



L'IDRIS

Numéro 1 - Janvier 1996

Édito

Le 1er Novembre dernier, l'IDRIS a fêté son 2ème anniversaire. Il est probablement opportun de prendre quelques minutes pour nous interroger sur notre identité.

terface de support aux utilisateurs particulièrement performante - qui, avouons le, constitue l'une de nos fiertés.

O Û ALLONS - NOUS ?

D'OU VENONS - NOUS ?

L'IDRIS résulte de la volonté du CNRS, affichée en début de cette décennie, de concentrer ses moyens informatiques lourds sur un site unique. L'explosion de l'informatique distribuée a permis au calcul intensif de haute performance de se faire en grande partie en dehors des grands serveurs nationaux. Ceux-ci s'adressent de plus en plus à des utilisateurs qui nécessitent des ressources extrêmes. Par ailleurs, cette concentration de moyens a servi - on ne le répétera jamais assez - à effectuer de très importantes économies d'échelle : le CNRS dépense aujourd'hui moitié moins que ce qu'il dépensait en 1989 pour les gros moyens informatiques.

Vers une plus grande performance de notre environnement, dans tous ses aspects. La mise en place d'un serveur de visualisation destiné à faciliter le post-traitement des données du site et apporter ainsi une plus-value aux équipements graphiques des laboratoires, nous permettra d'aider à faire évoluer la visualisation d'un outil de *présentation* à un outil *d'analyse* des données. La mise en place du CRAY T3E l'été prochain offrira à nos utilisateurs la possibilité de s'attaquer à des problèmes scientifiques d'une complexité hors de portée des plate-formes en exploitation actuellement. Nos actions de formation - très fortement délocalisées en province - seront intensifiées en faisant appel aux techniques pédagogiques modernes structurées autour du serveur Web.

QU'AVONS NOUS ACCOMPLI ?

La mise en place d'un environnement de calcul de haute performance à la hauteur des ambitions et des besoins de nos unités de recherches. Ici, le mot clé est *environnement*. L'exploitation de nos plate-formes vectorielles - et des machines parallèles en phase en démarrage - serait impossible sans un serveur de fichiers de très haut de gamme. Une bonne partie des projets scientifiques s'étalent sur plusieurs architectures. L'utilisation efficace de toutes ces machines serait très difficile sans une in-

QU'EST-CE QUI NOUS JUSTIFIE ?

Tout simplement, la qualité de la science que nous aidons à produire. Le journal que nous lançons aujourd'hui sera l'instrument privilégié de notre communication externe, face à l'ensemble de la communauté scientifique. Je souhaite, à cette occasion, remercier nos autorités de tutelle pour leur soutien sans faille, et nos utilisateurs pour leur confiance. L'IDRIS fait de son mieux pour en être digne.

V. Alessandrini

SOMMAIRE

- EDITO = P1
- T3D/T3E = P2
- DU CÔTÉ DE LA CHIMIE = P4

- 10 POINTS SUR MAIA = P5
- LE RÉSEAU DE L'IDRIS = P5
- NEWS = P6

LE PARALLÉLISME À

Depuis le 1er Septembre dernier, une architecture parallèle CRAY T3D a été intégrée à l'environnement de calcul de l'IDRIS. Dotée de 128 processeurs et de 8 Gigaoctets de mémoire, cette machine est destinée à amorcer le programme de parallélisme massif de l'IDRIS et préparer le démarrage de l'exploitation du supercalculateur CRAY T3E acheté par le CNRS, dont la livraison est prévue pour l'été prochain.

QUELS SONT LES ENJEUX LIÉS AU PARALLÉLISME ?

Les technologies d'avant-garde qui sont à l'origine des supercalculateurs vectoriels traditionnels comme les Cray C98/C94 en exploitation à l'IDRIS approchent leurs limites. Ces technologies demandent des mémoires ultra-rapides très chères et des réseaux d'interconnexion mémoire-processeurs à grande bande passante, difficilement extensibles au delà de quelques dizaines de processeurs. Les architectures massivement parallèles constituent aujourd'hui le seul moyen connu de bâtir un supercalculateur de haut de gamme avec des composants technologiques de masse (processeurs RISC et mémoire moins rapide et moins chère). L'enjeu actuel n'est donc pas le parallélisme en tant que tel, qui n'est qu'un moyen dans la course aux téraflops, mais le passage d'une technologie dédiée à une technologie de masse.

QUELLE LOGIQUE EST DERRIÈRE LES CHOIX DU CNRS ?

L'expérience de l'exploitation de l'ancien CRAY 2 du C2VR et des CRAY C98/C94 installés à l'IDRIS nous a persuadé que, pour le type d'application qui s'exécute sur nos centres de calcul, un très bon équilibre taille mémoire - puissance de calcul pour une machine de production est de compter à peu près 1 Gigaoctet de mémoire par Gigaflop de puissance effective. Par puissance effective, il faut lire puissance moyenne délivrée par la machine et non puissance nominale théorique

affichée par le constructeur. Pour notre C98, la taille de la mémoire est de 4 Gigaoctets et la puissance effective d'environ 3 Gigaflops.

Si, maintenant, nous souhaitons disposer d'une plateforme de calcul intensif de haute performance qui soit au moins dix fois plus performante que le C98, il nous

faut passer à une machine comportant quelques dizaines de Gigaoctets de mémoire et quelques dizaines de Gigaflops de puissance effective. C'est le cas du T3E de l'IDRIS. Sa taille mémoire à la livraison sera de 32 Gigaoctets. Doté de 256 processeurs ALPHA EV5 à 300 Mhz, sa puissance nominale est de 600 Mégaflops par noeud, soit environ 150 Gigaflops pour l'ensemble de la configuration. L'évolution prévue des compilateurs, l'extrême performance du réseau d'interconnexion, les mécanismes performants inventés pour cacher les latences, nous conduisent à estimer (de manière plutôt conservatrice) la puissance effective à environ 20% de la puissance nominale, soit une trentaine de Gigaflops.



Cray T3D - Document CRAY Research Inc

QUELLE EST LA PLACE DU T3E DANS LE DISPOSITIF DES MOYENS INFORMATIQUES NATIONAUX ?

Certainement pas de remplacer ou de concurrencer les plate-formes vectorielles, mais plutôt de les compléter en amont en ouvrant une fenêtre sur une classe de thématiques scientifiques qui ne sont pas aujourd'hui accessibles avec leur niveau de performance. Cette vision hiérarchique du calcul intensif de haute performance effectué à l'IDRIS est visualisée dans la figure. La majeure partie du calcul intensif ne se fait pas dans les grands serveurs nationaux mais plutôt dans les moyens répartis dans les laboratoires et les serveurs départementaux et régionaux. Environ 500 projets s'exécutent chaque année sur le C98 parce qu'adaptés à ce niveau de performance. La mise en service des machines parallèles entraînera un flux sortant des plate-formes vectorielles pour les thématiques scientifiques dont le nouveau niveau de perfor-

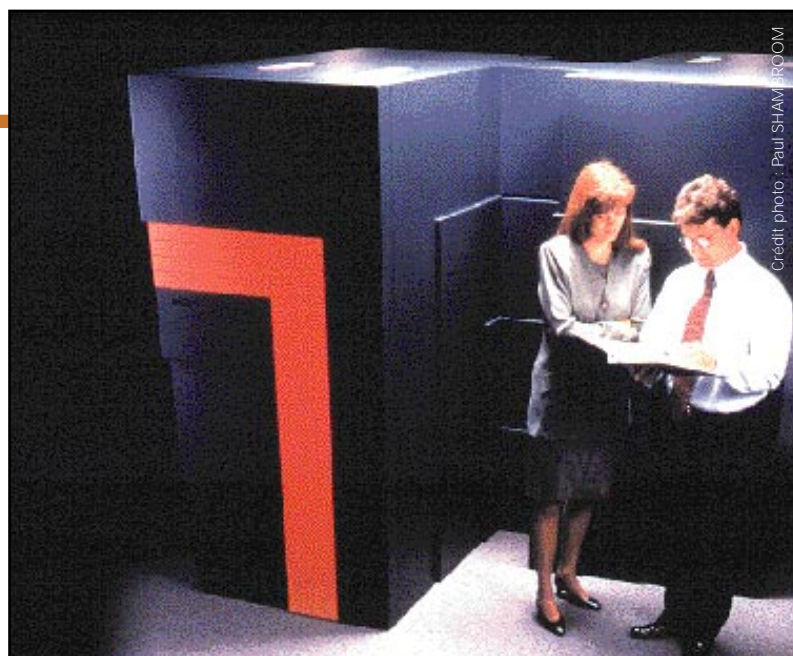
mance est indispensable pour le maintien de leur compétitivité internationale (on le constate cette année). Mais nous constatons également cette année que les flux entrant sur le calcul vectoriel à l'IDRIS se maintiennent. Les équilibres définitifs sont difficiles à prévoir.

Revenons au T3D en exploitation aujourd'hui. L'IDRIS a mis en place un support aux utilisateurs très personnalisé pouvant aller dans certains cas jusqu'à la participation très active dans la parallélisation d'un code. Nous avons également décidé de donner dans un premier temps aux utilisateurs un accès en mode "développement" caractérisé par un accès limité à l'ensemble des ressources, destiné à faciliter la mise point et le débogage des codes. Le passage en mode "production" avec des privilèges d'accès élargis se faisant après un contrôle de la qualité des codes.

Depuis la mise en service de la machine, 37 projets ont été implantés en mode développement, et plusieurs sont prêts à passer en production. 70 nouveaux projets sont arrivés avec la demande des moyens pour 1996 et bénéficieront d'un accès immédiat en mode développement. Sur les projets implantés aujourd'hui, environ 70% disposaient au démarrage d'un code parallèle développé, grâce PVM, sur réseau de stations de travail, et nos activités de support aux utilisateurs se concentrent sur leur optimisation. On constate une très forte corrélation entre l'utilisation du C98 et celle du T3D. Le T3D est en train de remplir très correctement son rôle de catalyseur dans la migration des applications qui nécessitent un niveau de performance accru, et de préparation d'une mise en production rapide et efficace du T3E.

**LE PARALLÉLISME EST,
POUR L'INSTANT, UNE TECHNOLOGIE
DE SUBSTITUTION :**

nous traitons différemment et parfois un peu mieux les mêmes problèmes que ceux qui s'exé-

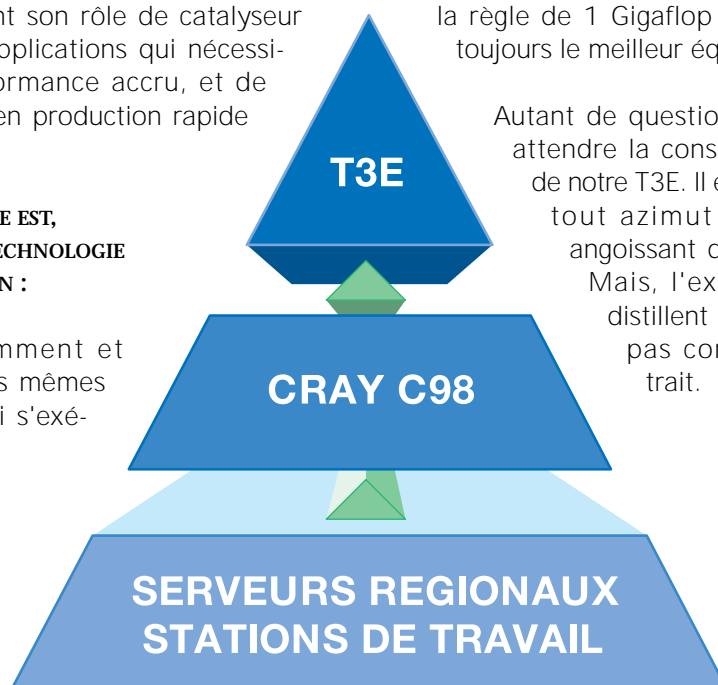


Cray T3E - Chassis liquide Cooled
Document CRAY Research Inc

cutent sur le C98. Personne n'a abordé ni encore maîtrisé des simulations qualitativement différentes avec un niveau de complexité plus élevé, comme par exemple les simulations 3D qui, dans les secteurs de la mécanique des fluides, de la combustion, de l'interaction laser-matière, seront possibles sur le T3E. La mise en service du T3E devrait nous permettre de beaucoup apprendre sur la possibilité réelle d'effectuer des simulations d'un niveau de complexité supérieure, et de mieux cerner la meilleure manière de produire de la science avec une telle machine. Nous trouverons des débuts de réponses à des questions comme : Quelle est notre possibilité réelle de résoudre ce type de problème ? Quel est l'impact réel de la dégradation de performances (ralentissement critique) qui frappe un grand nombre d'algorithmes lorsque la taille du problème augmente ? Est-ce que la règle de 1 Gigaflop par Gigaoctet représente toujours le meilleur équilibre à cette échelle ?

Autant de questions dont la réponse devra attendre la consolidation de l'exploitation de notre T3E. Il est de bon ton de proclamer tout azimut le besoin immédiat et angoissant d'une machine à Téraflopps. Mais, l'expérience et le savoir se distillent goutte à goutte, et il n'est pas conseillé de les boire d'un trait.

V Alessandrini



Du côté de la chimie

GAUSSIAN94

Gaussian94 a été installé récemment. Il est disponible sur les machines vectorielles (Atlas, Axis) et sur la grappe de stations scalaires (Pascal, Blaise1... Blaise5). La version précédente (Gaussian92) restera disponible pendant encore quelques mois. La note technique numéro 8 fournit toutes les informations nécessaires à son utilisation. Une nouvelle version multiprocesseur sera bientôt disponible sur les machines vectorielles (*suivre les news*).

AMBER

Ce logiciel de dynamique moléculaire est disponible dans sa version 4.0 sur les machines vectorielles et sur la grappe. Une note technique décrivant son utilisation est en préparation. En attendant, on pourra consulter la news Amber sur Atlas et sur Pascal. La version 4.1 sera disponible prochainement (*suivre les news*).

UNICHEM3.0

Unichem est un logiciel de type client-serveur permettant de soumettre des travaux sur les machines vectorielles à partir d'une plate-forme graphique (qui peut être une station Silicon Graphics ou une station Sun) : on prépare la structure à étudier sur la station (à l'aide d'outils graphiques très conviviaux), on prépare le travail à soumettre à l'aide de menus, on soumet le travail sur le Cray, on suit l'exécution, on récupère automatiquement les résultats que l'on peut ensuite visualiser (nouvelle structure, orbitales, cartes de densité, etc).

Les logiciels de calcul tournent sur le serveur (l'une des deux

machines vectorielles). Pour l'instant, on a accès à quatre logiciels : trois logiciels fournis avec la distribution Unichem :

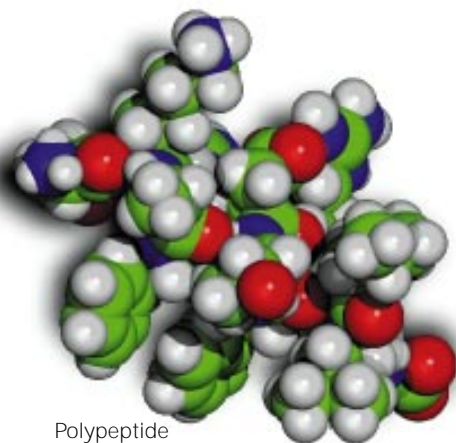
- MNDO93 : logiciel de type semi-empirique
- DGAUSS : logiciel de type fonctionnelles de densité,
- CADPAC : logiciel de type *ab initio*, et un logiciel externe (pour lequel Unichem n'offre que l'interface) :
- Gaussian92 : logiciel de type *ab initio*.

La note technique numéro 7 fournit toutes les informations nécessaires à son utilisation.

HONDO95

Il s'agit de la nouvelle version du logiciel de chimie quantique *ab initio* Hondo. Celle-ci est disponible sur la grappe.

La note technique numéro 14 fournit toutes les informations nécessaires à son utilisation.



Polypeptide

CRYSTAL 92

Il s'agit du logiciel de chimie quantique *ab initio* spécialisé dans l'étude des structures périodiques. Celui-ci est disponible sur la grappe. Une note technique est en cours de rédaction. En attendant, on pourra consulter la news Crystal92 sur Pascal.

GAMESS

Ce logiciel de chimie quantique *ab initio* est disponible sur la grappe. Il s'agit de la version en date du 3 février 1995. Gamess est distribué avec quelques outils graphiques assez simples à mettre en œuvre, comme molplt. Voir la news CHIMIE sur Pascal.

MOLCAS3

Il s'agit du logiciel de chimie quantique *ab initio* spécialisé dans les études de corrélation électronique par des méthodes de type multiconfiguration. Il est disponible sur la grappe. Une note technique est en préparation. En attendant, on pourra consulter la news Molcas3 sur Pascal.

MOPAC93

Ce logiciel est en cours d'installation sur la grappe. (*Suivre les news*).

AUTRES LOGICIELS

D'autres logiciels sont disponibles sur la grappe, mais ne seront plus maintenus, le plus souvent parce qu'ils font double emploi avec d'autres logiciels. Ils sont néanmoins conservés en l'état. Il s'agit des logiciels suivants : alchemy, ampac, kgnmol, monstergauss, mm3 et sirius.

Si vous êtes intéressé par un logiciel qui ne figure pas dans cette liste, ou bien si vous disposez d'un logiciel que vous souhaitez porter sur l'IDRIS dans le cadre de l'un de vos projets, vous pouvez prendre contact avec Jean-Marie Teuler (teuler@idris.fr) ou Etienne Gondet (gondet@idris.fr).

Jean-Marie TEULER



Dix points à connaître sur MAIA

1 • Qu'est-ce que Maia ?

Maia est la machine fichiers de l'IDRIS, elle gère un volume important de fichiers réparti dans 3 grands espaces : l'espace actif, l'espace d'archivage et l'espace réservé aux sauvegardes des différentes machines du centre (pour les \$HOME de Atlas, Kaos, Pascal et Hebe).

2 • Que doit-on stocker sur Maia ?

Les fichiers stockés sur Maia doivent être essentiellement des fichiers utiles aux simulations effectuées à l'IDRIS. Il est préférable de stocker un petit nombre de gros fichiers que de nombreux fichiers de petites tailles.

3 • Que devient l'ancienne machine fichiers V3 ?

V3 est arrêtée depuis le 31 Octobre 1995. Les opérations de transfert et d'archivage de fichiers ne sont plus possibles sur cette machine. Seul le désarchivage de fichiers de V3 sur Maia subsiste (voir question 8).

4 • Que doit-on faire lorsque l'on change de mot de passe de Maia ?

Dès le changement de mot de passe sur Maia, il faut crypter le mot de passe de Maia sur les machines du centre (Atlas, Kaos, Pascal, Hebe) à l'aide de la commande "ftuas -p maia". Cette opération crypte le mot de passe sur la machine concernée et permettra ultérieurement les transferts (**maiget**, **maiaput**, **ftget**, **ftput**) avec Maia.

5 • Que doit-on faire lorsque l'on reçoit un courrier électronique concernant les quotas sur Maia ?

Dès la réception du courrier électronique annonçant le dépassement de 90% du quota, il est préférable d'anticiper et par conséquent de "nettoyer" l'espace actif (\$HOME) de Maia, soit en détruisant les fichiers inutiles, soit en archivant les fichiers les moins utilisés. Cette opération nécessite auparavant la consultation des autres membres du groupe Unix.

6 • Quand peut-on considérer qu'une commande d'archivage (**archcp**) est terminée ?

Avant toute manipulation des fichiers originaux du \$HOME (**mv**, **rm**), il faut attendre le courrier électronique relatif à cette opération et vérifier que tous les fichiers ont bien été archivés (le sigle "KO" indique qu'il faut archiver à nouveau le fichier concerné). La commande **archive request** ne permet pas de savoir si l'archivage est complètement terminé.

7 • Quelle est la durée de rétention des fichiers archivés ?

La durée de rétention est la même pour tous les fichiers archivés, elle a été fixée à 5 ans. Pour conserver un fichier au delà de 5 ans, il faudra le désarchiver et l'archiver à nouveau.

8 • Comment restituer des fichiers archivés sur V3 ?

Cette opération se fait sur Maia à l'aide de la commande **reloadbv3**. Une fois les fichiers désarchivés dans l'espace actif de Maia, il faudra archiver (**archcp**) si nécessaire dans l'espace d'archivage (\$ARCH). Attention, les fichiers ne peuvent être désarchivés qu'une seule fois par cette commande. La durée de vie des fichiers archivés sur V3 est obtenue par la commande **listbv3**, le maximum étant 5 ans.

9 • Est-il possible d'autoriser un autre login que le mien à lire (ou modifier) mes fichiers sur Maia ?

Oui, mais les accès Unix ne suffisent plus, il faut utiliser les ACL (Access Control List). Reportez-vous à la documentation sur Maia ou bien contactez l'assistance.

10 • Des fichiers ont disparu sur Maia, que doit-on faire ?

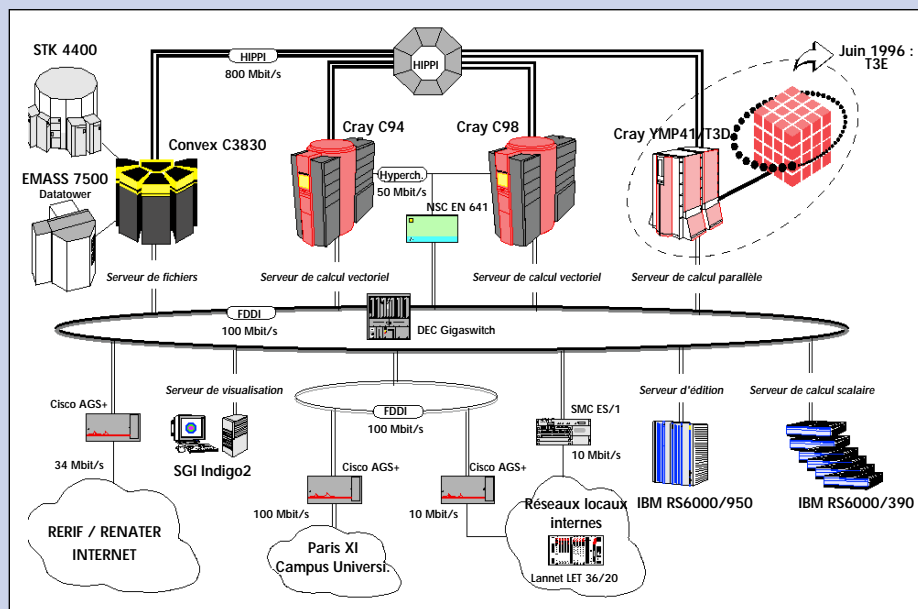
Il existe une commande (**fsundelete**) qui permet de restituer le(s) fichier(s). Plus l'intervention est rapide, plus la probabilité de retrouver le fichier est grande. N'hésitez pas à contacter l'assistance.

Gilles GRASSEAU

POUR EN SAVOIR PLUS

- contactez l'assistance par téléphone, (1) 69 82 42 00, ou bien par courrier électronique, assist@idris.fr
- lisez la note technique numéro 2 (NT2.ps) sur Hebe dans le répertoire `/u/idris/public/notes_techniques`

Le réseau de l'IDRIS



L'architecture réseau de l'IDRIS intègre différentes technologies : Ethernet, HYPERchannel, FDDI et HiPPI autorisant des débits nominaux respectifs de 10, 50, 100 et 800 Mbps.

Plusieurs réseaux IP spécifiques, constitués autour des routeurs (CISCO, NSC, SMC), des concentrateurs Ethernet/FDDI (DEC, LANNET), du commutateur FDDI (DEC) et du commutateur HiPPI (NSC), permettent des transferts volumineux et performants entre les supercalculateurs, la grappe de stations de travail, le serveur de fichiers et les frontales (serveur d'édition et serveur de visualisation). L'accès au monde de la Recherche et à l'Internet est réalisé via une connexion RERIF/RENATER à 34 Mbps.

Enfin, un service d'accès aux machines de l'IDRIS via le Réseau Téléphonique Commuté (RTC) est fourni aux utilisateurs isolés et offrira bientôt des débits de 28.8 Kbps.

Claude SAIVE



Gestion scientifique des Ressources

Dans l'esprit des modalités de fonctionnement de très gros équipements, le Conseil Scientifique de l'IDRIS effectue périodiquement un examen des résultats scientifiques obtenus à l'aide de cet environnement. Cette évaluation pour la période 1994 - 1995 est actuellement en cours. Un Rapport de Conjoncture sera publié en février 1996.

Renseignements pratiques

Qui joindre à l'IDRIS :
 La Direction(1) 69 82 41 41 et dir@idris.fr
 Le Secrétariat(1) 69 82 41 77/41 46/41 67
 et secretariat@idris.fr
 L'Assistance(1) 69 82 42 00 et assist@idris.fr
 Le Pupitre(1) 69 82 41 50
 Par FAX(1) 69 28 52 73



Formation IDRIS

Calendrier des cours IDRIS pour le premier trimestre 1996 :

17 janvier	Architecture superscalaire, utilisation de la grappe	2 jours
30 janvier	Fortran 90 (apports de la norme)	3 jours
05 février	Architecture vectorielle, utilisation du Cray C98	5 jours
12 février	Visualisation, présentation du serveur	1 jour
14 février	Visualisation, cours de base AVS	3 jours
19 février	Architecture parallèle, introduction à l'utilisation du Cray T3D-T3E, utilisation de PVM en réparti	2 jours
21 février	Architecture parallèle, introduction à l'utilisation du Cray T3D-T3E, CRAFT, optimisation SHMEM	3 jours
26 février	Le langage C	5 jours
19 mars	Chimie, introduction a Gaussian	2 jours
25 mars	Langage C++ et applications scientifiques	2 jours
27 mars	Visualisation, cours avancé AVS	2 jours

L'IDRIS assure également des cours en Province (Toulouse, Marseille, Grenoble, etc) les demandes doivent être formulées à dir@idris.fr Pour toute inscription et renseignement complémentaire sur le calendrier ci-dessus, contacter le secrétariat de l'IDRIS au (1) 69 82 41 46 ou 41 67 ou par messagerie à secretariat@idris.fr




Documentation et Publications IDRIS

Liste des notes techniques disponibles ou en cours de rédaction :

- NT1 Informations à connaître pour utiliser le Cray C90
- NT2 Présentation des fonctionnalités de la machine fichiers MAIA
- NT3 Logiciel de restitution de fichiers : TiNa
- NT4 Présentation des 3 classes NQS multi-taches
- NT5 Nouveautés de la version 6 du compilateur Cray cf77
- NT6 NQS sur la grappe
- NT7 Utilisation d'Unichem sur le Cray C90 (Chimie)
- NT8 Introduction à Gaussian dans l'environnement de l'IDRIS
- NT9 T3D/T3E : stratégie de parallélisation des codes à l'IDRIS
- NT10 Comment accéder à l'IDRIS par TRANSPAC, Minitel ou modem
- NT11 Présentation de la T3D à l'IDRIS
- NT12 Fermeture de la machine fichiers V3, étapes à suivre
- NT14 Introduction à Hondo dans l'environnement de l'IDRIS



CENTRE NATIONAL DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



Directeur de la Publication
 Victor Alessandrini
Rédacteur en chef
 Thierry Goldmann

Art & Concept SYLLEPSE : (1) 43 24 27 77

Merci de photocopier et de renvoyer cette demande à :
 IDRIS - Bat. 506 - B.P. 167 - 91403 ORSAY CEDEX - FRANCE

Je souhaite recevoir La Lettre de l'IDRIS
 J'ai déjà un login à l'IDRIS
 Je n'ai pas de login à l'IDRIS

Nom : Prénom : Fonction :
 Organisme :
 Adresse :
 Code Postal : Ville : Pays :
 Tél : Fax :