



I'DRIS

Numéro 6 - Juin 1998

Edito

En parallèle avec la préparation des documents techniques pour la remise à jour du parc des machines - un nouveau Banc d'Essais intégrant l'expérience accumulée sur plusieurs années sera prêt à la rentrée - IDRIS et son Conseil Scientifique ont étudié en détail cette année le cadrage scientifique de cette opération. La seule véritable justification d'IDRIS réside dans la qualité et la pertinence de la science qu'il aide à faire évoluer.

RAPPORT SCIENTIFIQUE

Tout d'abord, nous sommes tenus de faire tous les deux ans un bilan scientifique. Un premier rapport scientifique portant sur les résultats obtenus à l'aide des moyens informatiques attribués en 1994 et 1995 avait été publié en 1996. Un rapport analogue portant sur l'utilisation des moyens attribués en 1996 et 1997 est en cours de rédaction et il sera rendu public à la rentrée prochaine. Ne voulant pas être à la fois juge et partie, je me garderai de tirer des conclusions et me limiterai à signaler que ces rapports (portant sur presque 500 projets scientifiques et 1800 utilisateurs) donnent un très bon aperçu de l'état actuel de la " physique et chimie computationnelles " (ma traduction de " computational physics and chemistry ") en France.

Ensuite, nous avons effectué une prospection à moyen et long termes. La totalité des chefs de projets et des directeurs de laboratoires clients ont été interrogés en début d'année sur la nécessité d'une évolution des moyens de calculs d'IDRIS afin de maintenir la qualité et la compétitivité de leurs recherches et sur les objectifs scientifiques qu'une telle évolution devrait prendre en compte. Les résultats de cette enquête, effectuée en étroite coopération avec les Directions Scientifiques du CNRS, viennent d'être dépouillés. Un rapport de synthèse sera adressé à la rentrée prochaine à nos instances de tutelle.

L'étude est trop riche en enseignements pour l'explicitier en quelques lignes. Cependant, nous n'avons pas résisté à la tentation d'en présenter un aperçu partiel lors du Colloque Anniversaire d'IDRIS, comme vous le verrez à la page suivante. Je me limiterai à souligner que l'enquête confirme un certain nombre de choix stratégiques que nous avons effectués voici deux ans (et en particulier, la nécessité de maintenir deux architectures spécialisées, " musclées " en calcul vectoriel et scalaire) et qu'elle identifie clairement, dans tous les secteurs scientifiques clients d'IDRIS, sans exception, les communautés, les thématiques et le type de science exigeant une évolution de nos moyens de calculs.

LE RÔLE D'IDRIS

Enfin, une question revient très souvent, comme en témoignent les formulaires-réponses ; à savoir, la confirmation des choix stratégiques faits par le CNRS à la création de l'Institut : IDRIS centre d'excellence et non centre de calcul. Le fait qu'un environnement de calcul diversifié, polyvalent et évolutif doit être accompagné par une consolidation et une expansion des compétences système et des services à très forte valeur ajoutée véhiculés par notre support aux utilisateurs (optimisation des codes, formation, conseil) est très fortement souligné par nos utilisateurs. Les recommandations du Colloque du COMI qui, en octobre 1991, a marqué le démarrage du projet de création d'IDRIS (" acheter des machines, c'est important mais cela ne suffit pas ") sont toujours d'une très grande actualité. Nous continuerons à faire de notre mieux pour en tenir compte.

V. Alessandrini

SOMMAIRE

- EDITO = P 1
- Colloque de l'IDRIS = P 2 et 5
- L'Expertise Système = P 3 et 4

- Conférenciers invités = P 5
- Machines CRAY = P 5
- NEWS = P 6



“ Towards the 21st Century ”

19 NOVEMBRE 1998

PALAIS DES CONGRÈS, PORTE MAILLOT, PARIS

◆
P R O G R A M M E
◆

- Ouverture du Colloque par Jean-Jacques Gagnepain, Président du Comité d'Administration d'IDRIS
- “ The National Academic Supercomputing Initiative in the USA ” par Mélanie Loots, Senior Deputy Director of NCSA, USA
- “ The HPC technologies : Present and Future ” par Tadashi Watanabe, General Manager of Supercomputing Division, NEC, Japon
- “ The future of vectors in Scalable Architectures ” par Steve Oberlin, Vice-President of Hardware, Silicon Graphics, USA
- “ Fujitsu High Performance Computing ” par Moriyuki Takamura, General Manager of HPC Group, Fujitsu, Japon
- “ Le futur de quelques secteurs de la science basée sur le calcul intensif : le cas de la modélisation du climat, de la mécanique des fluides, de la chimie et de la biologie ” - exposé à la charge du Conseil Scientifique d'IDRIS
- “ HPC : beyond present technologies ” par Paul Messina, California Institute of Technology, California, USA
- Clôture du Colloque par Mme Catherine Bréchnignac, Directeur Général du CNRS



CENTRE NATIONAL
DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE



A propos des Conférenciers invités :

- ◆ **MÉLANIE LOOTS** a obtenu son Ph.D en Chimie Organométallique à Princeton. Elle a débuté sa carrière comme chercheur dans l'industrie pharmaceutique chez E.R Squibb and Sons. Associée au National Center for Supercomputing Applications (N.C.S.A.) depuis 1989, elle est actuellement " Senior Deputy Director for Institutional Relations " et " Assistant Vice Chancellor for Research " à l'université d'Urbana-Champaign.
- ◆ **TADASHI WATANABE** a fait des études d'ingénieur à l'université de Tokyo. Dès son arrivée chez NEC en 1968, il a été associé au développement des supercalculateurs. Il a été " chief architect " de la série SX1 et SX2 dans les années 80, et il est chargé actuellement des systèmes NEC de haute performance. Il a reçu en 1998 le prix ACM/IEEE Eckert-Mauchly pour sa contribution à l'architecture des supercalculateurs.
- ◆ **STEVE OBERLIN** est arrivé chez Cray Research en 1980. Il a été associé au développement des supercalculateurs Cray-2 et Cray-3. Son intérêt pour le calcul parallèle a culminé avec son rôle de " chief architect " des systèmes Cray T3D et T3E. Il est actuellement responsable de la définition et mise en oeuvre des supercalculateurs SGI de très haute performance.
- ◆ **MORIYUKI TAKAMURA** a fait ses études d'ingénieur à l'Université de Waseda. Arrivé chez Fujitsu en 1970, il a été immédiatement impliqué dans les aspects " hardware " de la conception des supercalculateurs. Il est actuellement le " chief architect " de toute la ligne des supercalculateurs vectoriels-parallèles VPP.
- ◆ **PAUL MESSINA** est un expert reconnu du calcul intensif de haute performance. Son activité actuelle en témoigne : Vice-Président pour le calcul scientifique et directeur du " Center for Advanced Computing Research " de Caltech, responsable du calcul de haute performance du Jet Propulsion Laboratory de Pasadena, California.

INFOS Des informations seront disponibles sur le Web IDRIS (www.idris.fr) et les modalités d'inscription seront détaillées dans le prochain numéro de la lettre de l'IDRIS, dont la parution est prévue courant Septembre.

MACHINES CRAY : PORTABILITÉ DES DONNÉES

IDRIS ne peut garantir à moyen terme le support des fichiers dont le format d'enregistrement ("COS-blocked") et le codage numérique sont spécifiques au constructeur Cray.

Pour se conformer aux standards, nous recommandons aux utilisateurs des machines Cray (C90/T3E) l'écriture des fichiers avec le format d'enregistrement "F77" et le codage numérique "IEEE" par l'intermédiaire de la commande Cray assign dont voici un exemple :

```
# Écriture ou lecture sur l'unité logique 10  
assign -F f77 -N ieee u:10
```

```
# lancement de l'exécution  
./a.out
```

Pour des raisons de performances, cette recommandation ne concerne que les fichiers destinés à être conservés pour réutilisation ultérieure sur d'autres machines et pas ceux utilisés temporairement pour exploitation régulière sur C90/T3E.

adresse à consulter :

```
http://www.idris.fr/su/Shared/IBM+CRAY/conv\_fich/conv\_fich.html
```

EXPERTISES

A des occasions diverses et variées, nous avons tous pu contempler et admirer la biodiversité des supercalculateurs installés à l'IDRIS : l'aspect malabar, armoire à glace de Hebe, la fière robe rouge et noire des machines vectorielles Cray, le gris galet de plage de la machine vectorielle-parallèle Fujitsu, le sobre manteau bleu atlantique avec le gamma rouge du calculateur parallèle T3E, le style rustique, épuré, " nuts-and-bolts " de la grappe super-scalaire IBM, le vénérable cylindre à base de trèfle avec une couronne en or doux soutenu par ses deux robots blanc neige qui est notre machine fichiers et pour terminer, le " look " jeune et branché, " Sky is blue and so am I " du serveur de visualisation Rhodes.

Mais la véritable diversité, la complexité et l'hétérogénéité de l'environnement informatique de l'IDRIS se cachent à l'intérieur des machines au sein des systèmes d'exploitation. Tous les systèmes font certes partie de la grande famille UNIX. Mais résumer le système d'une machine hautes performances à un UNIX est aussi réducteur et simpliste qu'une certaine définition de l'homme selon Platon : " l'homme est un animal bipède sans plumes ".

Si, au niveau utilisateur, le constructeur informatique s'est efforcé de fournir des commandes, des " shells " propres à l'environnement UNIX et que les utilisateurs vivent ce confort au quotidien, au niveau administrateur et au niveau interne de la machine, au niveau où agit l'équipe système de l'IDRIS, chaque machine possède un système d'exploitation totalement unique, totalement différente dans sa conception présentant son propre dictionnaire de commandes exotiques permettant de la configurer et de la piloter. Voyons cela de plus près.

IL ÉTAIT UNE FOIS UN SUPERCALCULATEUR

L'acquisition d'un supercalculateur à l'IDRIS se prépare des mois voire des années à l'avance au niveau de

l'équipe système par la préparation d'une série de tests pour le banc d'essais (indépendamment des applications utilisateurs).

Il s'agit de passer au crible le système d'exploitation : entrées-sorties disques, réseau, ordonnancement multi-travaux, tests de charge, swap, etc. Ce travail et l'exploitation des résultats des bancs d'essais fournis par les différents constructeurs est toujours un exercice difficile du fait de la diversité des systèmes et des plates-formes matérielles sur lesquelles ces tests doivent tourner.

Une fois le choix de la machine arrêté, alors se dévoile l'identité du système sur lequel les ingénieurs-système doivent se spécialiser. En effet, le constructeur du supercalculateur est le seul à pouvoir fournir les informations permettant de tirer le maximum de bénéfice de la machine. Un échange s'établit au cours duquel un savoir-faire technique transfuse à l'intérieur des équipes de l'IDRIS (et qui souvent plus tard fait l'envie des constructeurs eux-mêmes !).

Ensuite commence la " domestication " de la nouvelle machine, un art subtil qui consiste à masquer toutes les caractéristiques propriétaires et ésotériques du système d'exploitation, de la rendre plus standard et abordable possible et de l'intégrer harmonieusement dans l'environnement d'exploitation d'IDRIS.

Il s'agit ensuite de mettre en place l'environnement que les utilisateurs vont voir au quotidien lorsqu'ils effectuent leurs calculs.

Entre le moment où la machine a été déballée et le moment où les utilisateurs débarquent sur la machine, les heures sont comptées au plus juste. Et il s'agit que le service soit aussi complet que possible à l'ouverture.

Sur la plupart des systèmes des supercalculateurs, les jolies applications WYSI-WYG multicolores sont inexistantes et les commandes ligne-à-ligne d'administration ressemblent à celles des Unices primitives. Elles descendent à un niveau très bas afin de permettre toute opti-

È M E À L ' I D R I S

misation qui serait jugée utile. Et il arrive assez souvent que des bogues existent sur certaines commandes et qu'il faille trouver " à chaud " des contournements en passant par d'autres commandes.

Voilà des extraits de conversations qu'on peut entendre dans le couloir système dans le feu de l'action :

" Le file système ne se crée pas. Il détecte un " overlap " au niveau des cylindres. Il faut recompter la frontière du " slice " du disque. "

" Le démon démarre et meure aussitôt. C'est peut-être un problème de MLS et des niveaux de sécurité. "

" Il n'y a pas de NOS dans le système, débrouillez-vous pour chercher, trouver et porter un qui marche au plus tôt. "

" Ah ! Les quotas ne seront disponibles que dans la version 6.0.0.1 du système, il faut faire des développements avant que les malins nous fassent déborder le système de fichiers. "

" TiNa n'a jamais été porté sur un tel système ? Il y a une première fois pour tout dans la vie. Il faut le porter avec les gens de Quadravec. On ne peut pas ouvrir aux utilisateurs sans sauvegarde. "

" Maia, maia, maia. Les maipouets plantent quand maia est arrêté et on n'a pas de messages d'erreur. Il faut chercher dans les sources et voir ce qui se passe. "

" Il faut quand même une comptabilité. Comment ils font dans les autres sites ? Il n'y a rien de valable prévu dans le système. Il faut bidouiller quelque chose avec les informations qui sont dans les logs. "

L'ACTION AU QUOTIDIEN

Les mardi et jeudi, de temps en temps, les passages systèmes sont là. Ils agacent certainement ceux qui voulaient calculer en interactif ces matins. Mais ils sont indispensables pour maintenir le niveau des systèmes d'exploitation, implémenter de nouvelles commandes et faire évoluer les logiciels sur les machines. L'équipe sys-

tème est en première ligne pour effectuer dans les temps toutes les opérations prévues.

Ces opérations sont toujours très délicates car les super-calculateurs sont particulièrement sensibles aux fausses manipulations. Et quand on manipule sur des disques stockant des dizaines de gigaoctets de données utilisateurs, on a intérêt à avoir la main sûre.

Les alertes de sécurité sont aussi là pour ajouter de l'animation imprévue. Régulièrement des programmes permettant de compromettre la sécurité des systèmes font des apparitions sur l'Internet avec une préférence marquée pour les vendredi soirs les veilles de fêtes. Il s'agit alors de déclencher très rapidement l'équivalent informatique du plan " Épervier " : boucher tous les accès pouvant compromettre les machines de l'IDRIS, désactiver les commandes potentiellement compromettantes et mettre en place quand c'est possible des " bypass " et tout ceci en gênant le moins possible l'exploitation des machines.

SERVICES SYSTÈME

L'équipe système est un réservoir de compétences indispensable pour la bonne marche d'un centre d'excellence comme l'IDRIS. L'essentiel de son travail est invisible et discret ; c'est là son plus grand mérite. Elle assure entre autres la veille technologique indispensable permettant à l'IDRIS d'être prêt à accueillir et installer les technologies permettant de faire la science de demain.





Formations IDRIS

15 septembre	Apports/mise en oeuvre de la norme Fortran 90/95	3 jours
28 septembre	Introduction générale à l'IDRIS	1 jour
29 septembre	Calcul vectoriel : optimisation et bibliothèques.....	1 jour
30 septembre	Calcul vectoriel : utilitaires d'analyse/débogage.....	1 jour
1 octobre	Calcul vectoriel : ateliers C90/VPP.....	1 jour
5 octobre	Calcul parallèle : introduction (Cray T3E)	1 jour
6 octobre	Calcul parallèle : optimisation (Cray T3E)	2 jours
13 octobre	Calcul parallèle : MPI.....	3 jours
19 octobre	Applications scientifiques de C++	2 jours
19 octobre	Visualisation : introduction serveur graphique.....	2 jours
21 octobre	Visualisation : module AVS de base.....	3 jours
5 novembre	Visualisation : module AVS avancé	2 jours
16 novembre	Le langage C.....	5 jours
24 novembre	Calcul parallèle : introduction (VPP Fujitsu).....	1 jour
25 novembre	Calcul parallèle : bibliothèque scientifique	1 jour

IDRIS assure également des cours en province, toutes les demandes doivent être formulées à dir@idris.fr.
 Pour toute inscription et renseignement complémentaire sur le calendrier ci-dessus, consulter le Web à l'adresse www.idris.fr/data/cours/cours-IDRIS.html ou contacter le secrétariat de l'IDRIS au 01 69 35 85 01 ou par messagerie à secretariat@idris.fr



Renseignements pratiques

Qui joindre à l'IDRIS :

La direction	01 69 35 85 85	L'assistance	01 69 35 85 55
	et dir@idris.fr		et assist@idris.fr
Le secrétariat	01 69 35 85 05/85 01	Le pupitre	01 69 35 85 30
	et secretariat@idris.fr	Par télécopie	01 69 85 37 75



Serveur Web d'IDRIS (<http://www.idris.fr>)

Vous y trouverez toutes les informations utiles concernant IDRIS, les cours, des documentations et des FAQ's sur l'utilisation des différentes machines de l'institut, etc.



Documentations IDRIS

Nouvelle note technique disponible : NT 26 Utilisation de Molcas à l'IDRIS



CENTRE NATIONAL DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



Directeur de la Publication
 Victor Alessandrini
Rédacteur en chef
 Thierry Goldmann

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 :