Mésocentre de calcul de Franche-Comté

kamel.mazouzi@univ-fcomte.fr

http://meso.univ-fcomte.fr

Mésocentre de calcul Franche-Comté
Université de Franche-Comté



Plan

Le mésocentre

Ressources de calcul et services

Quelques chiffres

Contacts

Le mésocentre

Ressources de calcul et services

Quelques chiffres

Contacts

Le mésocentre

Service de l'université de Franche-comté

Partenaires

- UTBM
- ENSMM

Objectifs

- Fournir des ressources de calcul haute performances : HPC
- Développer une expertise locale dans le domaine du HPC : **soutien, formation, conseil**
- Permettre la mutualisation de moyen de calcul pour optimiser leur utilisation

Le service

Personnels : 3 ETP

- Responsable scientifique
- Responsable technique
- Ingénieurs

Comité de pilotage

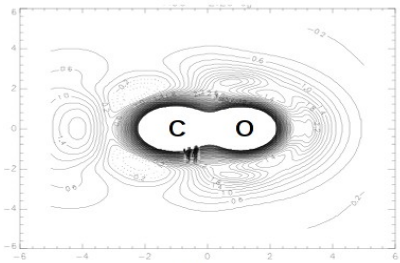
- Composé de membres des établissements partenaires
- Participe aux décisions sur les investissements et le fonctionnement du mésocentre

Comité scientifique

- Composé de membres représentant les différents utilisateurs
- Participe aux décisions sur les orientations techniques du mésocentre

Domaines d'utilisation

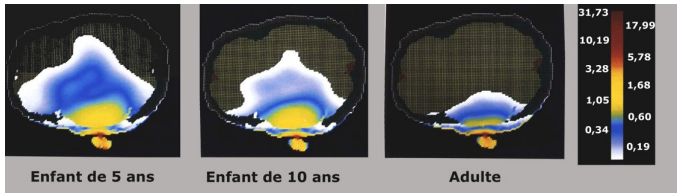
Simulation : 3ème pilier de la science



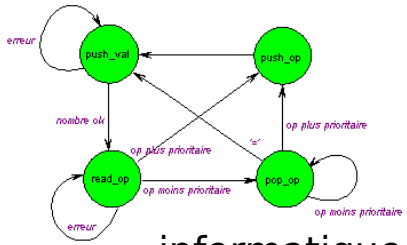
chimie



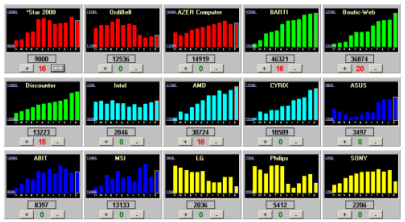
lettres



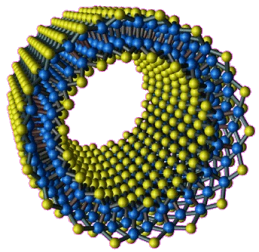
médecine



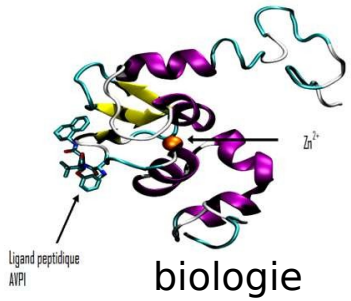
informatique



économie



physique



biologie

Besoins en HPC

Motivation

Les simulations peuvent consommer une puissance de calcul et demander une capacité mémoire supérieure à celle d'un ordinateur personnel.

Besoins importants

- En puissance de calcul
- En mémoire
- En stockage

Ordres de grandeur : **G** : giga, **T** : téra, **P** : péta

- 1 TeraFLOPs = 1 billion d'opérations flottantes par seconde
- 1 PetaByte = vidéo de 2 300 ans, 1 milliard de livres

Le mésocentre

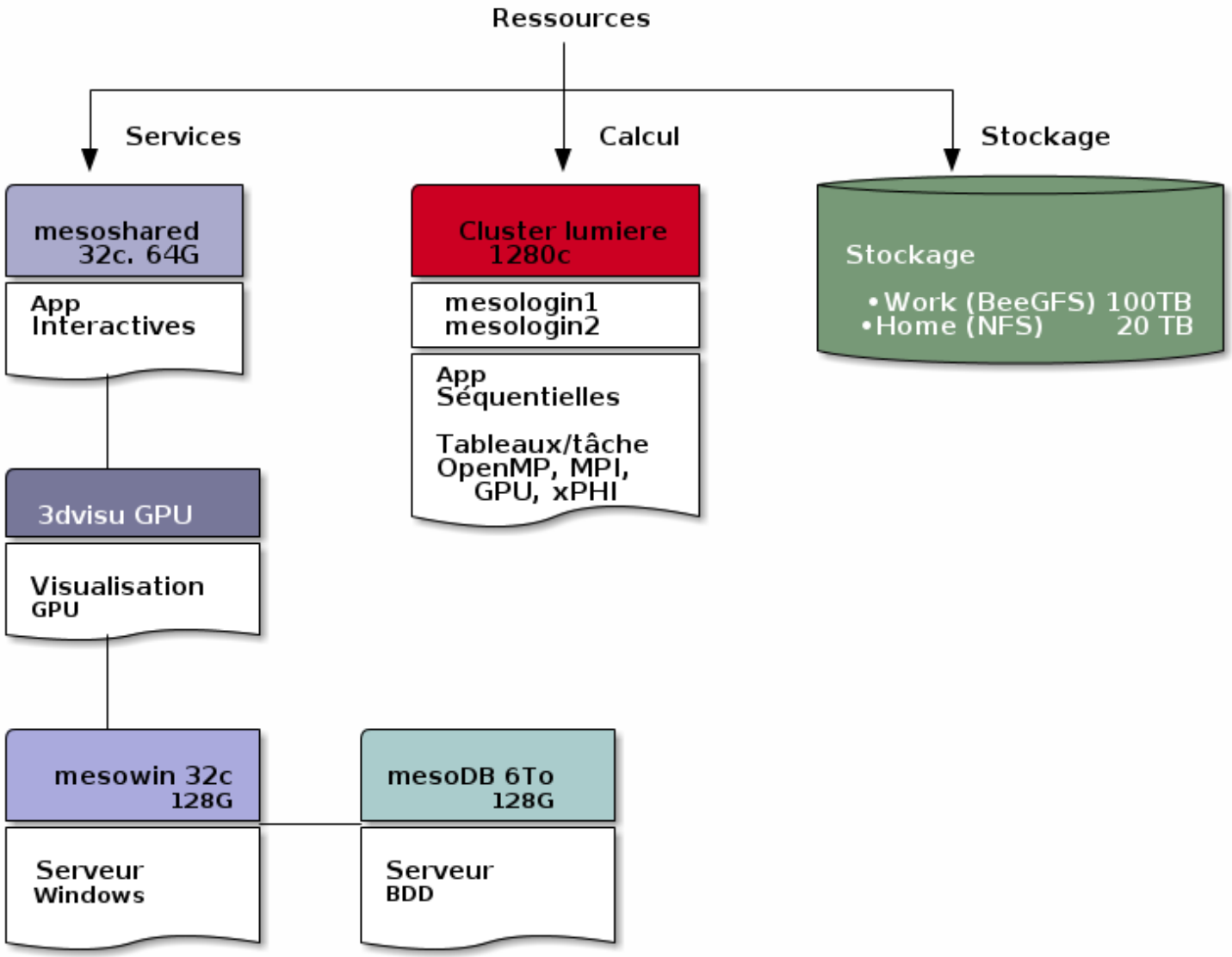
Ressources de calcul et services

Quelques chiffres

Contacts

Ressources de calcul

Puissance totale : 34 TFlops + 8 TFlops gpu



Logiciels installés

Exemple d'applications installées sur les clusters

- Compilateurs
  - Intel composer 2014 : icc, icpc, ifort
  - GNU : gcc, g++, gfortran
  - PGI, **OpenACC**
- Bibliothèques de passage de messages
  - Open MPI, Intel MPI
- Bibliothèques scientifiques
  - BLAS, LAPACK, PETSc, **Intel MKL**,...
- Logiciels scientifiques
  - Abinit, Meep, Espresso, OpenMX, NAMD, Gaussian 2009, Molpro, VASP,...
- Logiciels commerciaux
  - Matlab (10 j), Comsol (2 j), Crystal, Hyperworks, Ansys Fluent

Conseil et formation

Conseil en HPC

- Conseil pour l'utilisation des différentes technologies HPC
- Aide à la parallélisation et/ou l'optimisation de code existant
- Participation à des projets de recherche en lien avec HPC

Formation : école doctorale, université

- Utilisation des moyens de calculs
- Utilisation `Shell` et `SGE`
- Techniques d'optimisation des programmes
- Introduction au parallélisme (architectures, modèles et programmation)
- Programmation parallèle : OpenMP, MPI

Le mésocentre

Ressources de calcul et services

Quelques chiffres

Contacts

Les laboratoire participants

Université de franche-comté

- Institut Femto-ST
- Institut UTINAM
- Nanomédecine
- Théma
- Laboratoire de Mathématiques
- Laboratoire de Chrono-environnement

UTBM

- Laboratoire M3M
- Laboratoire SET
- Laboratoire LERMPS

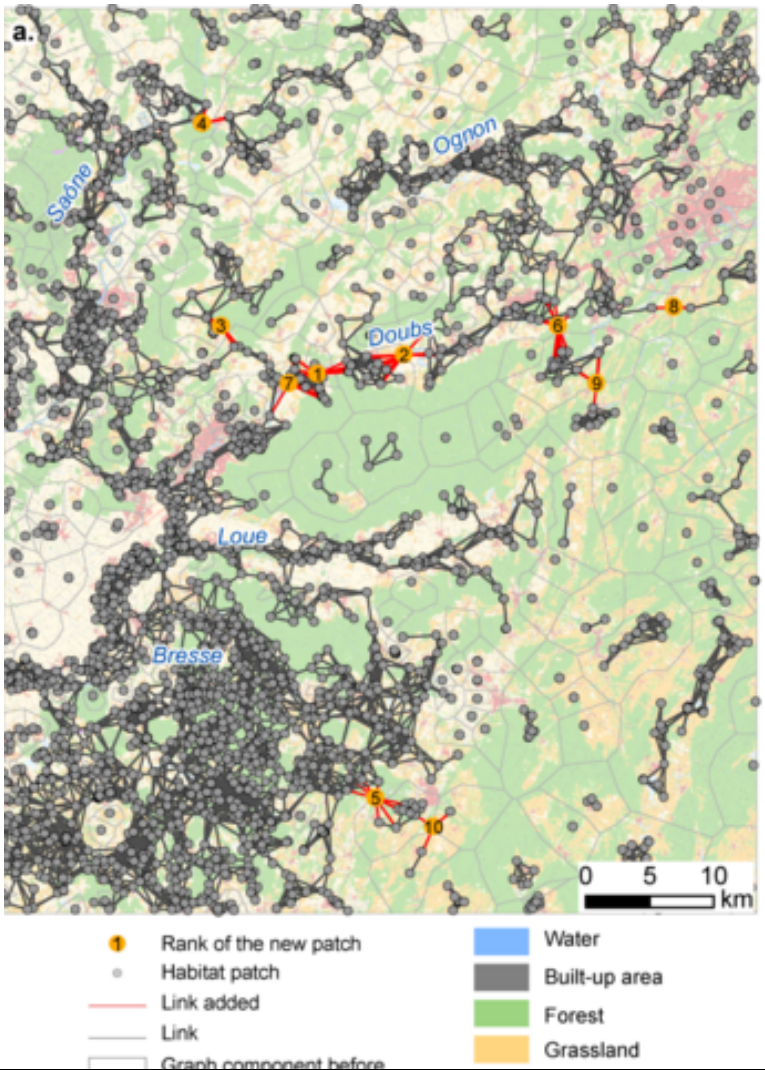
ENSMM

- Femto-ST

Exemple d'applications

Théma : environnement

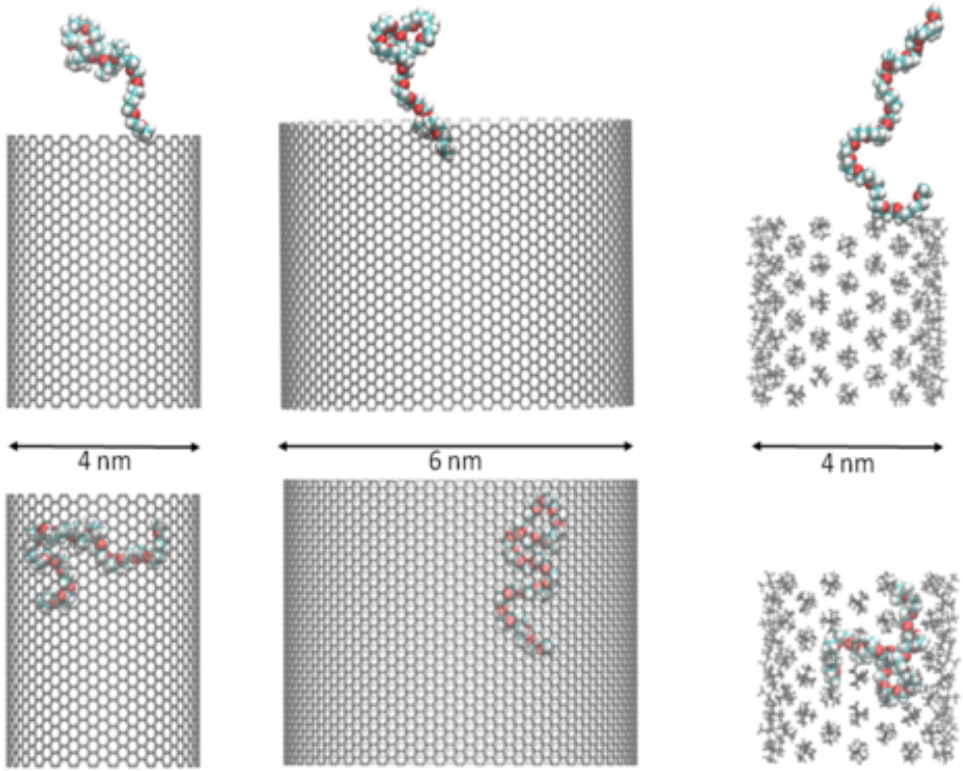
Apport des graphes paysagers pour améliorer la connectivité d'un réseau



- Temps d'exécution 9 jours et 12 heures avec 300 cœurs
- Il aurait mis plus de 7 ans sur un ordinateur simple

Nanomédecine : dynamique moléculaire

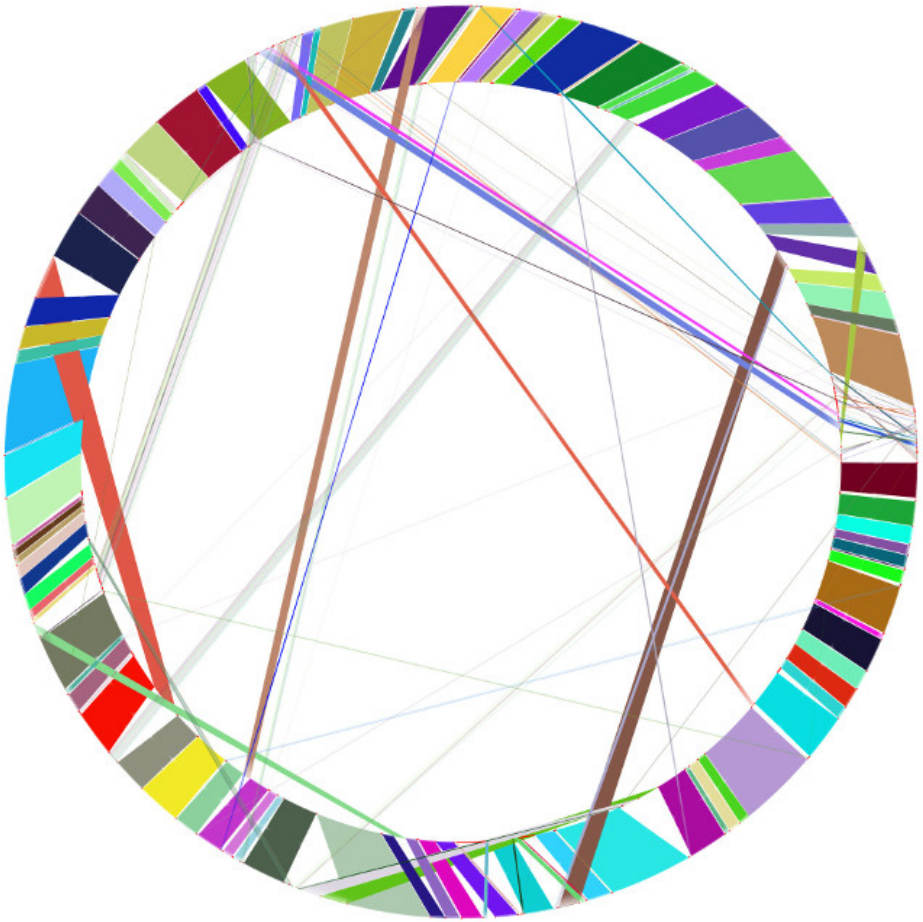
Simulations par dynamique moléculaire de la diffusion de molécules de polyéthylène glycol (peg) au sein d'un nanopore hydrophobe de différents diamètres (ou propriétés physiques).



- Temps d'exécution : $\approx$ 42 000h (par peg et par pore simulé) .

Femto-ST : bioinformatique

Investigation des meilleures techniques de prédiction de séquences codantes et de leur clustering sous forme de gènes.



- Temps d'exécution : 20 jours avec 360 cœurs.

Quelques chiffres

- Nombre de comptes actifs : **120**
- Nombre moyen d'utilisateurs qui calculent par mois : $\approx$ **40**
- Utilisation CPU pour l'année 2016 : $\approx$ **4 millions d'heures**
- Nombre de publications pour l'année 2016 : $\approx$**30**

Le mésocentre

Ressources de calcul et services

Quelques chiffres

Contacts

Contacts et informations

- Email : `mesocentre@univ-fcomte.fr`
- Site web : `http://meso.univ-fcomte.fr`
- Wiki : `http://mesowiki.univ-fcomte.fr`
- Support : `svpmeso@univ-fcomte.fr`