

OBJET :

Ce mode opératoire spécifie les modalités d'utilisation du Plateau Centre d'Expérimentation pour le Calcul Intensif en Chimie (PCECIC).

DOMAINE D'APPLICATION :

Ensemble des unités de recherche de l'ICMG et des personnes externes faisant appel aux ressources de PCECIC.

VOCABULAIRE :

ICMG : Institut de Chimie Moléculaire de Grenoble

PCECIC: Plateau Centre d'Expérimentation et de Calcul Intensif en Chimie

PCN-ICMG : Plate-forme Chimie Nanobio-ICMG

DIFFUSION :

PLASMA

DOCUMENTS DE REFERENCE :

PR-12 Gestion des équipements et infrastructures

FO-07-001 Règlement intérieur de la plate-forme chimie Nanobio de l'ICMG (PCN-ICMG)

Indice	Date	Auteur	Nature de la révision	
B	15/06/2017	A RIVET	Modifications	
A	27/01/2014	A RIVET	Création	
			Vérification	Approbation
Signé par :			ANNE MILET	SYLVAIN COTTAZ
Fonction :			Correspondant scientifique	Directeur ICMG
Date :			16/06/2017	19/06/2017
Visa :			AM	SC

1. Introduction

Le présent document précise le mode de fonctionnement du Plateau CECIC de PCN-ICMG.

Les prestations fournies par PCECIC concernent :

- La mise à disposition de moyens de calcul
- La réalisation de prestations
- La formation
- Les projets de recherche et développement

2. Mise à disposition des moyens de calcul

2.1. Introduction

Toute personne souhaitant utiliser les utiliser les moyens de calcul de PCECIC s'engage à respecter le règlement intérieur de PCN-ICMG. L'utilisateur s'engage également à respecter les chartes informatiques des tutelles dont il dépend.

2.2. Accès aux moyens de calcul

Toute personne travaillant dans un des trois laboratoires de l'ICMG peut disposer d'un accès aux moyens de calcul. Il doit pour cela en faire la demande à partir du formulaire « PCECIC : demande création de compte » présent sur Plasma (rubrique FONCTIONNEMENT / Utilisation des équipements).

PCECIC dispose de moyens de calcul propres que sont CECICCLUSTER dédiés à la communauté des chimistes. Il dispose également d'un accès à « Froggy » qui est l'équipement HPC de la communauté CIMENT (Calcul Intensif, Modélisation, Expérimentation Numérique et Technologique) de l'UMS GRICAD, acquis dans le cadre du projet Equip@Meso (Equipex vague 1).

2.2.1 CECICCLUSTER

CECICCLUSTER est cluster de calcul disposant de 600 cœurs sous CentOS. Les disponibilités des différents nœuds de calcul sont accessibles sur le site plasma.

2.2.2 FROGGY

PCECIC héberge dans ses locaux, le super calculateur "Froggy" qui comporte 3244 cœurs de calcul. Pour pouvoir utiliser Froggy, l'utilisateur doit soumettre au préalable sur l'espace PERSEUS (<https://perseus.ujf-grenoble.fr/>) un projet scientifique ou bien se joindre au projet générique de PCECIC intitulé « cecipex : Modélisation et simulation en chimie ». Toute demande de projet scientifique propre devra être validée par le correspondant scientifique et le responsable technique de PCECIC.

2.3. Les logiciels

PCECIC met à votre disposition, via ses membres, des logiciels et des compétences. La liste des logiciels disponibles est accessible sur le site plasma (rubrique FONCTIONNEMENT / Analyses et prestations). Leur mise à disposition dépend des licences d'utilisation des dits logiciels.

Dans la mesure du possible, il est recommandé de mutualiser les logiciels sans licence contraignante et utiles à la communauté, de façon à disposer d'une version unique des logiciels sur les calculateurs. Pour ce faire, il convient de se rapprocher du personnel du plateau.

Pour des logiciels très spécifiques, il est demandé à chaque utilisateur de déclarer les logiciels installés sur les espaces utilisateurs de PCECIC et de nommer une personne ressource pour ce logiciel. La personne ressource est invitée d'une part, à mettre à la disposition de la communauté sur PLASMA, les

informations concernant le logiciel (mode opératoire, liens vers des sites web, documentations internes...) et, d'autre part, à répondre à des questions sur son fonctionnement. Néanmoins, nous vous incitons à développer des collaborations dès lors que l'aide demandée n'est plus ponctuelle.

Les développements informatiques menés au sein du CECIC de même que les compétences liées à la programmation doivent également être répertoriés.

2.3. Transfert des données

PCECIC n'a pas vocation à être un espace de stockage permanent, aussi chaque utilisateur est invité à récupérer ses données, les transférer sur un ordinateur de son laboratoire et en assurer la sauvegarde.

3. **Réalisation de prestation**

PCECIC n'est pas ouvert actuellement à la réalisation de prestations.

4. **Formation**

PCECIC a également vocation à être un lieu d'échanges scientifiques et de formation. Des manifestations scientifiques sont ainsi organisées dans le cadre de l'ICMG de façon à favoriser les échanges scientifiques et le partage d'expériences. Les présentations de ces journées sont accessibles sur le site PLASMA (rubrique ANIMATION SCIENTIFIQUE / PCN-ICMG).

5. **Recherche et développement**

Le plateau est ouvert à toute offre de collaboration dans le cadre d'un projet de recherche et de développement en concertation avec le coordinateur scientifique et le responsable technique auprès desquels il convient de se rapprocher.

6. **Prévention et Sécurité**

Le règlement intérieur de PCN-ICMG précise les consignes générales relatives à la prévention et sécurité.

7. **Accès plateau**

La salle informatique du bâtiment C du DCM qui héberge les moyens de calcul HPC de PCECIC est uniquement accessible au personnel du plateau ainsi qu'à quelques personnes de l'UMS GRICAD ayant préalablement signé la charte d'utilisation de la salle.

Contacts :

pcecic.icmg@univ-grenoble-alpes.fr

Responsable Technique

Alain Rivet : 04 76 03 76 37

Coordinateur Scientifique

Anne Milet : 04 76 51 48 04