

**Livret d'information des utilisateurs
des ressources GENCI
dans les centres nationaux**

Janvier 2014

LIVRET D'INFORMATION

Sommaire

1# Présentation du livret	3#
1.1# <i>Services aux utilisateurs</i>	3#
1.2# <i>Services internes</i>	3#
2# Destinataires du livret.....	5#
3# Description des services.....	7#
3.1# <i>Services de calcul</i>	7#
3.1.1 <i>Services de calcul</i>	7#
3.1.2 # <i>Services de pré et post-traitement</i>	8#
3.1.3# <i>Services de visualisation</i>	9#
3.1.4# <i>Services de mise à disposition de logiciels</i>	10#
3.2# <i>Services de gestion de données</i>	12#
3.2.1# <i>Services de stockage</i>	12#
3.2.2# <i>Service étude d'archivage</i>	14#
3.3# <i>Services d'aide au passage à l'échelle des applications</i>	15#
3.4# <i>Services de support opérationnel</i>	16#
3.4.1# <i>Services d'accès</i>	16#
3.4.3# <i>Services de support applicatif</i>	18#
3.4.4# <i>Services de formation</i>	19#
3.4.5# <i>Services d'information</i>	21#
4# Annexes	22#
4.1# <i>Processus de soumission des demandes d'allocation d'heures sur les moyens nationaux</i> ...	22#
4.2# <i>Liste des comités thématiques de GENCI</i>	23#
4.3# <i>Architecture des centres</i>	24#

LIVRET D'INFORMATION

1 Présentation du livret

Ce livret a pour objectif de rassembler, en un document unique, les principales informations nécessaires à un utilisateur des supercalculateurs GENCI opérés dans les 3 centres nationaux de calcul que sont ceux du Cines, de l'Idris et du TGCC.

Il décrit les services accessibles aux projets qui bénéficient des ressources GENCI via la procédure DARI sur au moins un des calculateurs suivants : Jade, Yoda, Ada, Turing ou Curie.

Il vise à en donner une vision globale et pérenne, mais il est ensuite indispensable de consulter les informations spécifiques à chaque centre et à GENCI, qui sont mises à disposition sur leurs sites web respectifs¹, et où vous trouverez les informations qui évoluent plus rapidement.

Précisons, ici, que chacun des centres nationaux a d'autres activités, qui n'entrent pas dans le périmètre de ce livret.

Chacun des centres nationaux de calcul définit son architecture, installe et opère les équipements qui le composent et fournit les services aux utilisateurs.

1.1 Services aux utilisateurs

On y trouve les services suivants :

- Services d'**accès** aux calculateurs ;
- Services de **calcul** ;
- Services de **pré ou post-traitement** ;
- Services de **gestion de données** (stockage, archivage...) ;
- Services de **support** :
 - le **support applicatif** de type assistance au développement, et aide à l'optimisation de codes ;
 - l'**assistance aux utilisateurs** recouvrant la gestion de compte utilisateur et la réponse aux demandes d'information ou au signalement d'incidents exprimés par les utilisateurs (communication relative à la gestion des comptes et à la délivrance des services : habilitations, reporting, tableaux de bord etc.).

1.2 Services internes

Les services internes ne sont pas perceptibles par les utilisateurs.

Ils sont davantage liés au fonctionnement des composantes techniques des centres.

¹ www.cines.fr, www.idris.fr, <http://www-hpc.cea.fr/fr/complexe/tgcc.htm>

LIVRET D'INFORMATION

En voici les principales catégories :

- Services d'exploitation/administration des calculateurs et de leur environnement ;
- Services réseau ;
- Services sécurité ;
- Veille prospective : évolution des architectures/prospective.

Ces services ne sont pas décrits dans cette première version du livret d'information.

LIVRET D'INFORMATION

2 Destinataires du livret

Ce livret est destiné aux utilisateurs qui bénéficient d'une allocation en heures de calcul, attribuée par GENCI dans le cadre de la procédure Dari (Demande d'attribution de ressources informatiques).

Sous la coordination de GENCI, est lancé en septembre de chaque année, un appel à projets, visant à l'attribution des ressources informatiques GENCI opérées par chacun des centres nationaux (Cines, Idris, TGCC) : cette attribution est accordée pour l'année civile suivante et est d'une durée d'un an.

Une seconde session a lieu au printemps de l'année en cours pour permettre, durant le second semestre, le démarrage de nouveaux projets ou d'octroyer une allocation complémentaire aux projets de la première session qui ont besoin de moyens supplémentaires pour mener à bien leurs travaux.

Enfin le système est complété par « les demandes au fil de l'eau » qui permettent d'ajuster le volume total attribué, et qui sont limitées à 10 % de l'allocation principale.

Les demandes de ressources se font sur le site en ligne dit du Dari accessible à l'adresse www.edari.fr.

Les demandes sont examinées :

- d'un point de vue technique et scientifique par des comités thématiques dont la liste est fournie en annexe ;
- du point de vue de l'adéquation aux supercalculateurs demandés, par les centres pour tous les projets dont la demande cumulée est supérieure à 1 million d'heures.

L'analyse scientifique et technique donne lieu à un avis d'experts qui est envoyé à chaque porteur de projet à l'issue du processus d'attribution.

L'attribution des heures relève de la responsabilité de GENCI. Les centres nationaux sont ensuite responsables de toute l'activité qui touche à l'opérationnel et à l'usage des machines par les utilisateurs.

Accès aux services

En dehors des périodes d'arrêts planifiés dans les centres, les machines sont disponibles 24 h / 24 et 7 j / 7.

Le support est accessible pendant les heures de bureaux de chaque centre (voir précisions sur les fiches de services).

Tout utilisateur accédant aux ressources informatiques hébergées dans un centre doit avoir au préalable approuvé la charte de bon usage des ressources informatiques du centre. L'accès au centre est soumis aux règles de sécurité applicables dans le centre.

Les horaires et niveaux de service décrits ici constituent une information aux utilisateurs et décrivent un fonctionnement nominal des centres ; ils ne constituent pas un engagement contractuel. Les centres font leurs meilleurs efforts pour s'y conformer voire atteindre un niveau supérieur à celui décrit ici.

LIVRET D'INFORMATION

Vous trouverez toutes les informations spécifiques à chaque centre et à GENCI sur les sites web dont voici les adresses :

Pour GENCI :

www.genci.fr

Pour le CINES :

www.cines.fr,

Pour l'IDRIS :

www.idris.fr

Pour le TGCC :

1. <http://www-hpc.cea.fr> est accessible sur Internet et permet d'accéder aux informations générales du TGCC : formulaires d'ouverture de compte, présentation des machines, logiciels disponibles...
2. <https://www-tgcc.ccc.cea.fr> est réservé aux utilisateurs disposant d'un login/motdepasse sur le TGCC et contient les informations techniques et actualités du TGCC.

LIVRET D'INFORMATION

3 Description des services

3.1 Services de calcul

3.1.1 Services de calcul

Nom du service	CALCUL
Description du service	<p>Les services de calcul permettent l'exécution des codes utilisés sur les supercalculateurs. Ils sont destinés à des applications utilisant fortement le parallélisme. Ils répondent à des besoins en puissance élevés</p> <p>Les moyens nationaux de calcul proposent une puissance cumulée de plus de 1.6 Petaflop/s.</p> <p>Les projets bénéficient d'une allocation d'heures sur un ou plusieurs calculateurs et peuvent calculer dans la limite de cette allocation. L'accès aux calculateurs est effectif après avoir rempli les formalités administratives du centre où est/sont hébergé(s) le ou les calculateurs concernés.</p> <p>L'accès au calcul se fait par un système de files d'attente, prenant en compte les caractéristiques des travaux à effectuer, les disponibilités courantes du calculateur et éventuellement une priorité propre au projet (fair share).</p> <p>Les files d'attente sont gérées par un gestionnaire de « batch », qui peut être différent d'un centre à l'autre et qui permet de réserver les ressources pendant la durée de l'exécution du travail en gérant la disponibilité des ressources et les priorités éventuelles des travaux en file d'attente. Les ressources réservées sont décomptées de l'allocation d'heures de l'utilisateur une fois l'exécution terminée. Les modalités de réservation des ressources et les ressources limites maximum autorisées (en nombre de cœurs et en durée de calcul) peuvent différer suivant les centres et les supercalculateurs. L'accès en interactif à ses supercalculateurs est possible, mais les ressources disponibles sont alors très limitées Un accès aux supercalculateurs, dans le cadre d'actions de portage et de tests, est ouvert aux utilisateurs ; à cette fin, il faut déposer une demande d'accès préparatoire sur le site du Dari (www.edari.fr).</p>
CINES	<p>Le Cines exploite :</p> <ul style="list-style-type: none">• Jade : SGI ALTIX ICE 8200, supercalculateur scalaire parallèle d'une puissance crête de 267 Tflop/s, 46 racks, 23040 cœurs répartis sur 2800 nœuds (chacun disposant de 2 processeurs Intel Quad-Core E5472 ou X5560 et 30 Go de mémoire utile soit plus de 91 To au total).• Yoda : IBM/P1600 d'une puissance crête de 6.6 Tflop/s, 256 cœurs, composé de 8 nœuds P755 intégrant chacun 32 processeurs Power7 (à 3.3GHz) disposant chacun de 128 Go de mémoire et interconnectés par un réseau haute performance Infiniband DDR. Tous les nœuds partagent le même espace disque de travail (/scratch) disposant d'un débit agrégé supérieur à 2 Go/s.
IDRIS	<p>L'Idris exploite :</p> <ul style="list-style-type: none">• Turing, pour le calcul massivement parallèle : IBM Blue Gene /Q, 839 Tflop/s, 65536 cœurs IBM Power PC A2, 65 To, réseau de type tore 5D, caractérisé par sa densité de calcul et sa faible consommation énergétique.• Ada, pour le Calcul parallèle scalaire à nœuds larges : IBM x3750-M4, Cluster SMP 336 nœuds larges, 233 Tflop/s, 10 624 cœurs Intel E5-4650, 46 To, permet d'accueillir les applications les plus exigeantes en termes de capacité mémoire. <p>Les 2 calculateurs sont fédérés par un système de fichiers partagés GPFS de 2,2 Po utiles.</p>

LIVRET D'INFORMATION

	Les ressources accessibles sur Turing et Ada sont explicitées ici : www.idris.fr/turing/turing-new-class.html et www.idris.fr/turing/turing-new-class.html ou directement sur les supercalculateurs avec la commande « news class ».
TGCC	<p>Les ressources de calcul installées au TGCC et disponibles aux appels à projets Dari représentent environ 20 % du calculateur Curie. Les 80 % restants sont dédiés aux appels à projets Prace.</p> <p>Curie pour le calcul parallèle scalaire à mémoire distribuée constitue la deuxième composante de l'infrastructure européenne de calcul intensif Prace :</p> <ul style="list-style-type: none"> • Bull B510 : Cluster SMP à nœuds fins, 1.74 Pflop/s, 80 640 cœurs Intel E5-2650, 64Go de mémoire/nœud de 16 cœurs • Bull B505 : Cluster SMP à nœuds hybrides 200 Tflop/s, 288 GPU nVIDIA M2090, 6 Go de mémoire par GPU • Bull Supernode S6010 : Cluster SMP à nœuds larges, 105 Tflop/s, 11 520 cœurs Intel X7560, (512 Go de mémoire/nœud de 128 cœurs).

3.1.2 Services de pré et post-traitement

Nom du service	PRE / POST-TRAITEMENT
Description du service	<p>Les services de pré et post-traitement font référence à l'ensemble des activités de mise en forme des données en amont et en aval des services de calcul de production. Ils concernent les problématiques de reformatage de résultats, d'extraction de données, de visualisation légère de données, de génération de maillages etc. Généralement, ils requièrent beaucoup de mémoire et/ou des entrées-sorties très intensives. Ces spécificités font que ces services de pré et post-traitement s'exécutent soit sur des machines particulières, soit sur des nœuds des machines de production. Certains logiciels ou bibliothèques (de visualisation par exemple) ne sont disponibles que sur ces machines dédiées.</p> <p>Les ressources utilisées sur ces machines particulières ne sont pas décomptées de l'allocation d'heures des utilisateurs. Les modalités d'accès aux systèmes de fichiers des machines de calcul depuis les machines dédiées de pré et post-traitement peut différer suivant les centres, une recopie manuelle des données sur un système de fichiers locaux à la machine pré-post étant parfois nécessaire.</p> <p>Tout utilisateur ayant un compte ouvert sur un supercalculateur a automatiquement accès à ces services de pré et post-traitement</p>
CINES	<p>Machine de pré/post-traitement : les moyens de pré et post-traitement du Cines (et de visualisation) sont aujourd'hui constitués de 2 serveurs Bullx S6030 dotés de 256 Go de mémoire chacun et 2 cartes Quadro FX5800. L'espace de stockage local est de 13 To. L'ensemble de ces équipements constituent la machine « Cristal ».</p>
IDRIS	<p>Machine de pré/post-traitement : Adapp : 4 nœuds dédiés de type IBM X3850 M2, quadri-processeurs Intel Westmere 8-cœurs, soit 32 cœurs et 1 To de mémoire partagée par nœud. L'espace disque de travail <i>WORKDIR</i> est commun à Ada, Adapp et Turing. Un montage NFS (en lecture uniquement) permet d'avoir la visibilité sur les données stockées sur la machine d'archive Gaya.</p> <p>La liste exhaustive des outils de visualisation ainsi que les logiciels et bibliothèques installés sur Adapp peut être trouvée à l'adresse suivante : www.idris.fr/adapp</p>
TGCC	<p>Le pré et le post-traitement peuvent être directement effectués sur les nœuds de calcul de Curie. L'utilisateur peut demander des nœuds larges s'il a besoin de beaucoup de mémoire. Il n'y a aucun transfert de données à faire. En revanche, l'utilisateur doit prendre en compte les heures nécessaires au pré et post-traitement dans sa demande d'attribution d'heures.</p>

LIVRET D'INFORMATION

3.1.3 Services de visualisation

Nom du service	VISUALISATION DISTANTE
Description du service	<p>La représentation graphique des résultats de calcul permet dans de nombreux cas une interprétation efficace de ces résultats. En réponse à ces besoins de post-traitement graphiques croissants en nombre et exigeant des ressources de calcul importantes, les centres ont enrichi leurs services de visualisation tant au niveau des ressources affectées que des outils logiciels ou du support associé.</p> <p>Les trois centres nationaux proposent des moyens de visualisation efficaces, une aide au choix des solutions logicielles présentes sur leur plate-forme et un support personnalisé à l'utilisation de ces logiciels.</p> <p>On retrouve sur chaque centre : Paraview, Visit, Ensight... La liste détaillée est disponible sur les sites web des centres.</p> <p>Suivant les centres, les services de visualisation sont opérés sur des machines spécifiques ou s'appuient sur les machines de calcul de GENCI. Dans ce dernier cas, l'allocation d'heures inclut les ressources pour la visualisation. L'utilisateur doit faire une demande d'accès spécifique au service auprès du centre.</p>
CINES	<p>Parmi les logiciels de visualisation 2D et 3D accessibles au Cines : ParaView (http://www.paraview.org), Ensight (http://www.ensight.com) , Visit (https://www.projet-plume.org/fiche/visit-visualization-tool)</p> <p>Plate-forme disponible : http://www.cines.fr/spip.php?rubrique293 la plate-forme est également disponible pour du prétraitement (calcul de maillage) Exemples de visualisations réalisées avec les machines du Cines : http://www.cines.fr/spip.php?rubrique281 Formulaire de demande à adresser au directeur du Cines : http://www.cines.fr/IMG/rtf/Formulaire_Cristal.rtf Les utilisateurs peuvent bénéficier d'un support personnalisé</p> <p>Attribution et niveaux de service L'allocation des ressources graphiques se fait par tranches de demi-journée en précisant les moyens demandés :</p> <ul style="list-style-type: none">• Logiciels (Paraview, VisIT, Ensight)• Nombre de demi-journées• Espace de stockage temporaire (en Go) <p>Le Cines propose un accès simplifié aux ressources de visualisation via un portail. Les données de la machine de calcul sont visibles depuis la plate-forme de visualisation afin d'accélérer le post-traitement.</p>
IDRIS	<p>La machine de pré/post-traitement Adapp joue aussi le rôle de serveur de visualisation. Un nombre limité de logiciels de visualisation sont installés et maintenus, parmi lesquels IDL, ParaView et VTK.</p> <p>Tous les détails sur www.idris.fr/adapp</p>
TGCC	<p>Une partie des nœuds hybrides de Curie peut être utilisée pour la visualisation distante. L'utilisateur doit en faire la demande auprès de la hotline du TGCC. Un système de réservation en ligne des ressources permet à l'utilisateur de planifier ses créneaux horaires, par tranche de demi-journée. Un déport optimisé de l'affichage assure une utilisation fluide sans nécessiter de gros débit réseau. Les modalités d'utilisation sont décrites sur le site web des utilisateurs de Curie : https://www-tgcc.ccc.cea.fr</p>

LIVRET D'INFORMATION

3.1.4 Services de mise à disposition de logiciels

Nom du service	MISE A DISPOSITION DE LOGICIELS
Description du service	<p>En plus des compilateurs et des bibliothèques MPI indispensables pour compiler et exécuter des codes parallèles, des logiciels thématiques (principalement de chimie), des bibliothèques (scientifiques ou propres aux entrées-sorties) et des outils (d'analyse de performance, de débogage, de développement et de gestion de programmes sources), sont mis à disposition des utilisateurs</p> <p>Certains sont soumis soit à autorisation soit à licence et nécessitent, dans ce cas, des droits particuliers. Ces logiciels sont généralement gérés avec la commande module qui permet entre autres de lister les différentes versions disponibles.</p> <p>La liste exhaustive des logiciels installés et maintenus par chacun des centres ainsi qu'une documentation associée décrivant les modalités de leur utilisation est disponible sur le site de chacun des centres. Lors de leur demande d'heures Dari, les utilisateurs souhaitant utiliser des logiciels spécifiques mis à disposition par les centres doivent vérifier leur disponibilité sur la machine ciblée.</p> <p>Sur demande justifiée, les utilisateurs peuvent demander l'installation de nouvelles versions ou de nouveaux logiciels aux équipes d'assistance des centres.</p> <p>Sur chacun des centres, on peut retrouver les logiciels suivants :</p> <ul style="list-style-type: none">• Débogueur (Totalview, DDT...);• Outils de profilage ;• bibliothèques mathématiques.
CINES	<p>Le Cines a acquis un certain nombre de licences de type académique pour des progiciels de mécanique des fluides et calcul de structures et de chimie/biochimie :</p> <ul style="list-style-type: none">• Abaqus : analyse unifiée, collaboration et partage de données de simulation• ABINIT : find the total energy, charge density and electronic structure of systems made of electrons and nuclei• ADF : pour comprendre et prédire la structure chimique et la réactivité selon la théorie fonctionnelle de la densité (DFT).• AMBER : Simulation en dynamique moléculaire, particulièrement sur les biomolécules.• CHARMM : Chemistry at HARvard Macromolecular Mechanics• CP2K : Dynamique moléculaire• CPMD : Dynamique moléculaire ab-initio ; DFT ondes planes• DALTON : Dynamique moléculaire• Fluent : Computational Fluid Dynamics• GAMESS : Programme général de chimie quantique ab initio• GAUSSIAN :• GROMACS, GULP, JAGUAR, LAMMPS, MATERIALS STUDIO, NAMD, NumPy, NWChem, OpenFOAM, Quantum Espresso, SIESTA, Suite Schrodinger, TurboMOLE, VASP, Crystal, ...
IDRIS	<p>L'Idris offre un large éventail de logiciels de Chimie, parmi lesquels :</p> <ul style="list-style-type: none">• CP2K : simulations atomiques et moléculaires <i>ab initio</i>• CPMD : "Car-Parrinello Molecular Dynamics". Dynamique moléculaire et structure électronique <i>ab initio</i>• Gaussian : Chimie quantique <i>ab initio</i>.• LAMMPS : Molecular dynamics code• NAMD : Parallel molecular dynamics code designed for high-performance simulation of large biomolecular systems• Quantum ESPRESSO : Integrated suite of computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale. <p>(voir www.idris.fr/su/Chimie)</p> <p>Parmi les outils de gestion de code, de débogage, de profilage et d'analyse de performance mis à disposition par l'Idris :</p> <ul style="list-style-type: none">• Débogage : addr2line (pour identifier l'origine d'un plantage), GDB (débogueur GNU), TotalView (débogueur parallèle graphique)

LIVRET D'INFORMATION

	<ul style="list-style-type: none">• Profilage parallèle : SCALASCA et TAU (analyse de performances parallèles)• Autres : SVN (Subversion) : (Gestionnaire de version de fichiers), CMake : outil de production multiplateforme comparable aux autotools,... <p>Parmi les bibliothèques mises à disposition par l'Idris :</p> <ul style="list-style-type: none">• Bibliothèques d'entrées/sorties : HDF5, NetCDF, Parallel NetCDF.• Bibliothèques scientifiques séquentielles : FGSL, GSL, MASS, BLAS, LAPACK, ARPACK, ...• Bibliothèques scientifiques séquentielles et parallèles : ESSL, MKL, ScaLAPACK, PARPACK, FFTW, MUMPS, ParMETIS, PETSc, SCOTCH, SLEPc, Hype, ... <p>(voir www.idris.fr/ada/ et www.idris.fr/turing/)</p>
TGCC	La liste des logiciels proposés par le TGCC est disponible sur : http://www-hpc.cea.fr/docs/Curie-software-documentation.html (accès public)

LIVRET D'INFORMATION

3.2 Services de gestion de données

3.2.1 Services de stockage

Nom du service	STOCKAGE DES DONNÉES DE SIMULATION
Description du service	<p>Chaque centre de calcul dispose de plusieurs espaces de stockage pour héberger les différents types de données des utilisateurs. La politique de gestion des données peut différer sur chacun des centres en raison notamment des différentes technologies utilisées. Il est impératif de prendre connaissance des pratiques propres à chacun des centres, qu'on peut trouver sur leurs sites web respectifs avant de démarrer une campagne. Cependant, on peut retrouver sur chaque centre les espaces suivants :</p> <ul style="list-style-type: none">• un espace de stockage souvent appelé « Home » : espace permanent, sauvegardé, avec des quotas en volume assez limité. Il est plutôt utilisé pour stocker les données peu volumineuses mais critiques comme : les codes sources, certains fichiers de paramétrage...• des espaces de stockage locaux aux calculateurs (scratchxx, tmpxx, workxx,...) : espaces non sauvegardés, pouvant être soumis à quotas en volume et en nombre d'inodes mais destinés à héberger les données nécessaires à l'exécution des codes ainsi que les premiers résultats de calculs. Ces espaces disposent de performances en lecture /écriture importante. Ils peuvent, suivant les centres, s'appuyer sur des technologies différentes de systèmes de fichiers : Lustre, GPFS...Les fichiers ne sont pas destinés à rester « ad vitam aeternam » sur ces espaces. Ils peuvent être supprimés par les centres soit après les campagnes Dari ou Prace, soit par des purges si les espaces arrivent à saturation ;• Des espaces de stockage globaux aux centres de calculs : espace non sauvegardés, avec des capacités de stockage en volume très importants, peuvent être soumis à quotas en nombre d'inodes et en volume. Ils s'appuient souvent sur un système de gestion hiérarchique de données (HPSS, DMF) afin d'offrir des volumes de stockage plus importants, grâce à l'utilisation de bandes magnétiques. Ils sont, en général, optimisés pour une typologie de fichiers adaptée à la technologie utilisée. Ces espaces sont destinés à héberger les résultats de calcul sur un plus long terme mais pas pour faire de l'archivage. Si les données ne sont plus rattachées à un projet Dari ou Prace, elles peuvent également être supprimées. <p>Dans tous les cas, les espaces de stockage sont limités et les utilisateurs ou les groupes d'utilisateurs qui ont besoin d'une capacité de stockage importante (> 300To/projet) ou d'une conservation des données dans la durée (> 1 an) doivent prendre contact avec les centres de calcul pour exprimer leurs besoins.</p> <p>L'estimation du volume total de données générées par le projet ainsi que les besoins en stockage sont précisés dans le cadre de la demande Dari mais les conditions de disponibilité et d'accès aux espaces de stockage sont régies par chacun des centres.</p>
CINES	<p>Les moyens de stockage de Cines :</p> <ul style="list-style-type: none">• SGI ALTIX 450 (16 processeurs Montecito), 64 Go de mémoire, sous système LINUX. Ensemble doté d'un espace disque de 500 Tera-octets (disques SATA de 750 Go et 1 To configurés en Raid 6 (8+2), destiné aux fichiers scientifiques accédés par NFS. Accès (4x10 gigabits) et (6x1 gigabit) Ethernet vers les serveurs de calcul. Un système de gestion hiérarchique des données permet d'optimiser l'utilisation de cet espace. Les fichiers sont transférés sur cartouches magnétiques au sein de deux bibliothèques automatisées, après un certain temps de non utilisation. La sécurité des données est assurée par une copie quotidienne sur support magnétique. Toutes ces copies sont conservées une semaine. Stockage SGI IS 4600 attaché au serveur de fichiers.• Robothèques IBM 3584 : Robot primaire : 7 lecteurs Jaguar (IBM 3592), deux bras accesseurs. Robot secondaire : 7 lecteurs LTO4, un seul bras accesseur,

LIVRET D'INFORMATION

	avec réseau SAN dédié aux sauvegardes et à la migration des données.
IDRIS	<p>Les moyens de stockage de l'Idris :</p> <ul style="list-style-type: none">• GAYA : 32 bi-cœurs Itanium 2 (1,67 GHz) ; 128 Go de mémoire ; cache disque de 768 To, stockage sur cassette de 4 Po (sera augmenté courant 2014). Son rôle est essentiellement de stocker des fichiers de données de grosse taille pendant la durée de vie d'un projet. <p>Allocation - conditions d'utilisation</p> <p>Tout utilisateur des ressources de calcul de l'Idris possède un compte sur Gaya. La durée de vie des fichiers sur Gaya est d'un an après leur date de création ou leur date de dernier accès.</p> <p>L'espace disque accessible aux utilisateurs est partagé en plusieurs parties suivant la machine concernée.</p> <ul style="list-style-type: none">• le <u>Home</u> disponible sur toutes les machines (espace permanent, sauvegardé quotidiennement, soumis au système de quotas en taille utilisée - quota disque - et en nombre de fichiers - quota inodes-. Espace attribué à un groupe pour la durée du projet (sa taille dépend du nombre de personnes travaillant sur le projet)• le <u>WORKDIR</u> disponible sur toutes les machines SAUF sur la machine fichier Gaya (espace permanent, non sauvegardé, soumis au système de quotas)• et le <u>TMPDIR</u> répertoire temporaire à un travail ou à une session, disponible sur toutes les machines <p>Tous les détails sur www.idris.fr/turing/turing-disques.html et www.idris.fr/ada/ada-disques.html</p>
TGCC	<p>Le TGCC dispose d'une infrastructure adaptée à Curie. Ce complexe, conçu selon une architecture centrée sur les données, offre un service de stockage hiérarchique gérant plus de 10 Po de données (un système de fichier global Lustre couplé au mécanisme de migration automatique IBM/HPSS Hierarchical Storage Manager). Pour une bonne utilisation des espaces de stockage, l'utilisateur doit prendre connaissance des informations et bonnes pratiques disponibles en ligne sur Curie via \$curie.info.</p>

LIVRET D'INFORMATION

3.2.2 Service étude d'archivage

Nom du service	ETUDE D'UN PROJET DE PRESERVATION DE DONNEES SCIENTIFIQUES
Description du service	<p>La préservation de données scientifiques sous forme numérique a pour objectif de conserver ces données et de préserver leur accessibilité et leur intelligibilité au cours du temps. En fonction de l'intérêt des données et de leur réutilisation future, les moyens mis en œuvre vont de la sauvegarde sécurisée pour du très court terme à l'archivage pérenne à très long terme.</p> <p>Un système d'archivage permet de s'affranchir des différents risques liés au temps : la détérioration des supports physiques, l'obsolescence des formats de fichiers, l'évolution ou la disparition des outils matériels et logiciels de lecture, la perte d'information sur les contenus et les codages utilisés, etc.</p> <p>Toutes les données sont concernées par l'archivage pérenne (ex : résultats de calcul, données d'observation, cahiers de laboratoires, articles, etc.) sous quelque forme que ce soit, du moment qu'elles n'ont pas vocation à être modifiées et qu'elles présentent un intérêt à moyen et/ou long termes.</p> <p>Le CINES est à ce jour le seul centre mandaté par le ministère de l'Enseignement supérieur et de la recherche à proposer ce service à l'ensemble de la communauté de l'enseignement supérieur et de la recherche.</p> <p>Les utilisateurs désirant un service d'archivage peuvent donc s'adresser directement au Cines.</p>
CINES	Allocation - conditions d'utilisation <ul style="list-style-type: none">• Chaque projet fait l'objet d'une demande spécifique documentée au directeur• Chaque projet d'archivage suit un processus cadré en quatre phases (préparatoire, test, développement et déploiement). Le Cines propose un accompagnement personnalisé aux utilisateurs dans le déroulement de ces phases.• Certains projets peuvent être subventionnés notamment par l'initiative BSN (Bibliothèque scientifique numérique) : www.bibliothequescientifiquenumerique.fr

LIVRET D'INFORMATION

3.3 Services d'aide au passage à l'échelle des applications

Nom du service	SERVICE D'AIDE AU PASSAGE A L'ECHELLE
Description du service	<p>Ce service est offert par les équipes support des centres en aide aux projets.</p> <p>Depuis 2013, une Initiative pour le Passage à l'échelle des applications (IPEA) a été lancée. Pilotée par la Maison de la Simulation (MdS) avec la contribution des centres nationaux de calcul (Cines, Idris et TGCC) et le soutien de GENCI. Cette initiative a pour objectif d'identifier des communautés/équipes de recherche scientifique française afin de leur apporter une expertise technique pour le passage à l'échelle de leurs applications. Cette expertise ne peut concerner que des codes offrant déjà un bon niveau d'extensibilité sur des machines de type Tier1² et ne se substitue pas aux services de supports applicatifs de base des centres. En pratique, les chercheurs intéressés par cette initiative doivent se connecter sur le site www.edari.fr afin d'y déposer leur demande, quelle que soit la période. Dans le cas où le chercheur a déjà déposé un projet Dari, la référence devra y être faite. La demande sera ensuite examinée par les supports des centres et la MdS, en tenant compte des avis des présidents des comités thématiques. Une réponse sera faite au demandeur sous trois mois.</p>

Ce service est rendu par les 3 centres, il n'a pas de conditions particulières.

²Typiquement au-delà de 1000 cœurs sur les machines massivement parallèles.

LIVRET D'INFORMATION

3.4 Services de support opérationnel

3.4.1 Services d'accès

Service de gestion des comptes

Nom du service	AUTHENTIFICATION ET GESTION DE COMPTE UTILISATEUR
Description du service	<p>La sécurité, tant sur le plan matériel que logiciel, a toujours été une priorité des centres. Tous les systèmes informatiques requièrent une authentification et une autorisation octroyées par un annuaire centralisé par centre.</p> <p>Pour toute ouverture de compte, les utilisateurs doivent contacter le centre. Dans chacun, l'ouverture de compte et d'un login fait l'objet d'une procédure d'attribution et soumis au respect de la charte en vigueur.</p> <p>Il n'y a pas d'ouverture automatique ou implicite de compte, suite à l'attribution d'heures via le processus Dari.</p> <p>Les utilisateurs doivent se conformer aux règles de sécurité et confidentialité de chaque centre.</p>
CINES	La demande d'ouverture de compte est à télécharger depuis le site du Cines (www.cines.fr , rubrique calcul intensif)
IDRIS	Le document suivant synthétise toutes les informations et règles relatives à la gestion et à l'utilisation d'un compte utilisateur à l'Idris : http://www.idris.fr/info/Gestion/gestion-projets-comptes-utilisateurs.html
TGCC	Au TGCC, un utilisateur peut avoir un même login pour travailler sur plusieurs projets. Les formulaires de login sont disponibles sur : http://www-hpc.cea.fr/fr/complex/tgcc-formulaires.htm

Service d'accès aux centres

Nom du service	ACCES AUX CENTRES
Description du service	<p>L'accès aux centres de calcul se fait par l'intermédiaire d'un protocole chiffré : ssh, https. Généralement, un filtrage sur @ip permet de limiter l'accès aux utilisateurs légitimes. Dans le cas des utilisateurs Dari, les adresses IP fournies doivent être localisées sur le territoire français sinon la demande sera soumise à dérogation, sur chacun des centres concernés. Les filtrages réseaux, les protocoles autorisés font partie de la politique de sécurité de chaque centre et sont donc spécifiques à chacun.</p>

Ce service est identique pour les 3 centres.

LIVRET D'INFORMATION

3.4.2 Services d'assistance aux utilisateurs

Nom du service	ASSISTANCE AUX UTILISATEURS
Description du service	<p>L'assistance est le point de contact privilégié permettant d'apporter une aide aux utilisateurs, au quotidien. Chaque centre a mis en place un accueil centralisé pour la prise en compte et le suivi des demandes utilisateurs par téléphone, e-mail ou autre moyen.</p> <p>L'assistance au quotidien comprend :</p> <ul style="list-style-type: none"> • un service de hotline ou de niveau 1, accessible par téléphone, e-mail ou portail web, pendant les heures ouvrables. Il prend en charge les questions des utilisateurs tant sur sa compréhension du contexte HPC que sur l'utilisation de chacun des environnements disponibles. Il règle les problèmes qui sont de sa compétence et escalade au niveau 2 pour les demandes plus spécialisées. • des services techniques de niveau 2 qui prennent le relais pour toute question non résolue par le niveau 1, exigeant des connaissances spécifiques. <p>Chacun des centres dispose d'un système de gestion des appels via des tickets d'incidents qui permettent d'en assurer le suivi.</p> <p>Ce service d'assistance est complété par :</p> <ul style="list-style-type: none"> • des documentations en ligne ; • des cycles de formations organisés par les centres ; • un service d'expertise et d'accompagnement personnalisé pour l'évaluation et l'amélioration des codes de calcul. <p>L'essentiel de ces informations est disponible sur le site web de chaque centre.</p>
GENCI	<p>GENCI propose un support à l'utilisation de la procédure d'allocation de ressources Dari (dépôt de dossier et échanges de suite). Le site de dépôt des dossiers www.edari.fr propose une aide en ligne et des FAQ.</p> <p>Attribution et niveaux de service</p> <p>L'équipe GENCI est disponible du lundi au vendredi de 9h00 à 18h00, par mail à assist-dari@genci.fr</p>
CINES	<p>Le point d'entrée de l'assistance aux utilisateurs des plates-formes du Cines est le service « svp » qui garantit une prise en compte rapide de la question et son suivi par la création d'un ticket, dans le respect des bonnes pratiques ITIL.</p> <p>Suivant la complexité et la spécificité du problème soulevé, svp en assure la résolution ou transmet le ticket à la liste d'experts adéquate.</p> <p>Par ailleurs le Cines met à la disposition des utilisateurs une liste FAQ (en 2014) et un certain nombre de documents techniques en ligne permettant de comprendre les modalités d'accès et de mise en œuvre des moyens de calcul intensif du centre : http://www.cines.fr/spip.php?rubrique276</p> <p>Attribution et niveaux de service</p> <p>La permanence « svp » du CINES est assurée par téléphone au 04 67 14 14 14, ou par mail : svp@cines.fr , les jours ouvrés du lundi au jeudi de 7h00 à 18h00, le vendredi de 7h00 à 17h00.</p>
IDRIS	<p>L'équipe de support aux utilisateurs (SU), composée de dix-sept ingénieurs, est l'interface privilégiée entre l'Idris et ses utilisateurs. Sa mission consiste à aider les utilisateurs à adapter leurs exigences scientifiques (codes de calcul, applications) aux moyens de calcul intensif de l'Idris, à tous les niveaux.</p>
TGCC	<p>Attribution et niveaux de service</p> <p>L'équipe SU de l'IDRIS assure une permanence par mail (assist@idris.fr) ou par téléphone au 01 69 35 85 55, du lundi au jeudi de 9h00 à 18h00 et le vendredi de 9h00 à 17h30.</p>

LIVRET D'INFORMATION

3.4.3 Services de support applicatif

Nom du service	SUPPORT APPLICATIF
Description du service	<p>L'évolution des architectures et les exigences croissantes de performances implique une adaptation des applications de façon à tirer parti de cette puissance de calcul. Cette adaptation requiert technicité, compétences expertes et une grande expérience dans tous les domaines du calcul numérique intensif. Pour cela, les centres nationaux accompagnent les utilisateurs en leur proposant des services d'aide au développement et à l'optimisation de leur application sur leurs supercalculateurs</p> <p>Le support applicatif recouvre les notions suivantes :</p> <ul style="list-style-type: none">• conseil au niveau de la méthodologie d'optimisation à suivre ;• conseil à l'utilisation des outils de débogage ou d'analyse de performance au niveau de l'optimisation séquentielle ou parallèle du code (vectorisation, optimisation des accès mémoire, optimisation des communications MPI, des entrées-sorties, choix des bibliothèques scientifiques les plus performantes, optimisation algorithmique, etc.).
CINES	<p>Le département calcul intensif du Cines met à disposition des moyens matériels et logiciels avancés et propose une assistance pour faciliter l'activité de modélisation des chercheurs</p>
IDRIS	<p>Au delà du support applicatif de base, assuré dans le cadre de l'assistance utilisateur, l'Idris propose un support avancé aux utilisateurs, pour les projets qui auraient besoin d'une aide spécifique via des services à haute valeur ajoutée au service des développeurs en proposant une aide pour exploiter efficacement les moyens de calcul disponibles (optimisation, passage à l'échelle, vectorisation, débogage, ...)</p> <p>L'évaluation des demandes de support avancé à un projet de calcul intensif se fait sur la base des aspects techniques du projet, de la capacité de l'Idris à fournir un support efficace, voire de l'avis des comités thématiques sur la pertinence scientifique du projet. Les projets sélectionnés reçoivent l'aide d'ingénieurs de l'Idris sur une période de temps déterminée (3 mois renouvelables).</p> <p>Le formulaire de demande est à cette adresse : www.idris.fr/ipea_support_avance.html</p>
TGCC	<p>Au travers de son activité de support applicatif, le TGCC assure la prise en compte de demandes de soutien pour porter ou optimiser des codes applicatifs et de l'assistance aux utilisateurs dans ces opérations. En complément, un service de type « développement applicatif » est proposé afin d'aider au développement et à l'optimisation des codes des utilisateurs.</p> <p>Pour le service de type « développement applicatif », organisé sur le mode « projet », le demandeur doit rédiger un cahier des charges. Ce document est ensuite validé et/ou complété par le centre puis donne lieu à une estimation financière et un planning de réalisation de la part du centre.</p>

LIVRET D'INFORMATION

3.4.4 Services de formation

Nom du service	FORMATION
Description du service	<p>Pour faciliter le transfert de connaissance à destination de leurs utilisateurs, des programmes de formation sont mis en place, ouverts aussi bien à la recherche académique qu'aux partenaires industriels, couvrant tous les aspects techniques relatifs au HPC. Ces formations, à fort caractère appliqué, concernent aussi bien les langages de programmation scientifique que la parallélisation (MPI, OpenMP, hybride MPI+OpenMP), l'utilisation des accélérateurs (CUDA, OpenACC, OpenCL), l'optimisation et le débogage de code, la visualisation, l'utilisation des ressources de calcul disponibles dans les centres etc.</p> <p>Le programme et les modalités d'inscription à ces formations, propres à chacun des centres, sont disponibles sur leur site web respectif.</p> <p>Par ailleurs, dans le cadre du PATC France (PRACE Advanced Training Center, coordonné par la Maison de la Simulation et dont les centres nationaux sont tous partenaires avec Inria), d'autres formations sont dispensées en anglais et ouvertes gratuitement au public européen (prise en charge financière par le projet PRACE). Le programme complet et les modalités d'inscription sont disponibles sur le site web de la Maison de la Simulation.</p> <p>Enfin, des séminaires, des journées thématiques, d'information et de débat sont régulièrement organisées par les centres pour mettre en exergue l'utilité du calcul haute performance, ses spécificités, ses problématiques et partager des retours d'expérience autour de certaines thématiques ciblées.</p> <p>Les besoins en formation sont évoqués dans le cadre de la demande Dari, mais les modalités de délivrance du service sont régies par chacun des centres.</p>
CINES	<p>Le Cines organise notamment pour ses utilisateurs :</p> <ul style="list-style-type: none"> • des journées sur l'archivage électronique pérenne (présentation du service d'archivage et de ses évolutions, retours d'expériences de services versants, échanges) • des journées jeunes chercheurs visant à résoudre des problèmes pratiques dans les domaines des sciences de l'ingénieur, en s'appuyant sur des environnements logiciels ouverts et des codes de calculs puissants, résolvant des systèmes d'équations très complexes (Navier-Stokes, Maxwell-Lorentz, Schrodinger, Poisson, Laplace...) <p>Autres exemples de formation dans le cadre du plan calcul :</p> <ul style="list-style-type: none"> • Introduction aux architectures parallèles et au calculateur Jade ; • Visualisation scientifique ; • Optimisation de codes ; • Initiation avec la parallélisation avec MPI. <p>Des formations sont également organisées en coopération avec HPC@LR (Centre de compétences en calcul haute performance) : OpenMP, ...</p> <p>Pour tout contact : training@cines.fr</p>
IDRIS	<p>L'idris propose un programme soutenu d'actions de formation, alliant cours magistraux et de nombreux TP d'applications, dispensées sous forme de 70 journées de formation par an, réparties en une vingtaine de sessions, axées principalement sur :</p> <ul style="list-style-type: none"> • les langages de programmation scientifique (C/Fortran90/Fortran2003) • le parallélisme (Intro. BG/Q, MPI, OpenMP, Hybride MPI+OpenMP) <p>Les inscriptions à ces sessions de formation sont gratuites pour le personnel CNRS et de l'Éducation nationale, payante via CNRS Formation Entreprises sinon. Le calendrier prévisionnel, le contenu détaillé des formations ainsi que les modalités d'inscription sont disponibles sur le site : https://cours.idris.fr</p> <p>L'idris organise également des séminaires, sur le thème du calcul haute performance, qui ont lieu dans ses locaux à Orsay. D'autres journées à thème sont aussi ponctuellement organisées à l'IDRIS, dans des domaines comme les logiciels de chimie par exemple. Les supports de cours et des TP sont librement téléchargeables sur www.idris.fr/data/cours</p>

LIVRET D'INFORMATION

TGCC

Le TGCC organise des formations pour répondre aux besoins de ses utilisateurs. Ces formations portent sur :

- l'utilisation du TGCC et de son environnement pour de nouveaux utilisateurs ;
- la programmation MPI, OpenMP etc. ;
- les environnements de développement : compilateurs Intel, Intel trace analyser, débogueur ;
- Les architectures GPU.

Elles peuvent aussi être organisées à la demande des représentants utilisateurs.

LIVRET D'INFORMATION

3.4.5 Services d'information

Nom du service	INFORMATION
Description du service	<p>Informar est une activité essentielle à la promotion de l'utilisation du calcul intensif et de son alignement sur les besoins de la communauté scientifique.</p> <p>Chaque projet peut consulter l'état de sa consommation d'heures de calcul ; il est prévenu par mail en cas de dépassement de son allocation ou en cas de sous consommation.</p> <p>Outre les informations relatives au processus d'attribution, le portail Dari (https://www.edari.fr) permet le suivi mensuel de la consommation des projets sur les machines des centres nationaux.</p> <p>Chaque centre informe autant que possible les utilisateurs sur son fonctionnement : en cas de problème de disponibilité des ressources, ou en cas d'arrêt planifié, des mails sont envoyés aux utilisateurs pour les informer et des informations sont disponibles sur les sites web des centres.</p> <p>Les utilisateurs sont informés, via les sites web et les listes de diffusion, des dates de la prochaine campagne et des modalités qui lui sont spécifiques.</p> <p>À l'issue du Comité d'attribution, une note est publiée sur le site GENCI et le site edari.fr, qui présente les résultats de la campagne.</p> <p>Chaque année une analyse des campagnes de l'année précédente est publiée, elle est accessible sur le site de GENCI.</p> <p>Dans chaque centre, il existe un Comité des utilisateurs qui veille à ce que tous les projets auxquels des ressources informatiques ont été attribuées puissent être menés à bien, dans les meilleures conditions. Il transmet les observations de tous les utilisateurs sur le fonctionnement du centre et dialogue avec celui-ci pour définir les évolutions souhaitables (s'applique à l'ensemble des services délivrés). Vous trouverez sur le site web de chaque centre le nom des membres du Comité des utilisateurs que vous pouvez contacter.</p>
GENCI	<p>Des modalités d'ajustement relatives à la sous-consommation de ressources pourront être appliquées sur décision du Comité d'attribution des heures de calcul sur moyens nationaux. Dans ce cadre, et en cas de sous-consommation, un message est transmis aux utilisateurs mi-mai.</p>
CINES	<p>Tout au long de l'année, l'utilisateur peut visualiser sa consommation à l'adresse : http://reser.cines.fr</p>
IDRIS	<p>Le service Extranet de l'Idris https://extranet.idris.fr permet de consulter la comptabilité détaillée des projets : machine par machine, login par login, job par job, il fournit le nombre et la durée des sessions interactives, les consommations effectives en temps et remboursements éventuels, l'allocation et le pourcentage de temps consommé. Il permet aussi de remettre à jour les données de contact (téléphone, mail...) des utilisateurs.</p>
TGCC	<p>Chaque utilisateur peut disposer des informations de consommation relatives à son projet à travers la commande <code>ccc_myproject</code>.</p>

LIVRET D'INFORMATION

4 Annexes

4.1 Processus de soumission des demandes d'allocation d'heures sur les moyens nationaux

Les heures de calcul sont allouées à des projets de recherche selon l'un des processus suivant :

- appel à projets « régulier ». Ces AAP sont ouverts en septembre pour une allocation sur l'année civile suivante, et en avril, pour une allocation de juin à décembre de l'année en cours ;
- appel à projets préparatoire. Ouvert en permanence, cet AAP permet une allocation réduite d'heures à des fins d'essai et de test. Les dossiers sont examinés au fur et à mesure de leur dépôt.

Les dossiers sont à déposer sous format électronique via le site www.edari.fr

À compter de l'ouverture d'une session, les candidats ont environ un mois pour déposer leur dossier ; les dates précises d'ouverture et de fermeture d'une session sont précisées sur le site edari.

À chaque session, une note de cadrage, qui précise le nombre d'heures qui seront allouées et les modalités de l'appel à projets, est disponible sur le site de GENCI et sur le site edari. Les dossiers déposés sont ensuite évalués scientifiquement et techniquement.

Chaque porteur de projet est ensuite informé du résultat de l'évaluation et de l'allocation qui lui est accordée, ou du rejet de son dossier.

À l'issue de ce processus, les porteurs de projets bénéficiaires d'une allocation doivent contacter le centre national de calcul hébergeant le calculateur sur lequel ils ont une allocation afin de disposer des accès aux calculateurs.

Pour toute assistance, contacter :

- au TGCC : hotline.tgcc@cea.fr tel : 01 77 57 42 42
- au CINES : edari@cines.fr tel : 04 67 14 14 14
- à l'IDRIS : e-dari@idris.fr tel : 01 69 35 85 72 et 01 69 35 85 77
- à GENCI : contact@genci.fr tel : 01 42 50 35 03

Au-delà de la procédure Dari, ces équipes sont à la disposition des utilisateurs pour leurs besoins de mesure de performance (profiling) et, plus généralement, pour de l'aide aux projets.

LIVRET D'INFORMATION

4.2 Liste des comités thématiques de GENCI

Comité thématique	Libellé	Description par mots clés
CT1	Environnement	Modélisation de l'atmosphère, de l'océan et du climat. Modélisation des atmosphères planétaires. Analyse et assimilation des données. Physico-chimie atmosphérique. Bio-géochimie océanique. Fonctionnement et évolution des écosystèmes terrestres (hors projets de biologie).
CT2-a	Ecoulements non réactifs	Dynamique des écoulements incompressibles et compressibles. Hydrodynamique. Aérodynamique stationnaire et instationnaire. Ecoulements en rotation. Transferts thermiques et convection forcée. Convection naturelle.
CT2-b	Ecoulements réactifs ou/et multiphasiques	Interfaces et écoulements polyphasiques. Changements de phase. Rhéologie complexe. Combustion turbulente. Simulation directe des écoulements réactifs. Structure de flammes. Cinétique de la combustion. Ecoulements diphasiques réactifs. Plasmas froids. Arcs électriques. Milieux hors d'équilibre.
CT3	Biologie et santé	Interaction particule/tissu et calcul par méthodes de Monte-Carlo. Nanotechnologies en thérapeutique. Imagerie médicale (acquisition et traitement). Outils d'aide à la décision médicale. Bioinformatique. Génomique. Modélisation du corps humain. Biomécanique. Dynamique des écoulements physiologiques. Modélisation/simulation des systèmes physiologiques. Epidémiologie et dynamique des populations.
CT4	Astronomie et géophysique	Cosmologie. Formation des galaxies, des étoiles et des systèmes planétaires. Dynamique des systèmes gravitationnels. Modélisation d'objets astrophysiques. Plasmas géophysiques et planétaires. Géophysique interne. Hydrologie des sols. Géo-matériaux.
CT5	Physique théorique et physique des plasmas	Electromagnétisme, physique sur réseau dont QCD. Chaos quantique, propriétés électroniques des solides, physique nucléaire, interactions ondes électromagnétiques avec la matière. Plasmas chauds, sciences de la fusion magnétique ou inertielle.
CT6	Informatique, algorithmique et mathématiques	Réseaux, middleware, algorithmes pour le parallélisme, algèbre linéaire, EDP, traitement du signal, stockage et analyses des données, visualisation.
CT7	Dynamique moléculaire appliquée à la biologie	Structure, dynamique moléculaire, interaction des macromolécules et édifices moléculaires. Chimie supramoléculaire, relations structure-fonction. Bio-polymères, interfaces, matériaux hétérogènes. Auto-assemblage, réplication. Génomique.
CT8	Chimie quantique et modélisation moléculaire	Propriétés électroniques des molécules. Structures. Réactivité. Calculs ab initio. Calculs semi-empiriques. Dynamique quantique (Car-Parinello). Calculs Monte Carlo quantique (Méthodes QMC). Etat liquide. Solvation. Diffusion moléculaire. Collisions (molécules-ions, électrons). Dynamique quantique. Evolution d'un paquet d'ondes.
CT9	Physique, chimie et propriétés des matériaux	Modèles de cohésion des matériaux adaptés à la simulation à l'échelle atomique (ab initio, liaisons fortes, potentiels empiriques). Simulation des systèmes classiques et quantiques par dynamique moléculaire et méthodes de Monte-Carlo. Thermodynamique numérique d'équilibre et de non équilibre. Simulation des cinétiques à l'échelle atomique. Echelle mésoscopique. Dynamique des populations des défauts, comportement mécanique des matériaux hétérogènes. Physique et chimie des matériaux granulaires. Simulation numérique pour le dépouillement d'études expérimentales de structure des matériaux. Propriétés électroniques des matériaux.
CT10	Nouvelles applications et applications transversales du calcul	Dont : énergie, neutronique, radioprotection. Semblable aux actions blanches de l'ANR, le CT10 permet d'accueillir les nouvelles applications et les applications multidisciplinaires. Seules seront examinées par le CT10 les applications qui ne relèvent pas des comités CT1-CT9 en raison de la nouveauté ou du caractère transversal ou multidisciplinaire du domaine ou du sujet.

LIVRET D'INFORMATION

4.3 Architecture des centres

Architecture de l'Ildris

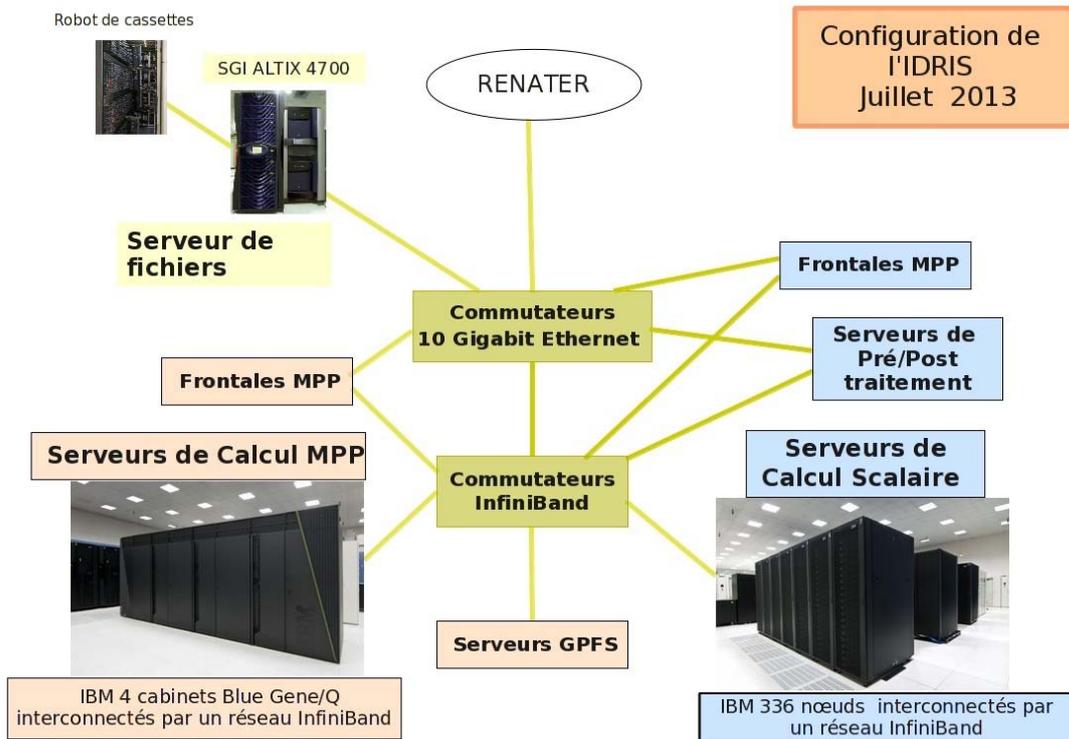
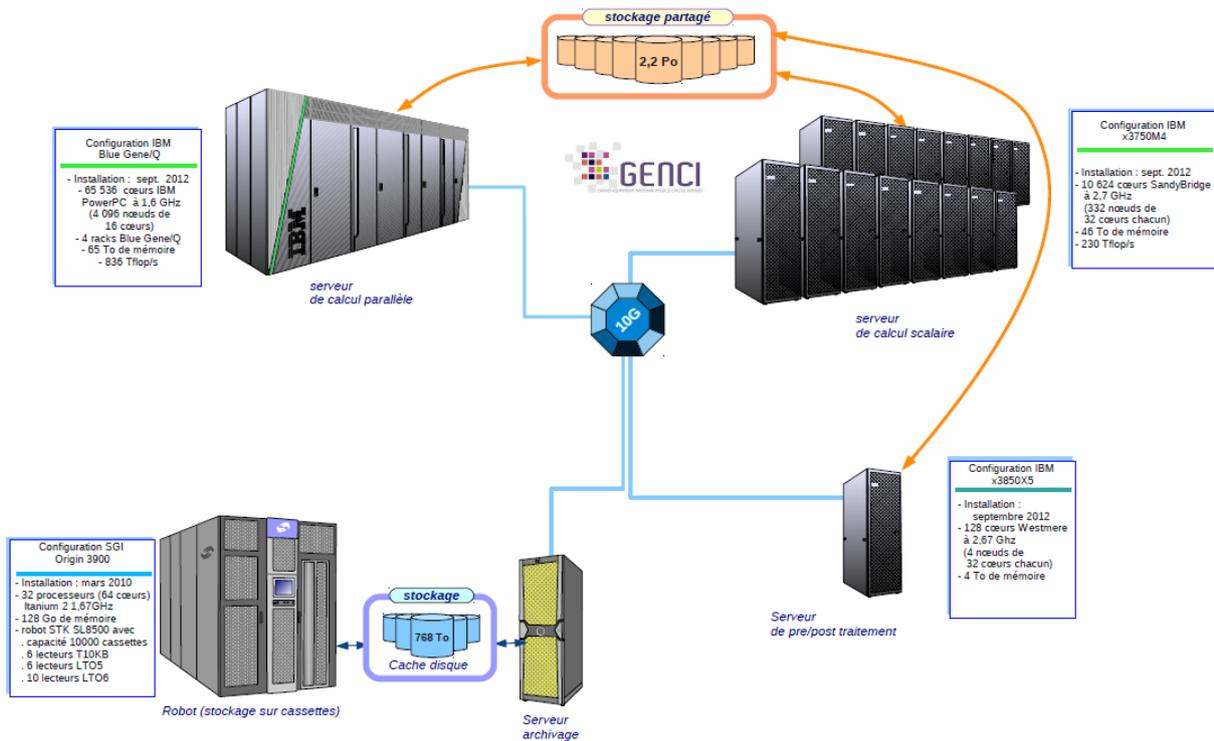
Le parc informatique des machines exploitées par l'Ildris, propriété de GENCI, est constitué de deux supercalculateurs d'architecture complémentaire installés fin 2012, l'un de type massivement parallèle (Turing) et l'autre à nœuds larges de 32 cœurs partageant une capacité mémoire importante (Ada). Ces deux calculateurs sont fédérés par un système de fichiers partagé GPFS de 2,2 Po à 50 Go/s de bande passante.

Turing, machine IBM Blue Gene/Q	<ul style="list-style-type: none">• 4 cabinets de 4 096 processeurs de chacun 16 cœurs, soit en tout 65 536 cœurs• 1 Go de mémoire par cœur, soit environ 65 To de mémoire globale• Puissance crête cumulée de 839 Tflop/s• Classements en novembre 2012 : 31^e au Top 500, 20^e au Green 500, 6^e au Graph 500• Nommé Turing en l'honneur d'Alan Turing (1912-1954)
Ada, machine IBM x3750	<ul style="list-style-type: none">• 332 nœuds de 4 processeurs Intel Sandy Bridge octo-cœurs, soit 32 cœurs par nœud pour une configuration totale de 10 624 cœurs• 304 nœuds à 128 Go de mémoire et 28 nœuds à 256 Go, soit environ 46 To de mémoire totale• Puissance crête cumulée de 230 Tflop/s• Classement en novembre 2012 : 123^e au Top 500• Nommé Ada en l'honneur d'Ada Lovelace (1815-1852)
Serveurs de service	<p>Aux supercalculateurs, sont associées diverses machines de service, dont en particulier un serveur de pré et post-traitements et une machine d'archives :</p> <ul style="list-style-type: none">• Machine de pré et post-traitements IBM x3850 de 4 nœuds, avec chacun 32 cœurs Intel Westmere et 1 To de mémoire• Machine d'archives SGI Altix 4700 de 64 cœurs, avec un potentiel de 15 petaoctets de stockage sur cartouches magnétiques, disponibles par l'intermédiaire d'un robot automatisé.

LIVRET D'INFORMATION

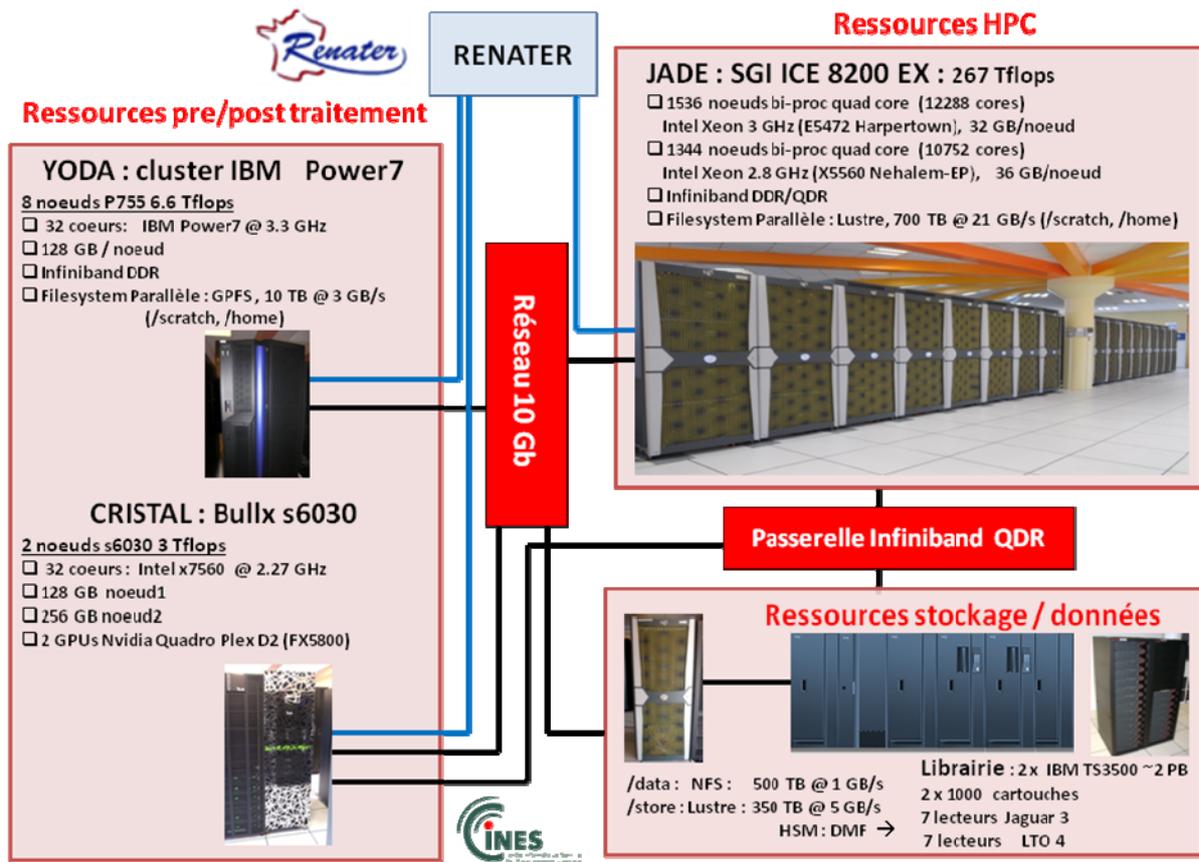


CNRS/IDRIS Infrastructure informatique – Octobre 2013



LIVRET D'INFORMATION

Architecture du Cines



LIVRET D'INFORMATION

Architecture du TGCC

