

Compte-rendu de la réunion C4 du 19 Décembre 2017 en visioconférence

<u>Participants C4 :</u> <ul style="list-style-type: none">- Sébastien Theetten (CT1)- Julien Bodart (CT2A)- Florent Duchaine (CT2B)- Alain Miniussi (CT4)- Virginie Grandgirard (CT5)- Rachel Nuter (CT5)- Michel Kern (CT6)- Nicolas Floquet (CT7) : Excusé- Sébastien Le Roux (CT8)- Evelyne Lampin (CT9) : Excusée	<u>Participants CINES :</u> <ul style="list-style-type: none">- Naima Aloui (DCI support)- Jérôme Chapelle (DS2I)- Mathieu Cloirec (DCI support)- Boris Dinstrans (directeur du CINES)- Romain Couturat (DCI admin)- Philippe Prat (DCI eDARI)- Olivier Rouchon (responsable DCI) <u>Participants GENCI :</u> <ul style="list-style-type: none">- Arnaud Valois- Jean-Philippe Proux- Gabriel Hautreux
---	---

Ordre du jour :

- Point sur les retours des utilisateurs CT7, CT8 et CT9
- Visualisation 3D
- Stockage
- Annulation de l'arrêt machine initialement prévu en Décembre, reportée en Janvier
- Workshop chimie au 1^{er} semestre 2018
- Retour sur les grands défis

Comme prévu, cette réunion a eu lieu en visioconférence. Les membres du C4 ont discuté entre eux de 9h30 à 10h30 pour faire un point sur les retours utilisateurs à aborder. La réunion C4-CINES-GENCI a eu lieu de 10h30 à 12h45.

1. Questions-réponses C4 à CINES

1.1 Point sur les difficultés rencontrées par certains codes des comités CT7, CT8, CT9

Suite à la dernière réunion du C4, plusieurs utilisateurs (principalement des comités thématiques CT7, CT8 et CT9) nous avait fait remonter leur difficulté à utiliser la machine Occigen. Comme prévu les représentants C4 de ces 3 comités ont envoyé un questionnaire à l'ensemble des utilisateurs de ces comités pour répertorier au mieux les problèmes rencontrés et les solutions apportées ou non. Le C4 tient à remercier tous les utilisateurs pour leurs retours détaillés. Ces retours ont permis de mettre en évidence des difficultés sur 6 codes : CPMD, CP2K, GROMACS, NAMD, LAMMPS et ADF. Une synthèse a été envoyée le 11 Décembre au CINES. Les équipes CINES ont de nouveau analysé les tickets support associés et nous font un point en séance sur l'ensemble de ces codes.

CINES :

- 1) CPMD : Pour la version v3 un utilisateur avait un problème de redémarrage. Problème résolu en forçant la sauvegarde du fichier de restart dans le SCRATCH.
La version v4 est en phase de recompilation Une journée de travail est programmée en janvier au CINES avec un spécialiste de CPMD pour essayer de résoudre les problèmes.

- 2) CP2K : La version v3 pose un problème pour un utilisateur. Il s'agit visiblement d'un problème lié à la librairie MKL qui semble être résolu si l'on utilise le compilateur intel-18.0. La compilation de la version v4 pose encore problème. Des essais de compilation avec différents compilateurs sont en cours. Ces problèmes avec le compilateur intel semblent avoir été rencontrés sur d'autres centres de calcul (cf. <http://www.prace-ri.eu/IMG/pdf/wp152.pdf> - pages 2 à 4). Certains utilisateurs sont repassés sur la
- 3) GROMACS : problèmes résolus.
- 4) NAMD : Version v2.11 OK par contre, dysfonctionnement intrinsèque pour l'utilisation d'une option pour la version v2.12 relevé par un utilisateur.
- 5) LAMMPS : ?
- 6) ADF : utiliser plutôt la version 2017 que celle 2016.

1.2 Amélioration du support aux codes

Pour améliorer l'efficacité du support face aux codes rencontrant des difficultés, le CINES a fait un point sur le nombre de tickets reçus par code (cf Figure 1). Le CINES envisage d'identifier, pour les 6 codes ayant le plus de tickets (ADF, CP2K, Gromacs, Namd, VASP et OpenFoam), une personne du support, chargée de l'assistance de niveau 3. Sachant qu'il y a actuellement 7 ETP (équivalent temps plein) au support, ceci représente un gros effort.

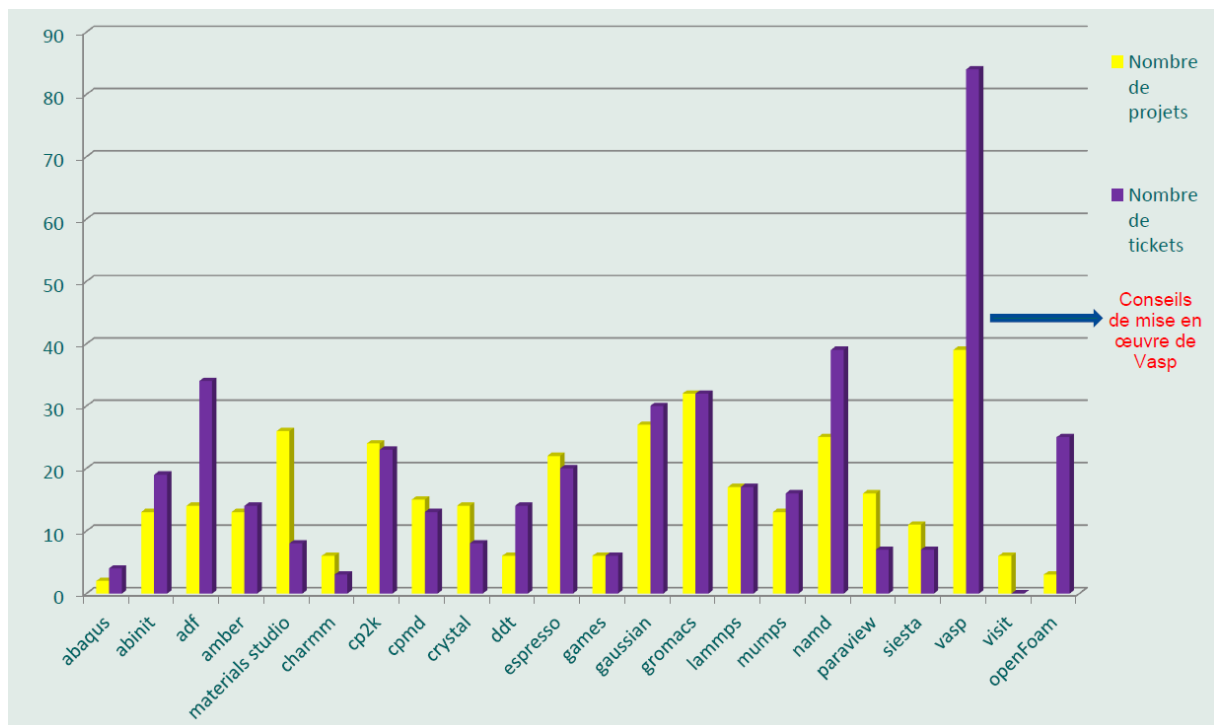


Figure1 : Appels utilisateurs par code en 2017

[ACTION C4] Identifier un utilisateur pour ces 6 codes qui pourrait interagir avec le CINES lorsqu'il y a une nouvelle version ou un nouvel environnement. Une des idées étant de définir davantage de cas tests que le CINES pourrait faire tourner pour aider à améliorer la validation technique et scientifique des nouvelles versions.

[ACTION CINES] Le CINES fournira la liste des personnes qui permettra de savoir qui contacter pour chacun de ces codes.

C4 : Le C4 s'étonne du nombre très important de tickets dédié au code VASP

CINES : 40 projets utilisent ce logiciel payant. Chaque utilisateur a sa propre licence. Des paramètres intrinsèques au code impactent la performance donc les tickets associés concernent le plus souvent cette paramétrisation. Le CINES rappelle toutefois qu'il existe depuis 1 an sur les FAQs un document qui explique comment utiliser VASP au mieux sur Occigen.

[ACTION CINES] Pour limiter les appels supports il faudrait une licence commune gérée par le CINES et non pas que chaque utilisateur ait une licence individuelle. Le CINES va vérifier avec l'IDRIS et le TGCC leur mode de fonctionnement et se charge de contacter l'éditeur du logiciel pour voir les solutions envisageables.

1.2 Mise en place des quotas

Comme signalé lors de la dernière réunion du C4 l'activation des quotas a été remise en place au mois de Novembre 2017. Par défaut la politique est la suivante : /home (40Go, 20 000 fichiers), /scratch (4To, 200 000 fichiers), /store (1To, 10 000 fichiers).

C4 : Un utilisateur signale qu'il serait très pratique de disposer d'une commande UNIX qui résume pour un répertoire donné le nombre de fichiers qu'il contient ainsi que l'espace occupé.

CINES : Les outils standards (du, find) sont utilisables. Si les volumétries empêchent d'utiliser ces outils, ouvrir un ticket (svp@cines.fr).

[ACTION CINES] Une commande va être mise en place pour visualiser les répertoires où il y a le plus d'inodes. Installation de l'outil ncd. Le CINES documentera l'utilisation sur son site WEB.

C4 : Avec la remise en marche des quotas, est-ce que le nombre de fichiers maximal autorisé est dépendant du nombre d'utilisateurs par groupe? Est-ce qu'il est fixé au regard des données fournies lors de l'appel à proposition? Est-ce que ces quotas peuvent évoluer?

CINES : Les quotas sur /home concernent l'utilisateur, ceux de /scratch et /store concernent le groupe (indiqué sur le site : FAQ -> lien quota).

Les quotas ne sont actuellement pas fixés en fonction des données fournies dans la demande DARI car celle-ci ne contient qu'une seule valeur. Une réflexion est à mener avec les autres centres pour savoir s'il ne serait pas pertinent d'ajouter ce genre d'informations au formulaire DARI.

Des demandes d'extension temporaires ou à plus long terme sont possibles si elles sont justifiées. Une extension a déjà été accordée pour environ 10% des projets depuis la mise en place des quotas.

Le CINES rappelle que la mise en place de ces quotas est nécessaire pour limiter en outre l'utilisation du scratch. Un scratch trop chargé est pénalisant pour l'ensemble des utilisateurs. En Novembre le scratch était plein à 70%. Les constructeurs préconisent une occupation de 50% pour ne pas dégrader les performances.

C4 : Quelle est la bonne taille d'archives pour que leur utilisation reste tractable ? Est-ce qu'il existe des commandes qui faciliteraient cet archivage ?

CINES : Les tailles d'archives optimum sont entre 4 et 32 Goctets. Au-delà de 500 Go la relecture se complique.

[ACTION CINES] : Voir avec le TGCC s'il est possible d'installer les outils développés pour cet aide à l'archivage sur Occigen.

1.3 Maintenance Occigen

La prochaine maintenance est prévue du 8 au 11 janvier. Le premier objectif est de passer de la REDHAT 7.3 à la REDHAT 7.4. Cette maintenance avait été annoncée plus tôt mais une alerte d'INTEL sur la version 7.4 a retardé l'opération. REDHAT et INTEL ont fourni des correctifs depuis que le CINES est en train de finir de valider sur sa machine test. Cet arrêt servira aussi au nettoyage du réseau d'eau utilisé pour le refroidissement.

Pour les prochaines maintenances, le CINES est en discussion avec le TGCC pour que les machines ne soient pas arrêtées en même temps. Actuellement les arrêts planifiés pour le TGCC sont 6-7 février, 9-10 avril, 19-20 juin. Des discussions identiques sont aussi en cours avec l'IDRIS.

1.4 Questions diverses

C4 : Un utilisateur s'étonne qu'il ne soit pas possible d'indiquer plusieurs numéros IP lors d'une demande d'ouverture de login.

CINES : Ceci est possible en appuyant sur le bouton +.

https://www-dcc.extra.cea.fr/CCFR/

ACCUEIL | GESTION MULTI-LOGIN | EDITION

Si adresse différente de l'adresse professionnelle

Centre(s) de calcul demandé(s) * CINES IDRIS TGCC

Machine(s) concernée(s) pour CINES: * Occigen Cristal Frioul PCP

Le format de l'adresse IP est du type A.B.C.D ou A.B.C.D/E ou A.B.C.[D-F] avec A,B,C,D des nombres limités à 255, E entre 0 et 64

Adresse IP de connexion: 195.83.

FQDN associé: cines.fr (Champ obligatoire)

C4 : Un utilisateur signale qui serait utile d'être prévenu lors du premier calcul sur une nouvelle allocation.

CINES : Le CINES propose d'envoyer un mail à tous les utilisateurs pour dire que l'on a changé de session plutôt qu'uniquement au responsable du projet (comme fait actuellement).

C4 : Le C4 propose que cette information soit ajoutée aux news lors de la connexion sur la machine.

Le C4 demande également s'il serait possible d'améliorer la commande `etat_projet` pour afficher la date de début et de fin de session.

[ACTION CINES] Modifier la commande `etat_projet`.

C4 : Un utilisateur demande s'il serait possible d'avoir des formations sur l'analyse des performances et le profiling pour les machines KNL.

CINES : PRACE propose de telles formations. Une formation optimisation/debugging KNL a eu lieu du 4 au 8 décembre 2017 au CINES. Le CINES peut proposer une formation profiling mais il faut que le nombre de participants soit suffisant. Des formations de ce type ont déjà été proposées et annulées dans le passé faute de suffisamment d'inscrits.

Pour rappel ou information, le site formation-calcul.fr liste un ensemble de formations proposées en calcul. Vous pouvez entre autre retrouver celles délivrées par le CERFACS, l'IDRIS et la Maison de la Simulation.

Le CINES étudie la possibilité de diffuser un questionnaire à ses utilisateurs afin de recenser les besoins en termes de formation.

C4 : Un utilisateur demande s'il serait possible d'avoir un outil qui permettrait de visualiser graphiquement l'état de la machine.

CINES : Le CINES répond que l'outil <https://reser.cines.fr/> permet cette visualisation. Or après un essai en séance de la part d'un des membres du C4 il s'avère qu'un utilisateur lambda n'a pas accès à cette information via ce site.

[ACTION CINES] Modifier les droits pour que les utilisateurs puissent avoir accès à l'occupation globale de la machine via ce site.

2. Présentation GENCI

2.1 Actualité centres de calcul nationaux et PRACE

2.1.1 TGCC : Machine Irene

Le calendrier prévisionnel de la mise en service d'Irene (remplaçante de Curie) est le suivant:

- Installation / configuration : de janvier à mars 2018
- Vérification du service régulier / Grands Challenges : d'avril à juin 2018
- **Mise en production : Juillet 2018**

La configuration de la machine sera la suivante :

- **Nœuds fins:** 1 656 nœuds Skylake (79 488 cœurs @2,7 GHz, 4 Go / cœur)
- **Nœuds manycores:** 666 nœuds KNL (45 288 cœurs @1,4 GHz, 1,4 Go / cœur)
- **Pré/post-traitement:** 5x [4 CPU Skylake, 1 GPU Pascal, 3 To DDR4, 1 SSD NVMe 1,6 To]
- **Visualisation distante:** 20x [2 CPU Skylake, 1GPU Pascal, 192 Go, 1 SSD NVMe 800 Go]

La clôture de l'appel à projets pour les grands défis sur Irene est prévue le 22 janvier 2018. Ces grands défis concerneront les 2 partitions : Skylake et KNL.

CINES : **Le CINES encourage les utilisateurs à faire des demandes d'accès préparatoires sur la machine Frioul pour préparer les codes à l'utilisation de la future partition KNL d'Irene.**

Pour rappel Curie sera disponible jusqu'en septembre 2018 mais elle ne sera pas disponible pour la demande de complément A3. Irene sera disponible pour l'allocation A4 avec 2 mois de retard, l'allocation A4 démarrant en mai 2018.

2.1.2 CINES : Journée de restitution des grands défis

La journée de restitution des grands défis sur Occigen2 a été organisée le 7 décembre 2017 au CINES. 11 projets y ont été présentés dont des premières à l'échelle mondiale. Un numéro spécial «Grands challenges» de la gazette du CINES résumant l'ensemble des grands défis a été édité et est téléchargeable au format PDF à l'adresse suivante :

2.1.3 IDRIS

- Une évolution du stockage CMIP6 est prévue pour le premier trimestre 2018.
- Le renouvellement d'Ada / Turing est prévu pour Q2/2019 (ce qui correspondrait à une disponibilité pour l'allocation A6). Les appels d'offres concernant le calculateur et le stockage ont été publiés en décembre.

2.1.4 PRACE

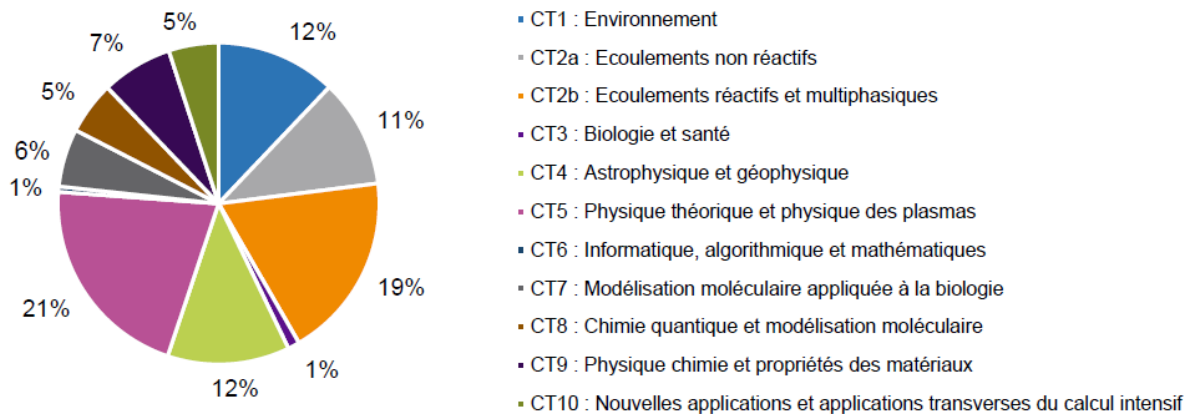
- L'appel à projets concernant le Call 16 a été clos le 21 novembre 2017. Les résultats seront communiqués mi-février 2018.
- L'appel à projets pour le Call 17 aura lieu en mars.

2.2 Utilisation des moyens nationaux

2.2.1 Bilan de l'appel à projets DARI A3

Concernant l'appel à projet A3 : 805 millions d'heures étaient disponibles, 1068 Mh ont été demandées, 940 Mh ont été attribuées. Parmi tous les dossiers 32% sont soutenus par l'ANR et 21% par un industriel. 3 dossiers ont été directement déposés par un industriel (EDF R&D, Continental Automotive France, Michelin).

Pour info la répartition des attributions des heures (en heures normalisées) par CT est la suivante :



2.2.2 Préparation de l'appel DARI A4

L'**ouverture de l'appel à projet A4** aura lieu le **8 janvier 2018**. **Clôture** de l'appel à projet A4 le **8 février 2018 à 11h**. Cet appel concerne selon les machines :

- IDRIS –CINES: nouveaux projets A4, renouvellements A2 ou antérieur (2016, A1) pour les projets non renouvelés dans A3, demandes complémentaires A3
- TGCC: nouveaux projets A4, renouvellements 2016 ou A1 pour les projets non renouvelés en A3

2.3 Informations GENCI

2.3.1 Portail unique pour ouverture de comptes sur les 3 centres :

Suite au projet de simplification des procédures d'ouverture de compte sur les 3 centres nationaux un portail unique pour les créations de comptes a été mis en place par le CEA depuis l'allocation A3

(novembre 2017). Ce portail est ouvert à l'ensemble des utilisateurs GENCI et disponible à l'adresse unique suivante : <https://www-dcc.extra.cea.fr/CCFR>.

2.3.2 Cellule de veille technologique

Pour rappel la cellule de veille technologique compte 2 machines : **Ouessant**/IDRIS (à base OpenPOWER) et **Frioul**/CINES (à base de KNL). Les objectifs de ces machines prototypes sont de (i) préparer les communautés aux nouvelles architectures et (ii) pousser les standards auprès des vendeurs et les tester (ex: OpenMP 4 pour travailler sur architecture GPU). Ces machines sont **accessibles à tous les utilisateurs via des demandes d'accès préparatoires**.

3. Point autres actions en cours au CINES

3.1 Visualisation 3D

Le renouvellement du cluster de visualisation CRISTAL est en cours. Il s'agira d'une machine livrée par ATOS intégrée dans OCCIGEN2 qui devrait être composée de 4 nœuds Broadwell équipés de cartes NVIDIA + 256Go RAM et d'un nœud large Skylake de type Mesca avec 3 To de RAM partagée. Ces nœuds devraient être opérationnels fin du premier trimestre 2018. TurboVNC sera installé en standard par ATOS (la réservation se fera via SLURM). L'installation de HPCdrive est en discussion avec le TGCC.

3.2 Stockage

Une enquête auprès des utilisateurs va être menée, conjointement entre les 3 centres, pour connaître leurs besoins en stockage afin de pouvoir planifier des investissements en moyens de stockage.

3.3 Workshop chimie au 1er semestre 2018

Suite aux difficultés rencontrées par un certain nombre d'utilisateurs principalement chimistes il a été proposé d'organiser un workshop de chimie au CINES au premier semestre 2018. Ce workshop serait constitué de talks scientifiques et de sessions d'échanges sur les contraintes et points durs qui pourraient être rencontrés dans le futur en fonction de l'évolution des machines.

Actions à prévoir d'ici la prochaine réunion : cf. document joint « Relevé de décisions »

Prochaine réunion : Vendredi 16 Mars 2017 (CINES)