angle de friction du sable $\phi_B \in [20; 40^\circ]$ (0.36, 0.84)

Angle de friction du décollement $\phi_D \in [1; 20^\circ]$

Angle de friction adouci $\phi_{R_f} \in [1; 40^\circ]$

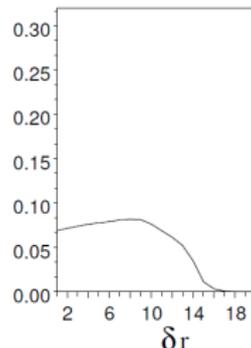
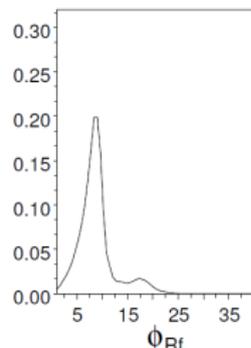
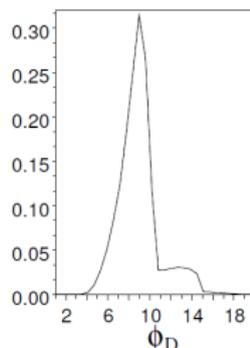
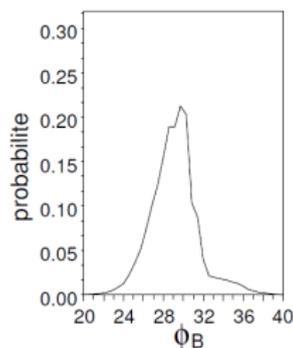
Longueur d'adoucissement $\delta_R \leq 25 \text{ mm}$

Echantillonnage de l'espace des modèles

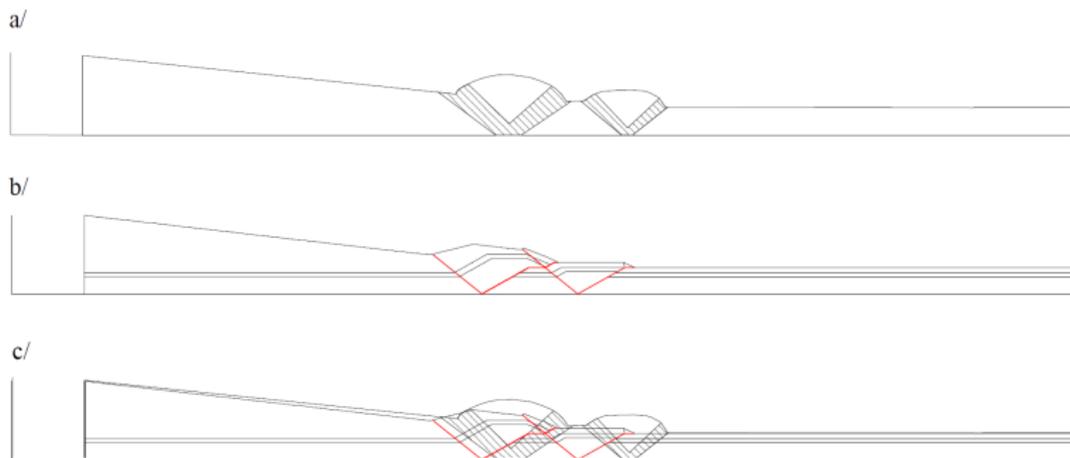


Exploration systématique demandant environ 1,5 million de simulations.

Probabilités marginales 1D :



Le meilleur modèle : $\phi_B = 30.3^\circ$; $\phi_D = 9.6^\circ$; $\phi_{R_f} = 9.6^\circ$; $\delta_r = 14$ mm
qui donne les meilleures données calculées :



Calculs des propriétés de transport électronique dans des nanomatériaux et des métaux complexes

Opérateurs appliqués à des vecteurs de taille N (nombre d'atomes dans le système physique étudié).

$N < \sim 40000$: diagonalisation matrice $N \times N$

- ▶ $N < \sim 5000$
- ▶ Mémoire $< 2\text{Go}$
- ▶ Beaucoup de diagonalisations indépendantes les unes des autres
- ▶ Temps $\sim N^3$

\implies Job divisé en ~ 100 jobs séquentiels sur pool condor

Temps de calcul réel : \sim quelques jours

Limitation : mémoire par job

Calculs des propriétés de transport électronique dans des nanomatériaux et des métaux complexes

- ▶ $N < \sim 40000$
- ▶ Mémoire $> 2\text{Go}$
- ▶ Moins de diagonalisations indépendantes les unes des autres
- ▶ Temps $\sim N^3$

⇒ Job divisé en qq **jobs parallèles** (OpenMP) sur **cluster**

Temps de calcul réel : qq jours à qq mois.

Limitation : temps de calcul

Calculs des propriétés de transport électronique dans des nanomatériaux et des métaux complexes

Opérateurs appliqués à des vecteurs de taille N (nombre d'atomes dans le système physique étudié).

$N \llsim 10^8$: diagonalisation impossible

- ▶ $N \llsim 10^8$
- ▶ Mémoire $\llsim 120$ Go
- ▶ Méthode de récursion (Lanczos) \implies parallélisation très difficile et sans intérêt
- ▶ Temps $\sim N$

\implies **Job séquentiel** sur **cluster**

Temps de calcul réel : qq jours à qq mois

Limitation : mémoire et temps de calcul

- ▶ Des moyens de calculs qui fonctionnent bien (mises à jour, sauvegardes,...)
- ▶ Proximité et disponibilité des ingénieurs en cas de besoin
- ▶ Possibilité, pour un laboratoire de taille moyenne, de financer sur ses fonds propres des ressources informatiques sans devoir en assurer l'installation et la maintenance
- ▶ Veille technologique. Formation adaptée aux besoins locaux
- ▶ Évolution des moyens qui tient compte des demandes concrètes des chercheurs