



UMR

botAnique et Modélisation de l'Architecture des
Plantes et des végétations

Calcul sur le cluster MBB

Atelier MAIA P3M 02 juillet 2019

Philippe V.



UNIVERSITÉ
DE MONTPELLIER



Programme de la matinée

- **09h00-09h15** : Présentation introductive
- **09h15-09h45** : Installation des outils et première connexion au cluster
- **09h45-10h15** : Familiarisation avec l'environnement de travail Linux en invite de commande
- **10h15-10h30** : Pause
- **10h30-12h00** : Lancer un script R en séquentiel puis en multicœur

Supports disponibles sur le wiki de <http://amap-dev.cirad.fr/projects/maia>



Présentation introductive

1. Calcul Haute Performance
2. Avantages et inconvénients
3. La plateforme MBB
 - a. Services
 - b. Fonctionnement
 - c. Consommation
 - d. Nouvelle tendance
 - e. Futur de la plateforme
 - f. Où trouver de l'aide ?



Calcul Haute Performance



Calcul Haute Performance

- High Performance Computing en anglais (HPC)
 - Supercalculateurs (grappe de serveurs, grille informatique, bigmem, etc.)
 - Logiciels (MPI, OpenMP, CUDA, etc.)
- Puissance de calcul mesurée en FLOPS
 - floating-point operations per second
 - Occigen (CINES, Montpellier) 2 PFlops, Behold Summit (ORNL, USA) 200 PFlops, ordinateur de bureau < 10 GFlops. MBB ? ~TFlops
- Domaine d'utilisation
 - Préviation météo, modèle de climat, nucléaire, finance, chimie, etc.
 - Institutions de recherche civile et militaire et gros industriels

Notions

- Cluster de calcul
 - grappe de serveurs
 - ensemble de serveurs de calcul homogènes avec beaucoup de CPU (noeuds légers) reliés en réseau très haut débit.
 - Exemple : cluster MBB, cluster SouthGreen, cluster MESO@LR
- Noeud gras / bigmem = un serveur de calcul avec beaucoup de mémoire vive.
- GPU, les calculs sont déportés sur la carte graphique. Techniques de programmation spécifiques, pas transposable efficacement à tous les calculs.



Avantages et inconvénients



Avantages HPC

- **Fiabilité, performance, confort**
 - Calcul délocalisé sur une machine spécialisée et dédiée
 - Garanties matérielles et logicielles
- **Scalabilité**
 - Tester “petit” puis exécuter “gros”
- **Assistance**



Inconvénients HPC

- **Technicité**
 - Un savoir faire à acquérir
 - Conception et déploiement de la bonne solution technique, chronophage à la mise en place
- **Installation des outils**
 - Version
 - Licence
 - Linux only
- **Transfert des données et récupération des résultats**
- **Temps d'attente**
- **Noeuds de calcul pas toujours performants (vieillissant)**



La plateforme MBB



Plusieurs services

- **Serveur Rstudio**
 - Réservé pour tester un script ou exécuter des petits scripts
 - Service à activer auprès des administrateurs systèmes
- **Machines GPU**
 - Sur réservation
- **Cluster ISEM**
 - Accessible uniquement au personnel ISEM
- **Cluster MBB**
 - Accessible à tous le personnel CEMEB
- **Machines Bigmems**
 - 3 machines (64 CPU, 512 Go RAM) sur réservation



Fonctionnement cluster MBB

- Un noeud maître ou noeud de connexion
 - cluster-mbb.mbb.univ-montp2.fr
 - Aucun calcul sur ce noeud
 - Gestion des fichiers et lancement des calculs sur les noeuds
- Chargement des programmes avec “module”
 - module avail / purge
 - module load / unload R-3.5.3
- Ordonnanceur des calculs / job scheduler
 - Gestion automatisée du lancement de tous les calculs soumis sur le cluster (multi-critère)
 - qsub / qstat / qdel



Consommation électrique

- Cluster MBB ~175000 kWh / an ($\frac{1}{5}$ de clim)
- Plateforme MBB 235000 kWh
- Définition kWh (Wikipedia)
 - Le kilowatt-heure est une unité d'énergie correspondant à celle consommée par un appareil de 1 000 watts (soit 1 kW) de puissance pendant une durée d'une heure. Elle vaut 3,6 mégajoules (MJ)
- Ampoule 100W représente ~900 kWh / an ($0.1\text{kW} * 24\text{h} * 365\text{j}$)
- Foyer français moyen 5000 kWh / an
- En ordre de grandeur Cluster MBB ~ 200 ampoules de 100W allumées en permanence, ou la consommation de 40 foyers



Nouvelle tendance: les conteneurs

- Sorte de serveur virtuel
- Permet de préparer un système d'exploitation isolé et simplifié dans lequel va s'exécuter le code
- Déplace le problème de l'installation au niveau de l'utilisateur
- Déployable sur la plupart des clusters
- Exemple : Docker, Singularity, etc.
- Une chose de plus à apprendre... futur atelier MAIA ?

Futur de la plateforme

- Cemeb 2.0 moins de moyen pour la plateforme
- Pas de remplacement des noeuds défectueux (fin des garanties matérielles proche)
- Services recentrés sur Bigmem, workflow, GPU
- Délégation possible du service vers MESO@LR, le cluster de l'UM
 - <https://meso-lr.umontpellier.fr/>

Ce qui est appris sur une plateforme servira
sur les autres plateformes de calcul !



Où trouver de l'aide ?

- MBB : une équipe dédiée (3 personnes)
- Soumission des tickets
 - https://kimura.univ-montp2.fr/calcul/helpdesk_NewTicket.html
- Aide en ligne (très bien faite !)
 - https://gitlab.mbb.univ-montp2.fr/docs/doc_user/docs/_book/articles/index.html



UMR

botAnique et Modélisation de l'Architecture des
Plantes et des végétations

Calcul sur le cluster MBB

Atelier MAIA P3M 02 juillet 2019

Philippe V.



cirad



UNIVERSITÉ
DE MONTPELLIER

