

La Lettre de l'IDRIS

Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique

www.idris.fr

Édito

Les missions de l'IDRIS sont de déployer et de piloter un environnement de calcul de haute performance et de contribuer à l'intégration des nouvelles technologies en émergence dans le système national de calcul scientifique. Ceci, dans le but de consolider la compétitivité de notre recherche scientifique.

Cette lettre – reprise aujourd'hui au format plus léger pour faciliter une parution plus régulière et soutenue – a la vocation de faire connaître les activités que l'Institut met en œuvre pour remplir ses missions. Ainsi, le lecteur trouvera une description de la nouvelle configuration de calcul scalaire de l'IDRIS, annoncée en février de cette année, qui rattrape un retard évident et qui nous permet dans l'immédiat d'améliorer sensiblement la qualité des services offerts à nos utilisateurs.

La mission de transfert de technologie nous a conduit depuis 1998 à nous engager dans un certain nombre de projets nationaux et européens portant sur les grilles de calcul. Outre plusieurs actions spécifiques effectuées en interne – dont la création d'une équipe de calcul distribué – nous avons participé depuis l'an 2000 au projet EUROGRID qui s'est terminé en janvier dernier. Un très succinct bilan est présenté dans cette lettre. L'IDRIS est également impliqué dans deux nouveaux projets européens : DEISA (en qualité de coordinateur) et HPC-Europa. Ces deux projets sont très différents. Le dernier poursuit une activité traditionnelle d'accès trans-national orientée vers la mise en relation des équipes de recherche et le support à la collaboration internationale. DEISA – avec le projet EGEE piloté par le CERN – fait partie d'une nouvelle vague d'infrastructures de recherche à vocation opérationnelle, appuyées sur les technologies de grilles. DEISA se propose ni plus ni moins que de déployer et de gérer le premier centre de calcul (virtuel) européen, et de démontrer la pertinence de cette stratégie dans la construction d'un espace européen pour la recherche scientifique et technique.

Les articles de cette lettre vous permettront de juger par vous-mêmes nos orientations stratégiques ainsi que la pertinence des efforts que nous déployons pour servir la science nationale et européenne.

Victor Alessandrini

Projet DEISA

Motivations, stratégies, technologies

1. Les objectifs de DEISA

DEISA (*Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications*) est un consortium de centres nationaux de calcul en Europe qui se propose de déployer et d'exploiter une infrastructure de calcul distribué de très haute performance. La puissance de calcul totale sera de plus de 20 téraflop/s au début du projet en 2004, avec une importante et constante évolution dans les années à venir.

Ce projet FP6 d'infrastructures de recherche (dirigé par Victor Alessandrini, directeur de l'IDRIS) vise à créer un centre HPC européen virtuel, au sommet de la technologie et de la performance, et à intégrer efficacement cette nouvelle infrastructure dans l'espace européen de la recherche. Les chercheurs en Europe disposeront d'une puissance de calcul regroupée et des possibilités de gestion globale de données structurées d'une manière cohérente, efficace et agréable. Une attention particulière est portée sur les grands défis d'applications scientifiques clés fortement développées par les organisations de recherche nationales partenaires, comme les sciences de la matière, la recherche sur le climat, l'astrophysique, la chimie quantique, les sciences de la vie, la recherche sur l'énergie de fusion. L'infrastructure de DEISA sera accessible, sous certaines conditions, à des utilisateurs d'organisations extérieures au consortium.

2. Motivations

L'émergence de l'*Earth Simulator* japonais (une architecture vectorielle spécialement conçue pour le calcul scientifique) comme le leader mondial des supercalculateurs, a suscité une profonde remise en question des stratégies et priorités dans HPC. Plusieurs opérations sont en cours pour stimuler l'émergence de nouvelles architectures de calculateurs au service de la science, motivées par le seul but d'atteindre une performance maximale soutenue pour les applications scientifiques.

Suite page 2

Sommaire

Édito / Projet DEISA	1
Service national de visualisation	4
Nouvelle plate-forme scalaire à l'IDRIS	5
Projet HPC-Europa	6
Projet EUROGRID	6
Forum sur la simulation numérique en astrophysique	7
Élection du comité des utilisateurs de l'IDRIS	7
Informations	8

Projet DEISA (suite)

Dans ce contexte, la motivation principale du projet DEISA est de faire progresser la science computationnelle européenne. Les centres de calcul partenaires du projet, profondément concernés par l'avenir du calcul de très haute performance en Europe, cherchent à développer une action d'avant-garde dans ce domaine. La mise en service d'un super cluster européen de quelques dizaines de téraflop/s par un couplage fort des supercalculateurs nationaux, avec des logiciels et des réseaux dédiés à haut débit, ouvre la voie dans un avenir proche à des actions innovantes et créatrices qui mettent en valeur l'impact des infrastructures existantes. De plus, cette approche devrait permettre de répondre à certaines (sinon à toutes) demandes exigeantes formulées par la communauté scientifique.

3. L'infrastructure européenne de calcul

Pour déployer une infrastructure européenne de production, DEISA adopte une approche *top-down* pour intégrer les environnements de calcul nationaux. Les orientations et les priorités du projet sont déterminées par les objectifs stratégiques et non par l'attachement à telle ou telle technologie. En effet, la mise en place d'un environnement de production est principalement une solution stratégique, dans laquelle les choix technologiques résultent de leur capacité à s'adapter à un modèle opérationnel pré-établi et à fournir de réels services aux utilisateurs. Ce critère détermine la manière dont DEISA intègre la simple puissance de l'ordinateur, les couches de données, d'applications et d'interfaces.

- Le projet 'étendu' : développement d'une infrastructure de recherche élargie dont le but est de connecter efficacement le super-cluster DEISA aux autres infrastructures de calcul en Europe. Ceci nécessite la mise en place des services de grilles traditionnels avec les autres sites HPC partenaires, les infrastructures ou projets de recherche de grilles. Toutefois, la priorité sur le calcul de haute performance est maintenue, et les services déployés sont sélectionnés et identifiés sur les bases de ce critère.

Le projet central fournira une image unique du supercalculateur distribué (initialement homogène), constitué de plusieurs systèmes nationaux IBM P690, P690+ et P655+, ainsi qu'une gestion globale des données à une échelle continentale. Il faut toutefois signaler que les configurations nationales intégrées dans ce super-cluster sont sensiblement différentes. Elles associent des noeuds P690 et P690+ à 32 processeurs avec des noeuds P655+ à 4-8 processeurs, et des configurations de mémoire très diversifiées. La Phase 1 du cœur de la plate-forme (opérationnelle en 2004) sera constituée de 4000 processeurs, chacun avec une performance de crête de 5 à 8 gigaflop/s. Ils sont répartis ainsi :

Sites		
FZJ, Jülich, Allemagne	1184 processeurs	8,0 téraflop/s
IDRIS-CNRS, France	1024 processeurs	6,7 téraflop/s
RZG, Garching, Allemagne	768 processeurs	3,8 téraflop/s
CINECA, Italie	512 processeurs	2,6 téraflop/s
CSC, Finlande	512 processeurs	2,6 téraflop/s

La phase 2 du déploiement de la plate-forme centrale (opérationnelle fin 2005) bénéficiera d'un certain nombre d'améliorations. Une extension hétérogène est prévue par l'intégration de plusieurs systèmes Linux, le premier étant celui actuellement installé à SARA (Pays-Bas). D'autres systèmes nationaux importants intégreront le cœur de la plate-forme. Une montée en puissance du réseau dédié d'interconnexion (de 1 Gb/s à 10 Gb/s) est aussi prévue pour cette configuration.

L'infrastructure étendue repose sur la mise en place et l'exploitation d'une infrastructure de grilles plus traditionnelle fournissant une intégration plus faible des ressources de calcul avec d'autres structures ou projets. Elle inclut des développements de *middleware* traditionnels – comme Globus ou Unicore – ainsi que la gestion globale des données à travers différents domaines avec des systèmes de fichiers répartis et le développement d'une interface spécifique DEISA pour une gestion des ressources hétérogènes. Cette partie de l'infrastructure se situe à une couche logicielle plus élevée que le projet central. L'infrastructure étendue, composée d'un environnement de grille plus traditionnel, ne nécessite pas d'interconnexions de réseau dédié et elle opère sur les services standard NRENs-GEANT.

4. La stratégie d'intégration du projet central et son modèle opérationnel

Dans le projet central de déploiement d'un supercalculateur réparti, les technologies de grilles sont cachées dans les systèmes de fichiers distribués utilisés pour fournir une gestion globale des données à une échelle continentale et dans les gestionnaires de batch multi-cluster qui permettent la gestion d'un pool de ressources de calcul européen.

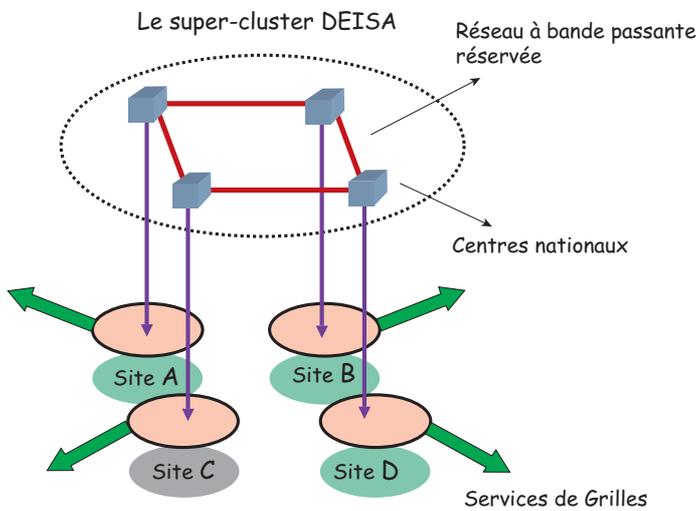


Figure 1

L'environnement de calcul de DEISA est représenté en figure 1. Il a été structuré en deux parties :

- Le projet 'central' : déploiement et gestion d'un supercalculateur réparti. Cette partie du projet est fortement dépendante du déploiement d'un réseau interne à bande passante réservée, fourni par les réseaux nationaux (RENATER, GARR, DFN) et européens (GEANT). Dans ce cœur l'infrastructure, les technologies modernes de grilles font un travail transparent en arrière plan et ne sont pas directement vues par les utilisateurs.

Les systèmes de fichiers distribués globaux sont des environnements logiciels sophistiqués indispensables pour fournir une image système unique d'un cluster. Un cluster typique de supercalculateurs en exploitation actuellement sur chaque site DEISA – représenté en figure 2 – est constitué d'un nombre substantiel de nœuds de calcul autonomes avec leur propre système d'exploitation (éléments verts sur la figure 2), d'un espace disque important qui constitue le support physique des systèmes de fichiers (éléments rouges sur la figure 2) et d'un réseau d'interconnexion qui relie tous ces éléments.

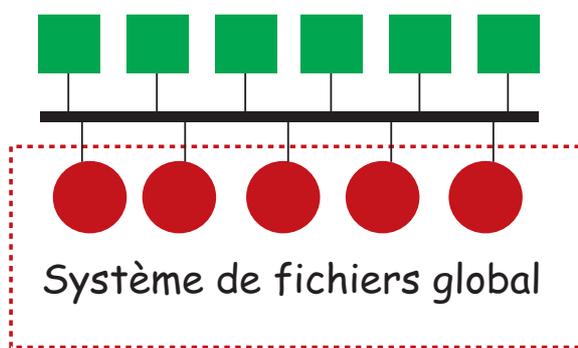


Figure 2

En principe, chaque nœud de calcul devrait avoir son propre système de fichiers avec ses données. Mais les systèmes de fichiers répartis permettent le partage des données et suppriment la nécessité de les recopier sur chaque nœud. Ceci est évidemment une condition fondamentale pour une intégration de plusieurs nœuds de calcul en une seule plate-forme de calcul à image système unique. Car les données dans le système de fichiers global sont partagées de manière totalement symétrique par les nœuds de calcul et un utilisateur n'a pas besoin de savoir sur quel nœud tourne son application.

Pour mettre en place un cluster de supercalculateurs européen, DEISA a simplement étendu l'idée à l'échelle continentale, en ajoutant une couche supplémentaire d'interconnexion entre les différents sites nationaux et en mettant en service des systèmes de fichiers répartis de portée continentale, comme représenté en figure 3. Dans cette plate-forme européenne, les utilisateurs auront une vision globale de tout l'environnement et les données stockées dans les systèmes de fichiers continentaux seront vues de manière symétrique depuis tous les sites nationaux. Plusieurs services de haut niveau proposés par cette plate-forme sont évidents :

Un environnement de travail coopératif trans-national. Les projets scientifiques trans-nationaux qui gèrent d'importantes quantités de données peuvent compter sur les ressources de données globales de l'infrastructure DEISA pour accéder à un environnement de calcul coopératif incluant les cycles de calcul, fichiers et séries de données.

La gestion concertée d'un « pool » de ressources européennes. La gestion concertée de plusieurs plates-formes nationales de calcul – basée sur une redistribution de la charge à l'échelle continentale – permet l'allocation des ressources exceptionnelles aux travaux très exigeants qui requièrent des quantités considérables de puissance de calcul. Plutôt que de faire du *metacomputing* et d'éclater l'application sur plusieurs plates-formes (ce qui requiert une co-allocation astucieuse des ressources, non disponible aujourd'hui), DEISA se propose d'allouer une fraction importante des ressources d'un site à une seule application, en se basant sur une

migration des travaux, c'est-à-dire en redistribuant les travaux d'un site à un autre. Notez que la disponibilité des systèmes de fichiers répartis facilite cette stratégie opérationnelle. Notez également que ces applications ne sont pas modifiées, et qu'elles n'ont pas besoin d'être adaptées à une grille pour opérer à un niveau de performance extrême. Avec ce modèle opérationnel, le centre virtuel de calcul européen n'est pas très différent d'un centre réel.

Exploitation d'applications réparties. L'infrastructure DEISA peut gérer efficacement des applications distribuées multiphysiques et multicomposants impliquant des modules logiciels couplés. Ces applications, qui présentent différents niveaux de parallélisme avec des quantités de données modérées circulant au plus haut niveau (distribué), peuvent bénéficier d'un super cluster hétérogène comme celui qui est prévu à la phase 2 du projet central.

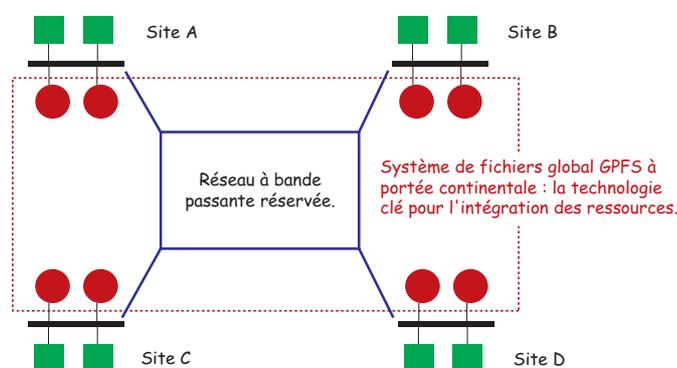


Figure 3

5. Les défis de la technologie

La plate-forme centrale a été soigneusement conçue afin de minimiser les risques technologiques et d'obtenir une qualité de production dès les premiers mois après le début du projet.

Les systèmes de fichiers distribués constituent la technologie **décisive** du cœur de la plate-forme. L'infrastructure de la phase 1 initiale, étant un système IBM homogène, utilisera une extension du GPFs d'IBM (*Global Parallel File System*) qui est actuellement opérationnel dans les sites de DEISA. Cependant, d'autres systèmes de fichiers répartis seront également installés et exploités, comme le DataGrid d'AVAKI (qui possède un modèle de sécurité robuste et qui peut opérer dans un environnement hétérogène), ou AFS (*Andrew File System*). Un prototype du DataGrid d'AVAKI est opérationnel entre l'IDRIS (France) et RZG (Garching, Allemagne) depuis février 2003.

L'extension hétérogène du cœur de la plate-forme, prévue pour 2005, suscite de nombreux défis relatifs à l'exploitation commune des systèmes AIX et Linux. Un modèle opérationnel est développé afin de pouvoir fournir un maximum de valeur ajoutée à la science *computationnelle* avec une telle plate-forme. Le principe de base du projet est toujours la volonté de cacher les complexités des technologies de grilles aux utilisateurs finaux et la mise en place d'outils de haute performance.

Suite page 4

Projet DEISA (suite)

L'environnement de grille étendu qui met en interface le cœur de la plateforme au reste de l'environnement IT européen est aussi important. DEISA développera et exploitera bien sûr les environnements *middleware* classiques de grilles. Mais DEISA suivra aussi dans ce domaine les progrès et initiatives des différents projets R&D européens, et mènera une activité de R&D en gestion des ressources en environnement hétérogène, spécialement adaptée à ses besoins.

6. Vers le centre européen virtuel

Le but fondamental de DEISA n'est pas de mettre en place un réseau dédié et des nœuds de calcul à plusieurs téraflop/s, mais de les utiliser efficacement afin de produire une science computationnelle à l'échelle mondiale. *Le seul et unique critère de réussite du projet est son impact sur les sciences computationnelles en Europe.* La mobilisation des ressources humaines est décisive pour atteindre le succès.

Le centre européen « virtuel » a été conçu comme un centre bien réel. Un nombre important d'activités de services classiques ont été étendues à une

échelle transnationale, chacune pilotée par un site différent : support et développement de réseau (FZJ Jülich), gestion de données avec des systèmes de fichiers globaux (RZG Garching), *middleware* (CINECA), applications et support aux utilisateurs (IDRIS), sécurité (SARA). Plusieurs comités travailleront en coopération et conseilleront la direction du projet : un comité d'utilisateurs pour les remarques sur la qualité du service, un comité scientifique pour le conseil en politique scientifique et la gestion des ressources et un comité de conseil concernant les questions de technologie.

Le projet DEISA soutient également un nombre substantiel d'activités de recherche dans différents domaines scientifiques comme les sciences de la matière, l'astrophysique et la cosmologie, la physique des plasmas, les sciences de la vie, le calcul industriel en dynamique des fluides. Ces activités de recherche fournissent des supports d'applications (développement, migration et optimisation) aux premiers utilisateurs de l'infrastructure. Une autre activité de recherche traite du support au développement et à la mise en œuvre des modèles couplés d'applications réparties.

Contacts : www.deisa.org

Service national de visualisation

L'IDRIS a lancé son service national de visualisation fin septembre 2003. Celui-ci s'articule autour de deux axes complémentaires :

- un supercalculateur graphique SGI Onyx3800 doté de deux *pipes* graphiques de très haute performance associés à 8 processeurs Mips R14000 de nouvelle génération, de 4 Go de mémoire partagée, ainsi que d'un espace local performant de 100 Go sur disque,
- un logiciel de compression d'application, *Vizserver*, qui permet, depuis un poste local, de lancer un logiciel de visualisation sur le calculateur graphique, de faire tous les post-traitements nécessaires, d'afficher le résultat et les fenêtres de contrôle de l'application sur le poste client sous la forme d'images décompressées et d'interagir sur l'application alors que toute l'exécution se déroule à l'IDRIS. La partie cliente peut être installée sur un PC (sous Linux ou Windows) ou une station de travail (SGI ou SUN).

L'utilisateur peut ainsi manipuler ses données sans les rapatrier en local, faire appel à des logiciels de visualisation 3D performants, le tout en restant devant l'écran de son poste de travail local, ce dernier n'ayant pas besoin d'avoir une puissance graphique 3D. Selon le logiciel utilisé, les données manipulées, le type d'objets graphiques affichés, la taille de la fenêtre de visualisation de la scène, le niveau de compression utilisé, la plaque régionale concernée et le réseau du laboratoire jusqu'au poste client, la bande passante

nécessaire va varier entre quelques centaines de Kbits/s et quelques Mbits/s.

On peut à tout moment choisir le niveau de compression en fonction de la bande passante entre l'IDRIS et le laboratoire ; on peut également travailler à 5 simultanément sur le même jeu de données en utilisant la même application graphique. L'application réserve automatiquement un *pipe* sur le calculateur, ce qui assure un très haut niveau de rendu et de performances que l'on ne peut pas obtenir aujourd'hui en local. L'accès à la machine se fait en remplissant un formulaire FOGEC accessible depuis le web de l'IDRIS (www.idris.fr) en justifiant l'usage de ce calculateur.



Actuellement une quinzaine de groupes se sert de ce calculateur graphique à distance via *Vizserver*. Les logiciels de visualisation actuellement disponibles sont :

- AVS/Express 6.1 et AVS 5.6
- Ensign 7.6.2
- Molekel et Molden
- Paraview et Vtk
- Vis5d+

OpenDX sera disponible dans le courant du second trimestre 2004. Pour tout renseignement, vous pouvez contacter l'équipe de visualisation de l'IDRIS à graph@idris.fr

Nouvelle plate-forme scalaire à l'IDRIS

La mise en service de la nouvelle configuration de Zahir est effective depuis le milieu du mois de janvier 2004. L'importante augmentation de la capacité de calcul (1,3 à 6,7 téraflop/s de puissance de crête) permet aux utilisateurs de l'IDRIS de bénéficier du plus puissant supercalculateur scalaire entièrement dédié à la communauté académique en Europe.

La configuration est composée de 116 nœuds de calcul qui se répartissent de la façon suivante :

- 8 nœuds à 32 processeurs de type p690 (avec 256, 128 ou 64 gigaoctets de mémoire partagée) qui composaient la configuration initiale,
- 12 nœuds à 32 processeurs de type p690+ (avec 128 gigaoctets de mémoire partagée pour chaque nœud),
- 96 nœuds quadri-processeurs de type p655+ (avec 8 gigaoctets de mémoire partagée par nœud).



La machine Zahir a été mise en service avec le souci de continuer à offrir une image unique aux utilisateurs de l'IDRIS mais l'installation de la configuration n'est pas terminée. L'ancienne plate-forme, les 8 nœuds p690, n'a pas encore migré sur le réseau *Federation*. Les nouveaux nœuds, p690+ et p655+ sont tous sur *Federation*, mais groupés en sept clusters différents, ceci étant transparent pour les utilisateurs. D'ici à l'été prochain, on passera progressivement à une configuration où les 116 nœuds (soit les 1024 processeurs) seront tous connectés au seul réseau *Federation*.

Il est utile de préciser un certain nombre de questions pertinentes pour une bonne utilisation de cette machine.

Les priorités scientifiques

Le conseil scientifique est unanime pour affirmer que le rôle de l'IDRIS est de soutenir prioritairement les projets scientifiques originaux

et innovants, ainsi que les projets pour lesquels l'accès aux moyens de l'IDRIS apporte une plus-value scientifique certaine. C'est pourquoi le conseil scientifique regarde d'un œil critique la présence parfois importante de travaux monoprocesseurs dont on peut se demander si certains ne seraient pas aussi bien servis par des moyens de calcul locaux.

Certains codes très répandus en Chimie ne sont pas parallélisés et souvent des travaux monoprocesseurs font partie d'une chaîne complexe de calculs et accompagnent des simulations très parallèles. Mais l'IDRIS s'est engagé auprès du conseil scientifique à faire en sorte qu'ils n'entravent pas les grosses simulations parallèles qui doivent rester prioritaires. L'augmentation importante des ressources disponibles facilite, bien évidemment, cette tâche. Les profils des travaux qui s'exécutent sur Zahir sont étudiés attentivement en ce moment.

Structure de classes

Une nouvelle structure des classes *batch* a été mise en place pour permettre l'exécution des travaux MPI massivement parallèles et des travaux OpenMP-Threads à mémoire importante (jusqu'à 55 gigaoctets). Les travaux MPI bénéficieront du fait qu'une partie de la machine possède une architecture particulièrement adaptée (nœuds quadri-processeurs directement branchés sur le réseau à haut débit *Federation*). Des efforts sont entrepris pour optimiser les accès interactifs et les adapter au mieux à leur finalité : disposer de temps de réponse très courts dans les processus de développement et de débogage des codes.

Les classes OpenMP-Threads

Elles sont limitées à 16 processeurs pour un certain nombre de raisons. Pour les nœuds à 32 processeurs, le *hardware* n'est pas strictement parlant un système SMP (multiprocesseurs symétrique). La mémoire est logiquement partagée mais physiquement distribuée. Le nœud est constitué de 4 sous-nœuds (briques de base) de 8 processeurs chacun et le réseau interne est hiérarchique. Les communications internes sont donc plus efficaces dans la brique de base de 8 processeurs que dans l'ensemble du nœud. Il est donc normal que, au-delà de 8 processeurs, l'extensibilité et le *speedup* des applications OpenMP-Threads se dégradent assez souvent. Le modèle de programmation lui-même n'est pas



supposé être « extensible » pour un nombre élevé de *threads*. Synchroniser 20 *threads* coûte beaucoup plus cher que deux fois la synchronisation de 10 *threads*.

Un article technique concernant les tests OpenMP est en préparation, et il sera bientôt disponible sur notre serveur Web.

Le projet européen DEISA

Vers la fin de l'année 2004, Zahir sera intégré au projet DEISA avec les machines IBM de Jülich et Garching en Allemagne et CINECA en Italie, pour constituer un supercalculateur réparti européen qui disposera initialement de 4000 processeurs (24 téraflop/s crête).

Il y a, comme idée de base, la constitution d'un « pool européen de ressources » conjointement géré, permettant les échanges de ressources de calcul entre les sites.

La co-gestion d'un pool de ressources doit permettre le support de simulations beaucoup plus importantes que celles que chaque site peut supporter individuellement. Elle doit nous permettre d'allouer à une simulation une fraction importante de la totalité d'une machine. C'est l'idée de base de ce projet qui est aujourd'hui le projet phare en Europe en calcul de haute performance.



Projet HPC-Europa

L'IDRIS participe au projet d'Infrastructure de Recherches HPC-Europa financé par la Communauté européenne dans le cadre du 6^e PCRD. Son objectif est la mise en œuvre d'une activité d'accès trans-national (*Transnational Access*) au calcul de haute performance (HPC), structurée autour de six centres nationaux d'informatique scientifique :

- CEPBA en Espagne,
- CINECA en Italie,
- EPCC en Grande-Bretagne,
- HLRS en Allemagne,
- IDRIS en France,
- SARA en Hollande.

Les buts affichés sont de :

- faciliter l'accès au calcul de haute performance aux chercheurs européens,
- renforcer, autour de ce thème, les échanges et

les collaborations entre les équipes de recherche.

Ce programme offre aux chercheurs des pays membres ou candidats à la CE, sélectionnés sur la base d'un projet scientifique, un séjour à l'étranger de quelques semaines auprès d'un des six centres de calcul cités ci-dessus en association avec un laboratoire de recherche local.

Il comprend :

- l'accès aux supercalculateurs du centre de calcul et à un service de support personnalisé au calcul scientifique fourni par des équipes d'experts,
- une collaboration avec des chercheurs de la même discipline dans un laboratoire proche du centre de calcul retenu,
- le financement des frais de calcul, de transport, de logement et de séjour.

Lors de leur séjour, les visiteurs seront d'abord accueillis par le centre de calcul choisi et formés



à l'utilisation avancée des supercalculateurs du site, puis rejoindront un laboratoire d'accueil proche pour une collaboration scientifique. Ce projet a débuté officiellement le 1^{er} janvier 2004, pour une durée de 4 ans.

Vous trouverez de plus amples informations sur ce programme et les formulaires de candidature pour un séjour à l'étranger sur le site Web officiel de HPC-Europa à l'adresse :

www.hpc-europa.org

Les laboratoires de recherche de la région parisienne sont chaleureusement invités à rejoindre les dizaines de laboratoires étrangers déjà impliqués dans le programme en acceptant de recevoir pendant quelques semaines un chercheur étranger. Les laboratoires intéressés peuvent à tout moment déclarer leur adhésion à ce programme d'échange en contactant le secrétariat de l'IDRIS (secretariat@idris.fr, Delphine Salmon, tél. : 01 69 35 85 05).

Projet EUROGRID

Le projet européen EUROGRID (voir La Lettre de l'IDRIS n° 5, pages 20-21) s'est achevé fin janvier, après trois années d'activité, par une grande réunion qui s'est tenue à Paris et dont nous étions les organisateurs. Il s'agissait de la troisième et dernière revue d'examen du projet par la commission européenne.

Cette collaboration, réunissant 11 partenaires, centres de calcul nationaux (l'IDRIS en France et les centres de Jülich en Allemagne, Manchester en Grande-Bretagne, Manno en Suisse, etc.) ou bien industriels (EADS, T-Systems, Pallas, Météo allemande), avait pour but de poursuivre le développement de l'intergiciel UNICORE, tant dans ses fonctionnalités de base que par l'ajout de modules additionnels spécifiques, et de le tester sur des applications et dans des environnements divers. Rappelons qu'UNICORE permet d'offrir une vision globale d'une grille de machines hétérogènes, en autorisant, à partir d'une authentification et d'une interface uniques, la soumission de chaînes de travaux distribués sur divers calculateurs, en masquant aux utilisateurs les complexités techniques liées aux différences entre les machines, les systèmes d'exploitation, les gestionnaires de travaux, etc. Dans le cadre du projet EUROGRID, des extensions ont été

ajoutées, tant pour disposer de fonctionnalités nouvelles (allocataire de ressources, comptabilité, transferts performants de fichiers, gestion facilitée de codes couplés — l'une des tâches à la charge de l'IDRIS dans ce projet —, etc.) que pour faciliter la mise en œuvre de certaines catégories particulières d'applications (notamment en biochimie, météorologie et sciences de l'ingénieur). Les objectifs initiaux du projet ont été atteints dans leur quasi-totalité, et, tant de l'avis des partenaires que de la commission, le succès de celui-ci est réel, UNICORE étant ainsi devenu un intergiciel à la fois robuste et fonctionnellement riche.

Son avenir a été récemment précisé, vu en particulier les interrogations qu'avaient suscitées la fin du projet EUROGRID et le rachat par Intel de la société allemande Pallas qui développait la partie cliente du logiciel. Si Intel va s'appuyer notamment sur UNICORE pour la constitution de son propre environnement de programmation pour les grilles, en cours de réalisation, l'ensemble des développements réalisés jusqu'à maintenant va être mis dans le domaine public et sera donc librement accessible. La maintenance sera dorénavant assurée par le centre de recherche de Jülich, qui fut l'un des principaux

partenaires d'EUROGRID, et le support par l'institut Fraunhofer, situé lui aussi en Allemagne. Cela garantit donc l'avenir de ce logiciel pour les prochaines années. Il sera l'une des interfaces d'accès aux supercalculateurs intégrés dans le projet DEISA (voir l'article dans ce numéro). De plus, de nouveaux développements sont projetés, aussi bien dans certains des nouveaux projets européens du 6^e plan cadre, tels que NextGrid et UniGridS, que dans d'autres projets internationaux, notamment le projet japonais NaReGi (*National Research Grid Initiative*).

On peut également noter qu'un de nos groupes d'utilisateurs appartenant à la communauté du climat est en train de tester l'utilisation d'UNICORE pour la gestion des chaînes complexes de travaux qu'ils exploitent à l'IDRIS, qui requièrent des soumissions de travaux interdépendants entre les machines de calcul, le serveur de fichiers et la machine de pré et post-traitement.

Tout ceci permet donc de penser que les succès d'EUROGRID pourront être capitalisés et d'être très optimiste sur l'avenir des développements effectués dans ce cadre durant ces trois dernières années.

Contacts : www.eurogrid.org

Forum sur la simulation numérique en astrophysique

L'Action Spécifique pour la Simulation Numérique en Astrophysique (ASSNA) et l'IDRIS ont organisé conjointement, du 15 au 18 décembre 2003, un forum s'adressant à tous les intervenants de la communauté astrophysique. Il a fait suite au forum de juin 2001 qui avait permis une première prise de contact et donné une vision globale de ce qui se faisait en France en simulation numérique lourde pour l'astrophysique. Cette nouvelle édition (qui s'est tenue à l'IDRIS) s'est résolument tournée vers l'avenir. En effet, en plus des actions du type de celles déjà soutenues les années précédentes (ateliers, écoles, etc.), l'ASSNA souhaite soutenir cette année, via son appel d'offres 2004, un certain nombre de « grands projets numériques » ambitieux. Le forum a donc été l'occasion d'une première présentation de tels projets qui seront amenés à se développer dans les années qui viennent. Il s'est articulé autour de trois thèmes :

- une présentation des résultats de la réflexion des Programmes nationaux et GdR qui ont, notamment pour le colloque de La Colle sur Loup, élaboré leur propre prospective pour la

simulation numérique dans leur domaine ;

- une présentation des projets numériques que différentes équipes souhaitent préparer dans la perspective de l'appel d'offres 2004 ;
- des présentations plus courtes, orales ou sous forme de posters, des travaux numériques en cours.

Avec plus de 70 participants, ce forum s'est avéré être une réussite, tant par le nombre et la qualité des présentations que par l'effort de mobilisation de plusieurs équipes vers des « Grands Projets ». L'ensemble des présentations du forum est disponible sur le serveur WEB de l'ASSNA à l'adresse suivante :

http://www.cetp.ipsl.fr/~mottez/simulaastro/forum_assna_2003/welcome.html

Dans le prolongement de ce forum, un atelier « Simulation numérique et visualisation en astrophysique » a été organisé du 10 au 11 février 2004, toujours avec le soutien de l'ASSNA



Forum ASSNA à l'IDRIS - décembre 2003

et de l'IDRIS. La première journée a été l'occasion pour les chercheurs de présenter les outils utilisés, leurs développements et leurs réalisations, ainsi que les problèmes rencontrés (dimensionnement des données, 3D, animations). Le lendemain, l'équipe graphique de l'IDRIS a présenté des approches de solutions au travers de diverses présentations et démonstrations de produits et services disponibles à l'IDRIS (IDL6, AVS/express, Vizserver, etc.). Une table ronde a clos cet atelier riche en échanges entre la vingtaine de participants et l'équipe graphique de l'IDRIS.

Contact : Pierre-Francois.Lavallee@idris.fr

Élection du comité des utilisateurs de l'IDRIS

Le 17 février dernier un nouveau comité des utilisateurs de l'IDRIS a été élu. Il est composé de :

Jean-Michel ALIMI	CP 4	Laboratoire de l'Univers et de ses Théories	Meudon
Marc BAADEN	CP 7	Institut de Biologie Physico-Chimique	Paris
Arnaud BLONDEL	CP 7	Unité de Bioinformatique Structurale	Paris
Karine COSTUAS	CP 8	Laboratoire de Chimie du Solide et Inorganique Moléculaire	Rennes
Thierry DUBOIS	CP 6	Laboratoire de Mathématiques	Aubière
Sébastien DUCRUIX	CP 3	Laboratoire Energétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion	Chatenay-Malabry
Jean-Louis DUFRESNE	CP 1	Laboratoire de Météorologie Dynamique	Paris
Marie-Alice FOIJOLS	CP 1	Institut Pierre Simon Laplace	Paris
Yann FRAIGNEAU	CP 2	Laboratoire d'Informatique pour la Mécanique et les Sciences de l'Ingénieur	Orsay
Alain GHIZZO	CP 5	Laboratoire de Physique des Milieux Ionisés et Applications	Vandœuvre-Lès-Nancy
Thierry HUCK et Sébastien THEETTEN	CP 1	Laboratoire de Physiques des Océans	Brest et Plouzané
François JAUBERTEAU	CP 2	Laboratoire de Mathématiques	Nantes
Hendrik MEYER	CP 9	Institut Charles Sadron	Strasbourg
Valerio OLEVANO	CP 9	Laboratoire des Solides Irradiés	Palaiseau
Julien REVEILLON	CP 3	CORIA – Laboratoire de Mécanique des Fluides Numérique	St-Etienne-du-Rouvray
Marie-Madeleine ROHMER	CP 8	Chimie Quantique et Modélisation Moléculaire	Strasbourg
Eric SERRE	CP 2	L3M – Laboratoire de Modélisation et Simulation Numérique en Mécanique et de Génie des Procédés	Marseille

Ce nouveau comité s'est réuni pour la première fois le 17 mars 2004. Jean-Louis DUFRESNE a été élu président du comité et Marie-Madeleine ROHMER représentante des utilisateurs auprès du conseil d'administration de l'IDRIS.

Informations

Calendrier des formations IDRIS d'ici l'automne 2004

• Introduction générale à l'IDRIS	Intro	25/05/2004	05/10/2004
• Calcul vectoriel : compilation, optimisations, bibliothèques, utilitaires d'analyse et de débogage	Vect	26-28/05/2004	06-08/10/2004
• Fortran : notions de base	F95-1	11-13/05/2004	28-30/09/2004
• Fortran : apports des normes 90/95	F95-2	22-24/06/2004	16-18/11/2004
• Langage C	C	07-11/06/2004	11-15/10/2004
• Unix : utilisation	Unix_u	24-25/11/2004	
• Calcul parallèle : MPI-1	MPI-1	03-05/05/2004	20-22/09/2004
• Calcul parallèle : MPI-2	MPI-2	15-16/06/2004	09-10/11/2004
• Calcul parallèle : OpenMP	OpenMP	06-07/05/2004	23-24/09/2004
• Calcul parallèle : bibliothèques scientifiques	Para_b	08/11/2004	

Ces dates vous sont communiquées à titre d'information et sont susceptibles d'être mises-à-jour. Pour une information récente et plus complète, veuillez consulter la rubrique « Cours » de notre serveur web :

<http://www.idris.fr>

Vous y trouverez le catalogue complet des formations et pourrez vous pré-inscrire en utilisant la sous-rubrique « Prochains cours ».

Nous vous rappelons que les formations IDRIS sont gratuites pour les personnes appartenant au CNRS ou à l'éducation nationale. Elles sont aussi accessibles au personnel d'entreprises publiques ou privées via CNRSFormation Entreprises ; les conditions d'inscription sont alors consultables sur le site web suivant :

<http://cnrsformation.cnrs-gif.fr>

Demande d'abonnement

Si vous êtes utilisateur de l'IDRIS, vous recevez La Lettre systématiquement.
Sinon, envoyez-nous vos coordonnées postales par messagerie à : La-Lettre@idris.fr

Directeur de la publication : *Victor Alessandrini*

Rédacteur en chef : *Thierry Goldmann*

Rédactrice-adjointe : *Geneviève Morvan*

Comité de rédaction : *Sylvie Brel, Hervé Delouis, Serge Fayolle, Denis Girou*

Conception graphique, réalisation, impression : *Atome Graphic Tél. 01 69 41 00 73 - www.atomegraphic.com*

IDRIS - Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique

BP 167, Bâtiment 506, 91403 ORSAY Cedex - Fax : +33 (0)1 69 85 37 75 - www.idris.fr

Secrétariat : + 33 (0)1 69 85 85 05 - secretariat@idris.fr

Support utilisateur : +33 (0)1 69 35 85 55 - assist@idris.fr