

Édito page 3

Calcul Global Pair à Pair : extension des systèmes Pair à Pair au calcul pages 4 à 15

> Calculs des spectres électroniques : quelle réponse ? pages 16 à 26

Serveurs de support au calcul scalaire page 27

Simulation numérique et astrophysique pages 28 et 29

Informations page 30



Édito

ous sommes heureux de présenter à nos lecteurs deux articles de qualité dans ce numéro. Dans la rubrique « Science » qui donne souvent la parole aux utilisateurs avertis de notre environnement, Lucia Reining et ses collaborateurs de l'École Polytechnique nous dévoilent les motivations de leurs recherches dans un domaine de pointe de la physique des matériaux. Ils exposent les stratégies adoptées et les techniques utilisées dans leurs études de la structure électronique des solides. Les simulations sous-jacentes utiliseront cette année plus de 15.000 heures de calcul sur les plates-formes NEC SX-5, elles s'exécutent sur cette plate-forme avec une performance soutenue de 5 Gigaflops par processeur. Pour la première fois cette année, la physique des matériaux dépassera la climatologie dans l'utilisation de notre environnement de calcul de haute performance.

Dans la rubrique « Technologie », Franck Capello, du Laboratoire de Recherche en Informatique d'Orsay, a bien voulu faire le point sur la portée actuelle et les perspectives des technologies dites de « Pair à Pair ». Cela désigne le traitement massif de l'information effectué, non pas par des supercalculateurs comme ceux de l'IDRIS, mais par des centaines - voire des milliers - de PC clients répartis, autonomes et intelligents qui coopèrent à la solution d'un problème. Cette technologie n'est pas une option pour l'IDRIS et, contrairement à l'avis de certains, elle ne nous obligera certainement pas à fermer nos portes. Toutefois, elle est pleine d'idées ingénieuses et elle a sans doute la capacité de susciter des applications innovantes dans certains secteurs du calcul et du traitement de l'information. L'article de Franck Capello constitue à mon avis l'un des meilleurs exposés sur ce sujet en langue française.

Pour ce qui est de l'IDRIS, nous continuons à gérer l'évolution de notre parc de machines. L'installation d'un système IBM SP3 en mars dernier s'est très bien passée. Cette plate-forme a été bien acceptée par nos utilisateurs et la migration s'est faite sans trop de problèmes. L'aboutissement de ce projet par l'installation de la plate-forme définitive Power4 connaît aujourd'hui quelques difficultés que nous espérons passagères. Quoi qu'il en soit, cela ne bloque pas notre évolution : nous préparons d'ores et déjà l'évolution ultérieure de notre environnement scalaire.

Enfin, un grand bravo au CEA-DAM pour l'installation – réussie et dans les délais – de ce qui est aujourd'hui le plus gros supercalculateur européen : un cluster Compaq à 5 Téraflops. À la visite du site, nous avons éprouvé la fierté de constater qu'il n'est plus nécessaire de se déplacer aux USA ou au Japon pour voir un environnement de cette envergure. Les supercalculateurs puissants et performants sont plus que jamais nécessaires et incontournables pour les sciences computationelles. L'évolution du CEA-DAM consolide la direction qui a toujours été la nôtre et que nous ne cesserons de suivre.