

1 OpenMOLE

1.1 Le logiciel

L'étude des systèmes complexes par la simulation numérique nécessite le traitement de gros volumes de données et l'exécution de calculs massifs. Cependant la mise en œuvre des méthodes numériques d'analyse avancées sur des environnements de calcul distribués s'avère très technique et loin des compétences disciplinaires des modélisateurs.

OpenMOLE¹ est un logiciel libre né de ce besoin fort: exécuter d'énormes quantités de calculs sur des modèles systèmes complexes. Pour répondre à cette question, OpenMOLE permet: d'exécuter de très nombreuses instances des codes de calcul des utilisateurs (implémentés dans à peu près n'importe quel langage) grâce à du calcul distribué, d'exécuter des méthodes d'analyse numérique clef en main (algorithmes d'optimisation, de calibration, d'analyse de sensibilité...), de bénéficier de manière transparente de la puissance de calcul d'un large éventail d'environnements massivement parallèles (serveurs multi-processeurs, fermes de calcul, grilles de calcul).

2 Stratégie cloud

OpenMOLE se présente sous forme d'un langage dédié à l'exploration des modèles de simulation. Depuis, la version 5 (publiée début septembre), OpenMOLE propose une interface graphique qui guide l'utilisateur dans l'utilisation du logiciel. Cette avancée ergonomique a déjà permis l'adoption d'OpenMOLE 5 par plus de 50 utilisateurs en seulement 2 mois.



Figure 1: Capture d'écran de l'interface d'OpenMOLE

L'interface graphique représente une avancée importante dans l'utilisabilité d'OpenMOLE par des chercheurs de toutes disciplines. Cependant elle nécessite toujours une installation du logiciel sur la machine de l'utilisateur. Cette opération pose deux problèmes: d'une part elle confronte l'utilisateur à une opération technique qui peut s'avérer complexe et décourager l'utilisateur avant même qu'il puisse tester le logiciel. D'autre part, la machine sur laquelle est

¹openmole.org

installée OpenMOLE doit rester allumée et connectée au réseau pendant tout le temps de l'exécution de workflows qui peuvent pourtant durer plusieurs jours.

Pour régler ce problème, nous développons actuellement une version d'OpenMOLE "dans les nuages". Grâce à cette nouvelle fonctionnalité, les utilisateurs pourront se connecter sur une instance distante d'OpenMOLE, développer et suivre l'exécution de leurs workflows depuis n'importe quel navigateur.

3 Infrastructure

Pour promouvoir OpenMOLE et rendre service à la communauté l'ISC-PIF mettra à disposition 2 instances d'OpenMOLE. La première servira d'instance de démonstration. Elle permettra à des potentiels utilisateurs, souhaitant tester OpenMOLE, de le faire sans procédure d'inscription ou d'installation préalable. Cette instance proposera une version cloisonnée d'OpenMOLE servant à montrer ses fonctionnalités sans pour autant permettre de passer à l'échelle ou de faire persister des données. La deuxième instance mettra à disposition un service OpenMOLE complet. Cette instance nécessitera une inscription au service. Elle permettra de passer à l'échelle et de stocker des données de manière pérenne.

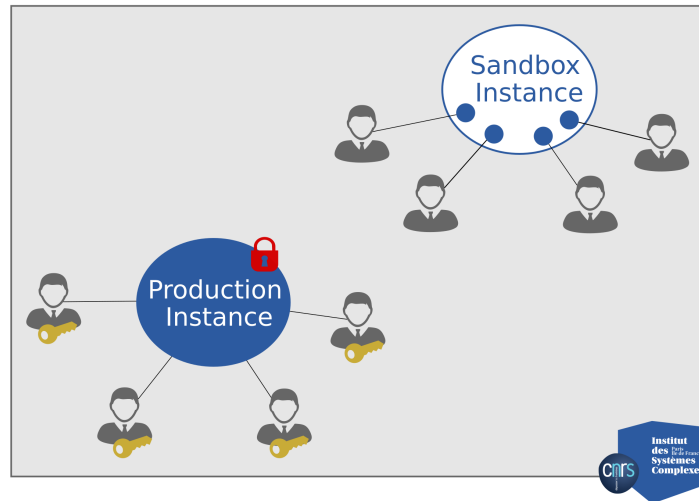


Figure 2: Services OpenMOLE

4 Passage à l'échelle

En complément de l'instance centrale, l'ISC-PIF formera les administrateurs systèmes des laboratoires partenaires qui souhaitent déployer leur propre instance OpenMOLE. Tous les serveurs feront parti d'un réseau peer 2 peer qui permettra un échange facile des données et le travail collaboratif sur les workflows quelque soit le serveur depuis lequel l'utilisateur travaille.

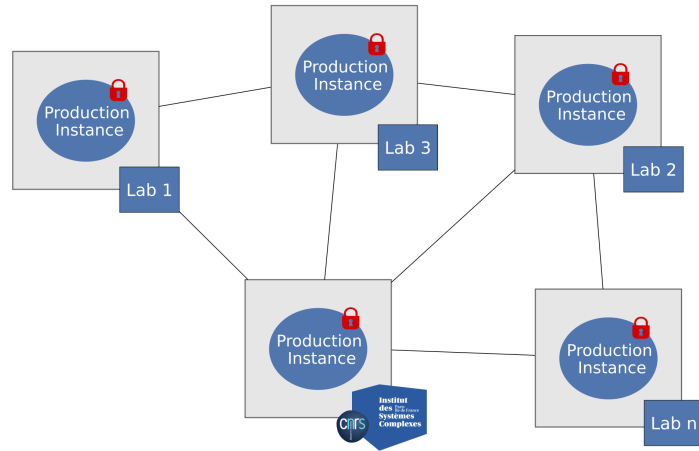


Figure 3: Réseau OpenMOLE

5 Besoins matériel

Ressource par utilisateur sur le service de test : 1 cœur, 512 Mo de RAM, 1 Go de données. Ressource par utilisateur sur le service de production : 1 cœur, 10 Go de RAM, 100 Go de données.

Capacité prévisionnelles : 10 utilisateurs simultanés en test et 50 utilisateurs simultanés en production.

Besoins matériel: 60 cœurs, 500 Go - 1 To de RAM, 10 To de disques.