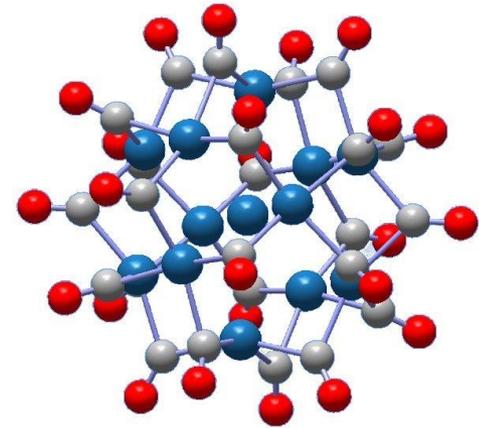


Rencontres CINES-Chimie

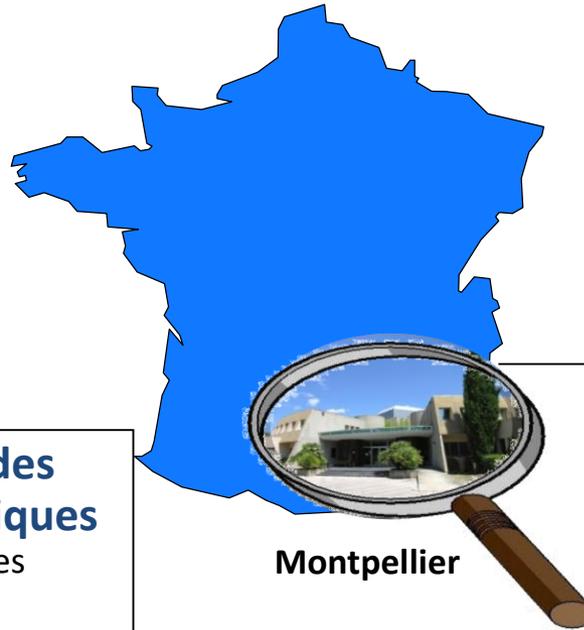


Boris Dintrans (directeur CINES)
dintrans@cines.fr

Un centre informatique national au service de l'ESR

Localisé à Montpellier :

- Le CINES est un EPA, créé en 1999 et sous tutelle du Ministère de l'Enseignement Supérieur, de la Recherche et de l'Innovation (MESRI)
- Le CINES fournit des ressources et des services informatiques essentiellement à la communauté Enseignement Supérieur et Recherche
- 60 personnes (3/4 permanents + 1/4 temporaires) techniciens, ingénieurs et administratifs travaillent sur le site
- Plus d'informations : <https://www.cines.fr/>



Montpellier

Infrastructure commune pour

Données

EUDAT 



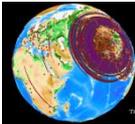
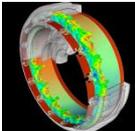
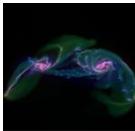
Calcul



Participation à des
projets Européens

HPC-Europa2

Pan-European Research Infrastructure on High Performance Computing



GENCI

**La Conservation à long terme des
données et documents numériques**

(Agrément du Service Interministériel des
Archives de France)

**3 missions statutaires
nationales stratégiques
en synergie**

**Hébergement : activité permettant de
mutualiser les infrastructures**

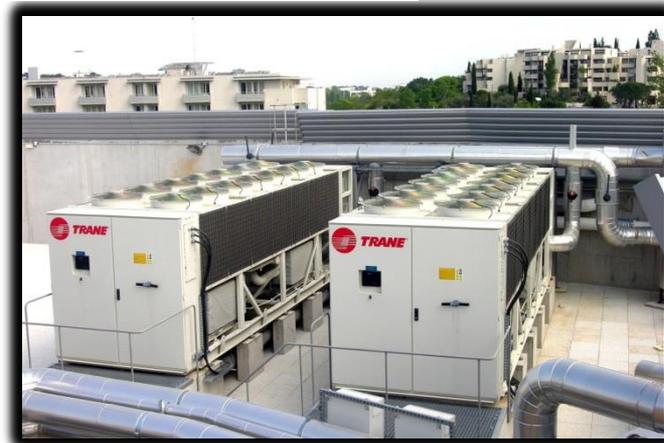
Hébergement de plates-formes stratégiques de partenaires
publics d'envergure nationale ou régionale (MESRI en
priorité)

- Baies entières ou serveurs dans baies CINES.
- ABES, DSI Inserm, DSI UM, Rectorat LR, COMUE LR,
CROUS ; mais aussi Meso@LR...
- Réseau : nœuds Renater, R3LR, HDMON et THD'OC

**Le Calcul Haute Performance : mise à
disposition d'un environnement HPC de
niveau mondial OCCIGEN 3,5 Pflops**

- 3336 nœuds de calcul / 85 824 cœurs
- 5 Po de scratch Lustre à 105 Go/s
- 260 To de /home
- 650 Mh de calcul disponibles par an
- ~400 projets de recherche et ~900 utilisateurs

Infrastructures de type Tier3+



Groupes froids



Groupes électrogènes

Fortement sécurisées et disponibles 24h/24, 7j/7

- 1500 m² sur 5 salles machines protégées
- 2000 m² de locaux techniques
- 2 lignes électriques : 2,5 MW et 10 MW
- onduleurs redondants + groupes électrogènes
- accès réseaux à haut débit (10 Gbits/s)



Adductions réseau



Salle machine SM5 (Occigen) : 600 m²

Q1 2017 : 3,5 Pflop/s



OCCIGEN2
2106 noeuds Haswell (2x12 cœurs)
1260 noeuds Broadwell (2x14 cœurs)
85 824 cœurs, 64 ou 128 GB/noeud,
IB 4xFDR, 5PB scratch Lustre, 105 Go/s
Elec. 1000 kW



Janvier 2015 : 2,1 Pflop/s



OCCIGEN : ATOS/BULL DLC B720
2 106 noeuds bi-processeurs (2x12 cœurs)
Intel Haswell, IB 4xFDR,
50 544 cœurs, 64 ou 128 GB/noeud,
5PB scratch Lustre, 105 Go/s
**Elec. 700 kW, Eau tiède sur procs (35°) + air
PUE < 1,1**

Juillet 2010 : 267 Tflop/s



JADE 2
2 880 noeuds bi-processeurs
• 1 536 noeuds Harpertown, IB DDR,
• 1 344 noeuds Nehalem-EP, IB QDR
23 040 cœurs, 4 GB/coeur, 700 TB Lustre
Elec. 1000 kW, Portes eau froide (12°)

Septembre 2008 : 147 Tflop/s



JADE : SGI Altix ICE 8200 EX
1536 noeuds bi-processeurs (2x4 cœurs)
INTEL Xeon – Harpertown
Elec. 600 kW, Portes eau froide (12°)

La chimie sur Occigen

Comité	Thématique	Président
CT1	Environnement	Evelyne Richard
CT2a	CFD non réactifs	Eric Lamballais
CT2b	CFD réactifs ou/et multiphas.	Nasser Darabiha
CT3	Biologie santé	Laurent Desbat
CT4	Astrophysique géophysique	Frédéric Bournaud
CT5	Physique théorique plasmas	Eric Serre
CT6	Info., Algo. et Maths	Didier Auroux
CT7	Modélisation moléculaire appliquée à la biologie	Marc Baaden
CT8	Chimie quantique et modélisation moléculaire	Marie-Bernadette Lepetit
CT9	Physico-chimie des matériaux	Thierry Deutsch
CT10	Nouvelles applications	Bruno Scheurer

La chimie sur Occigen : call A4

