

23 novembre 2004

Equipements de calcul intensif dans les institutions universitaires de la communauté française : inventaire, accès, formations

Rapport rédigé à la demande du Fonds National de la
Recherche Scientifique

R. Keunings, X. Gonze, D. Peeters
(U.C.L.)

B. Champagne
(F.U.N.D.P.)

1. Introduction
 2. Considérations de base
 - 2.A. Equipements de calcul intensif
 - 2.B. Profils d'utilisateurs
 - 2.C. Gestion, accès, formation
 3. Les équipements universitaires de calcul intensif en communauté française
 4. Spécificités du calcul intensif dans le cadre des grands équipements
- Annexe 1. Adresses e-mail des personnes mentionnées
Annexe 2. Tableau synthétique des entités gérant des équipements de calcul intensif et des caractéristiques de ces équipements.
Annexe 3. Description détaillée de l'équipement, de la formation et de l'accès.

1. Introduction

Le présent rapport a pour but de fournir au Fonds National de la Recherche Scientifique un inventaire des équipements de calcul intensif (ECI) disponibles dans les institutions de la communauté française, ainsi que de décrire les accès à ces équipements et les formations disponibles. Un inventaire similaire a été demandé pour chaque type de grand équipement que le F.N.R.S est amené à financer et dont la communauté d'utilisateurs est répartie dans différentes institutions.

Les auteurs du rapport, utilisateurs d'ECI, ont établi une liste de collègues actifs en calcul intensif, dans leur propre institution et dans les autres institutions universitaires de la communauté française (IUCF). Ils les ont ensuite contactés, en leur demandant de fournir les renseignements adéquats, ainsi que les coordonnées éventuelles d'autres collègues, non repris dans la liste initiale. De la sorte, celle-ci a été graduellement complétée, et comprend, actuellement, des représentants de six institutions universitaires de la communauté française : F.S.A.Gx, F.U.N.D.P., U.Lg, U.C.L., U.L.B., U.M.H . Aucune certitude d'avoir atteint tous les responsables d'ECI des IUCF n'est toutefois présente. A ce propos, il serait probablement utile d'avoir la possibilité d'examiner les contenus des demandes de financement déposées au FNRS ou aux fonds associés durant les dernières années. Contrairement à ce qui peut exister pour d'autres grands équipements, aucun groupe de contact d'utilisateurs d'ECI des IUFC n'existe jusqu'à présent.

Après la collecte initiale d'informations, une première version de ce rapport a été discutée le 15 novembre 2004, lors d'une réunion organisée aux F.U.N.D.P, en présence de 14 personnes. Une seconde version de l'inventaire a été diffusée, pour avis, à l'ensemble des personnes contactées, reprise en annexe 1. Après une dernière révision, la version finale a été remise au F.N.R.S.

Le présent rapport comporte, après cette brève introduction (section 1), diverses considérations de base nécessaires pour comprendre correctement l'inventaire (section 2). Ensuite, sur la base des annexes 2 et 3 (présentant respectivement, la liste des entités gestionnaires d'ECI et le détail des équipements gérés, des possibilités d'accès et des formations), un panorama des ECI des IUFC est brossé (section 3). La section 4 présente quelques réflexions concernant les spécificités des équipements de calcul intensif, de leur usage et de leur gestion, par rapport à celles d'autres grands équipements scientifiques.

2. Considérations de base

2.A Caractéristiques des équipements

L'inventaire porte sur des équipements de calcul intensif, à savoir, des ordinateurs, ou ensembles d'ordinateurs (dénotés "grappes"), dont certaines des caractéristiques critiques dépassent largement celles d'un ordinateur personnel (PC) utilisé par un chercheur isolé, et qui sont dédiés à cet usage (les PC utilisés pour de la bureautique le jour et pour du calcul intensif la nuit n'ont pas été comptabilisés). Les caractéristiques principalement visées sont la puissance de calcul et la mémoire disponible. D'autres caractéristiques intéressantes constituent moins fréquemment une limitation, vu l'état actuel de la technologie (p.ex. espace disque), mais ont néanmoins été inventoriées. Pour évaluer ces caractéristiques, certaines explications sont nécessaires.

En ce qui concerne la puissance de calcul des ECI, diverses définitions sont possibles. La puissance-crête cumulée pour les opérations en virgule flottante (Floating point aggregate peak performance) est obtenue en sommant, pour tous les processeurs composant l'ECI, le produit de leur fréquence d'horloge par le nombre d'opérations en virgule flottante exécutable à chaque battement d'horloge (Floating point operation - Flop). Cette quantité est aisément déduite des spécifications connues de chaque ECI. Elle définit une limite supérieure de la quantité d'opérations par unité de temps qui peut être effectuée par cet ECI. Elle ne donne toutefois qu'une idée peu précise de la vitesse à laquelle un programme réel donné pourra être exécuté sur cet ECI.

Les mesures plus précises de puissance de calcul, nécessitent la prise en compte de l'architecture de l'ECI. A l'heure actuelle, les ECI sont tous des ensembles de processeurs. Ces processeurs peuvent être groupés de sorte à accéder à une mémoire partagée, adressable directement par chacun des processeurs du groupe (un tel groupement est appelé "noeud" de calcul). De plus, des ensembles de processeurs ou des noeuds peuvent être connectés par un réseau rapide, de sorte à former une grappe.

Pour un ECI donné, la puissance-crête cumulée ne sera jamais atteinte : les limitations dues au transfert des données entre mémoire et processeur, ou dues au transfert de données entre noeuds de calcul, ralentiront dans des proportions significatives les calculs (le facteur de ralentissement pourra être compris entre 2 ou 10 pour des noeuds de calcul, voire même plus pour une grappe de calcul éventuellement dotée d'un réseau trop lent). De plus, tous les programmes ne sont pas capables de tirer parti de toutes les opérations disponibles par cycle.

En fait, une évaluation précise de la puissance d'un ECI nécessite d'effectuer des "benchmarks" : soit des tests standardisés, soit le test direct du ou des programmes qui seront le plus souvent exécutés sur l'ECI. Ceci est en général un travail assez conséquent, effectué lors de l'étude du marché préalable à l'acquisition d'un ECI. De ce fait, il n'est pas possible, dans le cadre de cet inventaire, de fournir une estimation basée sur des "benchmarks" de chaque ECI des IUFC. Par contre, la puissance-crête cumulée, aisément évaluée, sera fournie, avec les réserves précédemment mentionnées.

En ce qui concerne la mémoire, diverses évaluations sont également possibles. La mémoire directement adressable (ou mémoire partagée) est relative à un noeud de calcul et est exploitable par tous les types de programmes. Par contre, la mémoire totale disponible par tous les processeurs d'un ECI, appelée mémoire distribuée, n'est exploitable que par des programmes conçus pour pouvoir en tirer parti, ce qui augmente le travail humain nécessaire à leur développement, et n'est pas toujours possible.

Pour comparaison, un ordinateur PC typique atteint une puissance de crête d'environ 2 GFlops (c'est-à-dire 2 milliards d'opérations par seconde), avec une mémoire de 256 MOctets (c'est-à-dire 256 millions d'octets). Les équipements envisagés dans cet inventaire se trouvent plutôt dans la gamme de puissance crête de 10 à 100 GFlops, avec une mémoire partagée allant jusqu'à une trentaine de GOctets (c'est-à-dire une trentaine de milliards d'octets). Certains sont des grappes de plusieurs dizaines de PC, d'autres comportent des noeuds de calcul fort différents de PC.

2.B Profils d'utilisateurs

Après avoir spécifié les caractéristiques des ECI, il s'agit de spécifier les profils des utilisateurs.

Une première classe d'utilisateurs (dénommée "producteurs") se base sur des programmes déjà existants, pour obtenir des résultats scientifiques (typiquement des simulations de phénomènes physiques, chimiques, économiques, etc ...). Un même résultat scientifique (menant par exemple à une publication) pourra être obtenu sur n'importe quel ECI, pour autant que la mémoire disponible soit suffisante. Ce résultat sera obtenu plus ou moins rapidement selon la puissance de l'ordinateur et selon son taux d'utilisation : à titre d'exemple, une simulation spécifiée, nécessitant (chiffres typiques) dix millions de milliards d'opérations, pourra être effectuée en soixante jours sur un PC n'exécutant que cette simulation, et en une trentaine d'heures sur un ordinateur cinquante fois plus puissant, également entièrement consacré à cette simulation. Toutefois, si

l'ordinateur cinquante fois plus puissant est partagé par cinquante utilisateurs, la même simulation ne sera exécutée qu'en soixante jours, soit aussi lentement que par un PC. Pour cette classe d'utilisateurs, c'est la puissance totale divisée par le nombre d'utilisateurs qui compte.

Un important facteur limitant, déjà mentionné plus haut, est la mémoire partagée disponible par noeud. Certains producteurs pourront se satisfaire de 1 ou 2 GOctets par noeud, voire moins, tandis que d'autres producteurs auront besoin d'une ou de plusieurs dizaines de GOctets par noeud. Pour certains producteurs, une limitation est également présente au niveau de l'espace de stockage d'information (disques).

Un second classe d'utilisateurs (dénommée "développeurs") développe des programmes, qui doivent être aussi performants que possible. Leur utilisation d'ECI est toutefois assez ponctuelle : après une plus ou moins longue période de développement, qui peut souvent s'effectuer sur le PC de leur bureau, ils testent leurs programmes sur différents ECI (différentes architectures), en détectent les faiblesses, puis les corrigent. Ils ne sont donc utilisateurs d'ECI que sporadiquement, mais requièrent toutefois à intervalle plus ou moins régulier l'accès exclusif à un ECI.

Enfin, certains utilisateurs combinent les aspects des deux classes précédentes : tout en effectuant de longues simulations, ils travaillent avec leurs propres programmes, qu'ils sont amenés à améliorer régulièrement, en passant par des phases de tests.

Lors de l'achat d'un ECI, pour un budget donné, ces différents aspects doivent être pris en compte. La stratégie de choix sera différente s'il s'agit d'un ECI qui devra être utilisé par un petit groupe de personnes, pour faire des calculs basés sur un seul programme déjà bien mis au point, ou au contraire s'il s'agit d'une communauté plus large d'utilisateurs de profils différents.

Le domaine d'activité scientifique (physique, chimie, hydrodynamique, etc ...) d'un utilisateur ne détermine pratiquement pas le type d'ECI nécessaire, et le mode d'utilisation d'un ECI.

Tous les utilisateurs d'ECI sont aujourd'hui familiarisés avec les considérations de bases esquissées dans la sous-section précédente, et en tiennent compte pour leur utilisation d'ECI.

2.C Gestion, accès, formation

De nos jours, des ECI sont gérés aussi bien par des informaticiens que par des chercheurs (comme outil de leur recherche – et non comme but de leur recherche). Pour ces derniers, il s’agira en général de grappes de PC, dont l’accès sera restreint à un petit groupe d’utilisateurs, avec un surcroît de travail raisonnable. La mise en oeuvre d’ECI basés sur des noeuds plus complexes, ou destinés à servir une communauté plus large requiert des connaissances informatiques, ainsi qu’un investissement humain que des chercheurs ne peuvent se permettre. Certaines institutions allouent du personnel informatique à la gestion d’ECI, constituant alors un “centre de calcul” ou “institut de calcul”. Le risque existe alors d’une gestion d’ECI découplée des besoins réels de la communauté des utilisateurs, rendant nécessaire l’existence d’une structure de concertation, (typiquement un comité des utilisateurs), à moins que la direction même du “centre de calcul” ne soit entre les mains d’utilisateurs.

L’accès à un ECI par des personnes extérieures à une institution ne pose techniquement aucun problème, grâce aux progrès réalisés dans le cadre d’internet (connexion sécurisée par ssh, accès de type GRID, ...). Toutefois, l’intérêt d’ouvrir l’accès d’un ECI en-dehors de sa communauté de chercheurs initiale doit s’évaluer aussi bien du point de vue de celui qui donne l’accès que de celui qui reçoit la possibilité d’accès.

L’ouverture engendre des problèmes supplémentaires pour les gestionnaires d’un ECI et ses utilisateurs :

- (1) le surcroît de travail engendré par la gestion d’utilisateurs extérieurs (permissions, comptes, conflits possibles, etc ...)
- (2) le fait qu’un ECI soit déjà utilisé à sa pleine puissance, et qu’une utilisation accrue ne puisse se faire qu’au détriment de ses utilisateurs actuels.

Dès lors -en simplifiant peut être de manière excessive la situation-, des stratégies d’ouverture ne seront développées que par des centres disposant déjà d’une large communauté d’utilisateurs locaux, et ne viseront qu’un petit nombre d’utilisateurs supplémentaires, par rapport à la taille de cette communauté (en général, des collaborateurs extérieurs d’équipes locales). Toutefois, pour les utilisateurs supplémentaires de type “développeur”, menant des tests sporadiques, l’utilisation accrue (2) a souvent peu d’impact. L’intérêt de l’accès à différents équipements extérieurs est d’ailleurs le plus grand pour ces utilisateurs-là. En ce qui concerne les “producteurs”, tout dépendra du taux d’utilisation de l’ECI auquel ils auront accès, à moins que cet accès ne soit rendu

nécessaire par la possibilité d'utiliser une mémoire partagée plus grande que celle des ECI de leur institution.

En ce qui concerne la formation, on distinguera également les ECI dont la communauté d'utilisateurs est restreinte, et pour lesquels les utilisateurs s'entraident pour se procurer les informations adéquates, et les communautés d'utilisateurs plus larges, qui organisent des formations pour leurs utilisateurs, sur base plus ou moins régulière.

3. Les équipements universitaires de calcul intensif en communauté française

L'annexe 2 présente un tableau synthétique des entités gérant des équipements de calcul intensif, et faisant partie d'institutions universitaires de la communauté française. Quelques caractéristiques de ces entités et de leur équipement sont également fournies dans ce tableau. L'annexe 3 présente une description détaillée de chacune de ces entités. Ces deux annexes fournissent un « instantané » des ECI des IUCF, au mois de novembre 2004. Plusieurs équipements supplémentaires sont en cours d'acquisition (un financement a déjà été obtenu), mais n'ont pas été inclus dans les chiffres communiqués dans ces annexes. Ainsi :

- le CISM (UCL) devrait bientôt acquérir une grappe supplémentaire de 150 à 250 processeurs (puissance-crête d'environ 900 à 1500 GFlops)
- le SEGI (ULg) devrait bientôt acquérir un ECI supplémentaire, de puissance assez similaire à celui du CISM
- les laboratoires de mécanique des fluides et de physique statistique des plasmas (ULB) devraient acquérir une grappe d'environ 80 processeurs (puissance-crête d'environ 480 GFlops).

De plus, le centre de calcul ULB/VUB a initié une étude pour le remplacement des machines actuelles, et espère atteindre 500 GFlops.

Quoi qu'il en soit, une série d'observations peut être effectuée sur le contenu des annexes 2 et 3.

Globalement, la communauté des utilisateurs de moyens de calcul intensif des IUCF représente plus de 500 chercheurs, répartis d'une manière plus ou moins proportionnelle à la taille des six institutions représentées (F.S.A.Gx, F.U.N.D.P., U.Lg, U.C.L., U.L.B., U.M.H). Environ 15 entités sont gestionnaires de tels ECI. Quatre entités (FUNDP+UMH/ISCF, UCL/CISM, ULB+VUB/CC, ULg/SEGI-CSI) fournissent des services à une communauté de quatre-vingt scientifiques ou plus (entités « centrales»), tandis que les autres entités desservent moins de quarante scientifiques (entités « locales»). Les sources de financement de ces entités sont très diverses, mais viennent principalement des institutions hôtes et du FNRS (y compris les fonds associés, FRFC et IISN). Les apports supplémentaires proviennent de la CFB, de l'ESA, de firmes privées, de l'UE et de la RW.

Du point de vue technique, notons que l'ensemble des ECI correspond à un parc d'environ 900 processeurs, fournissant une puissance-crête cumulée d'environ 2900 GFlops. Ces ECI permettent une recherche de qualité, mais la comparaison avec les ECI disponibles aux USA, au Japon et dans d'autres pays européens est édifiante. La liste des 500 plus puissants ordinateurs au monde est disponible sur

le site [http : //www.top500.org](http://www.top500.org) . On y apprend que l'ordinateur le plus puissant comporte 32768 processeurs et fournit une puissance-crête de 91750 GFlops. On y apprend également que plus de 150 ordinateurs, dont un bon nombre dans des institutions universitaires ou centres de calcul intensif ouverts, atteignent une puissance crête de 2900 GFlops. L'ensemble de la puissance disponible dans les IUFC ne nous classerait même pas dans la première centaine d'ordinateurs existants au monde. Plusieurs universités ont une puissance de calcul plus grande que cette puissance-crête de 2900 GFlops répartie sur l'ensemble des ECI de l'IUFC, Ainsi, en ne regardant que chez nos plus proches voisins, et en excluant les centres de calcul nationaux (français, italiens, etc, de plus grande puissance encore) nous remarquons : le centre de recherche de Jülich, près d'Aix-la-chapelle (8921 GFlops), l'université de Liverpool (5752 GFlops), l'université de Wuppertal (3686 GFlops), l'université de Hanovre (2662 GFlops). Par contre, aucun des ECI présents dans une IUFC n'atteint la puissance du 500ème ordinateur de cette liste (1456 GFlops).

En ce qui concerne les autres caractéristiques techniques, nous noterons que les mémoires partagées (par noeud) les plus importantes sont accessibles dans les entités centrales, avec un maximum de 60 GOctets, tandis que les entités locales, associées à des plus petites communautés, gèrent des ECI avec des mémoires partagées dont certaines peuvent être aussi petites que de 1 ou 2 GOctets. A ces petites communautés peuvent être associées des besoins très ciblés, qui peuvent être couverts au meilleur prix, pour atteindre un objectif spécialisé. Les centres doivent contenter un maximum d'utilisateurs, et utilisent les investissements disponibles pour couvrir une gamme plus diversifiée de besoins. De ce fait, les puissances-crêtes disponibles dans quelques-unes des entités locales peuvent être aussi importantes que celles actuellement disponibles dans certaines entités centrales. Cette constatation doit être nuancée par le fait que deux entités centrales (le CISM et le SEGI) sont sur le point d'acquérir un équipement particulièrement important (voir le début de cette section).

Les entités centrales ouvrent, de manière contrôlée, leur accès (notamment lorsque des équipes de recherche extérieures à l'entité ont des collaborations avec des équipes de recherche faisant partie de l'entité), tandis que plusieurs entités locales ont une politique plus restreinte, pour les raisons exposées en section 2. Le débit d'information vers BELNET est en général de 100 MBits/sec, bien que certaines entités ne bénéficient encore que d'une connexion de 10 MBits/sec. Le développement du GRID apparaît comme un développement prometteur dans le domaine de l'accès aux diverses entités : les problèmes de sécurité et de gestion d'accès y sont abordés systématiquement, de manière (en principe) transparente. Toutefois, mettre en oeuvre les logiciels nécessaires à l'accès GRID est une tâche que des informaticiens doivent prendre en charge, les scientifiques ne disposant pas des connaissances suffisantes et du temps

nécessaire. Une étude-pilote, dans le cadre BELGRID (<http://www.belgrid.be>) est actuellement menée entre 6 institutions universitaires et 11 partenaires non-universitaires, et a obtenu récemment un financement du FNRS pour acquérir du matériel dédié pour les tests de logiciels GRID.

La gestion des équipements présents dans les entités centrales est confiée à des informaticiens dédiés à cette tâche. Certaines entités locales disposent également d'informaticiens dédiés, alors que d'autres entités ne disposent que de scientifiques (doctorants et post-doctorants) pour effectuer cette gestion, au détriment de leur recherche.

Une seule entité (le CISM de l'UCL) organise systématiquement la formation de ses utilisateurs. Deux cycles de formation par année peuvent y être suivis, dont chacun comporte environ 7 séances (introduction au calcul intensif à l'UCL, parallélisme MPI -2 séances-, parallélisme OpenMP -2 séances-, NetCDF). Dans les autres entités, la formation se fait par contact avec un informaticien d'un centre (support team), ou par aide directe entre utilisateurs ainsi que par auto-formation.

Pour terminer cet inventaire, il faut mentionner la présence d'ECI dans plusieurs autres institutions de recherche de la communauté française de Belgique qui ne font pas partie d'une institution universitaire, notamment : l'ORB, le CENAERO et le CETIC. Le CENAERO (centre d'excellence en recherche aéronautique – <http://www.cenaero.be>) est particulièrement bien équipé, avec une grappe de 170 processeurs XEON cadencés à 3.06 GHz, de puissance crête excédant 1000 GFlops, et un ordinateur à mémoire partagée de 56 GOctets, groupant 28 processeurs Itanium 2 à 1.3 GHz, de puissance crête 146 GFlops. Le CENAERO a été fondé par l'UCL, l'ULB, l'ULg et l'institut Von Karman. Le CETIC a été fondé par la FPM, les FUNDP, et l'UCL

4. Spécificités du calcul intensif dans le cadre des grands équipements

Dans cette section, nous souhaitons faire part des principaux constats et de quelques éléments de réflexion qui sont ressortis clairement des discussions entre utilisateurs, lors de la réunion du 15 novembre, et des chiffres présentés dans cet inventaire.

Les constats :

- La communauté scientifique a besoin dans sa recherche par simulation ou modélisation de phénomènes d'accéder à des moyens de calculs puissants qui dépassent largement la puissance délivrée par une ou des stations de travail locale, fussent-elles regroupées dans de petits clusters. Néanmoins ces stations de travail locales restent un outil indispensable au chercheur (pré-, post-processing, développement)
- Comparés aux équipements de calcul intensif présents dans des institutions universitaires étrangères, ceux présents en communauté française de Belgique ont une puissance assez petite. L'ensemble des équipements qui y sont présents est moins puissant –2900 GFlops- que ceux présents dans de nombreuses institutions universitaires étrangères. Ainsi, chez nos proches voisins on trouve : le centre de recherche de Jülich, près d'Aix-la-chapelle (8921 GFlops), l'université de Liverpool (5752 GFlops), etc ...
- Les chercheurs de la communauté française de Belgique ciblent leur recherche afin d'essayer de compenser ce manque de moyens.
- La nature des applications développées ou utilisées par les uns et les autres est très variée et ne permet pas de définir une « machine » unique qui satisferait les besoins de tous. Les profils types décrits dans la section 2 sont révélateurs de cet aspect.
- La qualité du réseau est un élément déterminant pour certaines applications scientifiques. Alors que les besoins de communication entre machines locales sont généralement bien cernés, il n'en va pas de même pour les communications entre centres géographiquement délocalisés. En dehors du problème de bande passante, les aspects de sécurité et de confidentialité deviennent déterminants. Le développement des initiatives GRID qui semble aux yeux de tous promis à un avenir prometteur, s'inscrit dans cette logique.
- Le service rendu aux chercheurs est le plus apprécié lorsque les gestionnaires des moyens de calculs sont proches des utilisateurs, voire les utilisateurs eux-mêmes. Toutefois, la gestion des machines n'est pas la tâche première des chercheurs et il s'avère que le temps consacré à cette

tâche est trop important lorsqu'ils sont amenés à gérer des machines locales.

- L'ouverture de l'accès aux ECI à des « extérieurs » pose lui aussi le problème de la confidentialité et de la sécurité, mais il convient d'y ajouter et le surcroît de travail demandés aux gestionnaires et la saturation des ressources constatées dans la plupart des ECI.
- Plusieurs centres de calcul intensif localisés à l'étranger semblent délivrer un service apprécié des chercheurs et sont cités en exemple (parmi ceux-ci l'IDRIS-France est mentionné). Des projets d'intercommunication à haut débit entre ces centres sont actuellement à l'étude et permettrait d'augmenter considérablement les puissances de calculs disponibles.

Réflexions et propositions :

Les participants aux réunions s'accordent sur plusieurs points :

- Une coordination et même une synergie entre les ECI est souhaitable pour permettre un éventuel gain d'échelle et optimiser les ressources disponibles. Il conviendrait toutefois de laisser un maximum d'initiative et d'autonomie aux utilisateurs des ressources : certaines entités ont acquis, selon les moyens financiers qui leur étaient disponibles, un équipement précisément adapté à leur besoin, qu'ils utilisent au maximum de ses possibilités, et dont l'ouverture ne dégagerait aucune ressource supplémentaire.
- Un besoin de personnel informatique de qualité est nécessaire pour organiser et gérer les ressources inter-ECI
- Une formation des (nouveaux) utilisateurs est nécessaire. Celle-ci n'est actuellement dispensée que dans peu de centres (CISM). L'utilisateur doit donc souvent se former par lui-même avec toute la perte de temps et d'énergie que cela implique. L'organisation de ces formations en inter-universitaire au sein de la CF est fortement souhaitée et recommandée.
- Les utilisateurs souhaitent disposer d'un lieu de rencontre pour échanger leurs expériences. Il s'agit d'une part de partager l'expérience des chercheurs, ce qui pourrait se faire par la création d'un groupe de contact FNRS. Et d'autre part, de partager l'expérience de gestion et d'utilisation des ECI. Une commission de gestion est sans doute plus appropriée à ce stade.

Les rédacteurs de ce rapport ont le sentiment que tous les acteurs de la recherche universitaire concernés par le calcul intensif ont pu être joints et ont eu l'occasion d'exprimer leur point de vue. D'autres acteurs du secteur public ou privé n'ont pas été contactés (ORB, CENAERO, CETIC) mais ils ne font pas partie de la mission qui nous a été confiée. Quelques informations concernant ces acteurs ont toutefois été jointes à ce rapport.

En guise de conclusion, il apparaît que les utilisateurs des ECI font preuve de dynamisme et que le groupe constitué lors de cette enquête est prêt à poursuivre la réflexion si cette mission lui est confiée.

En termes de recommandation, il apparaît que l'accès aux moyens de calcul intensif reste une préoccupation majeure des chercheurs et que des investissements concertés entre différentes institutions, permettant de répondre aux besoins des divers profils d'utilisateurs doivent être augmentés. La concertation devrait se faire au niveau de l'intégration des ressources, de la gestion et de la formation. La localisation géographique des ECI n'est pas en soi un problème, pour autant qu'un réseau à haut débit permette d'interconnecter les équipements.

Annexe 1. Adresses électroniques des personnes contactées

Titre, nom	institution, entité*	adresse électronique
Prof. M. ARNOULD	ULB, Inst. Astrophysique	marnould @astro.ucl.ac.be
Prof. R. BEAUWENS	ULB, S. Métrologie Nucl.	rbeauwen @ulb.ac.be
Prof. D. BELJONNE	UMH SCMN et FUNDP, ISCF	David @averell.umh.ac.be
Prof. D. BERTRAND	ULB/IIHE	bertrand @hep.iihe.ac.be
Prof. J.-M. BECKERS	ULg, CGI	JM.Beckers @ulg.ac.be
Dr. O. BOUHALI	ULB/IIHE	obouhali @hep.iihe.ac.be
Prof. R. BRASSEUR	FSAGx, CBMN	brasseur.r @fsagx.ac.be
Dr. Y. BUSEGNIES	ULB, Inst. Astrophysique	Yves.Busegnies @ksb-orb.oma.be
Prof. D. CARATI	ULB, Phys. Stat. Plasmas	dcarati @ulb.ac.be
Prof. B. CHAMPAGNE	FUNDP, ISCF	benoit.champagne @fundp.ac.be
Prof. J. CORNIL	UMH, SCMN	Jerome @averell.umh.ac.be
Prof. C. CRAEYE	UCL, CISM	craeye @tele.ucl.ac.be
Prof. G. DEGREGZ	ULB, Méca. Fluides	degrez @ulb.ac.be
Prof. J. DELHALLE	FUNDP, ISCF	joseph.delhalle @fundp.ac.be
Prof. J.-M. DELSETH	FSAGx, CBMN	delseth.jm @fsagx.ac.be
Prof. E. DELEERSNIJDER	UCL, CISM/ASTR	ericd @astr.ucl.ac.be
Prof. P. DESCOUVEMONT	ULB, Phys. Nucl. Theor.	pdesc @ulb.ac.be
Dr. G. DESTREE	ULB/VUB Comput. Center	gdestree @ulb.ac.be
Prof. G. DIVE	ULg, CGI	gdive @ulg.ac.be
Prof. A. DUBUS	ULB, S. Métrologie Nucl.	adubus @ulb.ac.be
Prof. EL MASRI	UCL, FYNU	elmasri @fynu.ucl.ac.be
Dr. A. EMPAIN	ULg, Mol. Genetics	alain.empain @ulg.ac.be
Prof. P. GASPARD	ULB	gaspard @ulb.ac.be
Prof. Ph. GHOSEZ	ULg, CGI/PHYTEMA	philippe.ghosez @ulg.ac.be
Prof. M. GODEFROID	ULB	mrgodef @ulb.ac.be
Prof. X. GONZE	UCL, CISM	gonze @pcpm.ucl.ac.be
Prof. H. GOOSSE	UCL, CISM	goosse @astr.ucl.ac.be
Dr. J. HANTON	UMH, LPPE	joseph.hanton @umh.ac.be
Dr. P. HERQUET	UMH, LPPE	Philippe.Herquet @umh.ac.be
Prof. M. HOU	ULB, Phys. Sol. Irrad. Nano.	mhou @ulb.ac.be
Dr. E. HUENS	UCL, CISM	huens @inma.ucl.ac.be
Prof. R. KEUNINGS	UCL, CISM	roland.keunings @inma.ucl.ac.be
Prof. P.-E. LABEAU	ULB, S. Métrologie Nucl.	pelabeau @ulb.ac.be
Prof. R. LAZZARONI	UMH, SCMN	Roberto @averell.umh.ac.be
Prof. V. LEMAITRE	UCL, FYNU	vincent.lemaitre @fynu.ucl.ac.be
Dr. A. LEYGUE	UCL, CISM	leygue @mema.ucl.ac.be
Prof. E. LOUTE	UCL, IAG	loute @poms.ucl.ac.be
Prof. E. MUND	ULB, S. Métrologie Nucl.	emund @ulb.ac.be
Dr. A. NINANE	UCL, FYNU	ninane @fynu.ucl.ac.be
Prof. Y. NOTAY	ULB, S. Métrologie Nucl.	ynotay @ulb.ac.be
Prof. M. PAPALEXANDRIS	UCL, CISM	miltos @term.ucl.ac.be
Prof. D. PEETERS	UCL, CISM	peeters @chim.ucl.ac.be
Prof. B. PIRAUX	UCL, CISM	piraux @fyam.ucl.ac.be
Prof. P. RAEYMAEKERS	ULB/VUB Comput. Center	Paul.Raeymaekers @ulb.ac.be
Prof. M. RAYET	ULB, Inst. Astrophysique	mrayet @astro.ulb.ac.be
Prof. F. REMACLE	ULg, CGI/Chim. Phys. Th.	fremacle @ulg.ac.be
Prof. J.-F. REMACLE	UCL, CISM	remacle @gce.ucl.ac.be
Prof. J.-P. VIGNERON	FUNDP, ISCF	jean-pol.vigneron @fundp.ac.be
Prof. G. WINCKELMANS	UCL, CISM/TERM	winckelmans @term.ucl.ac.be

* Il s'agit de l'entité gestionnaire d'équipements de calcul intensif utilisée par la personne concernée, et non pas de l'entité à laquelle est rattachée statutairement la personne concernée.

Annexe 2. Tableau synthétique des entités gérant des équipements de calcul intensif et de certaines caractéristiques de ces ECI.

Université/ Identifiant	# processeurs	Mémoire partagée max. (GOctets)	Financements	Débit vers BELNET
Nombre d'utilisateurs	Puissance-crête (GFlops)	Espace disque dédiacé (GOctets)		(Mbits/sec)
FSAGx	100 processeurs	4 GOctets	FNRS	10
30 utilisateurs	150 GFlops	290 GOctets		
FUNDP+UMH/ISCF	176 processeurs	32 GOctets	FUNDP/FNRS	100
80 utilisateurs	910 GFlops	3500 GOctets		
UCL/CISM	202 processeurs	32 GOctets	UCL/FNRS/	100
100 utilisateurs	287 GFlops	1600 GOctets	CFB	
UCL/FYNU	48 processeurs	1 GOctets	FNRS	10
15 utilisateurs	148 GFlops	3250 GOctets		
ULB+VUB/CC	32 processeurs	16 GOctets	ULB, VUB	1000
180 utilisateurs	73 GFlops	3100 GOctets		
ULB/IAA	23 processeurs	1 GOctets	FNRS/IISN/ESA	10
6 utilisateurs	120 GFlops	470 GOctets		
ULB/IIHE	33 processeurs	1 GOctets	ULB/FNRS	100
10 utilisateurs	110 GFlops	400 GOctets		
ULB/MF+PSP	50 processeurs	2 GOctets	ULB/FNRS	10
10 utilisateurs	210 GFlops	600 GOctets		
ULB/Lab.PSIN	46 processeurs	1.5 GOctets	ULB, FNRS	10
6 utilisateurs	166 GFlops	1840 GOctets		
ULB/SMN	56 processeurs	12 GOctets	ULB, FNRS	10
20 utilisateurs	334 GFlops	270 GOctets		
ULg/CPT-PTM	10 processeurs	2.5 GOctets	FNRS/RW	100
6 utilisateurs	45 GFlops	400 GOctets		
ULg/GIGA GENMOL	13 processeurs	19 GOctets	Firmes privées	100
30 utilisateurs	14 GFlops	1500 GOctets		
ULg/SEGI-CSI	60 processeurs	60 GOctets	ULg/FNRS	100
100 utilisateurs	48 GFlops	500 GOctets		
UMH/PPE	19 processeurs	4 GOctets	IISN	100
10 utilisateurs	66.8 GFlops	3000 GOctets		
UMH/SCMN	66 processeurs	32 GOctets	FNRS, UE, RW	100
20 utilisateurs	315 GFlops	2365 GOctets		

Annexe 3. Description détaillée de l'équipement, de la formation et de l'accès

(Description entité par entité, dans chaque université)

FSAGx/CBMN

Nom : Centre de Biophysique Moléculaire Numérique

Responsables : Prof. Robert BRASSEUR

Point de contact : Jean-Marc DELSETH

(delseth.jm @fsagx.ac.be 2, Passage des Déportés – 5030 Gembloux ;

Tel : 081/622 521 ; Fax 081/622 522)

Nombre d'utilisateurs : une trentaine

Nombre d'EPT de gestionnaires : 1 .

Equipement de calcul intensif :

Cluster diskless :

- i) Processeurs : 48 bi-P3 (1GHz) + 1 serveur bi-Xeon
- ii) (+ 100 bi-P2 inactifs)
- iii) RAM : 1 Gb par esclaves (non partagé) + 2Gb pour le serveur (non partagés)
- iv) HDD dédicacé: 250 Gb (!! uniquement sur le serveur !!)
- v) OS : Fedora Core 1 (esclaves) et Fedora Core 2 (serveur).
- vi) Environ 150 milliards d'opérations/secondes (estimation manuelle, pas de test de Benchmark effectué)
- vii) Financement FNRS

1 SUN bi-Processeurs AMD Opteron (<< donation SUN pour Belgrid)

- i) RAM : 4Gb
- ii) HDD : 40 Gb (SCSI)
- iii) OS : Scientific Linux (RHE3.0 recompilé par le CERN).

Formations : pas de formation spécifique

Accès :

Dans le cadre de Belgrid, le cluster et au-moins une des machines 64 bits seront accessibles **uniquement** via GLOBUS (certificat fourni par Belgrid). Il n'est actuellement prévu aucune autre autorisation d'accès.

FUNDP+UMH/ISCF

Nom : Interuniversity scientific computing facility

Responsables : Profs. Jean-Pol Vigneron (FUNDP), Benoît Champagne (FUNDP), David Beljonne (UMH)

Nombre d'Equivalents Temps-Plein de gestionnaires :

1 informaticien

Nombre d'utilisateurs

80

Equipement de calcul intensif :

- 80 bi-processeurs Sunfire V60x (2.8 GHz, 2Gb RAM, 30Gb disque, 896 GFlops

GNU/Linux 2.4 RedHat 9)

- 2 octo-processeurs V880, Sun Microsystems (900 MHz, 64 Gb RAM, 73Gb disque, 28 GFlops, Solaris 9)

- une unité de stockage SUN 3310 de 12 x 72 Gb

- server sun fire 280 R, bi-processeur (1.20 GHz, 4 Gb RAM, 2 x 32 Gb disque)

la gestion des jobs est effectuée via SGEE

Formation

journées de conférences sur différents aspects du calcul intensif (compilation, parallélisme, aspects numériques, méthodologies théoriques diverses en chimie et physique théoriques)

Accès (si ouverture endehors de la communauté d'utilisateurs initiale)

- ouvert aux membres des laboratoires de Chimie Théorique Appliquée, Physico-Chimie Informatique

et Physique du Solide des FUNDP ainsi que le Service de Chimie des Matériaux Nouveaux (UMH)

- ouvert aux utilisateurs extérieurs dans les domaines de recherche similaires

UCL/CISM

Nom : Institut de calcul intensif et stockage de masse

Responsables : Profs. Gonze et Peeters

Utilisateurs contactés : Profs. Craeye, Ghosez (ULg), Gonze, Goose, Huens, Keunings, Leygue, Ninane, Papalexandris, Peeters, Piraux, Remacle, Winckelmans

Nombre d'utilisateurs : une centaine

Nombre d'EPT de gestionnaires : 2.25 .

Equipement de calcul intensif :

- (1) un cluster de 11 noeuds quadriprocesseurs Compaq/DEC/Alpha, 667Mhz-1.25 GHz, 68 GFlops peak, mémoire totale 96 Go, mémoire partagée maximale 32 Go, batch PBS (propriété CISM/PCPM, géré par le CISM)
- (2) un cluster de 56 monoprocesseurs, 1 biprocesseur et 6 quadriprocesseurs Compaq/DEC/Alpha, 500Mhz-600Mhz, 54 GFlops peak, mémoire totale 51 Go, mémoire partagée maximale 1.125 Go, batch PBS (propriété CISM/PCPM/MEMA/ASTR, géré par le CISM)
- (3) un cluster de 16 noeuds monoprocesseurs Intel, 2.4 GHz, 76.8 GFlops peak, mémoire totale 32 Go, mémoire partagée maximale 1 Go, batch PBS (Vortex, propriété de l'unité TERM, géré par le CISM)
- (4) un cluster de 16 noeuds bi-processeurs Intel, 933 MHz, 59.7 GFlops peak, mémoire totale 32 Go, mémoire partagée maximale 1 Go, batch PBS
- (5) un 16-processeur HP, 180 MHz, 11 GFlops peak, mémoire 4 Go, batch PBS
- (6) un octoprocesseur HP, 360 MHz, 11 GFlops peak, mémoire 4 Go, batch PBS
- (7) un quadriprocesseur Itanium, 12 GFlops peak, mémoire 4 Go, batch PBS
- (8) en cours d'achat : un cluster de 18 biprocesseurs Xserve, un quadriprocesseur IBM
- (9) appel d'offre à lancer pour un cluster de plus de 128 processeurs

Formations : deux cycles de formation par année, dont chacun comporte environ 7 séances (introduction au calcul intensif à l'UCL, parallélisme MPI -2 séances-, parallélisme OpenMP - 2 séances-, NetCDF). Chaque séance comporte une partie théorique (de 1h à 2h), suivie d'exercices.

Accès :

- pour les membres de l'UCL, les équipements du CISM sont accessibles sans restriction, ou bien, si l'utilisation est intensive, moyennant l'introduction d'un projet de recherche
- en-dehors de l'UCL, l'accès est possible dans le cadre de collaborations avec des équipes de l'UCL, ou d'un accord interuniversitaire (p.ex. accord avec ULg, ou avec FUNDP)
- les formations sont ouvertes à tous les membres de l'UCL, et également, sur demande, à des participants hors-UCL

Renseignements complémentaires : voir <http://cism.ucl.ac.be>

Le CISM comporte également un système de stockage de masse d'une capacité de 10 TOctets (qui n'est pas dédié aux équipements de calcul intensif).

UCL / FYNU

Nom : Institut de physique Nucléaire

Responsable(s) (académique(s) - point de contact administratif):

Prof. Youssef El Masri, Prof. Vincent Lemaître, Dr. Alain Ninane

Nombre d'Equivalents Temps-Plein de gestionnaires: 1/3 ETP

Nombre d'utilisateurs: 15

Equipement de calcul intensif:

+ Cluster 1:

- 12 noeuds bi-processeurs Intel Pentium 3 1.4 GHz
- Red Hat Linux
- Puissance peak: 33.6 GFlops
- Mémoire totale: 6 GB
- Mémoire par noeud: 512 MB
- Système: Condor

+ Cluster 2:

- 12 noeuds bi-processeurs Intel Xeon 2.4 GHz
- Red Hat Linux
- Puissance peak: 115 GFlops
- Mémoire totale: 12 GB
- Mémoire par noeud: 1024 MB
- Système: Condor

Formation: informelle - contacts entre utilisateurs

Accès:

- Ouverts à d'autres entités académiques si CPUs disponibles

Renseignements complémentaires:

- Devrait être interconnecté à LCG (LHC Computing Grid) prochainement

ULB+VUB/CC

Nom : Centre de Calcul Ulb/Vub

Responsable + point de contact: Paul Raeymaekers (praeyma@ulb.ac.be)

Nombre d'équivalents temps-plein de gestionnaires : 1

Nombre d'utilisateurs : 180

Equipement de calcul intensif :

aster1 Compaq Gs140 6 cpu 700 MHz 6 Go RAM

aster2 Compaq Gs140 6 cpu 700 MHz 6 Go RAM

aster3 Compaq Gs160 16 cpu 1000 MHz 16 Go RAM

disk 600Go accessibles par aster1,2,3

aster4 HP 4 CPU Itanium1500 MHz 24 Go RAM

2500 Go montés en NFS sur aster 1, 2, 3, 4

Pas de formation spécifique, mais le groupe aide aux utilisateurs répond à toutes les questions concernant l'utilisation de ces 4 machines. Support @ulb.ac.be 02-6503737

Accès : réservé au personnel et étudiants des 2 universités.

Renseignements complémentaires :

<http://www.vub.ac.be/BFUCC>

ULB/IAA

Nom : Institut d'Astronomie et d'Astrophysique

Responsable : Prof. Marcel Arnould, CP 226, Bd. du Triomphe, 1050 Bruxelles

Nombre d'équivalents temps-plein de gestionnaires : 1/2 etp réparti sur plusieurs personnes pour l'ensemble de l'équipement informatique de l'IAA

Nombre d'utilisateurs : environ 6 personnes sur ± 17 membres de l'IAA

Equipement de calcul intensif :

A. grappe de 8 PC: 8 noeuds, mono CPU, Asus (Athlon 1200 jusqu'à XP3000+), Linux, 38 GFlops, 4 Go, 512 Mo/noeud, pas de gestion

B. grappe de 15 PC: 14 noeuds (diskless) + 1 serveur, mono CPU, Intel P4 3GHz (12) et Asus XP1800+ (3), Linux, 82 GFlops, 8 Go, 512 Mo/noeud + 1 Go serveur, pas de gestion

Pas de formation prévue

Accès : occasionnellement, accès à des visiteurs et étudiants, uniquement dans le cadre des programmes de recherche concernés

Renseignements complémentaires :

réseau: 100 Mbps pour la grappe B, 10 Mbps pour la grappe A; backups: DLT sur HP station HP-UX 10.2 (backups sur HD prévus sous peu)

ULB/IIHE

Nom : Service de physique des particules élémentaires

Responsables : Prof. D. Bertrand

Nombre d'ETP de gestionnaire : 0.5 ETP

Nombre d'utilisateurs : une dizaine

Equipement de calcul intensif :

- (1) un cluster de 23 nœuds monoprocesseurs, mémoire totale de 25 Go, partagée de 1Go, 80 GFlops, OS : Linux Debian 3.0, batch : PBS,
- (2) un élément de stockage type « *hp* SAN » contenant 38 disques SCSI, soit une capacité de 3 TB.
- (3) un cluster de 10 nœuds monoprocesseurs pour la « Grille de calcul », mémoire totale de 10 Go, partagée de 1Go, 30 Gflops, OS : Linux RH 7.3.3, batch PBS. Espace de disque associé : 250Go.

(10)

Formations : (non spécifié)

Accès : (non spécifié)

ULB/MF+PSP

Nom de l'entité :

Mécanique des fluides CP 165/43
Faculté des Sciences Appliquées

Physique Statistique et Plasmas, CP 231
Faculté des Sciences

Responsables académiques :
Gérard Degrez (Mécanique des fluides)
Daniele Carati (PSP)

Nombre d'Equivalents Temps-Plein de gestionnaires (informaticiens - postdocs)
Formellement 0 mais un post doc et deux doctorants s'occupent de la gestion

Nombre d'utilisateurs : une dizaine

Equipement de calcul intensif :
actuellement deux clusters (ANIC2, ANIC3) et un troisième en conception (ANIC4)

ANIC2 : 32 + 2 PIV 1.8GHz connectés en 100 Mb

ANIC3 : 16 PIV 2.8GHz connectés en Gb

ANIC4 : nous nous orientons vers
80 PIV 3.0 GHz connectés en Gb

Mémoire distribuée :

ANIC2 $32 * 1.5 = 48$ GB

ANIC3 $16 * 2 = 32$ GB

ANIC4 $80 * 2 = 160$ GB

nombre de processeurs

ANIC2 32

ANIC3 1

ANIC4 de l'ordre de 80

espace disque dédié

ANIC2 300GB

ANIC3 300GB

ANIC4 ?? de l'ordre de 800Gb

OS : Linux red hat .

Pas de système de queue sur ANIC2 et ANIC3. Nous explorons encore les différentes possibilités pour ANIC4

Formation : sur le tas...

Accès : Nous sommes ouverts mais n'avons pas fait de publicité.

ULB/Lab. PSIN

Nom : Laboratoire de Physique des Solides Irradiés et des Nanostructures

Responsables : Prof. M. Hou

Nombre d'ETP de gestionnaire : 0 ETP

Nombre d'utilisateurs : environ 6

Equipement de calcul intensif :

46 stations dont un serveur de fichiers et un front end

Les noeuds sont des PC Pentium 4, 1.8 GHz, 1.5 GB RAM, 40GB HD

Le réseau est un réseau GB avec 2 switches GB 3COM mis en série par une technologie XRN.

Formations : pas de formation organisée)

Accès : pas d'utilisateurs extérieurs au groupe (sauf exceptionnellement)

ULB/SMN

Nom de l'entité: Service de Métrologie Nucléaire

Responsable(s): Profs. A. Dubus, P.-E. Labeau, Y. Notay

Nombre d'Equivalents Temps-Plein de gestionnaires: 0

Nombre d'utilisateurs: 20

Equipement de calcul intensif :

28 noeuds: 26 noeuds bipro Intel Xeon 3.06 GHz (crête: 6.12 Gflop/s par noeud),

2 Go RAM par noeud

2 noeuds bipro Optéron 2.0 GHz (crête: 4 Gflop/s par noeud) , 12 Go RAM par noeud

OS: Linux Red Hat

Jobs: Open PBS

Mémoire totale: 76 Go RAM

Formation: néant

Accès: restreint aux collaborations scientifiques

Renseignements complémentaires: néant

ULg/CPT-PTM

Nom : Chimie Physique Théorique et Physique Théorique des Matériaux

Responsable : Profs. Ph. Ghosez (PHYTHEMA) et F. Remacle (CPT)

Nombre d'équivalents temps-plein de gestionnaires : 0

Nombre d'utilisateurs : 6

Equipement de calcul intensif :

5 noeuds (biprocresseurs IBM 970 2GHz par noeud

OS UNix MacOS X server

puissance crête HPC LINPACK (double precision floating point operations)

per node per second : 9 GFlops

Total RAM : 12.5 GBytes RAM totale

Système d'exploitation : XGrid (DEEP)

Formation : Les utilisateurs familiers avec les systèmes d'exploitation UNIX et LINUX sont formés sur le tas à la version UNIX de Mac.

Accès (si ouverture en dehors de la communauté d'utilisateurs initiale) : possible à tout utilisateur qui en fait la demande

Renseignements complémentaires : Nous comptons continuer à développer le cluster.

ULg/SEGI-CSI

Nom : SEGI-CSI groupe de calcul intensif

Responsable : Prof. J.M. Beckers porte parole calcul intensif et président CSI

Utilisateurs contactés : 5

Nombre d'utilisateurs : une centaine

Equipement de calcul intensif :

Machine SGI Origin3800 équipée de 60 processeurs et d'une mémoire RAM partagée (architecture SMP) de 60GB - puissance globale théorique de 48Gflops:

un module de base (brique) comprend 4 processeurs et 4 GB de mémoire RAM;

les modules sont interconnectés par un réseau CC-Numa de type NUMALink3.

Processeurs MIPS R12000 à 400MHz.

Disques internes 2x2x18GB, soit un total de 72GB.

Disques externes 12x36GB répartis sur 2 boucles FC à 100MB/s chacune, soit un total de 432GB.

Batch PBSpro, Version Unix SGI

Formation à l'installation

Accès ouvert sur simple demande

Renseignements complémentaires : en phase de remplacement, <http://www.ulg.ac.be/segi/aix-doc/nic.html>

ULg/GIGA GENMOL

Nom : Génétique moléculaire, faculté vétérinaire (élément du projet GIGA)

Responsable : Prof. Michel Georges

Gestionnaire(s) : 1 : Dr Alain EMPAIN

Utilisateurs : +- 30

Equipement calcul intensif :

Un cluster hétérogène formé de :

2 dual-ATHLON 1800+

3 dual-XEON 2.4 Ghz

1 dual-OPTERON

1 mono-XEON

Ram/CPU virtuel : min 500 MB, en majorité 1 GB, max 2GB

HD: tous ont un disque local (rsync des db de référence en local pour minimiser le trafic NFS)

NAS : 1 TB effectif en RAID-10, 400 GB en RAID-5

La majorité des serveurs et NAS proviennent de Unipress (www.unipress.be)

OS: Linux only (SuSE 8.2 à 9.1)

Batch manager : au départ SUN Gridengine, actuellement migration vers CONDOR (pré-production)

Formation : aucune actuellement

Accès extérieur : actuellement réservé à quelques applications spécifiques concernant des PME liées à GIGA (voir plus loin)

Remarque : Cette situation est en cours d'évolution sur deux plans :

1/ une bonne partie des services de l'ULG qui sont concernés par la biologie moléculaire vont être regroupés au CHU dans le projet GIGA

2/ un projet européen 'TERA' d'interconnexion des quatre génopôles Liège(GIGA)/Hasselt/Maastricht/Aachen a été signé et va apporter des moyens supplémentaires en hardware et grid endéans les deux années prochaines

3/ dans ce cadre, le nombre d'utilisateurs concernés à l'ULG passera à plus de 200

UMH/PPE

Nom : Service de Physique Générale et de Particules Élémentaires

Responsables : Prof. Ph. Herquet

Nombre d'utilisateurs : une dizaine

Nombre d'EPT de gestionnaires : 1 .

Equipement de calcul intensif :

-.Cluster 1 :

Amanda/IceCube

-.Cluster 2 :

CMS

a.Nombre de nœuds :

7

4

b.Nombre de processeurs/nœud :

2

3* 1 processeur

1* 2 processeurs

c.Marque :

4 Bi-Intel P III/1.2 GHz-XXX (0.9 Gflops)

2 Bi-Intel P IV/2.4 GHz-SuperMicro(3.4 Gflops)

1 Bi-Intel P IV/2.8 GHz-SuperMirco(4.0 Gflops)

3 Mono-Intel P IV/3.0 GHz-XXX (2.1 Gflops)

1 Bi-AMD-Opteron 2.2 GHz-SUN (4.4 Gflops)

d.OS :

RedHat Linux 8

RedHat Linux 7 (Cern)

e.Puissance peak :

40 GFlops

26.8 Gflops

f.Mémoire totale :

7 GB

10 GB

g.Mémoire partagée/nœud :

1 GB

3* 2 GB

1* 4 GB

h.Système de gestion des jobs :

CONDOR

CONDOR

Formations : à la demande

Accès :

restreint

projet Grid/Cms

Renseignements complémentaires :**Joseph.Hanton @Umh.Ac.Be****Francis.Lequeux @Umh.Ac.Be****Alain.Romeyer @Umh.Ac.Be (projet Grid/Cms)**

UMH/SCMN

Nom : Service de Chimie des Matériaux Nouveaux

Responsable : Profs. Roberto Lazzaroni, David Beljonne et Jérôme Cornil

Nombre d'EPT gestionnaires : 2

Nombre d'utilisateurs : 20

Equipement de calcul intensif :

1. Cluster de 21 nœuds

avec deux processeurs Xeon 2.8 GHz par nœud,

Operating system : Linux RedHat 7.3

Peak power: 230 Gflops

Mémoire totale : 84 Go

Mémoire par nœud : 4 Go

Système de gestion de jobs : PBS (PORTABLE BATCH SYSTEM)

2. Cluster de 4 nœuds

avec deux processeurs P3 1.26 GHz par nœud,

Operating system : Linux RedHat 7.3

Peak power: 10 Gflops

Mémoire totale : 16 Go

Mémoire par nœud : 4 Go

Système de gestion de jobs : PBS (PORTABLE BATCH SYSTEM)

3. IBM Pseries 655 64 bit

Cluster de 3 nœuds, dont deux à quatre processeurs IBM Power4 1.3 GHz et un à huit processeurs IBM Power4 1.1 GHz

Operating systems: IBM AIX 5.2

Peak power: 75 Gflops

Mémoire totale: 96 Go

Mémoire par nœud: 32 Go

Système de gestion de job : LoadLeveler

7. Formation

Ces équipements sont utilisés par les étudiants (de chimie et d'informatique) qui réalisent leur mémoire de fin d'études dans notre laboratoire. Ils servent également de façon ponctuelle à certains travaux pratiques de 3^e année.

8. Accès (si ouverture endehors de la communauté d'utilisateurs initiale).

En principe, ces équipements sont réservés aux chercheurs du laboratoire. Ils sont également accessibles aux chercheurs du groupe de Jean-Luc Brédas à Georgia Tech. Certains post-docs et visiteurs de longue durée gardent un accès temporaire aux équipements après leur 'retour à la maison', par exemple pour terminer les travaux entamés.

9. Renseignements complémentaires.

Notre laboratoire fait à la fois partie de l'Université de Mons-Hainaut et du Centre de Recherche Materia Nova (qui est une ASBL indépendante de l'UMH). Les équipements 1 et 3 ont été acquis au moyen de financements obtenus par le labo à travers Materia Nova. Ils sont utilisés pour l'ensemble de nos activités de recherche (et pas seulement pour des recherches liées exclusivement aux activités de Materia Nova).