Mésocentre Moulon@ParisSaclay

Pierre-Alain Boucard, Jean-Michel Dupays, Rémi Hellequin, Guillaume Joslin, Anne-Sophie Mouronval, Philippe Sanchez, Ronan Vicquelin









Préambule : les objectifs d'un mésocentre

Mettre à disposition un environnement de Calcul Scientifique

- des ressources de calcul performantes adaptées aux différents besoins
- un environnement logiciel pour le développement (outils de compilation, de debogage et de profiling)
- un support de proximité

Créer un véritable outil pour la recherche

- amener des nouveaux acteurs au calcul scientifique
- stimuler le développement d'une nouvelle génération de méthodes numériques et d'algorithmes
- proposer un lieu de mise au point des codes pour le passage à l'échelle (passerelle vers les centre nationaux et européens)

Organisation du mésocentre Moulon@ParisSaclay

Responsables scientifiques

- un responsable par tutelle partenaire du projet
- rôles : pilotage du projet, communication avec les tutelles

Equipe support aux utilisateurs et suivi de la machine

- 3 ingénieurs calcul et 2 ingénieurs système (2.5 ETP)
- rôles: administration de la machine, gestion de l'environnement logiciel, support aux utilisateurs, accompagnement des projets

Correspondants au sein des laboratoires

- un par laboratoire impliqué dans le mésocentre
- rôles : contact avec les utilisateurs, validation des projets

Comité technique opérationnel (tous les 2-3 mois)

- composition: responsables scientifiques, équipe support, correspondants labo
- rôles: suivi de l'activité, définition des orientations techniques, échange avec les laboratoires impliqués

Modèle financier

Principe : accès gratuit pour les personnels des établissements

Ressources informatiques

- Fusion : 1.5 M€
- Ruche: 1.2 M€ (2.3M€ fin 2020)
- Investissement initial des laboratoires (400k€)
- Financement Région Ile-de-France CPER depuis 2016 (3.5M€ sur 5 ans)

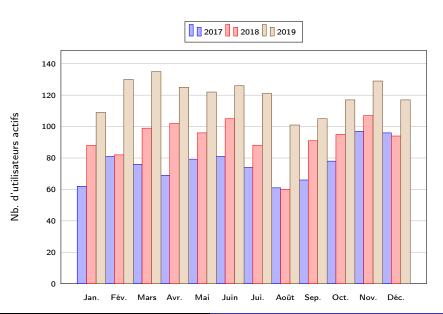
Ressources humaines

- 5 ingénieurs (2.5 ETP)
- Personnel propre CentraleSupélec / ENS Paris-Saclay

Frais de fonctionnement

- Hébergement de la machine à l'IDRIS (80 k€ / an fluides inclus)
- Maintenance du matériel + licences logicielles (65 k€ / an)
- Répartition entre les différents partenaires du mésocentre
- CS : financement par facturation interne (projets européens, ANR, etc.)

Nombre d'utilisateurs actifs



Machine de calcul fusion

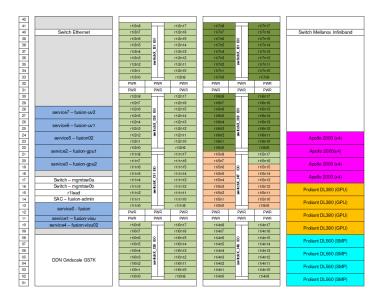
Le supercalculateur fusion

- ouvert aux utilisateurs en 2016, fin prévue en 2021 ou 2022
- 4560 coeurs de calcul, 160 Tflops + 12 GPU

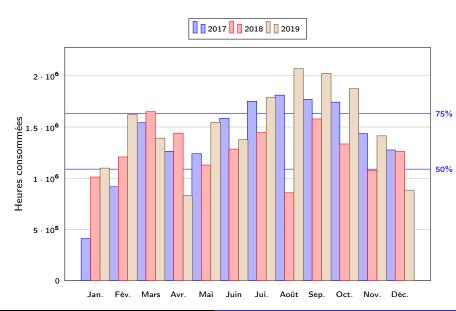
Ressources matérielles

- Deux nœuds de connexion
- Système de stockage GPFS (300 Tio, 8 Gio/s)
- Réseau Infiniband 56 Gb/s
- Scheduler PBS Pro
- Système de visualisation déportée
- 144 nœuds ICEX dédiés au calcul parallèle à mémoire distribuée
 - 3456 cœurs
 - réseau rapide
- 22 nœuds dédiés au calcul à mémoire partagée
 - 1104 cœurs
 - serveurs jusqu'à 80 cœurs et 1.5 Tio de mémoire
- 8 nœuds GPGPU équipés de 2 cartes de calcul Nvidia K40 / P100

Schéma de la machine fusion



Exploitation : occupation des nœuds ICEX



Machine de calcul ruche

Le supercalculateur ruche

- en béta-test, ouverture automne 2020
- 5120 coeurs de calcul, 344 Tflops + 20 GPU
- extension conséquente fin 2020

Ressources matérielles

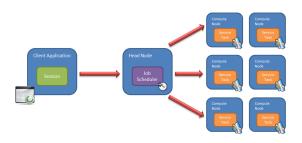
- Nœud de connexion
- Système de stockage GPFS (320 Tio, 8.6 Gio/s)
- Réseau Infiniband 100 Gb/s
- Scheduler Slurm
- Système de visualisation déportée
- 128 nœuds bi-CPU Intel Xeon "Cascade Lake" 6230 20c 2.1GHz 192GB
- 5 nœuds GPGPU équipés de 4 cartes de calcul Nvidia V100 32GB

Machine de calcul ruche



Le gestionnaire de tâches et de ressources PBS

 Chaque mois, plus de 100 utilisateurs issus de 20 laboratoires différents utilisent la machine



- Le scheduler un programme est chargé de la distribution des jobs suivant les ressources disponibles. Selon la politique définie sur la machine, il choisit quand éxecuter les jobs et avec quelles ressources.
- L'utilisateur fournit au scheduler une description de son job (script, ressources nécessaires, temps d'exécution maximum, autres contraintes) avec une syntaxe spécifique.
- Les centres de calcul à grande échelle fonctionnent tous avec un scheduler.

Paramétrage du gestionnaire de tâches et de ressources

Politique du scheduler

- Point-clef de la bonne utilisation de la machine pour respecter les objectifs du mésocentre
- Evolue en fonction du retour d'expérience

Caractéristiques du paramétrage

- Limiter le temps d'exécution des jobs pour :
 - favoriser la rotation des jobs
 - inciter les utilisateurs à implémenter une procédure de reprise
- Dédier une part importante de la machine aux jobs parallèles pour :
 - favoriser les jobs nécessitant beaucoup de cœurs
 - inciter les utilisateurs à paralléliser leur code
- Dédier des nœuds pour les tests en journée pour :
 - réduire l'attente pour les jobs inférieurs à 20 minutes
 - favoriser le développement des codes
- Activation du fairshare (priorité de calcul)
 - priorité pour les utilisateurs/labos calculant peu
 - score pour chaque établissement (= "parts" de la machine)
 - sous-score par laboratoire (CS : fonction de la participation)

Queues PBS calcul

Queue name	Nodes	Cores/node	Mem/node	Walltime
shmq	1	[1-80]	1520gb	24 :00 :00
longq	1	[1-80]	1520gb	72 :00 :00
vlongq	1	[1-72]	504gb	168 :00 :00
mpiq	[2-10]	[1-24]	122gb	04 :00 :00
np_mpiq	[11-30]	[1-24]	122gb	04 :00 :00

Queues PBS test

Queue name	Nodes	Cores/node	Mem/node	Walltime
shm_tstq	1	[1-40]	174gb	00 :20 :00
mpi_tstq	2	[1-24]	58gb	00 :20 :00

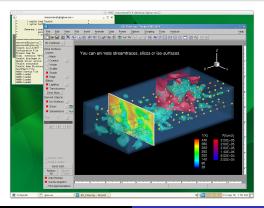
Queues PBS GPGPU

Queue name	Nodes	Cores/node	Mem/node	Walltime
gpuq	[1-4]	[1-24]	174gb	24 :00 :00

Visualisation

Visualisation à distance

- Ouverture de session graphique par un portail web + client VNC
- Permet d'exécuter un logiciel de visualisation sur le serveur
- Évite le transfert des données
- Un poste de travail classique suffit



Enseignement

Formation

- L'équipe mésocentre anime des formations à l'utilisation
- Formations sur des outils spécifiques (HPC, Matlab, GPU/IA, etc.)

Enseignement

- Comptes pour les séances de TP
- Réservation de ressources pour éviter l'attente

Ouverture de comptes pour les étudiants

- Sans restrictions pour les doctorants et les étudiants en stage
- Au cas par cas pour les projets étudiant
 - si le projet le nécessite
 - si l'étudiant est formé à l'utilisation de Linux
 - avec justification d'encadrement par un utilisateur formé

Rejoindre le Mésocentre...

- ...en tant qu'utilisateur :
 - remplir un formulaire de création de compte
 - renseigner un projet (infos utilisation + comptabilité)
 - transmettre au correspondant mésocentre de son laboratoire
 - consulter la documentation
 - démarrer ses calculs sur la machine
 - en cas de problème, faire appel au support
- ...en tant que correspondant mésocentre pour son laboratoire :
 - prendre contact avec l'équipe support
 - remplir un formulaire de correspondant laboratoire
 - valider les projets du laboratoire
 - assister au Comité Technique
 - informer les utilisateurs de son laboratoire

Contact



Contacter l'équipe support :

 ${\tt fusion_support@groupes.renater.fr}$

Informations générales :

https://mesocentre.centralesupelec.fr

• Documentation utilisateur :

https://mesocentre.pages.centralesupelec.fr/user_doc/

• Exemples de jobs :

https://gitlab.centralesupelec.fr/mesocentre/fusion_examples