

Starting with a tiny joke !

- How do you call people speak 3 languages ?
 - Trilingual people !
- How do you call people speak 2 languages ?
 - Bilingual people !
- How do you call people speak 1 language ?
 - French people !

I'm french :

if I twist your eardrums, I apologize...

So it's better : slides in globish & voice in french

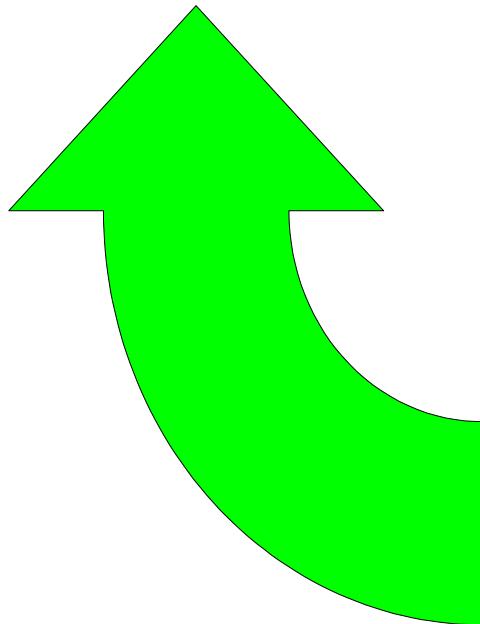
SIDUS Project From WS to HPC



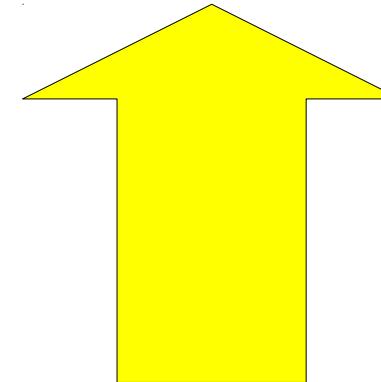
Last June 2012 :
From Workstations
to HPC
with Debian weapons
7 years to twitch
to convince scientists
Film : « 7 year itch »

What's CBP ?

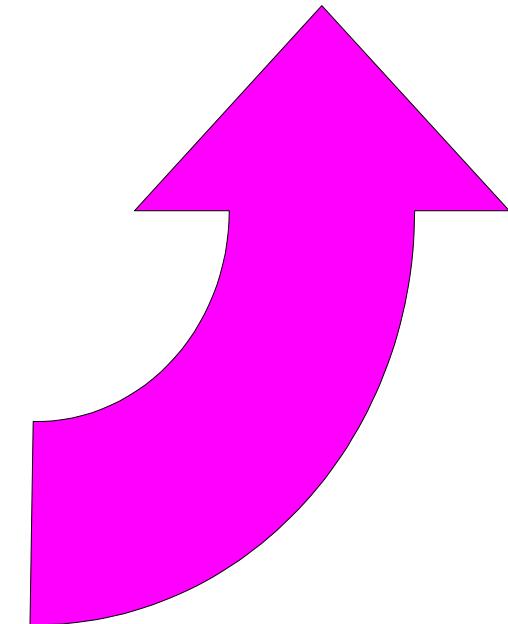
Conferences



Trainings



Projects



CBP : Hotel for conferences Material Resources

In « real world »
Rooms



- 2009 : 9 events
- 2010 : 10 events
- 2011 : 15 events

In « virtual world »
Web Site

Accueil du site : Centre Blaise Pascal

File Edit View Go Bookmarks Tabs Help

Back http://www.cbp.ens-lyon.fr/tiki-index.php?page=Accueil&20du%20site&bl=

CENTRE BLAISE PASCAL
"Les sciences du calcul seront l'outil majeur du XXIe siècle."

ENS DE LYON CBP

RECHERCHE

NEWS CBP

Février 2012 - février 2012

Mo	Tu	We	Th	Fr	Sa	Su
05	06	07	08	09	10	11
12	13	14	15	16	17	18
19	20	21	22	23	24	25
26	27	28	29			

RSS Forums

GPU
ICT Infos

WORKSHOPS

"New QM/MM opportunities for in silico macromolecular physicochemistry"
February 28, 2012 to March 2, 2012
Location : Centre Blaise Pascal, ENS Lyon, France

SEMINAIRES

"Modélisation ab initio d'une microscopie à sonde locale (Scanning Tunneling Microscope): principes et applications en nanoscience"

MARIE-LAURE BOUCET,
ENS Lyon - Laboratoire de Chimie-Chimie Théorique

20. Mars, 2012 à 14h
Location : Salle de réunion LR6 C 023, Centre Blaise Pascal, ENS- Lyon, France

RESEARCH

AHLORIS
OUT-OF-EQUILIBRIUM
PROPERTIES OF SYSTEMS WITH
LONG-RANGE INTERACTIONS

Stefano RUFFO
ENS-Lyon

EDUCATION

AtoSiM Master

In Atomic Scale Modelling of Physical, Chemical and Biomolecular Systems

PUBLICATIONS

"Smoothing algorithms for the mean-flow extraction in large-eddy simulation of complex turbulent flows"
A. Cahuzac
J. Bouvet
P. Borgnat
E. Leveque

LES HOUCHES SCHOOL

"Second Les Houches school in computational physics - Ab initio electron condensed matter physics"
June 19, 2012 - June 29, 2012
Location : Les Houches, Rhône-Alpes, France

ENS DE LYON cecam UNIVERSITÉ LYON 1 CBP

CENTRE BLAISE PASCAL, 46 allée d'Italie - 69364 Lyon cedex 07

Cette œuvre est mise à disposition selon les termes de la Licence Creative Commons Paternité - Partage à l'identique 3.0 non commerciale.

Forums

http://www.cbp.ens-lyon.fr/tiki-index.php?page=S2012

CBP : Hotel for trainings Material Resources

In « real world »
A room with 20 WS



In « virtual world »
Cluster & GPU Workstations



CBP : Hotel for projects

Material Resources

In « real world »
Offices



In « virtual world »
Forge, WS, specific software

Digital Humanities

- Amalia
- Desanti
- Hyperdonat
- Kit Corpus
- Omeka
- Montesquieu
- Morand de Jouffrey
- NucleoLin
- INCNS
- OpenPath
- OMX
- VASP on workstations
- Bench4GPU
- Distonet

Forge du Centre Blaise Pascal

http://forge.cbp.ens-lyon.fr/

Home Projects Help

Forge de Centre Blaise Pascal

Invitation aux projets

"J'aime mieux forger mon âme qu'en la meubler." (Montaigne, Les essais)

Où en sommes-nous ?

L'informatique : une divergence d'usage entre le calcul scientifique et les autres disciplines informatiques.

Dans un logiciel de calcul scientifique, l'usage de l'informatique est souvent le même individu ou formé par un seul programmeur :

- des documentation souvent tenuent à côté utilisateurs et inexistantes côté développeur
- un contrôle de cohérence des paramètres entre les différents logiciels inexistant
- une absence de tests d'intégration il suffit souvent de faire la chaque compilation ou utilisation

En effet, valoriser son activité, pour un chercheur développant ses propres codes, se limite souvent à mettre en place une approche "ma recherche bénéficie de l'informatique" et que son "faire-savoir" se transforme en publication dans une revue de sa spécialité.

Où voulons-nous aller ?

Transformer le paradigme : le code devient un moyen d'expression et l'approche "ma recherche bénéficie de l'informatique" devient "je contribue à l'évolution de l'informatique".

L'objectif est de rationaliser l'évolution du code scientifique en :

- faciliter la phase d'offre et d'acquisition
- favorisant l'changement de logiciel et de plateforme
- valorisant les outils pour la gestion de l'information

Comment y allons-nous ?

Ce site se propose d'offrir un ensemble d'outils comparables à ceux qui ont fait le succès des plateformes collaboratives de travail collaboratif.

Cette **forge** est donc destinée à tout scientifique souhaitant développer un projet touchant au près de l'informatique et souhaitant que lui permettant de partager son travail avec la communauté.

Latest news

Distonet: Ajout de l'usage de Distonet sur le réseau Internet
Dans le cadre de l'Equipe d'Excellence, nous proposons des solutions de stockage distribué pour du scratch et du cluster.
Added by Emmanuel Quemener 3 months ago

Distonet: Ouverture du service public
A l'occasion de la présentation du projet à la Direction Générale de l'Innovation au public.
Added by Emmanuel Quemener 3 months ago

HPL sur GPU: GotoBLAS2 et CUDA
La librairie GotoBLAS2 est maintenant disponible pour la plate-forme CUDA. Elle est passée en open source et maintenant disponible sous la licence BSD.
Added by Emmanuel Quemener about 1 year ago

HPL sur GPU: Support de la version 2.2 de la librairie GotoBLAS2
Il est maintenant possible d'utiliser la librairie GotoBLAS2 avec CUDA.
Added by Emmanuel Quemener about 1 year ago

Latest projects

- Humanités Numériques de Lyon (02/13/2012 11:05 am)
Atelier des Humanités Numériques de Lyon
- Méta-projet de regroupement des différents projets "Humanités Numériques de l'ENS de Lyon"
- ...
- Stockage pour les Laboratoires (03/15/2011 05:25 pm)
Le stockage de données numériques et, par extension, leur sauvegarde et leur archivage, est une préoccupation majeure de nos établissements : ces données forment, de fait, les actifs primordiaux que la sécurité des systèmes d'information se doit de préserver. ...
- HPL sur GPU (11/1/2010 12:15 pm)
Le LinPack est le test utilisé par le consortium Top500 pour évaluer la performance des super-calculateurs.
- Une implémentation portable, HPL, a été développée par A. Petitet, R. C. Whaley, J. Dongarra, A. Cleary et publiée sur NetLib.
- Leur usage de BLAS comme librairie de base d'algèbre linéaire en fait un excellent exercice pour l'utilisation de ses différentes implémentations ...

Search: Enter a web address to open, or a phrase to search for

Scientific Computing



Log'&Com'

CBP : Hotel Human Resources

Strategy

Director



BOFH
Test pilot

Web Site	Scientific Dev'
Events Comm'	Forge
Events Org'	Scientific COTS
Financial Ops'	Libraries Compilers
Logistic Ops'	OS
	Hardware

CBP : a small example



Nasa X-29

- Cell of F-5
- Engine of F-18
- Gear of F-16
- Studies
 - Fwd swept wing
 - Incidence >50°
 - « *Fly-By-Wire* »

Recycle, Re-use and explore new domains

CBP : from Test Center to Production

- A bridge between research and production
 - From Science (LIP) to Technology (PSMN)
- Scientific Computing Platform Provider
 - For research
 - For learning
 - For experiences, demonstrators, prototypes
- Project engineering : Human resources
 - Assistance for owner
 - Project Manager
 - Exploring new domains : GPU, parallelism, « *cloud* »
 - Code porting (environments, languages)...

Scientific Platform Provider

Examples done by CBP

- Specific scientific computing platform for research
 - Virtualized environment for VASP on MacOSX
- Scientific computing platform for learning
 - « Diskless » environments on heterogeneous platforms
 - Complete environment for computing schools in Houches
- Scientific computing platform for qualification
 - « Diskless » environment for cluster of 80 nodes (>250 c)
- Advantages :
 - Quicker integration of codes : Gaussian, VASP, ...
 - Availability of documentation for reuse

CBP & Platforms Scientific Computing Examples



Project Engineering Examples

- Scientific use of GPU (since ending of 2009)
 - 1 seminar in 2010 & 2 formations early november 2011
 - Migration of xHPL under CuBLAS (available on forge)
 - Usage of Par4All (automatic // on OpenMP, CUDA & OpenCL)
- Storage needs of laboratories
 - JRES 2011 publication & free availability of reports & videos
- Use of Python in scientific computing
 - Migration from Mathematica to Python/Numpy
 - //sation on Multi-(cores|nodes|shaders) : PyPhy-2011
- Use of distributed storage network
 - JRES 2011 publication & free availability to project on forge



What is « COTS » ? Component on the Shelf

« Military & Aerospace Electronics »,
November 2011, COTS : 12 occurrences

Inside « *Robots in combat missions* » (page 26)

« *The DOD has mandated the use of open standards that enable interoperability, such as COM Express, VPX, and PC/104, because of the cost savings they deliver.* »

« *Commercial off-the-shelf (COTS) components also allow manufacturers to improve time-to-market, getting new technologies deployed in the field faster.* »

« *Open-standard COTS components offer even greater advantages, with their modularity allowing designers to develop more advanced systems without increased project risk.* »

From COTS in industry... To SIDUS in HPC...

- SIDUS : « constellation » in Latin
 - Software Inside Debian Universal System
 - SIDUS approach, Integrative approach
- Debian, the best choice... Why ?
 - The Universal Operating System ?
 - Architectures : 11 supported (8 more non official)
 - amd64, arm(el|hf), i386, ia64, mips(el), PowerPC, s390(x), sparc
 - Kernel : Linux & FreeBSD (2 arch. supported)
 - Huge & Well integrated software (Squeeze : 29000 packages)
 - Quality Assurance (any Debian Developer agree...)
 - Hardware... Software... Environment (as I've show it!)

What's SIDUS

- SIDUS
 - Software
 - Inside
 - Debian
 - User
 - System
- 2 versions : Huge/Autonomous, Tiny/Networked
 - STALE for STAnd Alone Edition : Huge One, 32 GB
 - SIDIE for SIngle DIstributed Edition : Small One
- Complete environment for Scientific Computing



Why SIDUS ?

- Not reinvent the wheel : « basic done by Debian »
 - Libraries, Compilers, Applications, ...
- Increase speed integration
 - Concentrate on
- Manage reproducibility
 - working one time on my Host, ...
 - working on cluster without extra cost
- Have/share complete environment

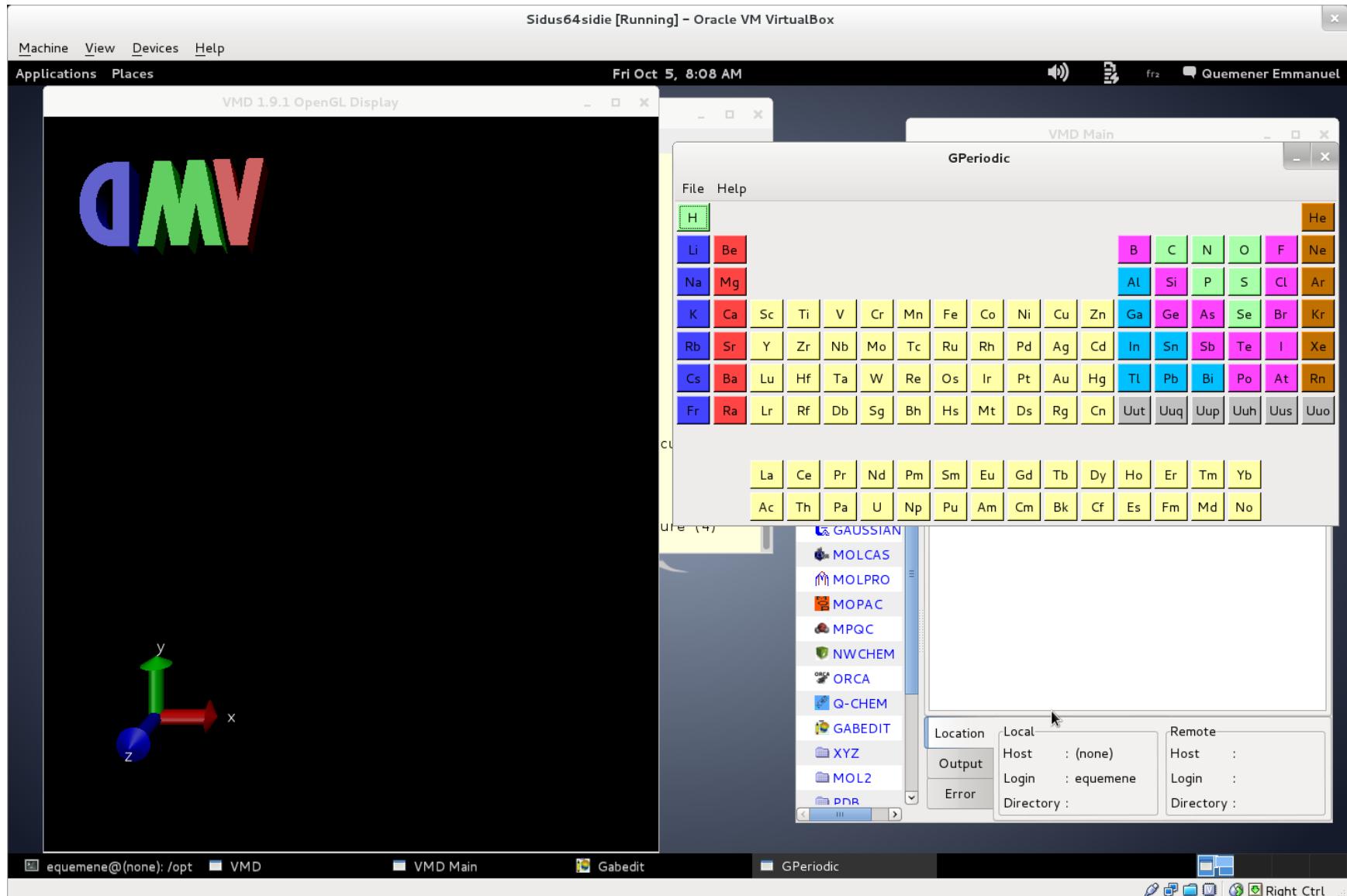
Install SIDUS/sidie in 13 clics

- Install VirtualBox from <http://www.virtualbox.org>
- Launch VirtualBox
- Download appliance : <http://www.cbp.ens-lyon.fr/sidus/Sidus64sidie.ova>
- File/Import appliance & Select file in folders
- Click « Reinitialize the MAC address of all networks cards »
- Click and « Settings »
- Network/Advanced : control & OK
- Shared Folders : to share data between host & virtual machine
 - Folder Path : where you want...
 - Folder Name : MyHost
- Start and Enjoy

Start SIDUS/sidie in 1 clic

- Only 2 needs to use it :
 - To be CBP user
 - To be wire connected on CBP network or Chemistry network
- To become CBP user : ask me...
- Launch Sidus64sidie
- On terminal, just type <Enter> to select default boot
- When Gnome Display Manager started
 - Click « other »
 - Type your login as « username »
 - Select « GNOME Classic » avec environment
 - Type your password (beware, french standard keyboard)
 - Enjoy !

Demonstration ?



First steps to SIDUS : Keyboard & Shared Data

- About the keyboard
 - Your Name on Top Right
 - System Settings/Keyboard/Layout Settings/+
 - After, select your keyboard on Top
- About the binding between Host & Virtual Machine
 - Select Places/Computer
 - Select File System
 - Select media/MyHost
- About your Desktop data :
 - On Fileserver.cbp.ens-lyon.fr : CIFS & SSH

Chemistry Inside Applications

- Inside **Science-chemistry** package :

gdpc-examples gromacs-lam libegad libint molden molekel
openchrom tinker adun.app apbs avogadro bkchem bodr
chemeq chemical-mime-data chemical-structures chemtool
cp2k drawxtl easychem **gabedit** galculator gamgi garlic
gausssum gchempaint gcrystal gcu-bin gcu-plugin gdis gdpc
gelemental ghemical gperiodic **gromacs** **gromacs-mpich**
gromacs-openmpi jmol kalzium katomic libcdk-java
massxpert **mopac7-bin** mpqc mpqc-support openbabel
pdb2pqr psi3 pymol python-openbabel qutemol rasmol v-sim
viewmol xbs xdrawchem xmakemol-gl xmakemol

Chemistry Inside Applications

- Inside ***Science-nanoscale*** package :

ape atompaw bigdft dx dx-doc espresso++ exciting gmsh gpaw
gpi gpi-tools horae ifeffit libmpich1.0gf libmpich2-1.2 life-apps
mpi-doc mpich-bin octaviz octopus python-ase python-elemental
qtiplot scidavis scilab-sivp sixpack wannier90 **abinit avogadro**
axiom cadabra cp2k drawxtl etsf-io extrema feynmf fityk garlic gdis
ggobi ghemical gnuplot gperiodic **grace** graphviz gsl-bin libblas-
mpi1 libblas3gf libfftw3-3 libgsl0ldbl liblapack3gf libopenmpi1.3
libscalapack-mpi1 **maxima** mayavi2 mpqc nco ncview netcdf-bin
netcdf-doc openmpi-bin mpich2 openmpi-doc mpich2-doc openmx
psi3 pymca python-scientific python-scipy python-scitools python-
sympy pyxplot qtoctave **quantum-espresso**

Chemistry Outside Applications

- Outside, but available : new or proprietary ones...
 - Abinit 6.12.3
 - BigDFT 1.6
 - Gaussian 2009
 - Sage 5.3
 - CPMD 3.13.2
 - Siesta 3.1
 - VASP 4.6.36
 - VASP 5.2.12
 - VMD 1.9.1

And after : room & styx ?

- **Workstations** : 3 GPU
 - Cuda : 2 cores/4GB/Nvidia GTX 260
 - Stream : 2 cores/4GB/ATI HD 4890
 - Tesla : 2 cores/8GB/Nvidia Tesla C1060
- **Clusters** : 84 nodes, 384 cores, 1024GB
 - 8 v20z with 2 cores, 8 GB: 8n/16c/64GB
 - 4 v40z with 4 cores, 16 GB: 4n/16c/64GB
 - 8 v40z with 4 cores, 32 GB: 8n/32c/256GB
 - 48 v20z.2 with 4 cores, 8 GB: 48n/192c/384GB
 - 16 x41z with 8 cores, 16 GB: 16n/128c/256GB
- Beware ! Only for short jobs, after, PSMN !

SIDUS

Stand Alone Edition

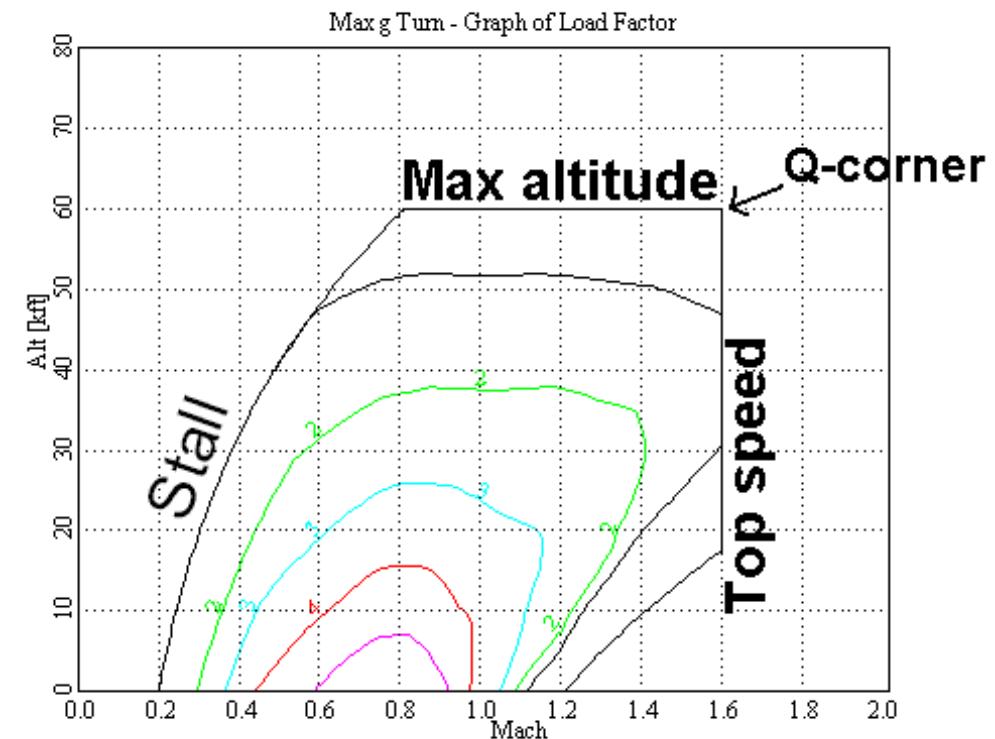
- Why ?
 - Keep complete environment on machine
- How ?
 - Download appliance & install
- How much ?
 - 32 GB of free disc space
- What ?
 - All Free Scientific Stuff inside Debian
 - Free Scientific Stuff outside
 - Proprietary one on demand : which ones ?

Next release ?

- Single Distributed Edition
 - Fusion of PSMN & CBP authentication in FLMSN.net
 - Hard authentication protocols : Kerberos
 - Interconnection to CBP cluster by VPN
 - Interconnection to all nodes as private cluster
 - Convergence between Sidus & Cloud
 - Backup & Storage agent as in Distonet project
- Stand Alone Edition
 - Automatic connection to cluster as gateway
- Suggestions ?

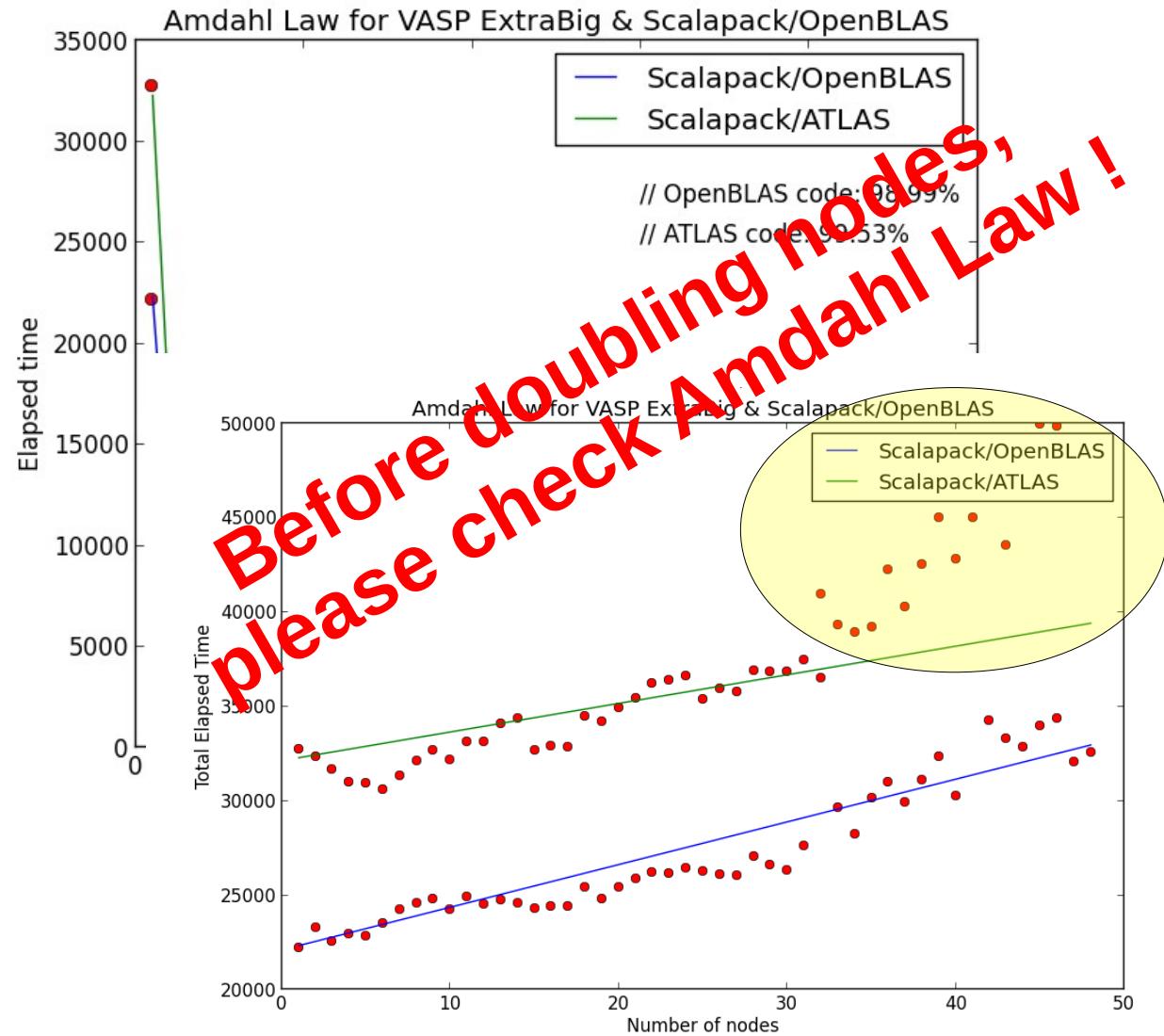
From Aeronautic To Computing Sciences

- Flight envelope:
 - Airspeed
 - Altitude
 - Load factor
- Defines :
 - Where to
 -



Elements of Parallelisation

MPI : How much nodes ?



- Amdahl Law :
 - $T = T_1(1-p + p/N)$
 - T_1 : time for 1 node
 - p : // part of code
 - N : number of nodes
- Results on VASP :
 - Good //sation
 - 99,5 % ATLAS
 - 99 % OpenBLAS
- But *Devil in details*
 - Green Attitude
 -

Questions ?

- How do you call people speak 3 languages ?
 - Trilingual people !
- How do you call people speak 2 languages ?
 - Bilingual people !
- How do you call people speak 1 language ?
 - French people !

I'm french : if questions, speak slowly !