

## Motivation initiale

- Modélisation → souvent nécessaire par les expérimentateurs, problématiques variées
- Leur faciliter l'accès aux techniques de calcul
- Machine en accès « libre », logiciels, formation, soutien.

## Historique

- 2002: Ateliers de modélisation, 50 inscrits (Nancy/Metz)
- 2003: Ateliers de modélisation (formation CNRS), 29 inscrits (France, nb limité). Bilan: besoin évident, calcul quantique et dynamique moléculaire en particulier.
- 2006: Création de la plateforme au sein de l'IJB, avec le soutien d'Yves Chapleur, achat d'un petit cluster 6 noeuds, recrutement de Francis Hofmann (AI CNRS)
- 2007: Démarrage, homologation CNRS de la plate-forme => projet d'extension
- 2008: Contractualisation IJB, plate-forme de calcul soutenue, représentant la plus forte demande de moyens (150k€ informatique scientifique, 25% total demande).

---

## Investissements (2006-2007)

Cluster de calcul (a)	22 000 €
Amber 9.0	300 €
CAChe WS Pro 7.5	1 500 €
Gaussian 03 (b), autres (c)	0 €
Total	23 800 €

- a) Cluster DATASWIFT : Machine frontale + 6 nœuds de calculs. Chaque nœud est équipé de deux processeurs AMD Opteron bi-cœur cadencés à 2,2 GHz de technologie 64 bits. Deux onduleurs : autonomie de 10 mn
- b) Logiciel Gaussian 03 : acheté par l'équipe CBT du SRSMC, licence de site UHP
- c) Logiciels *open source* tels que NAMD

## Bilan (2007-2009)

Installation	Janvier 2007
Mise en service, production	Mars 2007
Comptes utilisateurs	31
Projets scientifiques identifiés	17
Travaux soumis	7200
Taux d'utilisation	90%
Amortissement sur 3 ans, coût de l'heure « machine », hors frais d'environnement	1 €

### Pannes

- Carte raid (2008) + carte mère frontale (2009) => changées (garantie)
- Clim => actuellement arrêtée, changement nécessaire

## Situation actuelle

- Fin de garantie du cluster en Décembre 2009
- Taux d'utilisation toujours satisfaisant (90%) mais l'absence d'un système de files d'attente ne permet pas un accès rationnel (jobs courts, jobs longs, calcul parallèle en dynamique, priorités par utilisateur)
- Autres difficultés: interface utilisateur non-spécialiste manquante (site web, Gaussview, etc)

## Evolutions

- Extension => un outil pour tous (voir projet IJB)
- Coordonner l'ensemble des moyens de calcul (matériel/logiciel), augmenter l'efficacité, diminuer les coûts
- Différentes formules envisageables => une discussion sera nécessaire
- Articulation avec Metz (ancien PPF)
- Une priorité: l'affectation (recrutement) d'un ingénieur devra être envisagée (tâches effectuées par les chercheurs de CBT et EDAM dans la période 07/09).

## Demande

Equipement	Rien en 2009, à envisager en 2010
Clim	700 €
Logiciel, licences permanentes	
Gaussian 09 (a)	6 900 €
Linda (b)	2 300 €
GaussView 5 Unix (c)	2 875 €
Windows (d)	3 125 €
FORTTRAN Workstation Linux 32/64 BITS	850 €
Total	16 750 €
Apport SRSMC + CRM2 proposée	-8 750 €
Demandé IJB	8 000 €

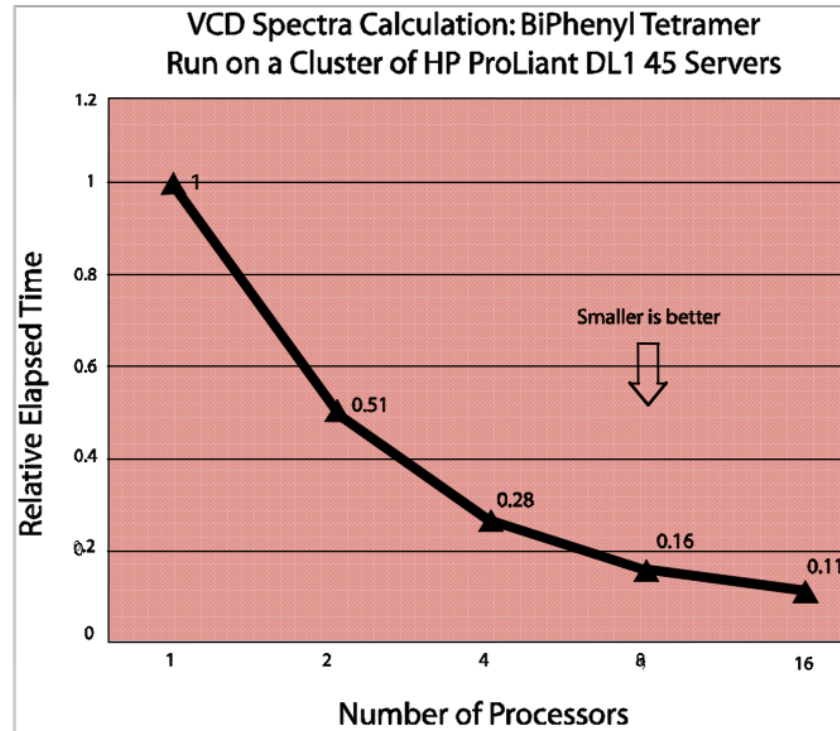
(a) Toutes machines Unix. Source.

(b) Environnement parallèle pour un type de machine (cluster IJB). Autres machines à la charge des équipes intéressées

(c) Tarif pour 1<sup>er</sup> type machine. Autres machines à la charge des équipes intéressées

(d) Upgrade de la version 4 (Département de Chimie Physique) – Version pour utilisation avec G09 installé dans une autre machine (PC bureau vers cluster IJB)

# How fast is TCP Linda-powered Gaussian?



**Scales more than 6X on 8 processor AMD64 clusters from HP.**