

Compte-rendu de la réunion C4 du 16 mars 2018 au CINES

<u>Participants C4 :</u> <ul style="list-style-type: none">- Sébastien Theetten (CT1) : Excusé- Julien Bodart (CT2A) : Visio- Florent Duchaine (CT2B) : Visio- Alain Miniussi (CT4)- Virginie Grandgirard (CT5) : Visio- Rachel Nuter (CT5) : Visio- Michel Kern (CT6) : Excusé- Nicolas Floquet (CT7)- Jean-Philippe Piquemal (CT7) : Excusé- Sébastien Le Roux (CT8) : Excusé- Evelyne Lampin (CT9) : Visio	<u>Participants CINES :</u> <ul style="list-style-type: none">- Boris Dintrans (directeur du CINES)- Olivier Rouchon (responsable DCI)- Gérard GIL (DCI)- Cédric Jourdain (DCI)- Romain Couturat (DCI)- Philippe Prat (DCI)- Marie Galez (DS2I)- Hervé Toureille (DS2I) <u>Participants GENCI :</u> <ul style="list-style-type: none">- Arnaud Valois
---	---

Ordre du jour :

- Stockage
- Visualisation
- Workshop chimie + formation
- IA + GPU
- Réponses aux utilisateurs
- Point sur relevé de décision de la dernière réunion

Vous trouverez ci-dessous un bref compte-rendu des points qu'il nous semble importants de souligner. Pour plus de détails sur : (i) le point des actions en cours suite à la précédente réunion ; (ii) les réponses aux questions des utilisateurs ; (iii) les actualités CINES et plus généralement GENCI n'hésitez pas à consulter les transparents ci-joint présentés par le CINES et GENCI lors de la réunion.

Points marquants CINES :

- Les 4 nœuds de visualisation initialement prévus pour la fin du premier trimestre 2018 arriveront avec 2 à 3 mois de retard. Ces nœuds de visualisation seront intégrés à OCCIGEN. Il s'agira de 4 nœuds biprocesseurs Broadwell de 256 Go de RAM avec 1,5 To de stockage temporaire (/tmp), ainsi que d'un nœud SMP de 4 modules biprocesseurs Skylake à large mémoire (3To de RAM) disposant d'un espace de stockage temporaire (/tmp) de 1,5 To. Ces nœuds accéderont aussi aux espaces de stockage partagés /scratch et /store.
- Politique de gestion des espaces de stockage :
 - ✓ Nous rappelons aux utilisateurs que s'ils rencontrent des problèmes de quotas en termes d'inodes et de capacité sur les zones /home et /scratch, ils peuvent faire une demande d'extension via SVP.

- ✓ Une politique d'effacement automatique des fichiers inactifs va être très prochainement déployée.
- ✓ Le CINES travaille à la mise en place d'outils d'aide aux transferts de données, notamment entre le SCRATCH et le STORE.
- Un investissement global de 5M€ pour une amélioration du stockage au CINES est prévu à partir de 2019 (série d'investissements sur une période 5 ans maximum via le SGPI¹). Le CINES aimerait un retour sur les besoins des utilisateurs pour designer au mieux l'achat.
- Communauté chimie :
 - ✓ Suite à la dernière réunion, une personne support référente a été identifiée pour les codes GROMACS, NAMD, VASP, CP2K, OpenFoam et ADF – les plus générateurs de demandes de la part des utilisateurs. Pour être efficace, il faudrait de la même façon un référent utilisateur.
 - ✓ Un workshop de Chimie est prévu au CINES les 28 et 29 Mai 2018.
 - ✓ Seul CPMD 4.1 semble encore rencontrer de gros problèmes.
- Le CINES prévoit d'investir fin S1 2018 dans un DGX-1 (Nvidia) pour IA/GPU/HPDA/HTC. Tout utilisateur intéressé par ce type de technologie peut se faire connaître.
- Un pôle de formation a été remis en place. 5-6 formations seront prochainement proposées pour les 18 prochains mois. Un questionnaire sera envoyé aux utilisateurs pour savoir quelles formations ajoutées en évitant les redondances avec celles déjà proposées.

Points marquants GENCI :

- La machine **Irene** (remplaçante de Curie/TGCC) sera opérationnelle en Juillet 2018. La période des grands défis débutera mi-Avril.
- Les appels d'offre pour le renouvellement d'ADA et TURING (IDRIS) sont en cours. La mise en production de la nouvelle machine serait prévue pour le premier semestre 2019.
- L'appel à projets pour le call 17 PRACE est ouvert depuis le 7 mars et sera clos le 2 mai 2018. Pour rappel, ticket d'entrée pour la machine française est de 15 Mh, et 68 Mh pour la machine suisse.
- Depuis début 2018, une équipe support haut niveau est dédiée aux utilisateurs PRACE sur chacune des machines PRACE. Pour ce qui est de Curie (et **Irene** par la suite) celui-ci comprend des personnes des 3 centres et de la Maison de la Simulation. N'hésitez-pas si besoin à faire appel à ce support si vous êtes concernés.
- Rappel sur le calendrier DARI :
 - ✓ L'appel à projets A4 est en cours d'évaluation. Les mails concernant l'attribution des heures devraient arriver aux alentours du 11 avril 2018 pour un démarrage début Mai (sauf sur **Irene** qui débutera début Juillet)

¹ Secrétariat général pour l'investissement

- ✓ L'appel à projets A5 aura lieu de début juin à mi-juillet 2018.
- ✓ Tous les projets ont maintenant une durée d'un an. Les allocations paires se renouvellent en allocation paire (idem impaires).

Actions à prévoir d'ici la prochaine réunion

Actions CINES :

1. Mettre à jour la rubrique « user's committee » sur le site WEB du CINES. La version française est à jour mais pas la version anglaise. Les derniers comptes-rendus C4 ne sont par exemple pas disponibles.
2. Recontacter développeurs et utilisateurs du code CPMD pour voir comment régler les problèmes liés à la version 4.1.
3. Le délai de blocage des jobs après dépassement des quotas a été réduit à 10 minutes. Modifier le message utilisateur en conséquence.
4. Préparer en accord avec le C4 un questionnaire très court, spécifique aux besoins mémoires pour diffusion aux utilisateurs.
5. Préparer en accord avec le C4 un questionnaire court sur les besoins en formation.

Actions C4 :

1. Proposer au CINES une liste d'utilisateurs référents pour les codes GROMACS, OpenFoam, NAMD, VASP, CP2K et ADF.
2. Voir si utilisateurs intéressés pour tester la machine de R&D pour l'IA et GPU.

Prochaine réunion : 21 juin 2018 (visioconférence)