

Journée mésocentres – 24 septembre 2009



Le Pôle Haut-Normand de Modélisation Numérique

Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie (CRIHAN)

Administrivia : crihan-admin@crihan.fr

Technique : crihan-tech@crihan.fr

Patrick BOUSQUET-MÉLOU

Qu'est-ce que le CRIHAN ?

CRIHAN

Centre de Ressources Informatiques de Haute-Normandie

- **Association loi de 1901** créée fin **1991** à l'initiative du Conseil Régional de Haute-Normandie pour **aider les organismes publics et privés de la Région à développer des activités d'enseignement, de recherche et de développement** basées sur l'utilisation des nouvelles technologies de communication et sur l'informatique
- Fonctionnement assuré par le Conseil Régional de Haute-Normandie
 - Projets lourds inscrits dans le cadre du Contrat de Projets État-Région 2007-2013
 - Environ 12 permanents

Domaines d'activité du CRIHAN

Quatre grandes thématiques

- Réseaux informatiques
- Calcul numérique intensif
- Formation et transfert technologique
- Support à des projets innovants



Réseau régional pour l'Enseignement, la Recherche et la Santé

Réseau régional SYRHANO

Systeme Réseau de HAute-NOrmandie

- Opérationnel **depuis 1993**, nombreuses évolutions depuis...
- Projet **piloté par le CRIHAN** dans le cadre du CPER 2007-2013
- **Réseau** multi-usages modulaire destiné à satisfaire les besoins de l'**Enseignement**, de la **Recherche** et de la **Santé** dans le cadre des chartes SYRHANO et RENATER
 - Très bonne qualité de service (performances, disponibilité)
 - Couverture régionale
 - Technologie "tout IP"
 - Support technique, aide aux usages et services mutualisés au sein de la communauté SYRHANO

Les utilisateurs de SYRHANO

- **Enseignement Supérieur et Recherche** (utilisateurs “historiques”)
 - Universités (Rouen, Le Havre, Evreux), INSA de Rouen, ESIGELEC
 - IUT de la Région, etc.
- **Enseignement secondaire**
 - Collecte pour les collèges et lycées depuis 1996
- **Santé**
 - CHU de Rouen depuis l’origine de SYRHANO (site Universitaire)
 - CHI Eure–Seine précurseur, plusieurs autres CH depuis, en coordination avec l’ARH
- **Autres** : collectivités, associations

Calcul scientifique

Pôle Régional de Modélisation Numérique

Calcul scientifique

Pôle Régional de Modélisation Numérique

- Plus de **40 laboratoires** utilisateurs (> 180 comptes)
- **90 utilisateurs actifs par mois** en moyenne
- 950 000 heures.CPU en 2008
- Support technique
- Support applicatif/scientifique
 - Aide au portage de codes
 - Optimisation
 - Formations



Image : Abdellah Hadjadj, INSA de Rouen

3 ingénieurs CRIHAN :

Patrick Bousquet-Mélou : support scientifique

Béatrice Charton : administration système

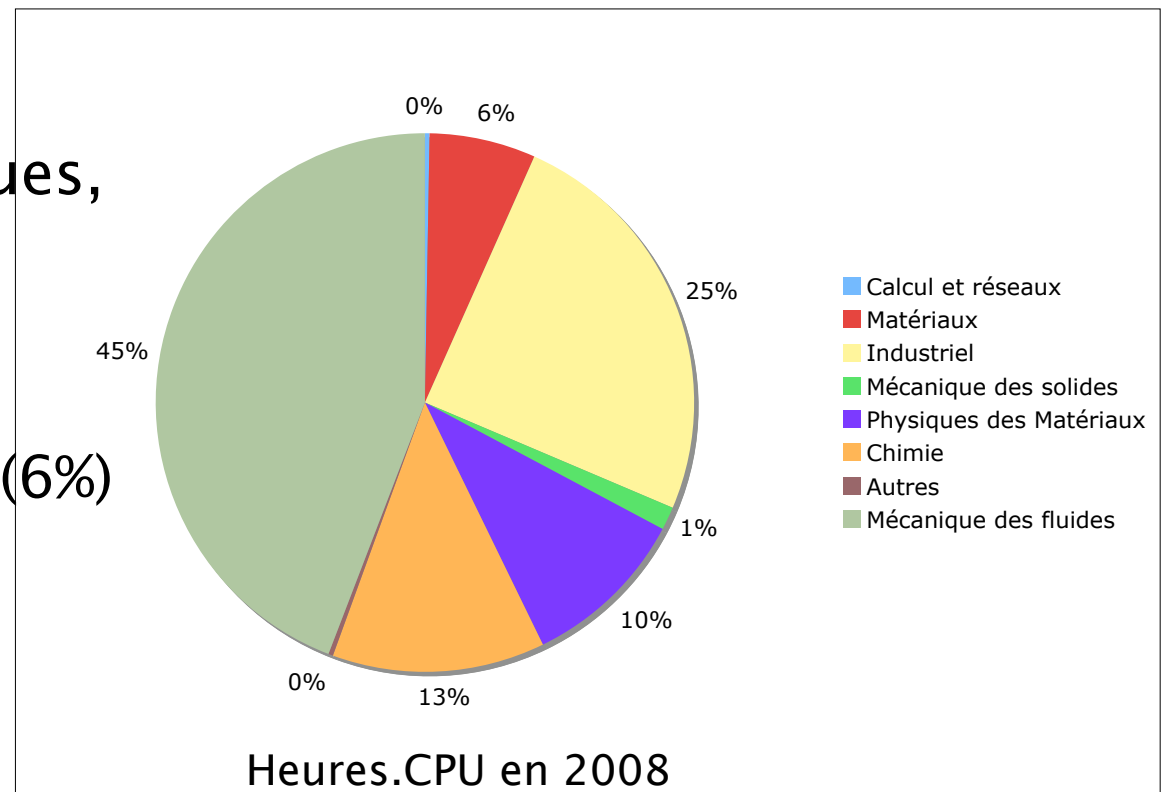
Laurent Vervisch : développement du
système de soumission

Calcul scientifique

Thématiques et utilisateurs (2008)

- Mécanique des fluides prépondérante : 70% des heures.CPU (45% académiques, 25% industriels)
- Activité non négligeable en chimie (13%), physique des matériaux (10%), matériaux (6%)
- Autres : mathématiques, optique, etc.

- Localisation des laboratoires : Rouen, Le Havre, Caen, Nantes, Le Mans, Paris, Reims, Lille, Dijon, Marseille, etc.



Calcul scientifique

Grappe IBM eServer p575



Salle machine du CRIHAN, Saint-Etienne du Rouvray

- 22 nœuds de calcul :
 - 22x8 **Power5**, single-core @ 1,9 GHz
=> **176 coeurs**
 - 22 x 16 Go de mémoire vive
 - Réseau rapide Federation (16 nœuds)
 - Système de fichiers GPFS
 - 20 To de disques rapides
 - OS AIX 5.3
 - **1,3 TFlops** de puissance crête
- Mise en service : janvier 2006

Calcul scientifique

Grappe IBM eServer p575

- Accessible gratuitement à tout laboratoire académique
- Attribution d'heures annuelles soumise à expertise
- Environnement technique
 - Compilateurs Fortran, C/C++
 - Calcul parallèle (MPI, OpenMP)
 - Bibliothèques scientifiques (ESSL, PESSL, ScaLAPack, FFTW, etc.)
- Codes commerciaux de chimie : Gaussian, Schrödinger, Accelrys
- Logiciels libres : Gamess, CNS, CPMD, Abinit (chimie), FDS (simulation incendies), etc.

Principe d'utilisation des ressources de calcul

Accès aux ressources de calcul

Objectif : simplicité d'utilisation

- **Pas ou peu de limitation sur l'accès aux calculateurs**
 - 24h/24 7j/7 (modulo les journées de maintenance)
 - Pas de déclaration de machines utilisatrices (ou d'@IP)
 - Projet scientifique soumis au CRIHAN et validé par des experts extérieurs à la Région
- **Limitations raisonnables sur les modes de soumission**
 - Batch IBM Load Leveler
 - jobs **intra-noeud** : limités à **300 heures**
 - jobs **inter-noeuds (MPI)** :
 - **100 heures** jusqu'à **16 processus**
 - **48 heures** de 17 à 64 processus

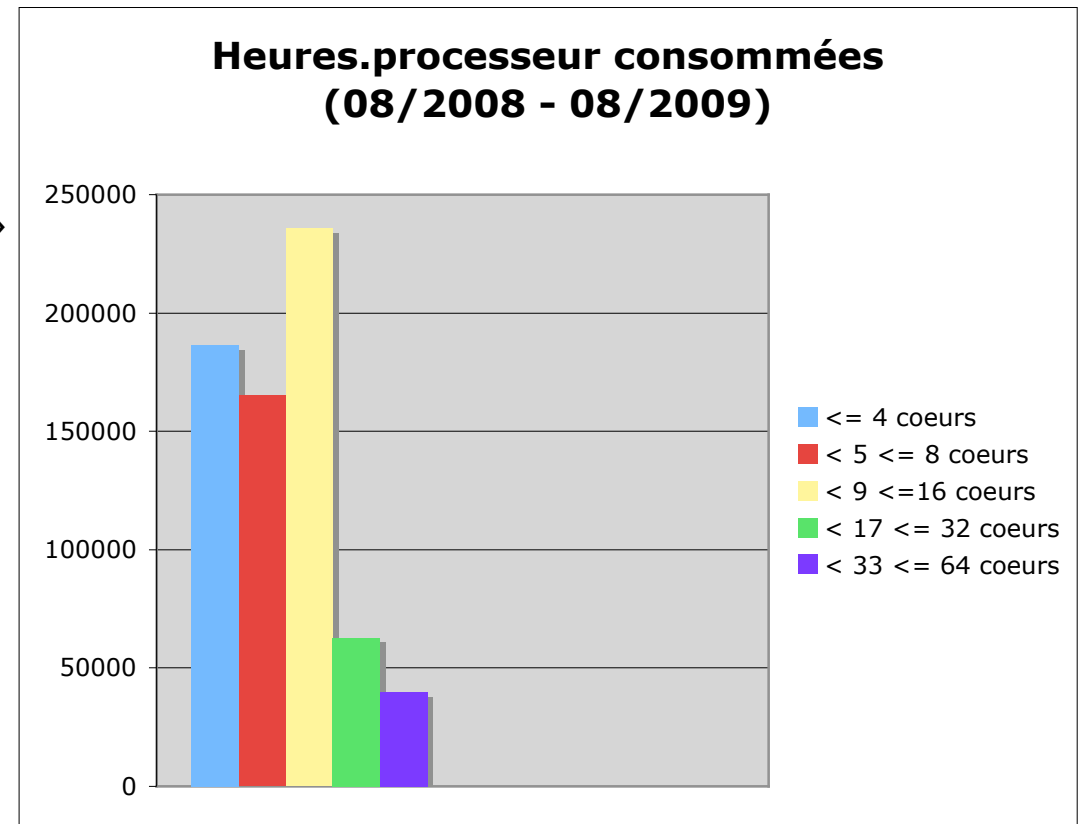
Accès aux ressources de calcul

Typologie des travaux

- 35% d'heures.processeur «intra-noeud»
- 65% d'heures.processeur «inter-noeuds»

- **Les jobs MPI de 16 processus**
(8e des ressources) **consomment le plus**

- **De 32 à 64 processus :**
 - 17% des heures.processeur
 - temps d'attente plus élevés
 - les centres nationaux sont préférés,
en attendant le renouvellement des ressources du CRIHAN (2010)



Accès aux ressources de calcul

Service sur mesure aux utilisateurs

- Aide technique
 - Accès aux ressources (réseau, environnement technique)
 - Suivi de consommation : relevés bi-mensuels
- Aide applicative/scientifique :
 - portage de codes sur Power5/AIX, installations de logiciels libres
 - développement de codes : optimisation/parallélisation

Accès aux ressources de calcul

Service sur mesure aux utilisateurs

•Souplesse :

- Réattribution de quotas d'heures sur demande motivée
- Augmentation temporaire de quotas disques
- Durée des jobs augmentée à 500 heures (intra-noeud) pour un utilisateur, de manière provisoire
- Gestion de situations particulières ou de cas d'urgence (fin de thèse, publication, nécessité de déboguer un code) :
 - augmentation de la priorité d'un job en file d'attente
 - réservation ponctuelle de ressources
 - créations de comptes sur un cluster de test (moins utilisé que la machine de production)

RNMM : Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire

RNMM

Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire

- Créé en **1997**
- **13 laboratoires** de Chimie et de Biologie (Rouen, Le Havre, Evreux, Caen)
- Des **ressources logicielles** (Tripos, Schrödinger, Accelrys, Gaussian) et **matérielles** (stations Linux/Windows, lunettes de vision LCD) choisies par les utilisateurs
- Accès libre et gratuit pour un usage académique
- Accessible au travers des **réseaux informatiques régionaux**
 - SYRHANO (HN) et VIKMAN (BN)
 - Très bonne connexion au réseau au travers de RENATER

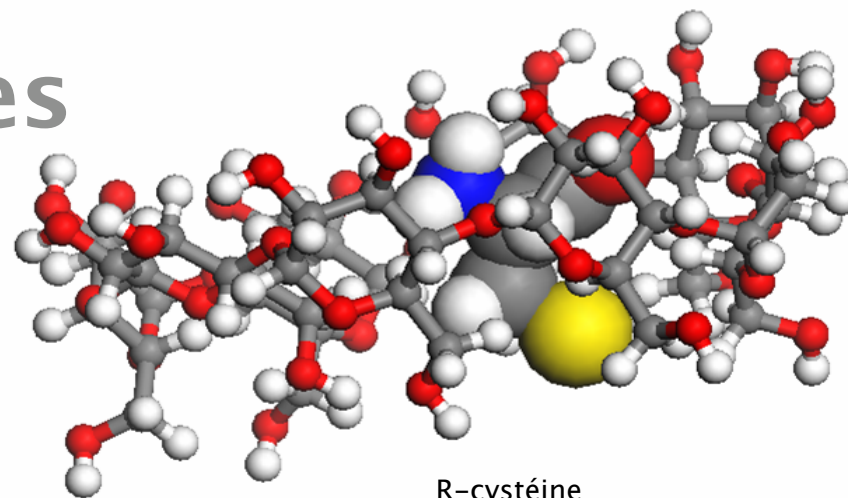
RNMM

Ressources

- 10 stations de travail dans des laboratoires spécialement adaptées pour la Chimie et la Biologie sous Linux / Windows
- 10 lunettes de vision LCD
- Logiciels de Tripos, Schrödinger, Accelrys, Gaussian, ...

Accès aux Ressources

- Libre et gratuit pour un usage académique



AMON

Atelier de Modélisation

Numérique pour les PME-PMI

Plate-forme de services AMON

Atelier de Modélisation Numérique pour les PME-PMI

- Objectif : proposer aux PME-PMI régionales une plate-forme de services autour de la simulation numérique
- Projet déposé à la DRIRE dans le cadre d'une "Action collective"
- Domaines visés dans un premier temps : **mécanique** (fluides/structures)
- Déploiement d'une plate-forme matérielle et logicielle
 - Grappe de **8 serveurs HP DL140** bi-processeurs double-cœur Xeon (Woodcrest 3 GHz)

Plate-forme de services AMON

Atelier de Modélisation Numérique pour les PME-PMI

- Achat pour mutualisation d'une licence annuelle **ANSYS Fluent** en mars 2009 (2 starters, 8 jetons parallèles) :
 - Plus de 10 semaines de location de la licence en 2009 par deux bureaux d'études
 - Actuellement, 2 autres entreprises intéressées par le service
- Intérêt manifesté pour d'**autres logiciels** de mécanique :
 - Abaqus (structures), LS-Dyna (dynamique rapide)
 - Tests techniques à venir : Power5 / Xeon / Nehalem EP
 - Dialogue avec les éditeurs pour mutualisation éventuelle de licence

Actions inter-centres

Actions inter-centres

CRIHAN / ROMEO2 (Centre de Calcul Régional Champagne-Ardenne)

- **Journées de formation/information :**
 - Journée Modélisation Moléculaire inter-centre de calcul ROMEO/CRIHAN : Reims, 22/10/2007
 - Journée Modélisation avec Schrödinger : CRIHAN, 26/01/2009
- **Projet de mutualisation de licences de logiciels de chimie :**
 - Accelrys, Schrödinger, Tripos

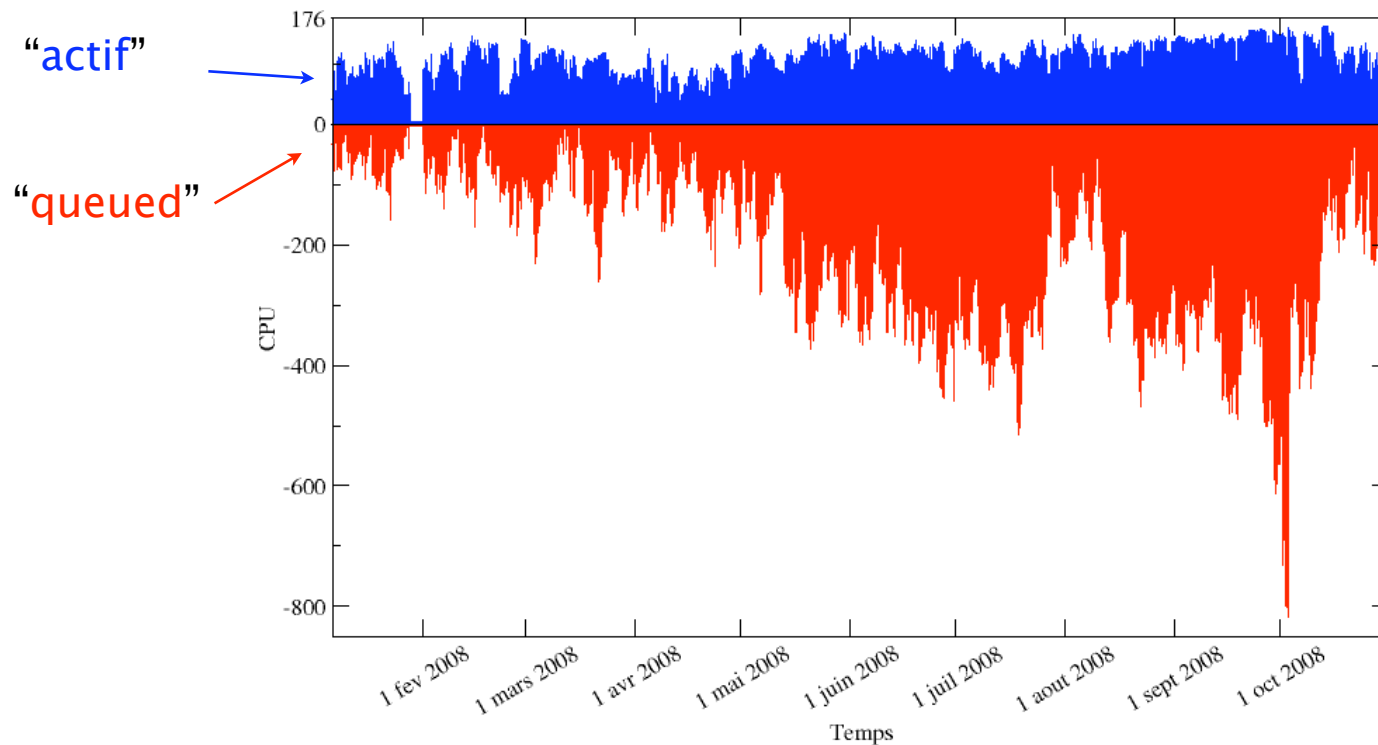
Evolution des ressources de calcul

Evolution des ressources de calcul

Acquisition d'une grappe de calcul d'architecture x86_64

- **Nécessité** : charge élevée en 2008, augmentation des temps d'attente

Réservations CPU LoadLeveler



Evolution des ressources de calcul

Acquisition d'une grappe de calcul d'architecture x86_64

- Les utilisateurs de codes parallèles travaillent plus à l'IDRIS et au CINES depuis un an ; **le nombre de CPUs doit augmenter** au CRIHAN (128 coeurs Power5 pour le parallélisme distribué aujourd'hui)
- **Appel d'offres** : décision en octobre puis achat en 2009
 - décision en octobre
 - mise en production fin 2009 – début 2010
- **Caractéristiques souhaitées pour la nouvelle machine**
 - Puissance crête : 15 TFlops (puissance actuelle x 10)
 - 3 Go de mémoire par coeur
 - Stockage : 180 To



Centre de Ressources Informatique de Haute-Normandie