

## Réunion C4 du 12/11/2015

La réunion s'est déroulée en 2 parties, une première réunion le matin entre le C4 et le CINES, une deuxième l'après-midi en présence de GENCI.

### Réunion C4 / CINES

- Membres du C4 présents : Présidente du C4 (CT5) : Virginie Grandgirard
- CT1 : Sébastien Theetten
- CT2a/CT2b : Florent Duchaine
- CT4 : Laure Combe
- CT7 : Jérôme Hénin
- CT8/CT9 : Sébastien Le Roux

Membres du CINES présents :

- Gérard Gil (Administrateur système OCCIGEN)
- Olivier Rouchon (Responsable Département Calcul Intensif)
- Francis Daumas (Directeur du CINES)

Olivier Rouchon (OR) rappelle l'organisation du Département de Calcul Intensif qui est composé d'une vingtaine de personnes (4-5 personnes pour l'administration système, 8-9 personnes pour l'assistance aux utilisateurs, [svp@cines.fr](mailto:svp@cines.fr), 3 personnes pour la maintenance des outils de demande DARI et PRACE, outils communs à tous les centres)

Concernant l'arrivée de la nouvelle machine OCCIGEN mise en opérationnel en janvier 2015, l'inauguration a dû être reportée suite à des modifications d'agendas du ministère. La date d'une inauguration officielle n'est pour le moment pas fixée. Parallèlement, une réunion de restitution des Grands Défis (simulations qui ont eu lieu durant la Vérification de Service Régulier de la machine) sera aussi prévue.

Francis Daumas (FD) se charge de faire le point sur ce qu'il s'est passé au CINES depuis le dernier C4 :

\* **Les statuts du CINES** ont évolué (voir site web). En plus des missions de calcul scientifique et d'archivage, l'hébergement devient une des missions du CINES (*e.g.* hébergement du méso-centre Languedoc-Roussillon HPC@LR). A noter également la mise en place prochaine d'un comité d'orientation stratégique.

\* **Le calculateur JADE** (remplacé par OCCIGEN) a quitté le CINES, racheté par des américains. Les données ont été proprement effacées par des spécialistes avec validation du RSSI (Responsable de Sécurité des Systèmes d'Information).

\* **Le calculateur OCCIGEN (OCcitanie CINES GENCI) :**

- Les premières baies d'OCCIGEN sont arrivées en septembre 2014 et la machine a été mise en production restreinte en décembre 2014 pour les grands défis.
- Décembre 2014 à Janvier 2015 : Grand défi et Vérification du Service Régulier. Calendrier très serré mais réalisation des Grands Défis et mise en service opérationnel auprès de tous les utilisateurs d'OCCIGEN en janvier 2016.

*Remarque C4 (RC4) :* Les retours utilisateurs sur ces Grands Défis semblent d'ailleurs très positifs (CT1 et CT2 en particulier). Par contre l'appel à projets pour les Grands Défis apparaît peu clair, quels projets, pourquoi, comment ... ?

*Réponse CINES :* Parmi les Grand Défis acceptés, se trouvaient, entre autre, l'environnement, la climatologie, la dynamique moléculaire et l'énergétique.

Concernant les modalités de choix, le CINES a son mot à dire mais c'est GENCI qui sélectionne. GENCI souhaitait la présence d'industriels Les projets du Grand Défi devaient correspondre à l'objectif de "stresser" la machine et d'être rapidement prêts pour démarrer le Grand Défi. Les candidats potentiels ont été contacté directement par GENCI avec comme contraintes principales d'avoir des applications massivement parallèles et prêtes à tourner.

\* **Le 'SCRATCH'** a été considérablement augmenté (5 Po) avec l'arrivée d'OCCIGEN, le 'STORE' également (2 Po) ainsi que la partie stockage robotique.

*Question CINES (FD) :* Reste-t-il encore des besoins à faire remonter de la part des utilisateurs?

A partir de la machine de calcul OCCIGEN, il y a maintenant des accès très rapides sur l'espace de travail /scratch (120Go/s) et /store (50Go/s). Cela permet une très grande efficacité dans les échanges de données entre /store et /scratch. Auparavant les utilisateurs se plaignaient de lenteur entre les 2 espaces /scratch et /store. Ils ont donc pris la mauvaise habitude de laisser leur données sur /scratch. Cela conduit à deux conséquences négatives : une perte en efficacité/performance du système de fichier Lustre sur /scratch et un risque de perte des données (/scratch n'est pas sauvegardé !).

**Rappel aux utilisateurs :** Rapatrier les résultats des calculs vers /store et faire régulièrement le ménage sur /scratch.

**Remarque générale CINES :** Si les utilisateurs rencontrent des problèmes quels qu'ils soient, même mineurs, il faut signaler à svp@cines.fr. Un problème anodin peut aider le CINES par recoupement de toutes les informations.

**RC4 (ST) :** Quel est le statut sur les dysfonctionnements que rencontre actuellement le scratch (Cf. mail du 9 novembre envoyé à tous les utilisateurs) ?

**CINES (GG) :** Réunion très récente entre le CINES/GENCI/BULL pour identifier et corriger le problème (corruption de données, pour le moment la source de la corruption n'a pas été identifiée).

\* **La sécurité :** Depuis le 6 novembre le CINES est officiellement une ZRR (Zone à Régime Restrictif). De ce fait, la création de logins devrait être soumise à accord du fonctionnaire sécurité défense (FSD) comme c'est déjà le cas à l'IDRIS. Pour les projets qui vont démarrer en janvier 2016, la procédure n'est pour le moment pas figée. Pour les nouveaux logins, il serait nécessaire de remplir un formulaire plus contraignant que l'existant et qui serait à valider par le FSD. Pour cela, le CINES souhaiterait pouvoir utiliser l'application du CNRS pour accélérer la procédure (discussions en cours). Pour les logins existants, le CINES essaye de reproduire la procédure mise en place à l'IDRIS de récupération des anciens logins. A noter que la procédure de validation par le FSD est valable pour une période de 5 ans, les comptes eux même étant à renouveler chaque année au CINES.

**Pour information :** Depuis le C4 une réunion a eu lieu au Secrétariat Général de la Défense et de la Sécurité Nationale qui doit déboucher sur des instructions données aux centres de considérer les utilisateurs comme des « visiteurs » de la ZRR. Pour le CINES cela signifierait que les renouvellements et les ouvertures de login ne seraient pas systématiquement remontés au HFSD, mais contrôlés en local par le FSD et le Directeur du CINES. Seuls seraient remontés au HFSD des cas particuliers qui poseraient questions.

**RC4 (VG) :** Serait-il possible de changer la procédure annuelle (fastidieuse) de renouvellement de login ? Plusieurs utilisateurs se sont plaints de la lourdeur de cette procédure. Une solution possible serait de faire remplir un unique document par projet, où seraient renseignés les comptes à conserver et ceux à clôturer. Seuls les nouveaux comptes nécessiteraient une procédure particulière.

**CINES (FD) :** Nous allons prendre cette proposition en considération, notre contrainte étant de pouvoir conserver un état des logins actifs/inactifs.

Le HFSD demande de mettre en place une authentification « forte » avec par exemple utilisation d'une clef physique (USB ou autre, ex : vérification par SMS type 3D secure), ce sont les avis de l'ANSSI, et les discussions sont en cours.

**[ACTION] :** Diffuser à tous les utilisateurs que les demandes d'ouverture de comptes et peut être les demandes de renouvellement de logins (si impossibilité de validation automatique des logins existants par le FSD) pourront prendre jusqu'à 2 mois. Anticiper dès maintenant en particulier pour utilisateurs hors Communauté Européenne !

**Remarque :** Ceci ne sera pas nécessaire si les instructions du SGDSN sont opérationnelles.

Le CINES rappelle qu'il est formellement interdit pour des raisons évidentes de sécurité de partager les logins. En cas de partage avéré, le CINES se voit obliger d'interrompre les accès pour les membres du projet concerné. Le CINES a malheureusement dû être amené à ces mesures suite à des utilisations détournées de logins.

\* **Archivage :** FD insiste sur le problème de l'archivage pérenne des sorties de simulations. Peu d'utilisateurs se sentent concernés mais il existe un risque à moyen terme de perte de données.

\* **Questions et remarques diverses suite aux retours utilisateurs :**

- **Mise à jour de l'environnement système :**

*RC4* : Suite à la mise à jour de l'environnement système des modules d'OCCIGEN en date du 1er octobre 2015, de nombreux utilisateurs (CT1 en particulier) ont eu beaucoup de difficultés à reproduire les expériences numériques antérieures et à revenir à un environnement de calcul identique. Des utilisateurs ont notamment signalé des problèmes de portabilité de leur code sur Occigen du fait des compilateurs intel v14 et surtout v15.

Le C4 insiste sur le fait que malgré les mises à jour et l'évolution des outils, il faut maintenir la possibilité de récupérer un environnement de travail antérieur. Le C4 demande au CINES que les utilisateurs puissent toujours avoir accès aux anciennes versions des modules.

*CINES(OR)* : Il existe plusieurs facteurs justifiant ces mises à jour :

- Résoudre des bugs connus,
- Suivre des mises à jour de bibliothèques imposées par le constructeur,
- Facilité de maintenance : il est compliqué de maintenir X versions différentes d'un même compilateur (pas forcément à cause du compilateur lui-même, mais de tout l'écosystème de bibliothèques qui doivent être compatibles entre elles).

De plus, les anciennes versions sont « cachées » aux utilisateurs mais sont toujours disponibles, si un utilisateur en fait la demande.

*RC4* : Le C4 souligne l'importance de proposer d'avantage d'information aux utilisateurs lors d'une mise à jour, sur l'évolution, la nature du/des bugs corrigés et ré-insiste sur l'importance de laisser visible *a minima* la version antérieure.

*CINES(FD)* : Le CINES entend le problème des utilisateurs et propose de mettre en place une période de transition lors d'un changement de version.

*CINES(OR)* : Mise en place d'arrêts planifiés trimestriels si nécessaires pour les maintenances système, sécurité en fonction des avis des constructeurs et éditeurs de logiciels et éventuellement mise à jour des modules et environnement.

Remarque : La possibilité de profiter de l'état vide de la machine après ces arrêts reste ouverte comme c'était déjà le cas sur Jade. Les demandes dépassant le cadre standard d'utilisation de la machine (120 heures et 700 nœuds) peuvent être évaluées individuellement et peuvent être repoussées après une opération de maintenance. Il n'est pas certain que cette information apparaisse sur le site web comme c'était le cas pour Jade. Le CINES va y remédier en mettant à jour le site.

#### - **Documentation** :

*RC4* : La documentation d'OCCIGEN n'est pas assez complète sur certains points et uniquement en français, pas d'anglais disponible.

*CINES(OR)* : le site web du CINES a changé en même temps que la mise en place d'OCCIGEN, confusion possible pour retrouver la doc sur le site.

[*ACTION*] : Une version anglaise de la documentation à rédiger rapidement.

#### - **SLURM** :

*RC4* : Le C4 s'étonne de ne plus voir apparaître de queues/classes avec SLURM.

*CINES(GG)* : Même si la notion de classe ou queue comme dans PBS sur Jade n'apparaît plus directement sur Occigen, cela est toujours pris en compte par SLURM. Le CINES a fait le choix depuis plus de 10 ans de « masquer » cette notion aux utilisateurs car il estime que cela reste du niveau de la gestion interne de la machine et que ce n'est pas à l'utilisateur de se préoccuper de cela. Nous avons pour objectif de répondre au mieux à la demande des utilisateurs. Pour y arriver nous mettons en œuvre des mécanismes de calcul de pondération à plusieurs dimensions utilisant le « fair-share » (historique des consommations récentes), le « backfilling » (anticipation du démarrage de travaux si aucune perturbation de l'heure de démarrage des travaux antérieurs) et de pondération des travaux selon le nombre de cœurs, la durée des travaux et le nombre d'heure des projets, pour toutes les demandes soient satisfaites au mieux : limitation des temps d'attente en tenant compte de tous les profils de travaux et de projets.

*Remarque CINES (OR)* : Pour pouvoir lancer des jobs avec un wall time supérieur à 24h, il faut faire une demande auprès du CINES qui sera examinée en fonction notamment des capacités de scalabilité et de checkpoints (stop/restart) du code.

#### - **Gestion d'un espace de partage pour les projets** :

*RC4* : Les projets sont des groupes informatiques qui sont strictement compartimentés. Pour les utilisateurs travaillant dans 2 projets : impossibilité d'avoir accès même en lecture d'un groupe à l'autre. Impossibilité d'utiliser les ACL car groupe info fermés.

*CINES (GG)* : Les membres d'un même projet peuvent échanger des données via des dossiers SHARED. Le CINES mène une réflexion plus large sur l'échange de données entre personnes de divers projets.

#### - Assistance SVP :

Le nombre de demandes d'assistance [svp@cines.fr](mailto:svp@cines.fr) fluctue beaucoup dans l'année : entre 50 et 250 tickets par mois ; à distinguer entre problèmes systèmes (ex : système lustre de scratch en dysfonctionnement) et assistance applicative aux utilisateurs (ex : problème de compilation). Le CINES a mis en place une procédure qui permet une première réponse aux utilisateurs en moins de 12h (sauf week-end et jours fériés).

#### - Le renouvellement des présidents des comités thématiques d'évaluation va se faire. Appel à candidature !

Fonctionnement des CT d'évaluation : les présidents des CT nomment les membres, ...

#### - Clefs de chiffrement :

*RC4* : Pourquoi les clefs de chiffrement ne sont-elles plus autorisées au CINES?

*CINES* : Le CINES considère que les postes de travail des utilisateurs peuvent être compromis. De ce fait, la mesure de sécurité est de ne pas autoriser les clés de chiffrement et d'imposer la saisie d'un mot de passe. La sécurisation va peut-être aller plus loin avec l'utilisation de token, clé USD, validation SMS ou autre.

## Réunion C4 / CINES / GENCI

Représentants GENCI:

- Jean-Philippe Proux
- Arnaud Valois

Jean-Philippe Proux nous a présenté les actualités PRACE et GENCI, un point sur l'utilisation des moyens de calculs nationaux. Jean-Philippe Proux a insisté sur l'intérêt pour GENCI de pouvoir échanger le plus possible avec les utilisateurs et donc sur l'importance des réunions de comité utilisateurs.

#### \*Actualités PRACE/GENCI :

- Fin de PRACE (2010-2015)
- Non participation de la France aux *calls* 11 et 12 car le quota de la France pour PRACE est atteint avec (2Milliards d'heures / 100 Millions d'euros d'investissements).
  - ➔ Disponibilités exceptionnelles sur Curie Nœuds Fins (CNF) en 2016
- **PRACE 2** : Finalisation du modèle d'appel à projet vers mars 2016, premier call (13) PRACE 2 le 13 septembre 2016

#### \*Utilisation des moyens de calculs nationaux :

- **DARI 2016** : Particularité sur Curie Nœuds Fins (due à l'absence de calls PRACE\* 11 et 12 sur Curie)
- **3 sessions DARI pour CNF en 2016** :
  - ✓ Session 1: 200 Mh (x3 vs 2015)
  - ✓ Session 2: 10 Mh (standard)
  - ✓ Session « **spéciale** »: 100 Mh attribuées sur avril-août selon modalités de PRACE. Ouverture campagne mi-décembre après attribution S1

#### - Bilan des demandes de la première session 2016 du DARI :

CINES (OCCIGEN) :	186 %	(456 682 255 h demandées)
IDRIS (Ada) :	221 %	(114 666 708 h demandées)
IDRIS (Turing) :	122 %	(648 297 000 h demandées)
TGCC (Curie NF) :	192 %	(380 463 476 h demandées)

Total des demandes : - 1600 Mh (+35 % / 1ere session 2015)  
- 541 dossiers validés (+ 3%)

#### - Calendrier 1ère session :

- 4 décembre 2015 : Comité d'évaluation
- 11 décembre 2015 : Comité d'attribution
- 1 janvier 2016 : Attribution des heures

- **Trois mesures mises en place pour optimiser la charge des machines :**

1) Assouplissement des attributions au fil de l'eau :

- Suppression du plafond de 10 %

- Si la demande est supérieure aux heures proposées (nouvelles informations qui seront disponibles pour les utilisateurs après le 11 décembre) par le CT arbitrage par le président du CT et le centre de calcul.

2) Chevauchement des sessions année X-1 et année X pendant le mois de janvier de l'année X, pour les projets non renouvelés (pour le moment en 2016, à l'étude en 2017 pour tous les projets).

3) Heures bonus (en cours d'expérimentation à l'IDRIS) :

- Priorité nulle, heures non décomptées de l'allocation DARI

- File spéciale, passage automatique dans périodes de faible charge machine.

- Utilisable si conso régulière > 20 % DARI

- Maximum de 20 % de la DARI2016

- 512 coeurs sur Ada et 512 coeurs sur Turing

**\*Informations GENCI :**

**Forum des utilisateurs :**

GENCI organisera un [premier forum des utilisateurs, le 19 janvier 2016](#) à l'Institut de Physique du Globe (Paris 5ème). L'objectif de ce forum est réellement de donner la parole à tous les utilisateurs des centres de calcul nationaux. Ce forum devrait réunir environ 130 personnes dont GENCI, le personnel des différents centres, les représentants des COMUT, etc... L'ensemble des utilisateurs pourront suivre l'intégralité de la journée grâce à une [Webdiffusion en direct avec possibilité d'interaction](#) (chat en direct ...).

La journée devrait s'organiser comme suit :

- Présentation de GENCI, des centres de calcul et de l'ANSSI (la sécurité, quoi, pourquoi, comment ?)

- Tables rondes animées par les présidents des CU,

- Présentations flash de plusieurs scientifiques dans le style « Mon projet en 180s ».

**Résultats du groupe de travail Gaussian :**

Installation de Gaussian sur Occigen (janvier 2016). Gaussian est peu parallélisé et donc peu adapté pour les machines massivement parallèles. Impact sur la charge de la machine ? Le CINES va autoriser le farming, c'est-à-dire rassembler plusieurs jobs par nœud pour ne pas gaspiller les processeurs au sein du nœud. Ce n'est pas idéal pour l'utilisation de l'interconnexion de la machine, mais il faut que la communauté Gaussian puisse travailler. En parallèle, une réflexion est en cours dans la communauté chimie. Les chimistes doivent réfléchir au bien-fondé de l'utilisation de Gaussian par rapport à d'autres logiciels disponibles, en tout cas pour les fonctions les plus usuelles, sachant que Gaussian dispose aussi de fonctionnalités plus rares pour lesquelles il est difficilement remplaçable.

*CINES (FD) : imposer/recommander une formation minimale à ce logiciel, car si mauvais paramétrage, performances catastrophiques !*

**Cellule de veille techno :**

Le but est de préparer et d'anticiper l'arrivée des nouvelles architectures HPC. Ce projet comprend la mise à disposition de la communauté scientifique de petits systèmes de test pour évaluer ces architectures.

IDRIS :

<http://openpowerfoundation.org/blogs/power8-the-first-openpower-processor/>

CINES :

Intel KNL interconnection BXI

<https://www.cines.fr/le-futur-du-hpc-se-prepare-au-cines/>

**Divers :**

- *[ACTION GENCI]* : Mise en avant d'un résultat scientifique chaque mois sur le site GENCI (1 an pour l'ensemble des CT) proposé par le président du CT.

- Jean-Christophe Penalva rappelle l'existence de la machine Cristal utilisable pour des travaux de pre- et post-traitement ainsi que pour la visualisation (Ensign, Paraview, VisIt, d'autres logiciels peuvent être installés à la demande). Il n'y a pas besoin de demande DARI pour accéder à la machine. Cristal est connectée avec /scratch et

/home d'Occigen.

La prochaine réunion du C4 est prévue au printemps 2016. L'objectif est d'augmenter la fréquence des réunions (3 réunions / an). Pour rappel ces réunions sont l'occasion de discussions directes avec le CINES et GENCI. N'hésitez pas à nous faire remonter toutes vos remarques, questions ou problèmes.