

Édito

Édito page 3

Évolution et perspectives
de la chimie quantique
sur ordinateur
pages 4 à 9

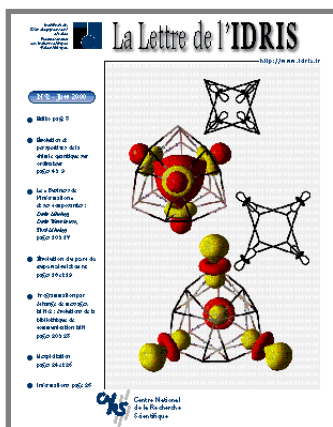
Le «Business de l'Information»
et ses composantes :
Data Mining, Data
Warehouse, Text Mining
pages 10 à 17

Évolution du parc de
supercalculateurs
pages 18 et 19

Programmation par échange
de messages.
MPI-2 : évolutions de la
bibliothèque de
communication MPI
pages 20 à 23

L'exploitation
pages 24 et 25

Informations page 26



L'une de nos missions prioritaires, conformément à notre vocation de centre d'excellence en calcul intensif, est d'intervenir efficacement dans les transferts de technologies innovantes vers les infrastructures nationales de calcul. Dans ce contexte, un effort tout particulier est fait depuis début 1999 sur le calcul scientifique réparti, ainsi qu'il a été rapporté dans notre dernier numéro.

Suite à une évaluation très favorable au sein de la Commission européenne, nous sommes actuellement engagés dans la mise en place d'un projet européen intitulé *Application Testbed for European GRID Computing* (EUROGRID). Les principaux partenaires d'EUROGRID sont cinq centres nationaux de ressources informatiques : FZ Jülich (Allemagne), CSAR (Manchester, UK), IDRIS (France), PARALLAB (Norvège) et ICM (Pologne), deux organisations possédant une activité d'avant-garde en calcul intensif : Centre de Recherches d'AéroMatra (France) et DWD (météo allemande) et enfin la société allemande PALLAS (logiciels scientifiques). D'autres organisations interviendront à titre de contractants associés.

Au démarrage du projet, une infrastructure transnationale de test et de développement d'applications réparties sera mise en place par l'interconnexion de plates-formes dédiées – dans un premier temps – sur chacun des sites des partenaires principaux. Cette grille européenne sera immédiatement opérationnelle pour certaines études grâce à l'installation de logiciels émanant du projet allemand UNICORE, déjà en opération dans les centres nationaux allemands, permettant l'enchaînement transparent d'applications sur des plates-formes et des sites différents. Par la suite, la grille transnationale de calcul EUROGRID évoluera par la mise en place d'un certain nombre de fonctionnalités supplémentaires concernant le transfert performant de grandes masses de données, la co-allocation et la mise en place d'agents de courtage de ressources, le développement d'interfaces spécifiques pour certains types d'applications.

L'objectif ultime d'EUROGRID est le remplacement progressif, au fur et à mesure de l'évolution en maturité de la grille transnationale, des plates-formes dédiées par de vrais supercalculateurs de production. Car EUROGRID traduit avant tout la volonté politique d'un certain nombre de centres nationaux de ressources informatiques, au sommet de la technologie et de la performance, d'exercer un *leadership* efficace dans le domaine du calcul réparti, afin d'aboutir à terme à une réelle intégration européenne du calcul intensif de très haute performance.

Victor ALESSANDRINI