



Rapport d'activité

Projet Feder n° HN0001418

Maison Normande des Sciences du Numérique

Période septembre 2016 à décembre 2019

Date du document : mars 2019

1. Introduction

Le projet de Maison Normande des Sciences du Numérique vise à structurer et consolider un écosystème normand du calcul intensif (HPC), de la simulation numérique avancée et de l'ingénierie des données numériques.

Ce projet initié en 2016 par le CRIANN et les équipes de recherche partenaires a été prévu pour s'articuler en deux volets :

- Une phase 1, de préfiguration, portée par le CRIANN sur la période août 2016 – août 2018 ;
- Une phase 2, pérenne, sous forme d'une structure définie dans le cadre d'une coopération inter-établissements.

La phase de préfiguration a reçu le soutien d'un cofinancement de la Région Normandie et de l'Union Européenne (Feder n° HN0001418).

L'objet de ce rapport est de présenter les actions menées par le CRIANN et leur bilan dans le cadre de cette mission.

2. Pilotage du projet

2.1. Équipe projet

L'action a effectivement démarré en septembre 2016 avec le recrutement de Benoist Gaston, ingénieur HPC, à plein temps sur le projet.

Marie-Sophie Cabot (Dr., anciennement Professeure des Universités Associée), a assuré le pilotage scientifique des actions.

Par ailleurs, le projet a fait appel aux ressources de l'équipe administrative et de l'équipe technique du CRIANN.

2.2. Planification des actions, articulation avec les établissements

L'une des premières actions engagées a consisté à élaborer un questionnaire de recensement des compétences et des besoins, avec pour objectif de recueillir les besoins et les attentes vis-à-vis de la MNSN afin de prioriser les actions concrètes à mettre en place, et recueillir les propositions de contribution, par exemple de séminaires spécialisés. Les retours des questionnaires ont permis de définir des actions concrètes qui ont été menées et sont décrites dans la suite du rapport.

En parallèle, la structuration de l'action au niveau des établissements a été initiée dès le démarrage de l'action. Un courrier cosigné par Normandie Université et par le CRIANN a été envoyé aux directions des établissements pour les informer des missions - en particulier le recensement des compétences et des besoins - et pour solliciter la désignation d'un correspondant.

Une coordination avec la communauté des mathématiques a également été engagée dès le début du projet. En accord avec la Fédération Normandie Mathématique, un courrier a été envoyé au Labex Amies pour présenter le projet MNSN fin 2016. Le projet MNSN est maintenant identifié par l'AMIES (réseau national « MSO ») et dispose ainsi de points de contact identifiés sur les besoins relevant des mathématiques (Christian Gout, correspondant régional). En effet, l'apport des mathématiques, en amont de l'algorithme et du code, peut s'avérer déterminant sur la performance finale et sur l'utilisation optimale des ressources de calcul.

3. Action de recensement des compétences et des besoins

3.1. Élaboration du questionnaire

Le questionnaire a été élaboré début octobre 2016 avec les chercheurs impliqués dans le projet à son origine (Thibault Ménard, Maître de Conférences à l'Université de Rouen Normandie / CORIA).

Ce questionnaire vise différents publics et couvre différents volets : domaine d'application scientifique, mathématiques utilisées, logiciels, bibliothèques, outils de profilage, etc. Son objectif est double : recueillir les besoins et les attentes vis-à-vis de la MNSN afin de prioriser les actions concrètes à mettre en place, et recueillir les propositions de contribution, par exemple de séminaires spécialisés.

Le texte intégral est disponible en annexe 1.

3.2. Diffusion du questionnaire

Le questionnaire a été envoyé par mail (le 18/10/2016) aux chercheurs qui avaient participé à l'élaboration du projet (CORIA, LMRS, LMI, LITIS, CHU). Il a été mis en ligne sur le site du Criann (<https://www.criann.fr/mnsn-actions/>).

Les réponses sont arrivées jusqu'en fin d'année 2016, la plupart des chercheurs ont remonté des besoins élargis à leur laboratoire.

D'autres demandes sont arrivées « au fil de l'eau » (BOREA, COBRA).

3.3. Planification des actions

Suite aux retours des premiers questionnaires, des actions concrètes ont été menées afin de répondre aux besoins exprimés.

Les actions nécessitant un travail de fond, comme l'accueil de la communauté scientifique du Deep-Learning sur le calculateur, se sont déroulées sur la durée du projet.

Les actions de support aux équipes ont été planifiées en fonction des disponibilités et ont pu, pour certaines, s'inscrire dans la durée avec un suivi régulier (par exemple à l'arrivée de nouveaux doctorants ou post-doctorants au sein des équipes).

Enfin, certaines de ces actions comportant un volet d'administration système ont mobilisé l'équipe technique du Criann (Béatrice Charton, administratrice système).

Le calendrier de réalisation de ces actions est synthétisé page suivante (Tableau 1).

Dates	Réalisations (tâches de fond)
mi sept.- mi oct. 2016	Élaboration du questionnaire
nov. 2016 - nov. 2017	Formation Bonnes Pratiques développement de code HPC
Sept – oct. 2017 (puis oct. 2018)	Opération « fête de la science » (élaboration des support pédagogiques, organisation)
déc. 2016 - juil. 2018	Optimisation code Dorothy du LOMC
déc. 2016 - juil. 2018	Génie Logiciel code Dorothy du LOMC
mi déc. 2016 – déc. 2018	Veille technologique sur les outils Deep Learning
jan. 2017 - mi fév. 2017	Déploiement outils Deep Learning sur environnement HPC
jan. 2017 - fév. 2017	Amélioration/optimisation code ENA de l'UMR BOREA
mars 2017 - juin. 2017	Amélioration/optimisation code EMBN du LMRS
avr. 2017 et juin 2018	Formation Profilage de code avec Scalasca
juil. 2017 - jan. 2018	Profilage codes Jetles et GPS du LMRS
déc-18	Amélioration/optimisation code Collision de l'UMR COBRA
fév. 2018 - sept. 2018	Montage Plateforme conteneurisation
oct. 2018 – déc. 2018	Montage Plateforme interactive IA et Donnée
oct. 2018 - déc. 2018	Veille technologique sur les outils Traitement de la donnée
nov- déc. 2018	Hackathon du HPC

Tableau 1 - Calendrier de réalisation des tâches de fond du projet

4. Actions réalisées pour le bénéfice des communautés scientifiques normandes

4.1. Accueil de la communauté du Deep-Learning sur le calculateur régional

Cette action a démarré dès octobre 2016 et a fait l'objet d'un rapport en juillet 2018. L'intégralité de ce document de bilan est disponible en annexe 2.

Les éléments de calendrier de réalisation sont les suivants :

- Octobre 2016 : suivi de la formation Deep learning Nvidia par Benoist Gaston
- Rencontre avec les équipes du LITIS (définition des suites logicielles à installer, des cas tests)
- Décembre 2016 – Janvier 2017 : déploiement des outils sur première tranche de Myria et réalisation des premiers tests
 - Janvier 2017 : présentation des premiers résultats dans le cadre d'Equip@meso
- Avril 2017 : demi-journée de formation des utilisateurs du LITIS (9 utilisateurs)
- Été 2017 : tests CRIANN sur architecture Intel KNL (en attente de performances)
- Septembre 2017 : présentation lors des journées mésocentre.
- Octobre 2017 : rencontre avec le GREYC (Caen), suivie par la création d'un projet pour l'équipe « image » de ce laboratoire.

- Juillet 2018 : réunions de bilan avec les utilisateurs.

D'autres travaux ont été réalisés depuis l'élaboration de ce rapport, en particulier pour répondre aux manques exprimés par les chercheurs à l'occasion du bilan :

- Réalisation d'une plateforme de test interactive et modulaire (base Jupyter Notebook).

En plus du Litis et du Greyc, depuis l'élaboration de ce rapport, d'autres équipes de recherche utilisent maintenant les ressources du Criann pour leurs activités en IA/Deep-Learning (deux projets de l'Esigelec, un projet du Coria).

4.2. Nouvelles formations

L'élaboration de contenus de formations représente un travail de fond conséquent.

Le CRIANN proposait déjà, sur un rythme d'environ deux à trois sessions par an, des formations à l'utilisation du calculateur, au calcul parallèle (bibliothèques OpenMP et MPI) ainsi qu'à l'utilisation optimale de l'environnement et des commandes Linux pour un utilisateur de service de calcul.

Dans le cadre de la MNSN, de nouvelles formations et ateliers ont été mises en place et dispensées par Benoist Gaston.

Formation	Durée	Sessions
Bonnes pratiques de développement HPC	½ journée	- 15 nov. 2016 - 7 nov. 2017
Profilage HPC - Scalasca	Une journée	- 26 au 28 avril 2017 (Profiler's day avec URCA et UVSQ) - 21 juin 2018
Deep-Learning sur le calculateur Myria	½ journée	- 4 avril 2017 - 20 avril 2018 - 19 oct. 2018 - 10 déc. 2018

Formation Python : travail commun avec Alexandre Poux (CORIA) pour l'élaboration d'un contenu de formation à destination des chercheurs. Participation à deux l'animation de 2 sessions au Coria.

4.3. Actions de support scientifique ciblées

Les fiches projet de ces actions sont disponibles en annexe.

UMR BOREA (U. Caen)

Une action emblématique a été réalisée pour une équipe de biologie de l'UMR Borea à Caen (équipe Nathalie Niquil). Confrontée à des temps de calcul extrêmement longs sur un nouveau cas d'application de son modèle d'écosystème marin, cette équipe s'était tournée vers le Criann pour accéder à ses moyens de calcul. Le code a donc été adapté par l'ingénieur MNSN pour être exécuté sur architecture HPC et une réflexion sur le bénéfice potentiel d'une nouvelle approche mathématique a été menée.

Après une mise en relation par le correspondant AMIES (C. Gout), une rencontre avec un spécialiste des graphes du laboratoire de mathématiques de l'Insa de Rouen (Arnaud Knippel, LMI - INSA Rouen) a été organisée et a débouché sur un travail commun entre les deux équipes de recherche. Elle s'inscrit comme l'axe 5 (Optimisation des méthodes de modélisation des réseaux trophiques et de régulation des gènes) du RIN ECUME (période 10/2018-09/2021). Le CRIANN interviendra en support sur la parallélisation des applications qui seront développées dans le cadre de ce projet.

LOMC (U. Le Havre)

La demande de l'équipe havraise du LOMC (équipe de Gregory Pinon) de portait sur un besoin en support d'un Ingénieur de Recherche afin de pérenniser le valoriser le code de calcul développé en interne (code de mécanique des fluides Dorothy). La réponse apportée dans le cadre de la MNSN a consisté à apporter conseil et expertise en terme d'ingénierie logicielle, a été finalisé par la restitution de recommandations sur les outils de suivi de version, ainsi que sur l'architecture du code lui-même. Ces préconisations ont ensuite été mises en œuvre par le laboratoire dans le cadre d'un stage de Master 2 puis d'une thèse, avec un accompagnement régulier par le Criann.

LMRS (U. Rouen)

Plusieurs actions ont été réalisées avec différents chercheurs du LMRS, sur l'identification de problèmes de performance. Outre le travail d'analyse des codes, des réunions techniques ont permis de sensibiliser les chercheurs à l'usage des outils de profilage.

- Profilage des codes Jetles (Francky Luddens), ayant abouti à des préconisations.
- Profilage du code GPS (Ionut Danaila).
- Optimisation du code de bio-statistique EMBN écrit en R (N. Vergne).

CHU de Rouen (U. Rouen)

Travail avec l'équipe D2IM (Badisse Dahamna).

- Analyse des solutions envisagées pour un passage à l'échelle du moteur de recherche CISMEF; identification des goulots d'étranglement.

UMR IDEES (U. Rouen)

La demande de l'UMR IDEES (géographie) portait sur l'utilisation de ressources de calcul du CRIANN afin de couvrir une montée en charge non couverte par les moyens du laboratoire (en particulier un besoin en mémoire). Avec un usage consistant à soumettre une quantité massive de petits calculs indépendants (quelques secondes à quelques minutes d'exécution), l'équipe est par ailleurs utilisatrice de l'infrastructure de la grille EGI/France Grille, au travers du logiciel openmole développé par l'Institut des Systèmes Complexes.

Les actions communes du CRIANN, de l'UMR IDEES (Sébastien Rey-Coyrehourcq) et de l'équipe de développement d'openmole ont permis de mettre en place un workflow adapté à l'usage des ressources HPC (nombre et durée des calculs, charges des processus actifs, ...). Le CRIANN fournira en juin 2019 l'infrastructure de calcul pour l'école d'été ExModelo sur l'exploration des modèles de simulation.

Laboratoire COBRA (U. Rouen)

Demande de Hélène Lavanant (Comité Technique du 08/11/2018) pour un besoin en support en informatique scientifique visant à rendre fonctionnel le code Collision Code, issu d'un code historique du laboratoire de chimie.

4.4. Veille technologique et prototypage

Une veille technologique est réalisée en continu sur les sujets IA et Deep Learning. Les outils et fonctionnalités sont testés avant d'être déployés sur le calculateur.

Un travail conséquent a été mené en 2017 sur l'utilisation des processeurs Xeon Phi KNL pour le Deep Learning, en collaboration avec les experts d'Intel constructeur du processeur.

Par ailleurs, l'équipe a été amenée à prototyper des services qui n'étaient pas couverts par le mode d'utilisation conventionnel du calculateur. Ainsi sur l'année 2018 :

- Montage d'une plateforme de test pour la conteneurisation d'applications.

- Montage d'une plateforme de test pour des workflow de traitement interactif IA et donnée.

NB : ces plateformes de test ont requis une forte implication au niveau administration système (Béatrice Charton). Afin de tester de nouvelles solutions sans impacter la production de Myria, quelques nœuds de l'ancien calculateur Antares ont été remis en service mi-2018 pour en faire une petite machine de test. Les solutions testées ont vocation à être transposées sur Myria une fois validées au niveau technique comme fonctionnel, en assurant la compatibilité avec sa pile logicielle HPC, en particulier son réseau rapide, et en préservant sa stabilité de fonctionnement.

La conteneurisation permet d'isoler entre elles des applications s'exécutant sur le même système d'exploitation. Elle permet d'encapsuler des variations du système d'exploitation (par rapport au système hôte) et permet ainsi plus de souplesse pour l'installation de certaines versions des applications. L'intérêt peut être d'installer des versions qui seraient trop récentes pour le système hôte, ou trop anciennes s'il s'agit de rejouer des travaux pour vérifier leur reproductibilité. Outre la communauté IA/Deep-Learning, l'usage de la conteneurisation est répandu dans d'autres communautés scientifiques, en particulier la biologie. Ce travail de prototypage, en vue d'un déploiement ultérieur sur le calculateur, vise donc plusieurs communautés scientifiques.

4.5. Animation scientifique et pédagogique

Fête de la science 2017 et 2018

Le Criann a pris un stand sur le village des sciences du Madrillet à l'occasion des éditions 2017 et 2018 de la fête de la science. Des supports pédagogiques spécifiquement adaptés au public scolaire ont été réalisés à cette occasion.

Cet événement a également permis la valorisation des travaux des chercheurs auprès du public ; en particulier sur l'édition 2018 :

- Accueil de l'exposition « le calcul intensif au service de la connaissance » des 10 ans Genci, augmentée par la réalisation de 4 posters sur des travaux normands (laboratoires GPM, Litis, CERMN, Cobra).
- Organisation de conférences « calcul intensif et médecine » pour le lancement régional de l'événement 2018 au Medical training Center (exposés de Ghislain Lartigue et Dorian Midou, laboratoire CORIA, et de Caroline Petitjean, laboratoire LITIS).

Hackathon du HPC

Cet événement a été initié par Genci dans un cadre national en 2017. Le Criann a participé aux deux sessions (décembre 2017 et décembre 2018).

En 2018, Benoist Gaston a participé au jury national en tant qu'expert HPC.

Actions réalisées pour le bénéfice des communautés scientifiques

5. Communication et publicité du projet

5.1. Site Web

<https://www.criann.fr/mnsn/>

<https://www.criann.fr/mnsn-actions/>

5.2. Plaquette

- Plaquette de présentation du projet MNSN réalisée en mars 2017 (disponible en annexe).

5.3. Participation à des salons

- 02/12/2016 – Rencontres Universitaires Numériques Normandes (RUNN 2016 – Caen) ; événement organisé par Normandie Université, stand et pitch du projet à destination de la communauté universitaire.
- Présentation du projet sur les stands de l'Amies et de Normandie Université lors du salon RUE 2017 à Paris (Rencontres de l'enseignement supérieur, de la recherche et de l'innovation).

5.4. Journées scientifiques

Journées scientifiques organisées conjointement avec la communauté mathématiques :

- <http://lmi.insa-rouen.fr/87.html> (5 octobre et 8 novembre 2017)
- <http://lmrs-num.math.cnrs.fr/journee-math-entreprise-2018.html> (17 octobre 2018)

6. Bilan de l'action

6.1. Rappel des objectifs du projet

Les actions décrites dans ce rapport peuvent être rapportées aux objectifs initiaux du projet MNSN.

Objectifs

1. de faciliter les échanges et les synergies ;
2. de favoriser le développement de l'interdisciplinarité autour du partage et de la mise en commun d'outils numériques et de données ;
3. de mieux valoriser les travaux réalisés dans les laboratoires ;
4. d'organiser des formations de haut niveau et de favoriser l'émergence d'un pôle d'enseignement et d'animation scientifique et d'innovation.
5. de favoriser l'approche pluridisciplinaire des problèmes, par des échanges entre les équipes de recherche, la codirection de thèses entre laboratoires (math-géologie par ex.), des séminaires, formations, etc.
6. de conforter une expertise d'excellence en algorithmique parallèle, optimisation des codes, post-traitement des données, visualisation scientifique et ingénierie des données.

6.2. Bilan des réalisations

Les travaux réalisés dans le cadre du projet et présentés dans ce document sont en parfaite adéquation avec les objectifs rappelés ci-dessus.

Pour retenir l'essentiel :

- Le projet MNSN a permis d'accueillir, sur les moyens de calcul régionaux mutualisés, la communauté des chercheurs en Deep-Learning (Intelligence Artificielle). Initié avec le laboratoire Litis, cette action a été élargie au Greyc, puis plus récemment aux laboratoires de l'Esigelec. [objectifs 2 et 6]. L'impact est donc particulièrement important, et des chercheurs issus de laboratoires autres que l'informatique commencent à utiliser ces outils (une équipe du Coria).
- De nouvelles formations spécialisées ont été mises en place pour le bénéfice des chercheurs et des doctorants [objectif 4].
- Des actions de support en calcul parallèle ou en génie logiciel ont été apportées à des équipes de recherche développant leurs propres applications (cf. 4.3 actions LMRS, CHU de Rouen, Cobra). [objectifs 3 et 6].
- La coordination mise en place avec la communauté des mathématiques (labex AMIES), alliée à la qualité de l'analyse scientifique des besoins exprimés par les chercheurs, a abouti à la réalisation d'un projet de recherche commun Mathématiques – Biologie. (cf. 4.3 action Borea) [objectif 5].
- Des actions ont été menées pour faire connaître le calcul intensif auprès d'un public large, en valorisant les travaux des chercheurs (cf. 4.5 fête de la science, hackathon) [objectif 3].

Annexes

au rapport d'activité Projet Feder n° HN0001418

Maison Normande des Sciences du Numérique

Période septembre 2016 à décembre 2019

Annexe 1 : questionnaire de recensement des compétences et des besoins

Projet MNSN – Maison Normande des Sciences du Numérique

Action « Recensement des compétences et des besoins »

v1 – 18/10/16

Avec le soutien de la Région Normandie, de l'Union Européenne, et avec l'appui scientifique des établissements et des équipes de recherche impliquées dans le projet, le CRIANN a une mission de deux ans pour initier la construction de la Maison Normande des Sciences du Numérique (MNSN). Cette action de coordination inter-établissements vise à structurer et consolider, à l'échelle de Normandie Université, un écosystème normand du calcul intensif (HPC), de la simulation numérique avancée et de l'ingénierie des données numériques.

Pour répondre aux enjeux liés aux évolutions rapides des technologies de processeurs et d'accélérateurs et soutenir le travail de développement de codes effectué au sein des laboratoires, le service de support applicatif et scientifique du CRIANN se trouve renforcé par l'arrivée d'un deuxième ingénieur spécialiste en calcul intensif, embauché dans le cadre de la MNSN. L'objectif est de renforcer et de mettre en place :

- des formations spécialisées ;
- un accompagnement de type « support avancé », qui permettra d'accueillir les doctorants, post-doctorants ou chercheurs au-delà des formations pour quelques heures à quelques jours afin de les guider dans leurs développements.

Sur le plan académique, la MNSN vise également à accueillir et orienter les nouvelles demandes, en particulier issues de disciplines peu familiarisées à l'utilisation de la modélisation ou du calcul intensif. Pour faciliter l'expression de ces nouvelles demandes et y répondre en favorisant les échanges et les synergies entre les différentes disciplines scientifiques, le CRIANN a également pour mission de mettre en place, dans le cadre de la MNSN, un portail web dédié à la cartographie des besoins et des compétences, accessible aux établissements et laboratoires de recherche.

Enfin, la MNSN sera ouverte aux entreprises, au travers des formations qu'elle proposera et du dispositif SiMSEO, programme des investissements d'avenir coordonné par GENCI et TERATEC et financé par la DGE et Bpifrance. Ce programme, dont l'objectif est d'inciter les PME et ETI à utiliser davantage la simulation numérique, prendra en charge une partie des coûts de calcul, d'expertise et d'accompagnement par les laboratoires de recherche.

Pour toutes ces raisons, nous vous remercions de consacrer une quinzaine de minutes pour répondre à ce questionnaire, qui vise différents publics et dont la grille de lecture sera multiple.

CRIANN

Centre Régional Informatique et d'Applications Numériques de Normandie

Technopôle du Madrillet – 745 avenue de l'Université – 76800 SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY

Tél. : 02 32 91 42 91 – admin@criann.fr - www.criann.fr

SIRET N° 383 599 990 00025 – CODE APE 7219Z

N'hésitez pas à y répondre de façon partielle ou à nous contacter si certaines rubriques vous paraissent trop techniques.

Un premier objectif est d'exprimer vos besoins et vos attentes vis à vis de la MNSN, au regard de ce que vous faites déjà (colonne « l'existant ») et de vos projets (colonne « projections »). Cela permettra de prioriser les actions concrètes à mettre en place dans les prochains mois.

Vous pouvez également, au travers de ce questionnaire, proposer de contribuer à la MNSN en partageant votre expertise.

Vous recevez ce questionnaire dans sa première version car vous êtes utilisateur des ressources de calcul du CRIANN. A terme, ce questionnaire aura vocation à être diffusé plus largement. Vos remarques et suggestions d'améliorations sont donc les bienvenues.

Merci pour votre contribution,

Marie-Sophie Cabot
Coordinatrice du projet MNSN
02 32 91 42 91 – marie-sophie.cabot@criann.fr

Thibault Ménard – thibault.menard@coria.fr
Correspondant MNSN pour l'Université de Rouen

CRIANN

NOM Prénom,

Fonction, laboratoire, tél. et mail

J'accepte, je n'accepte pas (1) que ce formulaire soit présenté dans son intégralité lors des réunions de travail de la MNSN.

J'accepte, je n'accepte pas (1) que les informations transmises dans ce formulaire fassent l'objet d'un traitement informatique par le CRIANN pour recenser les besoins et orienter les actions de la MNSN.

Date du document

(1) Supprimer la mention inutile

Conformément à la [loi « informatique et libertés » du 6 janvier 1978 modifiée](#), vous disposez d'un [droit d'accès](#) et [de rectification](#) aux informations qui vous concernent. Ce droit peut être exercé auprès du CRIANN à l'adresse admin@criann.fr

	Existant (ce que vous faites actuellement) Préciser [1] simple utilisateur, [2] utilisateur avancé, [3] expert	Projection d'évolution et besoins associés (préciser l'échéance et/ou le niveau de priorité)
Domaine d'application scientifique Utiliser la nomenclature proposée page suivante Préciser succinctement		
Mathématiques utilisées Equations aux Dérivées Partielles, mathématiques pour le traitement de données Préciser ensuite : type d'équation, type de traitement		
Méthodes numériques et algorithmie Exemples : volumes finis, méthode stochastique, FFT, structures de données, etc.		

Logiciels de calcul, pré et post traitement, visualisation		
Langage de programmation Préciser l'environnement de travail (OS)		
Bibliothèques de parallélisation		
Outillage (bibliothèques, debugger, profilage, suivi de version...)		
Environnement matériel utilisé (PC, cluster, ...) Préciser l'architecture (x86, GPU) et les limitations rencontrées (mémoire, temps de calcul)		
Besoins complémentaires et attentes vis à vis de la MNSN En particulier, préciser les formations souhaitées		
Proposition de contribution à la MNSN (domaine d'expertise, proposition de séminaire ...)		
Suggestions relatives à ce questionnaire Pistes d'amélioration		

Annexe : Nomenclature des domaines d'application scientifique (nomenclature Genci)

1. Environnement

Mots clés : Modélisation de l'atmosphère, de l'océan et du climat. Modélisation des atmosphères planétaires. Analyse et assimilation des données. Physico-chimie atmosphérique. Biogéochimie océanique. Fonctionnement et évolution des écosystèmes terrestres. Hydrologie des sols.

2a. Écoulements non réactifs

Mots clés : Dynamique des écoulements compressibles. Hydrodynamique. Aérodynamique stationnaire et instationnaire. Écoulements en rotation.

Transferts thermiques et convection forcée. Convection naturelle.

2b. Écoulements réactifs ou/et multiphasiques

Mots clés : Interfaces et écoulements polyphasiques. Changements de phase. Rhéologie complexe. Combustion turbulente. Simulation directe des écoulements réactifs. Structure de flammes. Cinétique de la combustion. Écoulements diphasiques réactifs. Plasmas froids. Arcs électriques. Milieux hors d'équilibre.

3. Biologie et santé

Mots clés : Interaction particule/tissu et calcul par méthodes de Monte-Carlo. Nanotechnologies en thérapeutique. Imagerie médicale (acquisition et traitement). Outils d'aide à la décision médicale. Bioinformatique. Génomique. Modélisation du corps humain. Biomécanique. Dynamique des écoulements physiologiques. Modélisation/simulation des systèmes physiologiques. Epidémiologie et dynamique des populations.

4. Astronomie et géophysique

Mots clés : Cosmologie. Formation des galaxies, des étoiles et des systèmes planétaires. Dynamique des systèmes gravitationnels. Modélisation d'objets astrophysiques (hors fluides et chimie). Plasmas géophysiques et planétaires. Géophysique interne. Hydrologie des sols. Géomatériaux.

5. Physique théorique

Mots clés : Electromagnétisme, optique, physique sur réseau dont QCD, Chaos quantique, Propriétés électroniques des solides, Physique nucléaire, Interactions ondes électromagnétiques avec la matière. Plasmas chauds, Sciences de la fusion magnétique ou inertielle. Physique de la matière condensée.

6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Mots clés : Réseaux, middleware, algorithmes pour le parallélisme, algèbre linéaire, EDP, traitement du signal, stockage et analyses des données, visualisation.

7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Mots clés : Structure, dynamique moléculaire, interaction des macromolécules et édifices moléculaires. Chimie supramoléculaire, relations structure-fonction. Biopolymères, interfaces, matériaux hétérogènes. Auto-assemblage, réplication. Génomique.

8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Mots clés : Propriétés électroniques des molécules. Structures. Réactivité. Calculs ab initio. Calculs semi-empiriques. Dynamique quantique (Car-Parinello). Calculs Monte Carlo quantique (Méthodes QMC). Etat liquide. Solvation. Diffusion moléculaire. Collisions (molécules-ions, électrons). Dynamique quantique. Evolution d'un paquet d'ondes.

9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Mots clés : Modèles de cohésion des matériaux adaptés à la simulation à l'échelle atomique (ab initio, liaisons fortes, potentiels empiriques). Simulation des systèmes classiques et quantiques par dynamique moléculaire et méthodes de Monte-Carlo. Thermodynamique numérique d'équilibre et de non-équilibre. Simulation des cinétiques à l'échelle atomique. Echelle mésoscopique. Dynamique des populations des défauts, comportement mécanique des matériaux hétérogènes. Physique et chimie des matériaux granulaires. Simulation numérique pour le dépouillement d'études expérimentales de structure des matériaux. Propriétés électroniques des matériaux.

10. Nouvelles applications et applications transversales du calcul intensif

Cette thématique permet d'accueillir les applications nouvelles ou multidisciplinaires.

Annexes

au rapport d'activité Projet Feder n° HN0001418

Maison Normande des Sciences du Numérique

Période septembre 2016 à décembre 2019

Annexe 2

Rapport

**« Accueil de la communauté du Deep-Learning sur le
calculateur du CRIANN – bilan juillet 2018 »**

Accueil de la communauté du Deep-Learning sur le calculateur Myria du CRIANN

Bilan à 18 mois - mi-juillet 2018

Cette action a été réalisée dans le cadre du projet MNSN (Maison Normande des Sciences du Numérique), cofinancé par la Région Normandie et l'Union européenne.

Lors de l'élaboration de ce projet en 2015, une demande avait été formulée par le LITIS pour accéder à des ressources de calcul intensif régionales pour ce type de travaux. Une réponse a pu être apportée d'une part grâce au renouvellement du calculateur en 2017 (financement Région Normandie, État et Union européenne), et d'autre part grâce à l'embauche de Benoist Gaston en septembre 2016 (financement MNSN).

Sur le territoire normand, les principaux laboratoires d'informatique concernés sont le LITIS et le GREYC. Historiquement, les chercheurs de ces laboratoires utilisaient peu les ressources du CRIANN, dont le mode de fonctionnement était perçu comme trop contraignant (dossier scientifique, batch, pas de droits administrateurs, etc.). Mais les directions de ces laboratoires restent particulièrement conscientes du besoin des équipes en ressources de toujours plus grande capacité, et des implications en termes d'infrastructure que cela engendre.

L'objectif de cette action est donc de :

- Démontrer aux équipes que l'utilisation du plateau technique HPC du mésocentre régional présente certains intérêts : stabilité, puissance, disponibilité, etc.
- Dimensionner, côté CRIANN, les ressources techniques et humaines requises ainsi que les évolutions à mener pour répondre durablement aux besoins des équipes de recherche concernées.

1. Ressources du calculateur Myria mises en jeu

Myria est un calculateur d'une puissance totale de 600 TFlops (403 TFlops Xeon, 170 TFlops GPU et 27 TFlops Xeon Phi KNL) et principalement doté de nœuds de calcul généralistes :

- 366 nœuds bi-sockets Broadwell (28 cœurs à 2,4 GHz, 128 Go de RAM DDR4 à 2400 MHz).

La communauté du Deep-learning utilise le sous-ensemble de nœuds GPU :

- 9 nœuds GPU Kepler K80 (2 cartes par nœud soit 4 unités GPU embarquant chacun 12 Go de mémoire)
- 8 nœuds GPU Pascal P100 (2 cartes par nœud soit 2 unités GPU embarquant chacun 12 Go de mémoire)
- 1 nœud doté de 3 cartes GPU Pascal P100 (3 unités de traitement GPU, 12 Go de mémoire embarquée par unité)

Par ailleurs, des tests ont été effectués par l'équipe du CRIANN sur la partie KNL :

- 10 nœuds de calcul dotés chacun d'un Xeon Phi KNL 7210 (64 cœurs à 1,3 GHz et 96 Go de RAM DDR4 à 2133 MHz par nœud, 16 Go de mémoire rapide MCDRAM embarquée dans le processeur KNL).

L'ensemble des ressources est interconnecté par un réseau Intel Omni-Path à faible latence et haut débit (100 Gbit/s) et accède à un système de stockage rapide d'une capacité de 2,5 Po.

2. Calendrier de la mise en œuvre

- Octobre 2016 : suivi de la formation Deep learning Nvidia par Benoist Gaston
- Rencontre avec les équipes du LITIS (définition des suites logicielles à installer, des cas tests)
- Décembre 2016 – Janvier 2017 : déploiement des outils sur première tranche de Myria et réalisation des premiers tests
 - Janvier 2017 : présentation des premiers résultats dans le cadre d'Equip@meso
- Avril 2017 : demi-journée de formation des utilisateurs du LITIS (9 utilisateurs)
- Été 2017 : tests CRIANN sur architecture Intel KNL (en attente de performances)
- Septembre 2017 : présentation lors des journées mésocentre.
- Octobre 2017 : rencontre avec le GREYC (Caen), suivie par la création d'un projet pour l'équipe « image » de ce laboratoire.
- Juillet 2018 : réunions de bilan avec les utilisateurs.

3. Bilan de l'utilisation (juillet 2018)

Depuis la mise en production du supercalculateur Myria en mars 2017, le CRIANN a accueilli 5 projets dans le domaine du Deep Learning. Ces projets sont principalement portés par les équipes du LITIS et du GREYC et traitent d'activité de recherche sur les méthodes de Deep Learning ou sur l'application de ces méthodes principalement dans le domaine de la santé. Un 6^{ème} projet, porté par le CRIANN, traite de mise en œuvre des framework de Deep Learning sur l'architecture KNL d'Intel. Deux autres projets ont été déposés en 2018 mais n'ont pas encore consommé d'heures de calcul. Le tableau Tab. 1 présente les projets actifs sur Myria en juillet 2018.

Projet	Utilisateurs	Heures ¹	Typologie de travaux
N°1	1	16 000 (2017) <1000 (2018)	1 GPU (P100)
N°2	3 (2 actifs)	< 1000 h (2017) < 2000 h (2018)	2 GPU
N°3	4 (un actif)	2000 h (2017) 9000 h (2018)	1 GPU (P100)
N°4	4 (2 actifs)	30 000 h (2017) 50 000 h (2018)	1 GPU (K80 ou P100) Tests en multi-nœuds et multi GPU
N°5	2	50 h (2018)	multi GPU
N°6 (tests KNL)	3	12 000 h (2017) 23 000 h (2018)	KNL

¹ Comptabilité système (ACCT) : seule la consommation des ressources CPU est comptabilisée (cf. § 6.1 concernant l'évolution à apporter).

L'utilisation est assez irrégulière, avec des pics d'utilisation intensive et des périodes de moindre activité. La question du partage des ressources sera détaillée dans la suite du document (cf. 5.3).

Stockage

Pour les projets traités, le quota d'espace de stockage attribué aux utilisateurs a été adapté à leurs besoins, de l'ordre de 100 Go et jusqu'à 1 To.

Les besoins en terme de stockage restent donc - pour le moment - dans les fourchettes habituelles, mais à la différence des projets CFD habituellement traités, les besoins concernent les données d'entrée, et en particulier des jeux de données de test des modèles.

NB : il est souhaitable que les jeux de données standards susceptibles d'être partagés par différentes équipes soient déposés dans des espaces de stockage partagés.

4. Retour d'expérience du CRIANN sur la gestion de la logithèque

4.1. Logithèque et procédures d'installation

La gestion de la logithèque scientifique du CRIANN se base sur les deux critères suivants :

- Minimiser les impacts sur le système
- Permettre l'installation de multiples versions d'un même outil

Pour cela, les logiciels et les bibliothèques informatiques dont ils dépendent sont installés dans des répertoires spécifiques. Un outil, *module*, permet aux utilisateurs de charger à la demande un l'environnement logiciel (outil, version et dépendances) dont ils ont besoin. Cette démarche de cloisonnement permet d'installer, sur un même système, différentes versions d'un même outil tout en évitant les conflits entre elles.

La logithèque de Deep Learning déployée au CRIANN est conforme à cette politique d'installation. Cette logithèque se compose des principaux frameworks couramment utilisés dans la discipline. Le choix de ces outils a été fait en concertation avec les utilisateurs (ou futur utilisateurs) concernés.

La plupart de ces frameworks sont utilisés via python, c'est pourquoi nous avons choisi le schéma d'installation suivant² :

- installation d'une version de python qui est dédiée au Deep Learning
- installation des frameworks et de leur interface python pour la version de python dédiée

L'intérêt de cette démarche est que l'installation des différents frameworks ne nécessite que la construction d'une version de python ; à partir de cette version les frameworks peuvent être installés à partir de packages standards pré-construits par les distributeurs et téléchargés automatiquement sur un dépôt distant par l'outil *pip*.

Pour des raisons de performances, ces frameworks nécessitent l'utilisation de ressources de type GPU. Toutes les installations sont donc réalisées avec prise en charge des ressources gpu.

² Initialement, sur demande d'un utilisateur, le logiciel Caffe avait été installé en stand-alone ce qui avait nécessité la recompilation complète de l'outil et de la bibliothèque dont il dépend, donc une installation particulièrement lourde.

La plupart des frameworks sont disponibles pour python2 et python3. Nous avons procédé à une installation spécifique pour ces deux versions de python. Le tableau Tab. 2 présente la liste des frameworks installés et indique pour quelles versions de python ils sont disponibles.

Tab. 2 - Frameworks DL installés au CRIANN

4.2. Principaux problèmes rencontrés

Foisonnement des versions

La communauté de Deep Learning est très active et par conséquent les frameworks proposés ont des cycles d'évolution très rapide. A titre d'exemple, un des frameworks les plus populaires, Tensorflow, est passée de la version 1.0 à la version 1.9 de février 2017 à juillet 2018. Ces outils ont des dépendances système, dont les montées de versions de Cuda, dont dépendent d'autres logiciels. Les cycles d'évolution étant rapide, il n'y a quasiment aucune maintenance à moyen terme sur les versions antérieures, en particulier une mise à jour de certaines dépendances d'une version peut entraîner le dysfonctionnement de celle-ci.

Les différents utilisateurs du CRIANN sont parfois contraints d'utiliser des versions de frameworks figées ou, au contraire, demandent à utiliser la dernière version en date. Il est donc nécessaire de gérer plusieurs versions de frameworks au sein d'une même version de python. Bien que l'installation d'un paquet standard soit une tâche simple, l'installation de multiple des versions sur de courtes échéances devient vite laborieuse en particulier dans la gestion des environnements spécifiques.

En conséquence, la gestion de versions cloisonnées nécessite un outil plus souple et/ou plus automatique que celui actuellement utilisé.

Architecture système spécifique

La plupart des packages mis à disposition par les distributeurs de frameworks sont construits pour des environnements système standards et répandus. Bien que compatibles et fonctionnels, ces packages ne sont pas optimaux sur des environnements spécifiques tels qu'une infrastructure HPC, et en particulier de son réseau d'interconnexion rapide. Pour utiliser au mieux ce type de système, il est nécessaire de construire les packages spécifiquement pour l'infrastructure cible.

En particulier, pour tirer parti du réseau OPA du calculateur Myria avec l'outil Tensorflow en multi-nœuds, c'est une version expérimentale du logiciel, bénéficiant de peu de retour d'expérience, qui a dû être utilisée et qui a nécessité un environnement de compilation dédié.

Ce mode de fonctionnement (construire ses propres paquets plutôt qu'utiliser des packages standards) n'est pas recommandé par les développeurs de Tensorflow.

5. Retour d'expérience des utilisateurs, expression de besoins et pistes d'amélioration

Les deux laboratoires fonctionnent en mettant des machines virtuelles à disposition des utilisateurs. Au LITIS, les machines sont attribuées pour une durée de l'ordre du mois, et attachées à une ressource physique GPU.

Parmi les contraintes liées à l'utilisation des ressources mutualisées du CRIANN, les points initialement perçus comme bloquants étaient :

1. L'absence de droits d'administration du système pour les utilisateurs : sur leur ressources internes, les utilisateurs ont pour habitude d'administrer leur système ce qui leur donne une autonomie dans la gestion de leurs applications.

2. Le mode batch : il alourdit le mode de développement incrémental des utilisateurs, est plus difficile à mettre en place qu'un mode interactif, ne permet pas de prévoir précisément la période d'exécution des travaux, et oblige l'utilisateur à estimer la durée de ses travaux.
3. Le partage des ressources de calcul : les utilisateurs craignent que les ressources ne soient qu'occasionnellement disponibles augmentant ainsi les délais de restitution des calculs.

Un bilan est donc établi sur chacun de ces points lors d'une réunion de bilan avec les utilisateurs concernés. Le cas échéant, des pistes d'amélioration sont proposées.

5.1. Absence des droits d'administration

Les demandes de mise à jour (du système ou des logiciels) ont été traitées dans un délai raisonnable. Occasionnellement, certains chercheurs ont installé par eux-mêmes des packages manquants.

Il s'avère que l'utilisation des droits d'administration est plus une habitude des usagers qu'un réel besoin.

5.2. Le mode batch

Le mode batch est bien adapté aux travaux d'apprentissage qui forment la phase la plus coûteuse en temps de calculs des projets de Deep Learning hébergés au CRIANN. De plus, par son aspect automatique, il permet aux utilisateurs d'éviter certaines tâches manuelles laborieuses nécessaires sur leurs ressources internes³.

La limite de durée des calculs (48 heures sur les ressources GPU⁴) n'est pas bloquante pour ces utilisateurs : ils ont le cas échéant mis en place des fichiers de reprise (certains n'avaient pas cette habitude mais l'ont maintenant intégrée).

Besoins spécifiques pour la mise au point des modèles (calibrage)

Le mode batch, tel qu'il est paramétré actuellement au CRIANN, paraît en revanche inadapté aux travaux de calibrage des modèles. Les utilisateurs ont alors besoin de réactivité et d'interactivité : accès rapide à des ressources pour y lancer des calculs assez courts, en suivant l'évolution des résultats.

Plusieurs utilisateurs souhaiteraient effectuer des travaux de calibrage: un délai de deux heures pour l'accès aux ressources comme pour la durée des calculs serait un bon compromis pour ces calculs (par rapport à la durée « incompressible » d'initialisation, sur un cas dimensionnant d'un utilisateur du GREYC).

- Le CRIANN envisage la création d'une file réservée à des travaux courts sur GPU, le cas échéant en dédiant un serveur K80 (soit 4 GPU). Par ailleurs, les 2 serveurs dédiés à la visualisation peuvent aussi être utilisés (s'ils sont disponibles) puisqu'ils sont dotés chacun d'une carte K80.

³ Pour l'un des doctorants, qui jonglait entre deux machines virtuelles dans son laboratoire et devait gérer manuellement l'orchestration de ses travaux et les transferts de fichiers, le lancement des travaux sur le calculateur au travers du batch s'avère plus confortable et plus efficace car propice à l'automatisation.

⁴ Cette valeur limite est adaptée par le CRIANN pour une utilisation optimale des ressources en mode partagé. Elle varie (de 3 à 72 heures) suivant les ressources ciblées.

5.3. Partage des ressources

Globalement, l'utilisation simultanée de plusieurs ressources a permis aux utilisateurs d'obtenir des temps de restitution meilleurs qu'avec leurs ressources internes.

Mais des pics d'usage intensif des ressources GPU ont été observés et certains utilisateurs se sont découragés avec des temps d'attente trop longs et du coup ont abandonné le CRIANN.

Plusieurs voies sont envisageables. Actuellement, il n'y a pas de limite à l'utilisation de ressources GPU par un même utilisateur. Il n'y a pas non plus de politique de fair share. Tous ces points doivent donc être étudiés par l'équipe du CRIANN pour améliorer la fluidité du trafic ressentie par les utilisateurs.

Un affichage plus direct des ressources disponibles serait également le bienvenu pour les utilisateurs. Au cours de la réunion de bilan, l'idée d'un forum utilisateurs a été proposée comme vecteur de communication et de régulation entre utilisateurs. Mais du point de vue du CRIANN, ce qui fonctionne pour la gestion de ressources à l'échelle d'un laboratoire peut difficilement être transposé à une plus grande échelle : les règles doivent prévaloir, ainsi que la surveillance de la charge au quotidien par les administrateurs. Cependant cette proposition mérite une attention.

- **Mieux partager les ressources, mieux informer les utilisateurs des disponibilités constituent les principaux points à améliorer par le CRIANN.**

5.4. Autres besoins exprimés

Par ailleurs, les utilisateurs du GREYC ont besoin de profiler les consommations GPU / CPU / RAM / et transferts entre mémoires de leurs applications.

- Les outils disponibles ou à installer seront proposés aux utilisateurs.

6. Exploitation du plateau technique HPC : réflexions et évolutions envisagées

Avec un recul d'environ 18 mois dans l'accueil d'utilisateurs de la communauté du Deep Learning, il ressort que, du point de vue du mésocentre, plusieurs points relatifs à l'exploitation du plateau technique HPC sont à considérer.

6.1. Comptabilité des heures consommées

Jusqu'à présent, le CRIANN se base sur la comptabilité du système (ACCT) pour le décompte des heures consommées par les utilisateurs. Cette solution avait été retenue historiquement par le CRIANN pour sa fiabilité, mais elle n'est pas adaptée à l'utilisation des GPU.

L'alternative consiste à utiliser la comptabilité du logiciel de batch (Slurm) et à travailler sur la comptabilité « elapsed » des travaux. Cette solution est actuellement opérationnelle en doublon de la comptabilité acct. Cependant, le décompte des heures peut s'avérer complexe (plusieurs GPU dans un même serveur qui peut être en mode partagé ou non).

NB : une modification a été apportée au dossier de demande d'heures, les utilisateurs de ressources GPU sont invités à renseigner la durée totale de leurs travaux.

6.2. Administration de la logithèque

L'administration de la logithèque est complexe : mises à jour très fréquentes, et versions standard non-adaptées au HPC. À cela s'ajoute le risque de conflit entre des installations de versions différentes.

Les conteneurs, actuellement en test pour les besoins d'une autre communauté, pourraient apporter une solution à ce problème.

6.3. Nécessaire évolutivité des ressources

Les ressources matérielles mises à disposition des utilisateurs de cette communauté peuvent devenir rapidement obsolètes : ce sont les cartes GPU les plus récentes qui intéressent les utilisateurs (P100 plus prisées que K80 sur Myria, et demande pour de nouvelles cartes Volta).

Le mésocentre doit donc être en capacité d'intégrer au fil du temps de nouvelles générations de GPU (ou d'autres ressources qui seraient adaptées à cette activité).

Pour des raisons de compatibilité entre générations de matériels, cette intégration sera possible tant que le calculateur reste relativement récent. De la même façon, les conteneurs, évoqués plus haut comme une solution aux évolutions rapides des logithèques, fonctionnent sous réserve de compatibilité de la couche matérielle et de la couche logicielle basse.

D'autre part, les projets accueillis dans le cadre de cette action effectuent du traitement de données au moyen de techniques de Deep Learning, ce qui n'est qu'une petite partie de l'activité des laboratoires concernés. D'autres besoins existent au sein de ces laboratoires, quelques demandes ont d'ores et déjà été formulées auprès du CRIANN :

- Une demande de ressources HPC pour une utilisation intensive de Matlab sous Windows (environnements imposés) ;
- Un demande de type « big-data » (Hadoop).

Le spectre est donc large et ne peut pas toujours être couvert par l'utilisation du calculateur.

Enfin, les laboratoires concernés ont une activité contractuelle conséquente qui leur permet d'acquérir des ressources. En terme d'infrastructure, vu leur puissance électrique, ces ressources doivent bénéficier d'un hébergement adapté dans un datacentre.

Dans certains cas, ces ressources pourraient être intégrées à un calculateur et mises à disposition d'autres communautés lorsqu'elles ne sont pas utilisées (proposition du GREYC). Une proposition similaire avait été formulée par l'UMR IDEES (géographes). Un mode de fonctionnement doit donc être proposé pour répondre à ces demandes.

Il s'agit au final d'optimiser l'utilisation des ressources ainsi que leurs coûts d'exploitation.

7. Conclusion

En conclusion de ce retour d'expérience, il apparaît que le mode de fonctionnement du calculateur est globalement adapté aux besoins de la communauté du Deep-Learning même si des améliorations peuvent être apportées. Les utilisateurs ont pu mesurer les bénéfices du plateau technique HPC en terme de puissance et de stabilité. Le CRIANN doit cependant apporter des améliorations concernant le partage des ressources.

La stratégie d'exploitation du plateau technique HPC pour les besoins de la communauté DL doit être adaptée, du fait de la spécificité des matériels et des logiciels. Pour répondre durablement aux besoins de cette communauté, il paraît indispensable d'être en capacité de suivre le cycle de d'évolution rapide des logiciels, ainsi que d'intégrer régulièrement les dernières technologies matérielles.

Annexes

au rapport d'activité Projet Feder n° HN0001418

Maison Normande des Sciences du Numérique

Période septembre 2016 à décembre 2019

Annexe 3

Fiches projet des actions

Deep-Learning

Actions de support scientifique ciblées

1. Fiche projet de l'action Deep-Learning

Intervenants

- CRIANN : Benoist GASTON
 - Support de Béatrice CHARTON (administration système) et Marie-Sophie CABOT (pilotage de l'action, relations laboratoires, synthèses)
- Université et INSA Rouen : Soufiane BELHARBI, Caroline PETITJEAN, Roger TRULLO, Alain RAKOTOMAMONJY (LITIS)
- Université de Caen : Laboratoire GREYC (Frédéric JURIE, Alexis LECHERVY, Sovann EN)

Objectifs

- Ouvrir les ressources HPC du CRIANN à la communauté Deep Learning
- Veille Technologique sur les ressources Deep Learning

Tâches Réalisées

- Recueil des besoins de la communauté
- Monter en compétence sur les outils DL
- Déploiement des outils sur Myria
- Formation de la communauté sur l'usage des ressources Myria
- Support à l'utilisation des ressources HPC
- Veille technologique sur les solutions matérielles Intel
- Mise en place d'une infrastructure de test pour un usage interactif

Résultats

- Le déploiement des outils de Deep Learning et les formations spécifiques ont permis à la communauté Deep Learning des laboratoires LITIS et GREYC d'utiliser les ressources de Myria
- Les outils déployés au cours de ce projet sont également utilisés par d'autres communautés scientifiques
- L'infrastructure de test a permis de spécifier un mode de travail complémentaire à celui de Myria

Planning

- Décembre 2016-> janvier 2017 : recueil initial des besoins et déploiement des outils
- Avril 2017 : formation du LITIS à l'utilisation des outils sur Myria
- Octobre 2017 : accueil du laboratoire GREYC
- Juillet 2018 : Recueil du retour d'expérience des utilisateurs à 18 mois
- Novembre 2018-> décembre 2018 : montage de l'infrastructure de test (pour des premiers tests en janvier 2019)

Tâches en cours et à venir

- A court terme : déploiement d'un environnement interactif sur une extension de production de Myria

2. Action UMR BOREA (U. Caen)

Intervenants

- CRIANN : Benoist GASTON, Marie-Sophie CABOT, Béatrice CHARTON
- Université CAEN : Nathalie NIQUIL (CNRS BOREA), Aurore RAOUX (Stagiaire), Emma ARAIGNOUS (Stagiaire), Quentin NOGUES (Doctorant)
- INSA Rouen : Arnaud KNIPPEL (LMI)

Objectifs

- Obtenir un temps de restitution plus rapide sur l'outil ENA (Matlab)
- Proposer une solution scientifique plus adaptée
- Permettre aux codes de tourner sur des ressources HPC

Tâches Réalisées

- Exécution du code sur Antares
- Résolution de problème de consommation mémoire
- Analyse des performances
- Mise en place d'un système de protection/reprise
- Parallélisation du code Matlab
- Préconisation sur l'usage de R sur Myria et sur la parallélisation pour le code LIM-ENA (R)
- Mise en relation de l'équipe BOREA avec un Membre du LMI pour l'analyse de la solution scientifique
- Étude de faisabilité de l'utilisation de Maple sur le supercalculateur du CRIANN

Résultats

- Le code ENA en Matlab a été amélioré mais le modèle mathématique utilisé est perfectible.
- La mise en place d'une nouvelle solution mathématique est un axe d'un projet RIN auquel participe l'UMR BOREA, le LMI et le CRIANN.
- Les préconisations de parallélisation du code LIM-ENA ont permis de réduire des calculs de 20 jours estimés à 2 jours effectifs.
- L'étude de faisabilité du code Maple a permis d'identifier qu'une architecture HPC telle que Myria n'était pas adaptée aux travaux réalisés.

Planning

- Janvier 2017 : Réunion autour de l'outil ENA (Matlab)
- Janvier 2017 -> Février 2017 : amélioration outil ENA
- Mars 2017 : Rencontre UMR BOREA – LMI – CRIANN : besoin scientifique
- Mars 2017 -> Juin 2017 : support Ressources HPC
- Mars 2018 -> Juin 2018 : Préconisation de parallélisation et support pour le code LIM-ENA (R)
- Juillet 2018 : étude Maple sur Myria
- Octobre 2018 : Préparation projet RIN Écume

3. Action LOMC (U. Le Havre)

Intervenants

- CRIANN : Benoist GASTON
- Université du Havre : Grégory PINON (LOMC)

Objectifs

- Améliorer les performances du code DOROTHY (optimisation, HPC)
- Améliorer la maintenance du code DOROTHY (Génie Logiciel)

Tâches Réalisées

- Optimisation partielle du code => gain de performance entre 30 et 50%
- Ré-architecture du code source => amélioration de la maintenance
- Préconisation d'un workflow pour la maintenance du code (versionning, tests unitaires, ...)
- Tests de passage à l'échelle et profilage des performances des dernières versions du code

Résultats

- Les optimisations ont permis un gain de performances de 30% à 50% selon les jeux de données.
- La ré-architecture du code a permis la sortie d'une version 1.0.0 avec un système de compilation multi-cibles.
- Les tests de passage à l'échelle et de profilage ont permis d'identifier les prochains axes d'amélioration.

Planning

- Décembre 2016 : Réunion de démarrage des travaux
- Janvier 2017 : prototype d'une version optimisée
- Juin 2017 -> juillet 2017 : amélioration des performances
- Mai 2018 -> Juin 2018 : mise en place d'un workflow pour la maintenance et amélioration de la génération des versions
- Juillet 2018 : version 1.0.0, tests de passage à l'échelle

4. Actions LMRS (U. Rouen)

a. Code JETLES

Intervenants

- CRIANN : Benoist GASTON
- Université de Rouen : Ionut DANAILA (LMRS), Francky LUDDENS (LMRS), Corentin LOTHODÉ (LMRS)

Objectifs

- Améliorer les performances des code GPS (Entrées/Sorties parallèles) et JETLES (Parallélisme)

Tâches Réalisées

- Réunions techniques
- Profilage du code JETLES
- Préconisation sur l'optimisation du parallélisme JETLES
- Profilage du code GPS

Résultats

- Un goulet d'étranglement lié aux schémas de communication dans JETLES a été identifié
- Présentation d'un prototype sur un nouveau schéma de communications plus performants dans JETLES

Planning

- Juillet 2017 : Réunion technique sur le code JETLES
- Automne 2017 : Profilage de code parallèle JETLES et prototypage d'un nouveau schéma de communication
- Décembre 2017 : Profilage du code GPS
- Décembre 2017 : Réunion d'échange avec le LMRS

b. Code EMBN

Intervenants

- CRIANN : Benoist GASTON
- Université de Rouen : Nicolas VERGNE (LMRS), Mathilde SAUTREUIL (Stagiaire)

Objectifs

- Améliorer les performances du code de bio-statistique EMBN (R)

Tâches Réalisées

- Réunions techniques
- Identification du problème de performance
- Sensibilisation à l'usage des outils de profilage
- Développement de l'optimisation de performance

Résultats

- Les optimisations apportées ont permis de diviser les temps de restitution par 5

Planning

- Mars 2017 : Réunion de démarrage
- Avril 2017 : Préconisation en développement logiciel et utilisation d'outil de profilage
- Avril 2017 -> Juin 2017 : optimisation des performances

5. Action CHU Rouen (U. Rouen)

Intervenants

- CRIANN : Benoist GASTON
- CHU : Badisse DAHAMNA (D2IM)

Objectifs

- Atteindre et maintenir les performances optimales de l'outil du CHU
- Procéder à une veille technologique

Tâches Réalisées

- Réunion technique de présentation de l'outil
- Réunion technique sur le passage à l'échelle de l'outil du CHU : pour prendre en charge un volume de données plus important l'outil doit tourner en parallèle sur plusieurs serveurs (accumulation de la quantité de mémoire disponible). Les performances (bonnes sur un seul serveur) chutent profondément lors de l'utilisation de plusieurs serveurs. Le CRIANN a proposé une série de tests pour identifier les causes de la chute de performance.

Résultats

- Les tests réalisés ont permis d'identifier que le goulet d'étranglement était d'origine logiciel et non matériel. En conséquence le CHU a optimisé la consommation mémoire de l'outil et réduit la taille des données à transférer entre les différents serveurs.

Planning

- Novembre 2016 : 1^{er} échange CHU-CRIANN
- Janvier 2017 : Réunion technique (présentation de l'outil et définition du périmètre)
- Mars 2018 : Réunion technique sur les problèmes de passage à l'échelle
- Mars 2018 -> Juin 2018 : Tests du CHU suite aux préconisations du CRIANN
- Été 2018 : Optimisations logicielles réalisées par le CHU

6. Action UMR IDEES (U. Rouen)

Intervenants

- CRIANN : Benoist GASTON, Béatrice CHARTON
- Université de Rouen : Sébastien REY-COYREHOURCQ (UMR IDEES), Bruno LEVASSEUR (DSI U. Rouen)
- ISC-PIF (équipe openMole) : Romain REUILLON et Mathieu LECLAIRE

Objectifs

- Interfacer la plateforme openmole avec l'infrastructure HPC Myria

Tâches Réalisées

- Réunions techniques
- Support à l'utilisation de Myria

Résultats

- Les échanges techniques ont permis à l'UMR IDEES d'installer une version d'openmole sur un serveur local permettant la soumission massive de simulations sur l'infrastructure HPC partagée Myria.

Planning

- Novembre 2016 : Prise de contacts, présentation des besoins du l'UMR IDEES
- Janvier 2017 : Définition d'un workflow
- Depuis janvier 2017 : support à l'utilisation, remontées des dysfonctionnements et des comportements anormaux des calculs openmole

Tâches en cours et à venir

- Juin 2019 : mise à disposition d'une partie de l'infrastructure Myria dans le cadre de l'école ExModelo

7. Action UMR COBRA (U. Rouen)

Intervenants

- CRIANN : Benoist GASTON
- Université de Rouen : Hélène LAVANANT (CORBA)

Objectifs

- Rendre fonctionnel le code Collision Code

Tâches Réalisées

- Réunions techniques
- Prise en main et analyse du code Collision Code et de son prédécesseur Mobcal

Résultats

- L'analyse du code a permis d'identifier des erreurs à corriger

Planning

- Novembre 2018 : Réunion de démarrage
- Décembre 2018 : Analyse du code Collision Code

Tâches en cours et à venir

- A court terme : correction des dysfonctionnements de collision code
- A moyen terme : prototypage d'une nouvelle version de collision code

Annexes

au rapport d'activité Projet Feder n° HN0001418

Maison Normande des Sciences du Numérique

Période septembre 2016 à décembre 2019

Annexe 4

Plaquette MNSN : voir fichier joint séparément