

# Le Mésocentre de Calcul intensif Aquitain

# Plan

- Positionnement
  - Le MCIA dans la pyramide du calcul
  - Modèle économique
  - Conditions d'utilisation
- Equipements
  - Cluster HPC : Avakas
  - France-Grilles / EGI
  - Stockage : MCIA-iRODS
- Partage des ressources
  - Partage des ressources en calcul scientifique
  - La politique de partage au MCIA
- Utilisation
  - Avakas : exemples d'utilisation
  - Exemple d'assistance : IMB - NS2D
  - Exemple d'assistance : CENBG - DDCCS

# Le MCIA dans la pyramide du calcul

<https://www.mcia.univ-bordeaux.fr/>

	Classification des moyens de calcul	investissement
Tier-0	Centre européen	X00 000 000 €
Tier-1	Centre national	X0 000 000 €
<b>Tier-2</b>	<b>Mésocentre régional</b>	<b>X 000 000 €</b>
Tier-3	Equipement de laboratoire	X00 000 €

- Objectif : promouvoir la modélisation et la simulation pour toutes les communautés scientifiques au niveau régional
  - Equipements matériels
  - Formation, assistance, conseil
- Un maillon essentiel entre les équipements de laboratoire et les centres nationaux
  - Plus puissant qu'une machine de laboratoire
  - Moins rigide qu'un centre national
  - Donner un accès au Calcul Scientifique aux laboratoires sans équipement ou sans culture du domaine

# Modèle économique

- Investissement en 2010
  - Fonds Région Aquitaine + FEDER + établissements
  - 2 millions d'euros
- Fonctionnement principalement pris en charge par l'Université de Bordeaux
  - ~100 k€ de fluides par an
  - 2 ingénieurs permanents (1 CDD CUEA)
  - Extensions de maintenance Avakas (~100 k€ / an, quelques établissements contribuent)
- Modèle en cours de redéfinition
  - Eviter à tout prix une facturation à l'utilisateur ou aux labos

# Conditions d'utilisation

- Conditions d'inscription
  - Personnel d'un des établissements partenaires de la CUEA
  - Ou bien en collaboration avec une équipe de ces établissements
  - ~310 utilisateurs inscrits
- Procédure
  - Demande par mail selon les instructions :
    - [https://redmine.mcia.univ-bordeaux.fr/projects/cluster-avakas/wiki/Comptes\\_Utilisateurs](https://redmine.mcia.univ-bordeaux.fr/projects/cluster-avakas/wiki/Comptes_Utilisateurs)
- Durée
  - Renouvellement des comptes chaque année (en septembre - octobre)

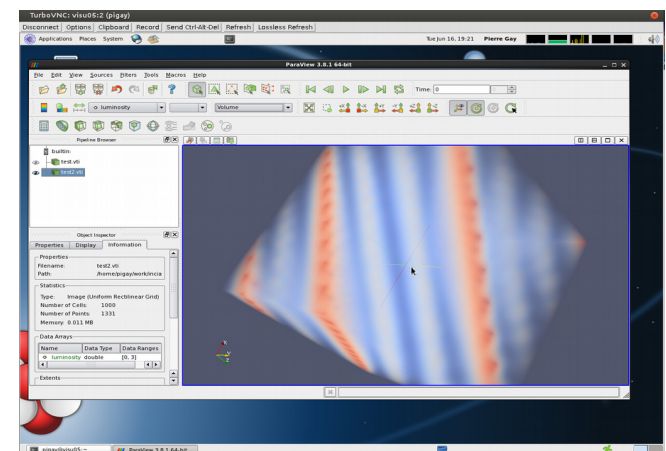
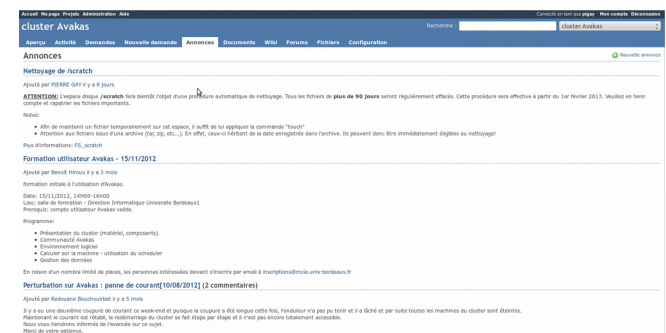
# Plan

- Positionnement
  - Le MCIA dans la pyramide du calcul
  - Modèle économique
  - Conditions d'utilisation
- Equipements
  - Cluster HPC : Avakas
  - France-Grilles / EGI
  - Stockage : MCIA-iRODS
- Partage des ressources
  - Partage des ressources en calcul scientifique
  - La politique de partage au MCIA
- Utilisation
  - Avakas : exemples d'utilisation
  - Exemple d'assistance : IMB - NS2D
  - Exemple d'assistance : CENBG - DDCCS

# Cluster HPC : Avakas

<https://redmine.mcia.univ-bordeaux.fr/projects/cluster-avakas/wiki>

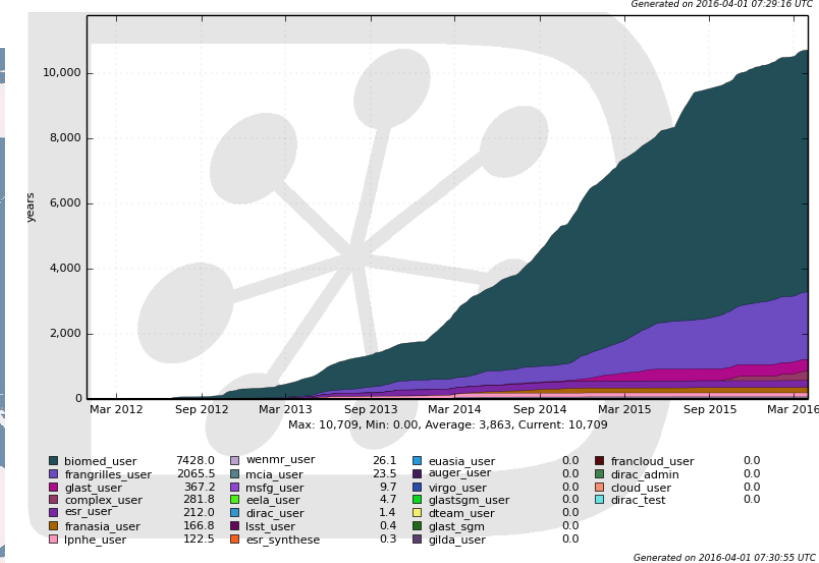
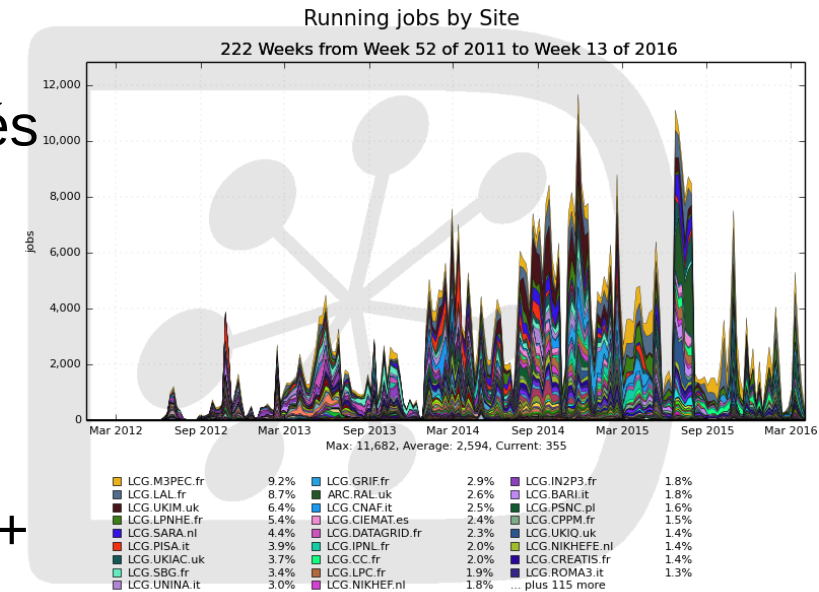
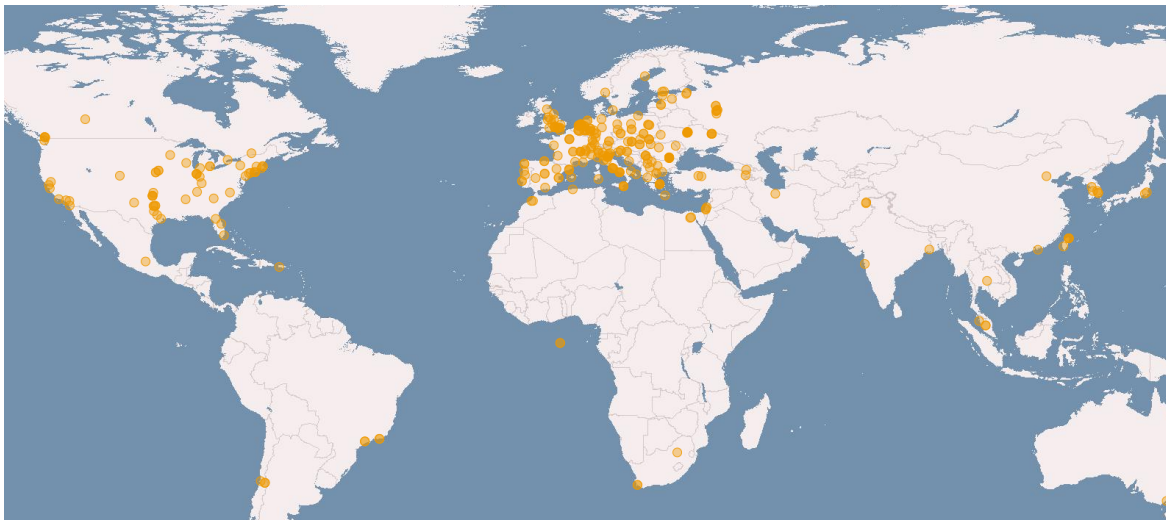
- +3000 cœurs
- Réseau Infiniband 40 Gb/s
- Espace de stockage parallèle 120 To
- Quelques serveurs avec 512 Go RAM (40 cœurs)
- Solution de visualisation déportée
- Logiciels communautaires
- Documentation et support
- Mis en service 11/2011
- Fin du support 02/2016 (étendu en 2016 et 2017)
- 120 millions d'heures de calcul produites
- Remplaçant en cours d'acquisition



# France-Grilles / EGI

<http://www.france-grilles.fr>

- Pour les grandes productions de jobs (quasi-)séquentiels
- Capacité de traitement de grandes quantités de données
- Possibilité de rejoindre des communautés internationales
- Expérience locale au MCIA et formations
- Site grille opéré par le MCIA : ~800 cœurs + 80 To de disque

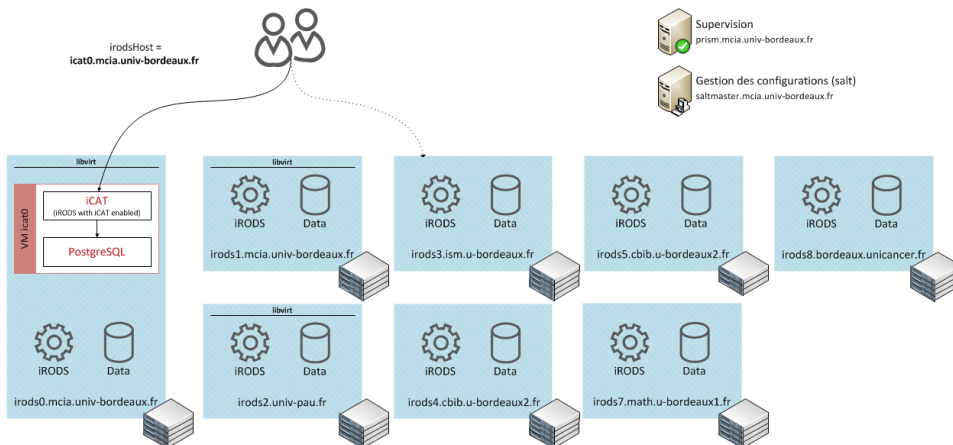
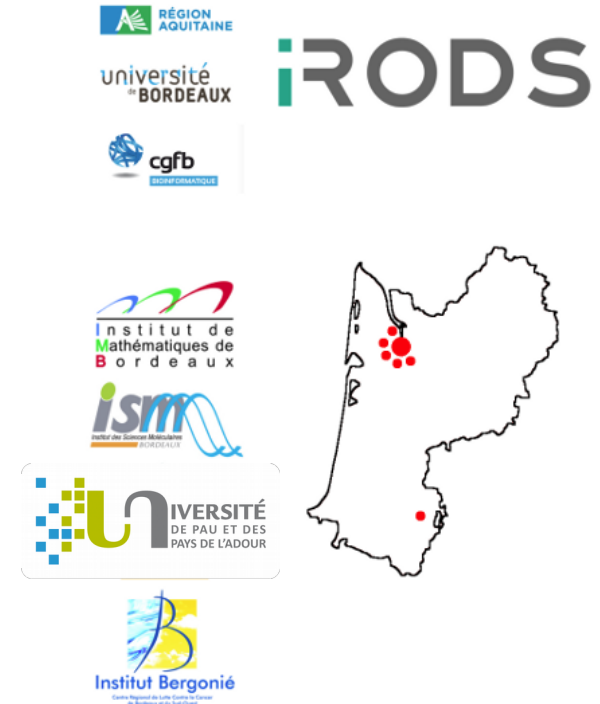




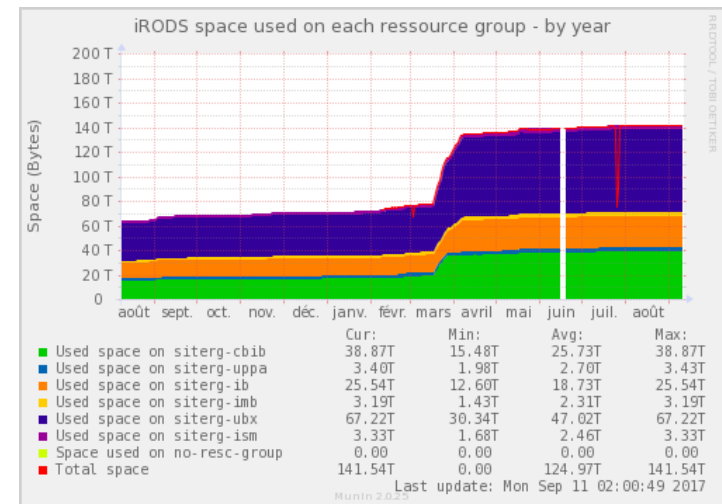
# Stockage : MCI*A*-iRODS

<https://redmine.mcia.univ-bordeaux.fr/projects/irods/wiki/IRODS>

- Infrastructure de stockage 300 To répliqués (1 Po brut)
- Serveurs répartis sur 6 sites (Bordeaux + Pau)
- 7 partenaires : MCI*A*, CBI*B*, IB, IMB, ISM, UPPA
- Ouvert aux nouvelles participations
- Attention à la confidentialité des transferts!



017 - MCI*A*



# Plan

- Positionnement
  - Le MCIA dans la pyramide du calcul
  - Modèle économique
  - Conditions d'utilisation
- Equipements
  - Cluster HPC : Avakas
  - France-Grilles / EGI
  - Stockage : MCIA-iRODS
- Partage des ressources
  - Partage des ressources en calcul scientifique
  - La politique de partage au MCIA
- Utilisation
  - Avakas : exemples d'utilisation
  - Exemple d'assistance : IMB - NS2D
  - Exemple d'assistance : CENBG - DDCCS

# Partage des ressources en calcul scientifique

- Partage des capacités de calcul
  - Les besoins des utilisateurs sont exprimés en nombre de cœurs simultanés pour une durée prédéfinie
  - L'exécution des calculs est différée jusqu'à obtention des ressources demandées par le programme par le « Batch Scheduler » qui gère le partage des ressources avec un système de priorités
  - Selon la politique du centre concerné, la quantité de ressources accessibles à un utilisateur peut-être soumise à une demande d'allocation préliminaire (DARI, etc...)
- Partage des capacités de stockage
  - La quantité de données à déposer est bornée par des quotas d'utilisation
  - Possibilité de quotas différents par utilisateur, par groupe, par projet

# La politique de partage au MCIA

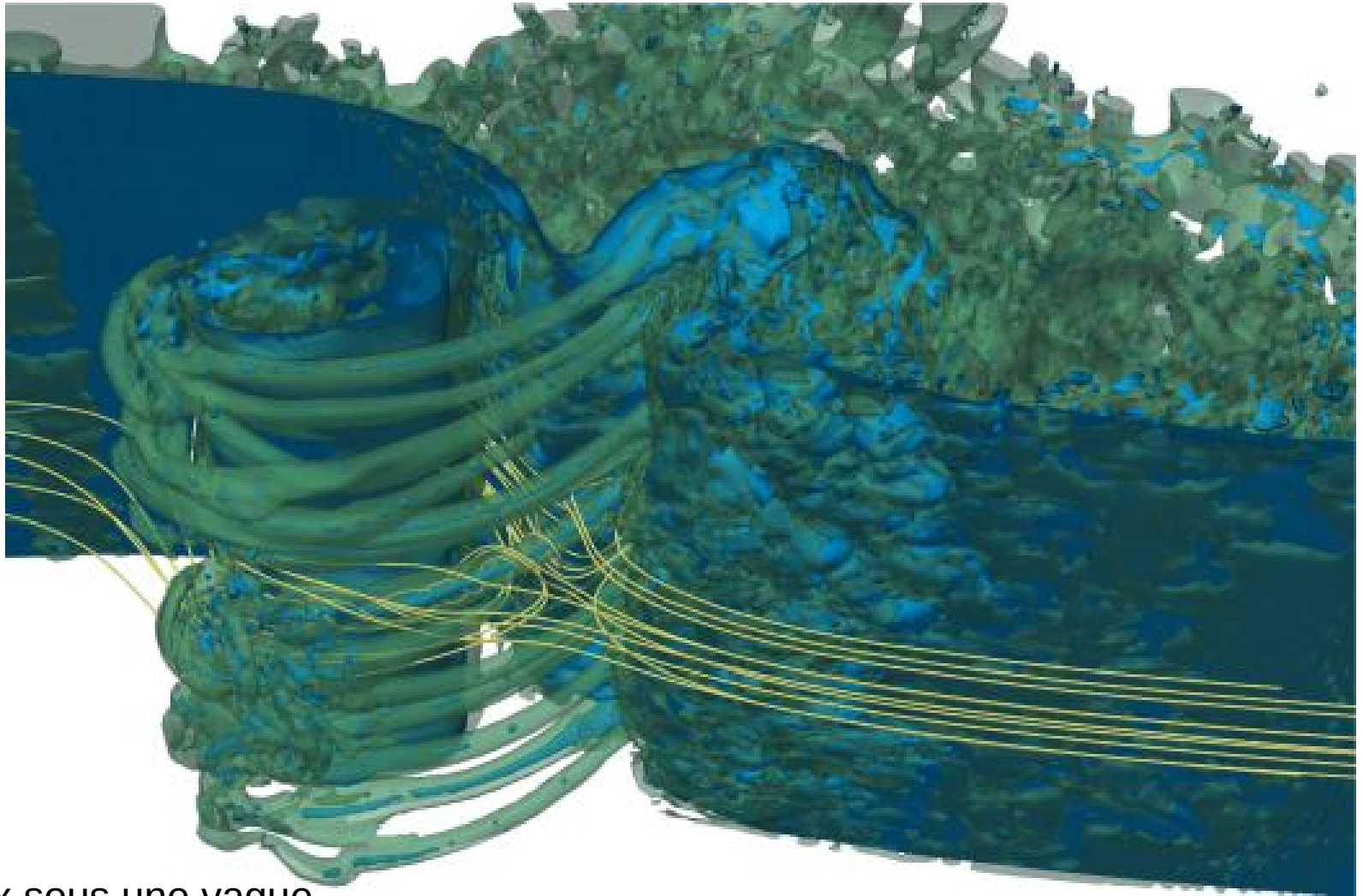
- Ressources de calcul
  - Pas besoin de demande d'allocation préalable
  - Le partage équitable est assuré par la configuration « FairShare » du scheduler
  - Des limites dans le nombre de calculs simultanés et dans leur durée permettent de fluidifier le partage (voir le wiki)
- Ressources de stockage
  - Les espaces de stockage de travail (stockage parallèle /scratch) sont réservés aux données temporaires. Il n'y a pas de quota pour ces espaces, mais les fichiers trop anciens sont supprimés automatiquement
  - Les espaces de stockage pérenne sont soumis à des quotas individuels
    - MCIA-iRODS : 10 To par utilisateur
  - En raison de la sur-allocation volontaire sur ces systèmes, les quotas par défaut peuvent évoluer à la baisse au fil du temps
  - Une extension des quotas ou une allocation par projet peuvent être demandées au « Comité des Utilisateurs »
  - Les partenaires MCIA-iRODS qui participent à l'hébergement et l'administration de la solution peuvent allouer des suppléments de quota correspondant à leur participation à l'infrastructure

# Plan

- Positionnement
  - Le MCIA dans la pyramide du calcul
  - Modèle économique
  - Conditions d'utilisation
- Equipements
  - Cluster HPC : Avakas
  - France-Grilles / EGI
  - Stockage : MCIA-iRODS
- Partage des ressources
  - Partage des ressources en calcul scientifique
  - La politique de partage au MCIA
- Utilisation
  - Avakas : exemples d'utilisation
  - Exemple d'assistance : IMB - NS2D
  - Exemple d'assistance : CENBG - DDCS

# Avakas : exemples d'utilisation

Source : <https://redmine.mcia.univ-bordeaux.fr/documents/24>



Laboratoire : Trefle

Filaments de vortex sous une vague

11/12/2017

Journée RAISIN 2017 - MCIA

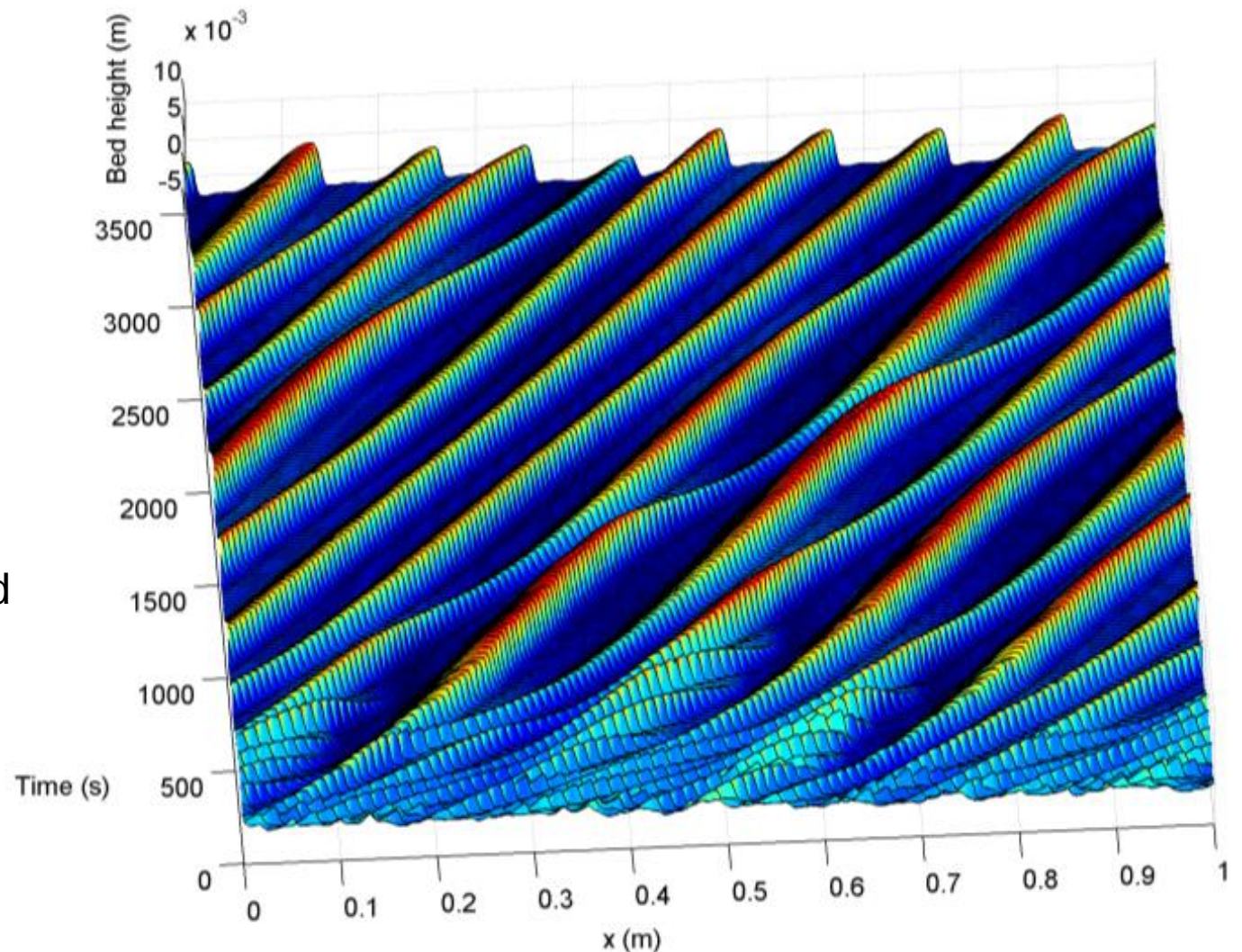
14

# Avakas : exemples d'utilisation

Source : <https://redmine.mcia.univ-bordeaux.fr/documents/24>

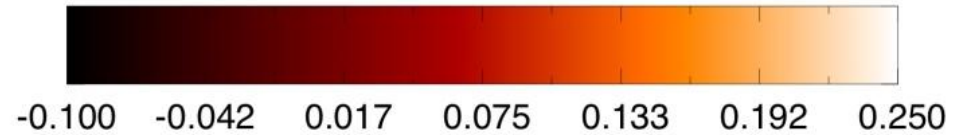
Laboratoire: EPOC

Evolution temporelle d'un fond marin vers une structure de dunes régulières



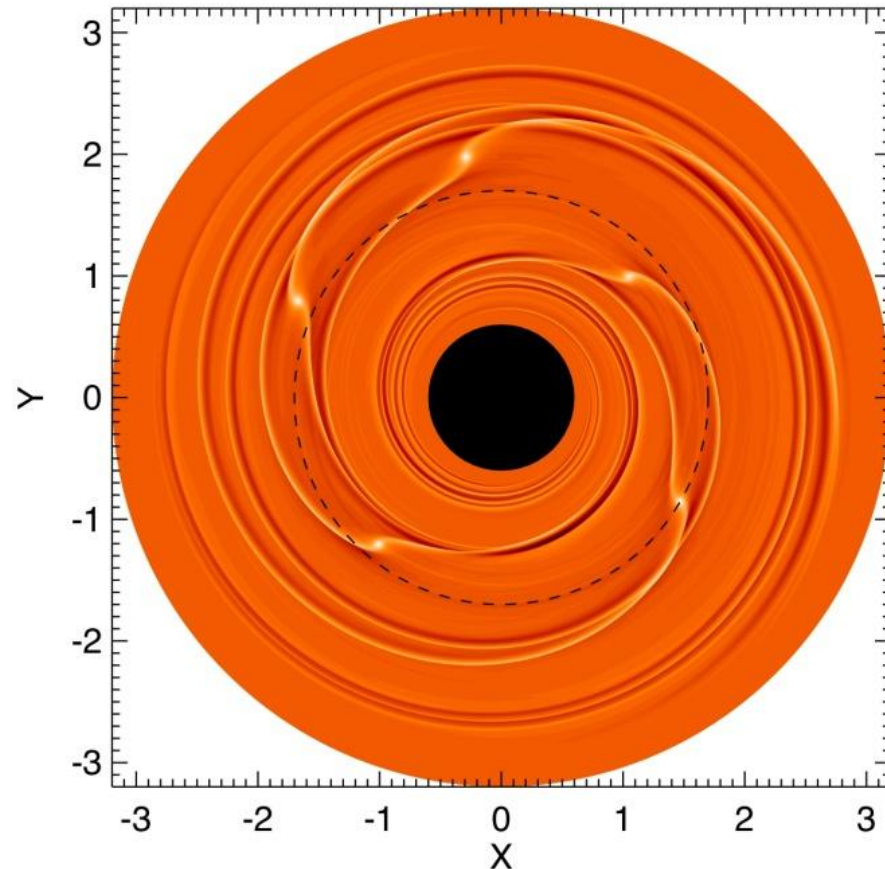
# Avakas : exemples d'utilisation

Source : <https://redmine.mcia.univ-bordeaux.fr/documents/24>



Laboratoire : LAB

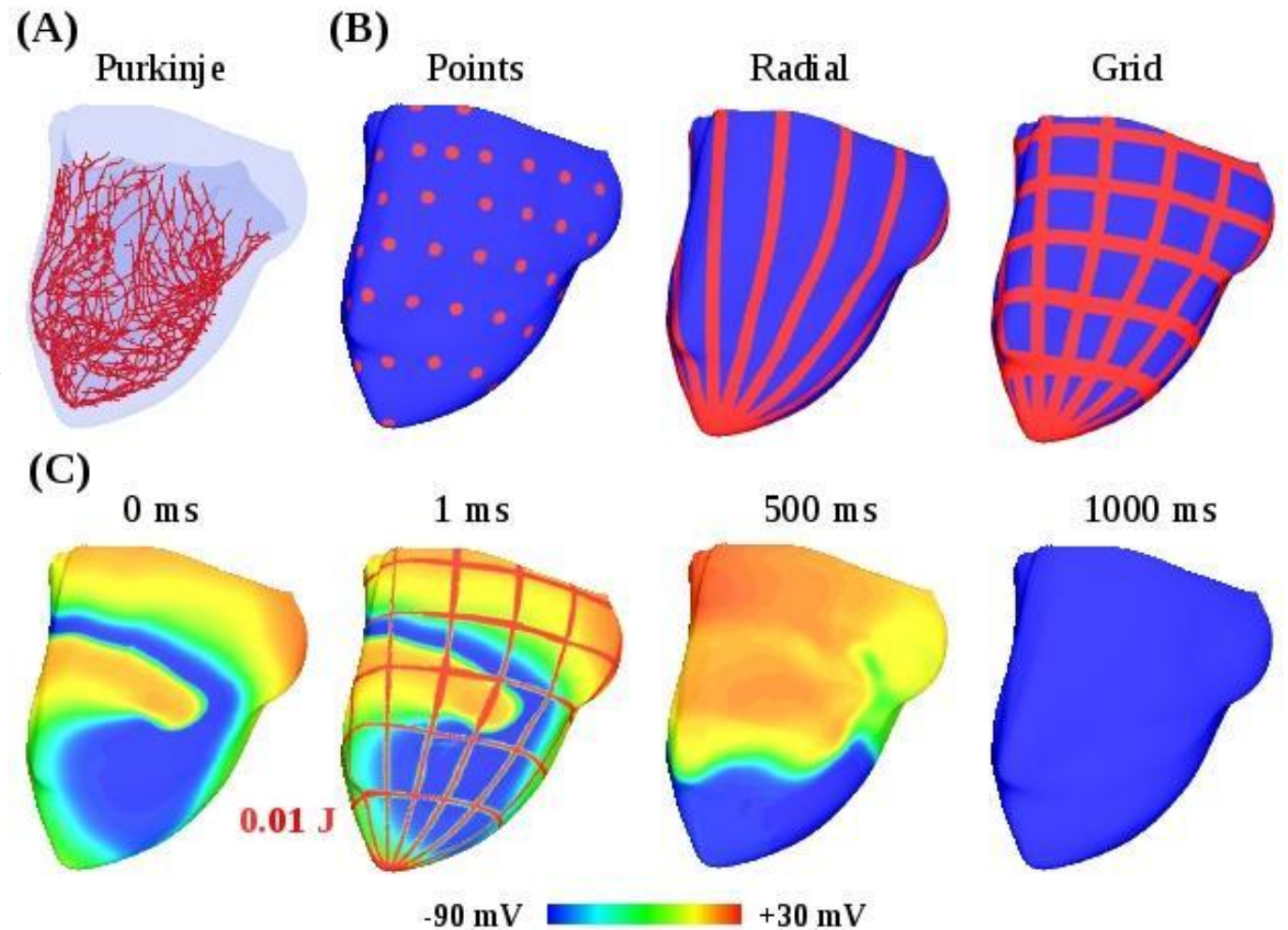
planètes immergées dans un disque  
radiatif, migrant vers une zone de  
convergence





# Avakas : exemples d'utilisation

Source : <https://redmine.mcia.univ-bordeaux.fr/documents/24>



Laboratoire : CARMEN - INRIA

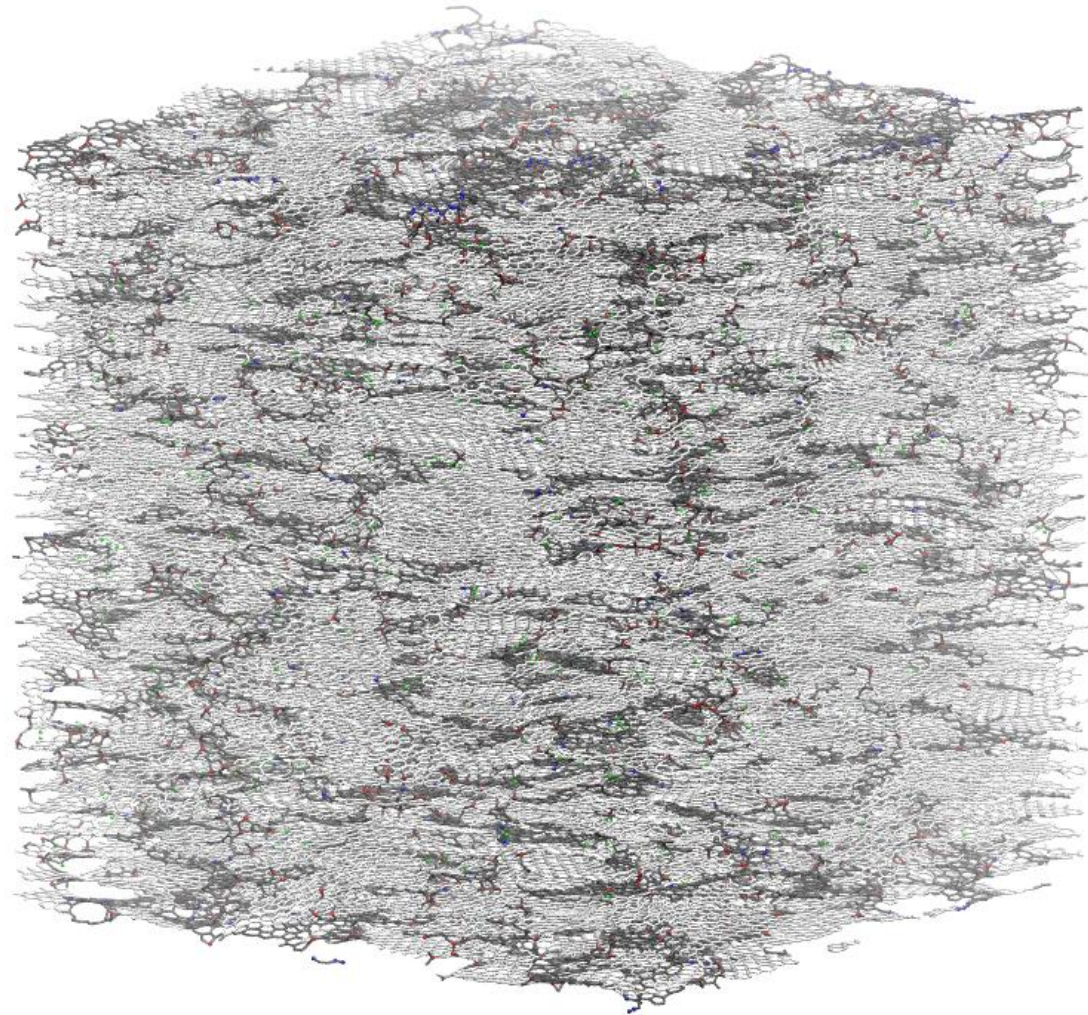
Différents types de stimulation  
électrique des tissus  
cardiaques

# Avakas : exemples d'utilisation

Source : <https://redmine.mcia.univ-bordeaux.fr/documents/24>

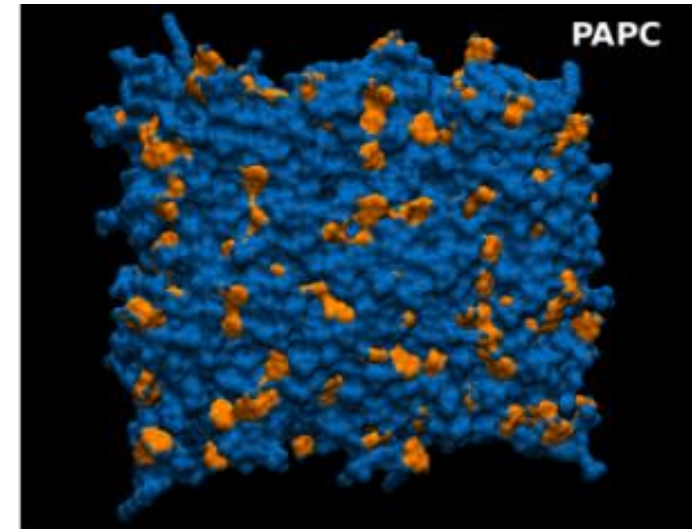
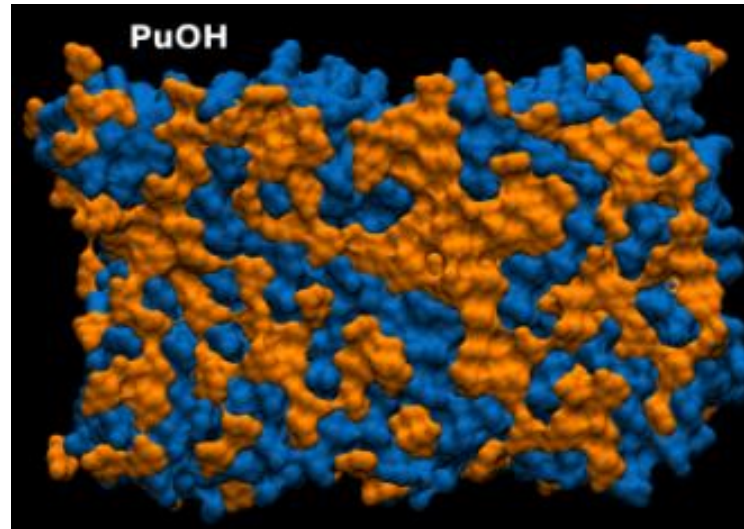
Laboratoire : LCTS

Modèle structural d'un  
pyrocarbone laminaire rugueux

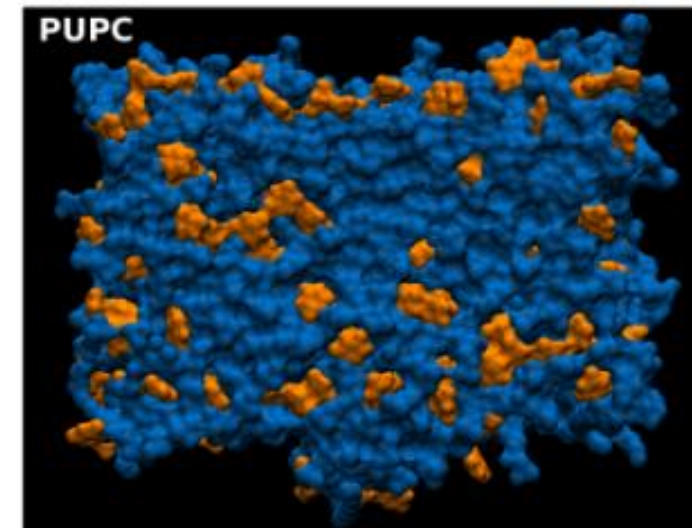
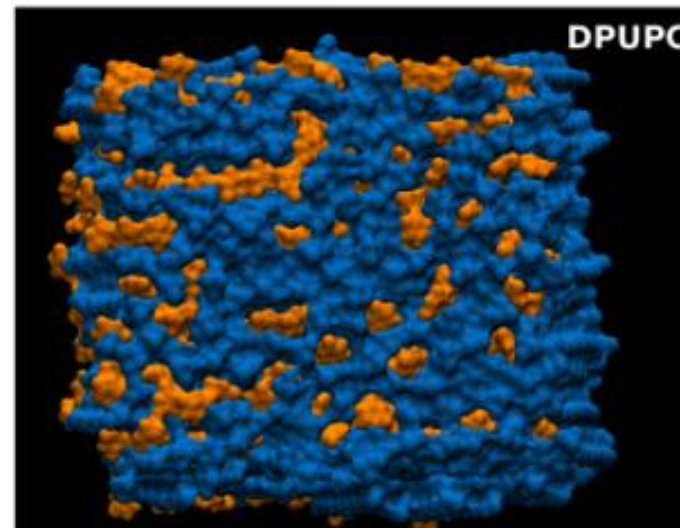


# Avakas : exemples d'utilisation

Source : <https://redmine.mcia.univ-bordeaux.fr/documents/24>



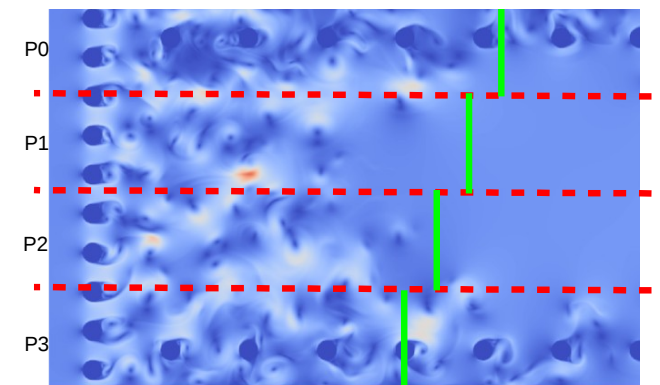
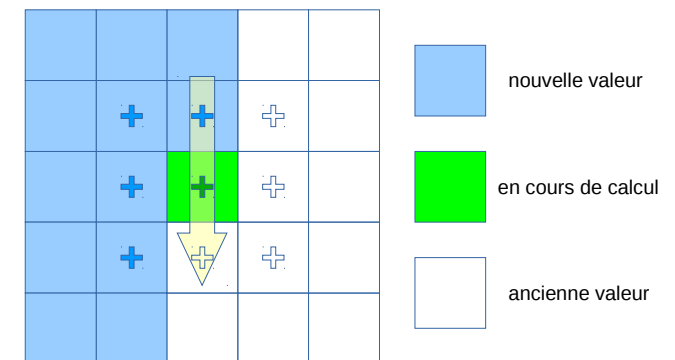
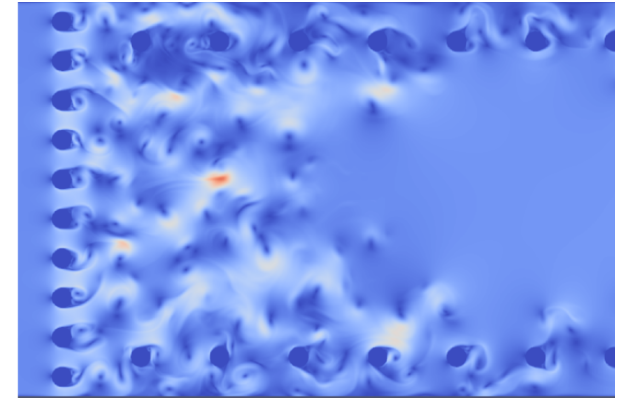
Laboratoire: CBMN



Bicouches formées avec  
des nucléolipides

# Exemple d'assistance : IMB - NS2D

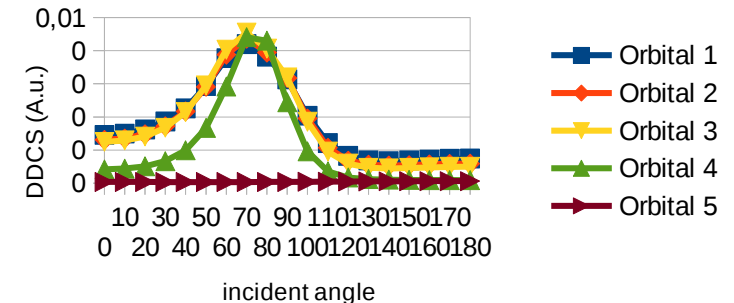
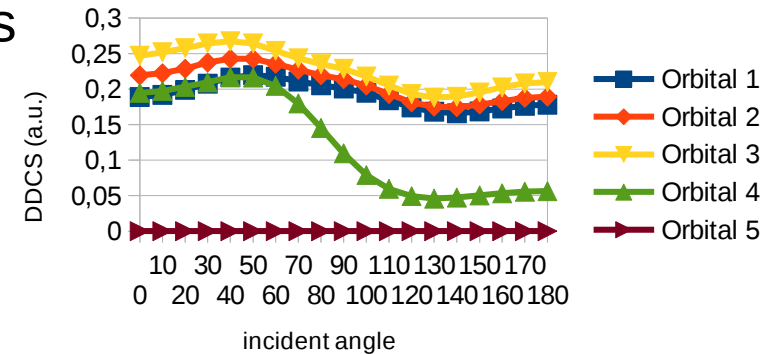
- Parallélisation d'un code Navier Stokes 2D multigrille
- Algorithme de type Gauss-Seidel : direction privilégiée
- Extraction du parallélisme dans la phase de résolution
- Le diable est dans les CL et le passage entre niveaux de grilles
- Les collègues de l'IMB ont pu appliquer la méthode pour leur code 3D



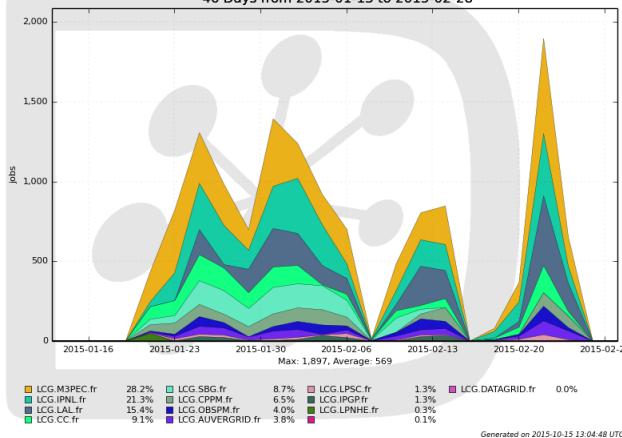
# Exemple d'assistance : CENBG - DDACS

- Code séquentiel de calcul de surfaces efficaces dans les collisions proton / atome (d'eau)
  - Alimente une base de données pour un code MC
- Optimisation du code séquentiel (x60)
- Production de 3 millions de calculs sur la grille européenne EGI (DIRAC)
- 25000 jobs grille pour 570000 heures CPU
- Les calculs sont distribués par un serveur web + BD à partir d'une machine virtuelle

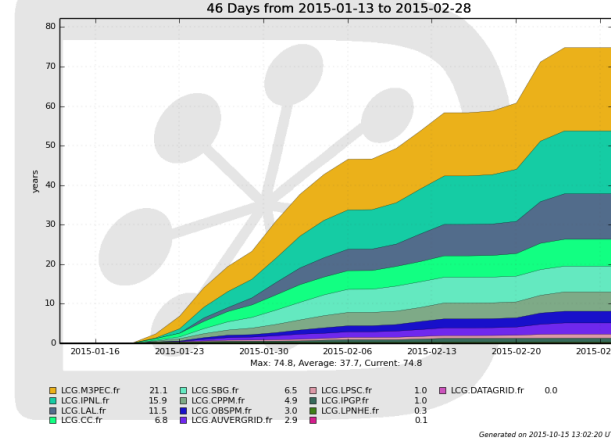
incident energy 300keV



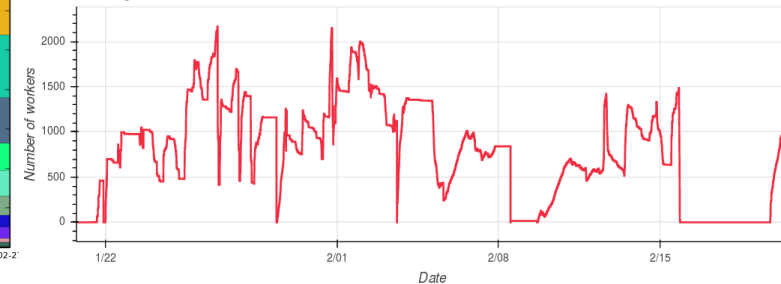
Running jobs by Site  
46 Days from 2015-01-13 to 2015-02-28



Cumulative wall time by Site  
46 Days from 2015-01-13 to 2015-02-28



Running workers



# Questions

# Difficultés en HPC

- Passage à l'échelle
  - Calculs indépendants ou parallèles
  - Mémoire nécessaire
  - Entrées – sorties
  - Durée et fréquence des calculs
  - Le changement d'ordre de grandeur est rarement indolore
- Les chercheurs ont parfois besoin de conseils ou d'assistance dans ce contexte
  - Des formations sont organisées dans le cadre du MCIA
  - L'équipe technique accompagne des chercheurs dans la mise au point et l'optimisation de leurs outils de calcul