

## Sommaire

- Le pôle de calcul scientifique intensif de l'Université Bordeaux 1 (2<sup>ème</sup> partie)
- Le programme GRID'5000
- Actualités BI-ORAP
- Agenda

## 16<sup>ème</sup> Forum ORAP

Le second Forum prévu pour cette année 2003, qui devait être organisé en collaboration avec l'association suisse *SPEEDUP*, a dû être annulé du fait de l'indisponibilité des principaux intervenants qui étaient prévus. Nous le regrettons vivement.

Le conseil scientifique et le bureau d'ORAP se consacrent maintenant à la préparation d'un Forum "Spécial 10<sup>ème</sup> anniversaire" qui aura lieu à Paris en juin 2004.

---

## Le pôle de calcul scientifique intensif de l'Université Bordeaux 1 Sciences et Technologies

Cet article a été rédigé par Samir Matar<sup>1</sup>. La première partie de cet article a été publiée dans le numéro 36 (juillet 2003) de BI-ORAP.

---

1. Responsable scientifique du Pôle M3PEC (S.MATAR@DRIMM.U-BORDEAUX1.FR <http://www.m3pec.u-bordeaux1.fr/matar>), composante de la Direction des Ressources Informatiques et Multimédia Mutualisées DRIMM de l'Université Bordeaux 1 Sciences et Technologies.

## 2<sup>ème</sup> Partie : Quelques applications choisies

### A - En chimie

#### 1. De la Chimie quantique au Vivant

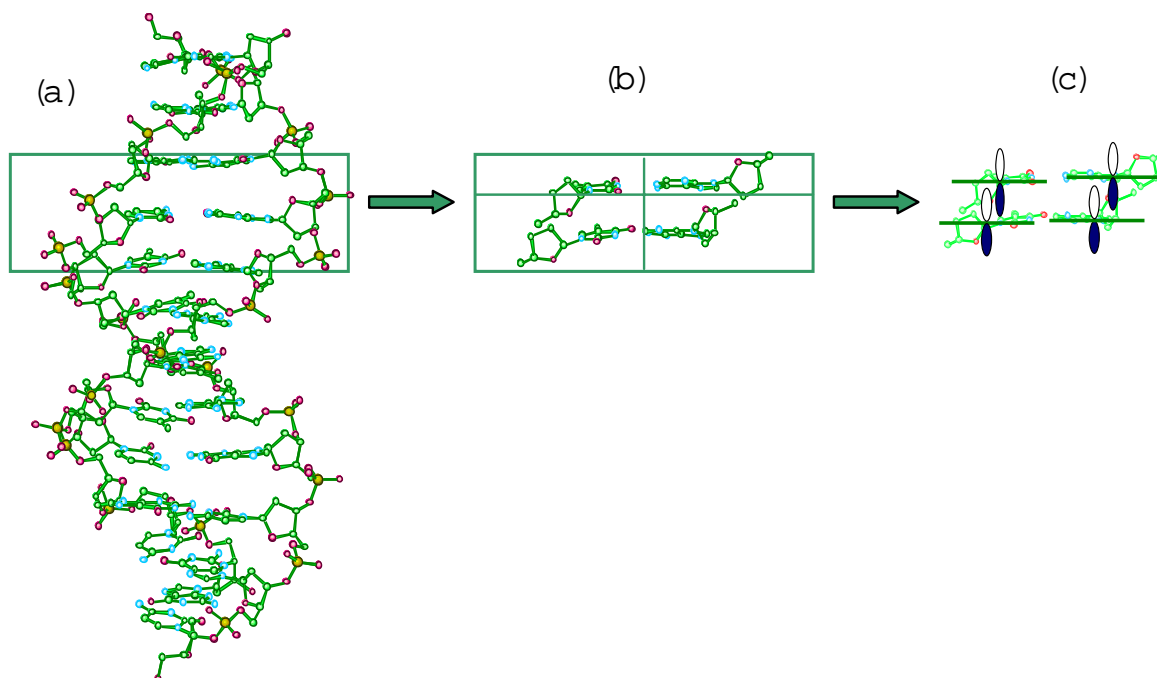
Des expériences ont été menées récemment sur des brins d'ADN pour évaluer les constantes de vitesse et les caractéristiques énergétiques du transfert d'électron dans ces systèmes. Des résultats contradictoires ont été obtenus, comme le soulignait très récemment B. Giese (Current Opinion in Chemical Biology, 2002) : *It is not surprising that DNA has been described as an insulator, semi-conductor, conductor, and even as a superconductor*. Ce projet a pour but de tenter de rationaliser ces observations en développant une approche mixte quantique/classique pour évaluer l'influence des degrés de liberté électroniques et nucléaires.

**Illustration 1** (page suivante) : **Projet élec@ADN (CRCM, L. Ducasse)**<sup>2</sup>.

Méthodologie pour les édifices moléculaires complexes s'appuyant sur un formalisme d'objets locaux en adéquation avec les méthodes de type Liaisons de Valence (VB). Modélisation d'un agrégat de 4 nucléo bases (a) par la méthode Valence Band/Hartree Fock permettant de calculer les interactions entre les 4 fragments (b) et passage à une représentation d'orbitales frontières dans le cadre d'un hamiltonien effectif corrélé (c). Ici il s'agit de la modélisation d'un brin d'ADN (Acide Nucléique, base du code génétique de l'organisme vivant).

---

2. G. Brunaud, F. Castet, A. Fritsch, M. Kreissler, L. Ducasse. *J. Phys. Chem. B*, 105 12665 (2001) et G. Brunaud, F. Castet, A. Fritsch, M. Kreissler, L. Ducasse. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 4 6072 (2002)

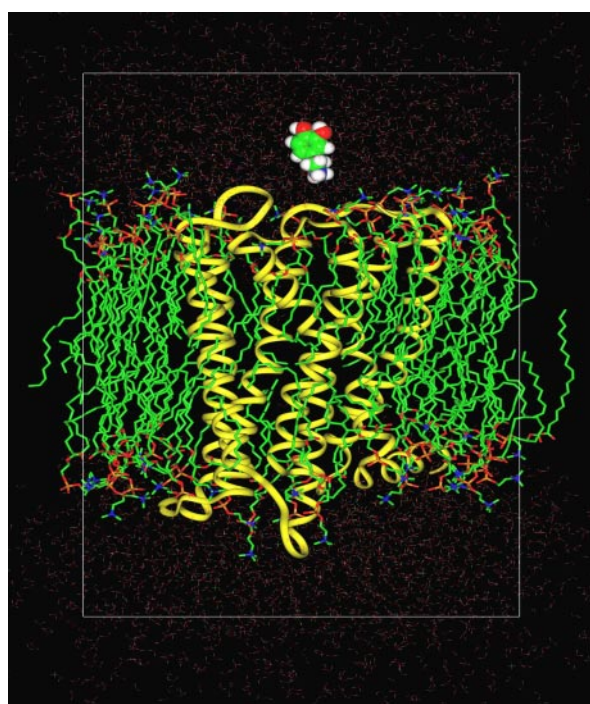


**Illustration 2** (ci-contre) : **Protéines membranaires (IECB, M. Laguerre)**<sup>1</sup>.

L'étude des protéines membranaires par imulation numérique pré-suppose d'avoir à disposition non seulement de bons modèles de protéines, mais aussi de bons modèles de membranes biologiques (ce qui est moins courant). Grâce au travail effectué au Laboratoire depuis 1998 et à l'apport des moyens de calculs du Pôle M3PEC, cette dernière condition ne pose pas de difficultés majeures. A l'heure actuelle nous avons à notre disposition un éventail important de membranes biologiques neutres ou chargées qui peuvent s'adapter à n'importe quel type de protéines membranaires (au moins de type actuellement connu).

Les premiers essais de dynamique de protéines membranaires dans un environnement complet ont montré l'intérêt de ce type d'approche. Avec la famille des GPCR (récepteurs couplés aux protéines G) nous avons pu suivre les premiers instants de l'entrée du ligand dans le récepteur et comprendre en particulier dans le cas de la dopamine, comment le ligand peut atteindre sa cible dans un temps raisonnable et sans perte d'information. Les récepteurs de la dopamine sont une des cibles privilégiées de l'Industrie Pharmaceutique, car ils sont directement impliqués dans la dépression, la maladie de Parkinson ou à la dépendance aux drogues.

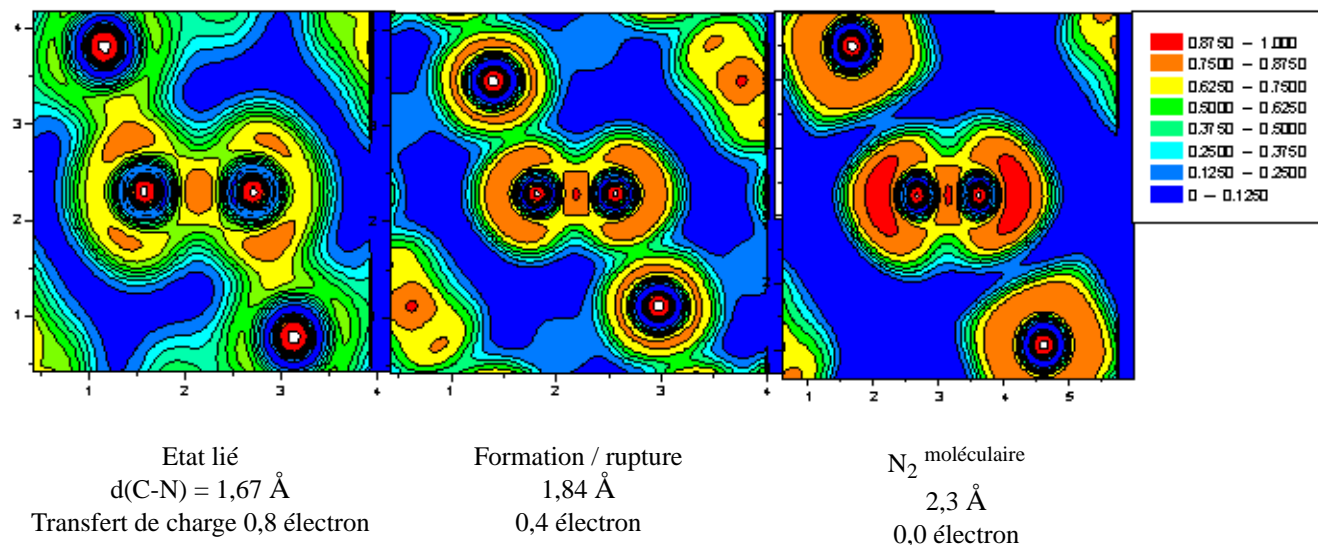
Ce travail a nécessité l'utilisation de près de 5000 heures de calculs provenant à part à peu près égale du Pôle M3PEC ou du CINES.



*Récepteur humain de la dopamine (D2) en ruban jaune dans une bicouche de POPC (vert) avec la dopamine en approche de sa cible (en CPK)*

<sup>1</sup> I.F. Beaurain, C. Di Primo, J.J. Toulmé, M. Laguerre. *Nuclear Acid Research*, sous presse (2003)

## 2. Vers une cartographie de la liaison chimique



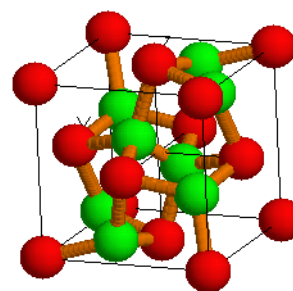
*Cartographie de la localisation électronique (fonction ELF : zones bleues = peu de localisation ; zones rouges = fortes localisations :  $0 < ELF < 1$  ; cf. échelle des couleurs à droite)*

### Illustration 3 : Physico-Chimie des Matériaux (ICMCB, S. Matar)<sup>1</sup> : cartographie ELF de la localisation électronique C-(N-N)-C dans l'étude des conditions de stabilité des carbonitrides CN<sub>x</sub>

*(Calculs sur Regatta utilisant des pseudo-potentiels 'US-PP/VASP' au sein de la théorie de la fonctionnelle de la densité : DFT).*

Ces phases sont étudiées comme précurseurs pour de nouveaux matériaux ultra durs.

Les recherches ont été menées essentiellement dans le cadre d'un Réseau Européen *Training and Mobility of Researchers* (1997-2002). Le modèle de structure choisi est dérivé de la pyrite FeS<sub>2</sub> pour CN<sub>2</sub> (C et N aux sites de Fe et S respectivement). Ce choix permet d'identifier des paires N ... N dans la structure visualisées comme des "haltères" de deux sphères vertes au centre de la maille (ci-contre). L'étude des mécanismes de formation <-> rupture des liaisons C-N et N-N a été menée en fonction des variations volumiques autour d'un équilibre énergétique afin d'expliquer l'instabilité de l'azote dans les couches préparées de CN<sub>x</sub> (x~0,36). L'illustration en est faite avec une cartographie de la localisation électronique (fonction ELF) : l'observation des figures de gauche à droite décrivant la localisation électronique autour des liaisons C(haut)-N-N(milieu)-C(bas) permet de constater la formation de N<sub>2</sub> lorsque l'allongement de la liaison C-N devient trop important (2,3 Å).

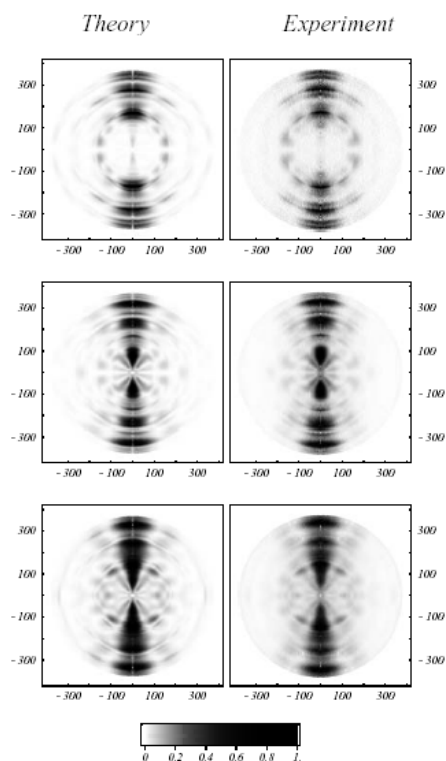


*Structure cristalline de la pyrite FeS<sub>2</sub> (Groupe d'espace cubique Pa3, N° 205)*

<sup>1</sup>I.R. Wehrich, S. Matar, E. Betranhandy, V. Eyert. *Solid State Sciences* 5, 701-703 (2003) et R. Wehrich, V. Eyert, S. Matar. *Chem Phys. Lett.* 373, 636-641 (2003)

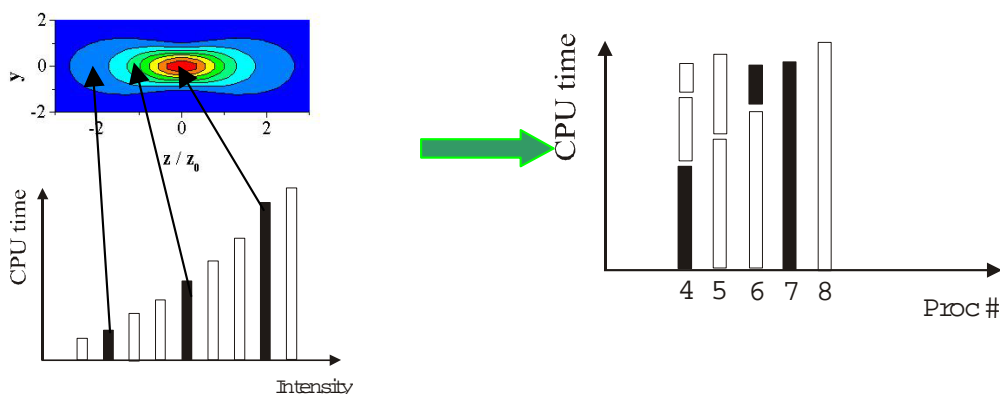
## B. En physique.

### Interaction onde matière<sup>1</sup>



#### Illustration 4 : Interaction Laser - Matière (CE-LIA, E. Cormier).

Processus d'ionisation multiphotonique dans les gaz rares. On étudie les propriétés des électrons émis lors de l'ionisation d'atomes sous forme gazeuse par une impulsion infrarouge laser femtoseconde (d'une durée de l'ordre de  $50 \times 10^{-15}$  s). Les mécanismes à la base de l'éjection et de l'accélération des électrons sont l'ionisation multiphotonique, l'ionisation par effet tunnel et la rediffusion. L'intérêt de la simulation est de reproduire le plus fidèlement le spectre d'électron émis tel qu'il est mesuré expérimentalement (voir ci-contre l'énergie et la distribution angulaire des électrons émis lors de l'ionisation d'un gaz d'Argon par une impulsion laser :  $\tau=40$  fs,  $\lambda=800$  nm et  $I=3 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup> (haut),  $5 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup> (milieu) et  $7 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup> (bas)). Une fois validé, le calcul permet d'extraire des spectres toutes les informations sur chaque mécanisme. Pour calculer un spectre d'électron, il faut résoudre l'équation de Schrödinger 3D dépendante du temps (utilisation de bases de fonctions B-splines) pour tous les atomes situés dans la zone proche du plan focal et subissant des intensités lasers différentes. Le schéma de parallélisation choisi est du type "task farming" afin d'équilibrer la charge des processeurs avec des tâches de différentes durées comme illustré par les 2 figures ci-dessous.



<sup>1</sup>G. Duchateau, E. Cormier, R. Gayet. *Phys. Rev. A* 66, 023412 (2002) et S. Barmaki, S. Laulan, M. Ghalim, H. Bachau. *Journal of Physics B* 36, 817 (2003).

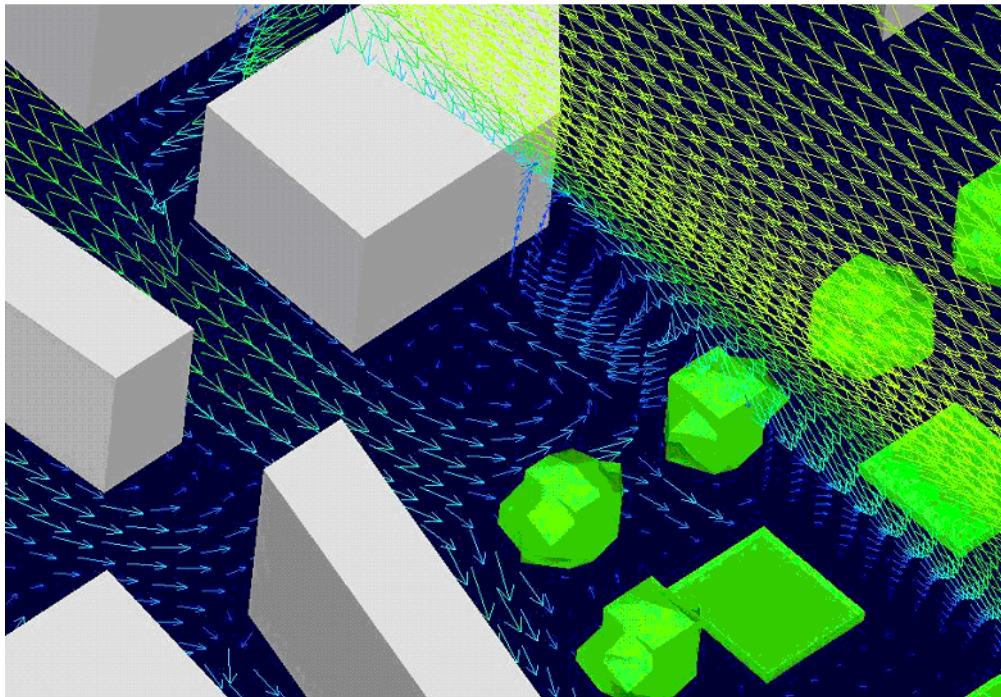
## C. Dans l'environnement

### Illustration 5 : Modélisation de la pollution atmosphérique en milieu urbain (MASTER-ENSCP. B. Duguay, S. Glockner).

L'objectif de la simulation numérique des écoulements atmosphériques dans les zones urbanisées est d'appréhender l'évolution des différents composés et particules générés par la ville et notamment par la circulation automobile. Les courants atmosphériques sont bien entendu le premier vecteur du transport de la pollution mais bien d'autres phénomènes physiques interviennent dans cette évolution : le rayonnement solaire qui induit des mouvements thermo convectifs spécifiques, les transformations chimiques des composés, notamment l'ozone, la ségrégation des particules dues au diesel, etc. La prise en compte d'un modèle physique et numérique incluant ces différents phénomènes nécessite de mobiliser plusieurs communautés : mécaniciens, mathématiciens, chimistes, biologistes, coordonnées autour d'un même objectif. La réalisation de ce modèle sera effectuée à partir de la bibliothèque Aquilon développée au MASTER. Une technique de raffinement adaptatif de type multi grille sera mise en oeuvre pour appréhender les différentes échelles de la ville : agglomération, centre ville, ensemble d'immeubles, voies, etc. La modélisation des écoulements turbulents au sein de la canopée urbaine sera abordée à l'aide de modèles de turbulence récents.

*S. Glockner, J-P.Caltagirone, P. Morel. International Journal of Thermal Sciences 38 (8), 1999*

**L'image représente un champ de vitesse, place Gambetta à Bordeaux**



## Perspectives d'évolutions

La machine actuelle acquise en avril 2002 est utilisée à son maximum de puissance par plus de 40 chercheurs appartenant aux laboratoires partenaires

du Pôle. Un accès au calculateur du Pôle Généraliste (quadri processeur) est également offert aux utilisateurs. Tout en notant que l'IBM p690 à 32 processeurs du Pôle n'est pas évolutif en nombre de

processeurs, nous souhaitons enrichir notre choix en moyens de calcul par une solution évolutive de machines à huit processeurs mises en réseau. Ceci afin de permettre que de nouveaux besoins en calcul à mémoire distribuée, exprimés tant par l'arrivée de nouvelles équipes partenaires que par les besoins en formation des étudiants du campus de l'université puissent être satisfaits. Nous souhaitons conforter notre base SMP à mémoire partagée par une solution "grappe" de SMP octo-processeurs, reliés par un réseau à haut débit et faible latence. En outre une telle solution sera évolutive par l'adjonction de nouveaux octo-processeurs dans l'avenir. Cette diversification amenée par la solution proposée permettra également une avancée au niveau des applicatifs comme par exemple le couplage de codes parallèles (avec CORBA) et le "computational steering" s'agissant de piloter l'environnement immersif (imagerie virtuelle avec modification interactive des paramètres du code en cours de calcul).

La montée en puissance souhaitée et pour laquelle une demande est formulée au niveau de nos autorités de tutelle est justifiées à plusieurs niveaux de partenariats.

L'implication d'équipes extérieures est fortement envisagée, i.e. avec la fourniture de moyens de calcul sur les machines du pôle M3PEC. Un exemple en est donné dans le domaine de la physique par le Laboratoire de Chimie Théorique et Physico-Chimie Moléculaire (LCTPCM UMR 5624) de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour (R. Brown - Dir. D. Gonbeau) qui a une collaboration sur des problèmes de dynamique moléculaire avec le CPMOH (A. Marboeuf). L'accès aux moyens de calcul de l'Université Bordeaux 1 va être grandement facilité par l'arrivée début 2004 d'une liaison à haut débit reliant nos deux universités. L'Université Bordeaux 1 s'implique fortement dans les projets de Génomique Fonctionnelle et de Génopôle portés principalement par l'université Bordeaux 2. Ce projet va, là encore, demander des moyens de calcul et de stockage d'information accrus.

D'autres partenariats sont également envisagés:

- La création de l'Institut Lasers-Plasmas (ILP) en partenariat avec l'Université Bordeaux 1 (principalement le CELIA), le CNRS et le CEA vient d'amener de nouvelles équipes de recherche, dont le projet, issu du programme civil du Laser Méga Joule, s'inscrit dans le domaine de la recherche sur la maîtrise de l'énergie électrique et constitue une thématique privilégiée à l'Université Bordeaux 1. Cette recherche qui fait appel

à la modélisation est très demandeuse en moyens de calcul intensif.

- La mise en place récente d'un Centre INRIA sur le campus en étroite relation avec le MAB et le LaBRI va générer une demande croissante en moyens de simulation numérique dans les domaines de la réalité virtuelle, de la bio-informatique, de l'imagerie et des réseaux neuronaux.
- Le renforcement de l'IECB a conforté le partenariat entre l'Université Bordeaux 1, l'université Bordeaux 2, l'INSERM et le CNRS. Cette augmentation du potentiel de l'IECB va induire une intensification des travaux de calcul effectués, en particulier sur la modélisation moléculaire des molécules d'intérêt biologique. De plus la création de la "start-up" FLUOFARMA qui va utiliser les outils d'analyse et de modélisation de l'IECB constitue un élément d'ouverture vers des partenaires extérieurs.
- Des contacts avec la SNECMA à Bordeaux ont été initiés.

## Les équipes de recherche concernées

Les chercheurs de la communauté M3PEC, au nombre variant entre 40 et 50 (permanents et non-permanents), se répartissent dans treize laboratoires de l'université et autour des disciplines suivantes dont la liste était fournie dans la première partie de cet article.

---

## Le programme GRID'5000

Le Ministère de la Recherche a créé en 2003 un programme national intitulé GRID'5000, dans le cadre de l'Action Concertée Incitative "Globalisation des Ressources Informatiques et des Données" (GRID).

Ce programme vise à promouvoir la création d'une plate-forme expérimentale de recherche en informatique constituée d'une grille de calcul de grande ampleur qui sera développée en associant des organismes de recherche, des collectivités locales ou régionales et des partenaires industriels. Elle sera ouverte en priorité aux équipes académiques ou industrielles travaillant dans le cadre de projets précédemment labellisés par les ACI *GRID*, *Sécurité informatique* et *Masses de données* ou par les différents réseaux de recherche et d'innovation technologique (RNRT, RNTL, ...).

La grille expérimentale devrait être constituée, à terme, d'une plate-forme matérielle et logicielle interconnectant à très haut débit dix à quinze grappes de PC de grande taille, typiquement 500 unités de calcul. Le premier appel à propositions, lancé en 2003 et qui était clos fin octobre, visait à sélectionner un nombre limité de sites souhaitant être noeud principal de cette grille expérimentale.

Le comité de pilotage a décidé que, dans cette première phase, la plate-forme GRID'5000 serait constituée de 7 centres : Bordeaux, Grenoble, Lyon, Orsay, Rennes, Sophia-Antipolis et Toulouse.

<http://www.recherche.gouv.fr/appel/2003/grid5000.htm>

---

## Actualités Bi-Orap

### ➔ *The Future of Supercomputing*

L'Académie Nationale des Sciences américaine a publié un rapport intermédiaire sur "*The Future of Supercomputing*". Ce rapport présente la situation du calcul de haute performance aux Etats-Unis, les futurs besoins et les facteurs qui permettront de répondre à ces besoins. Le rapport final devrait être prêt en automne 2004. Le rapport intermédiaire insiste sur la nécessité de poursuivre de façon continue les travaux de recherche et les investissements fédéraux dans les technologies basées sur les composants "sur étagère", sans pour autant abandonner les technologies "propriétaires". Il s'agit de l'un des trois rapports qui doivent orienter les investissements fédéraux dans le calcul de très haute performance : les autres rapports doivent être préparés par le HECRTF (High-End Computing Revitalization Task Force) et par un groupe qui doit faire un bilan de l'initiative ASCI.

<http://www7.nationalacademies.org/cstb>

<http://www.hpcc.gov/hecrtf-outreach>

### ➔ Nouveau rapport IDC sur les superordinateurs

IDC a publié, en septembre, une nouvelle version de sa grille d'analyse des performances des superordinateurs, combinant la performance des processeurs, la performance de la mémoire etc, et une liste de 1599 machines classée selon les résultats découlant de cette grille. Le *Earth Simulator* japonais est bien entendu en tête de la liste. Un découpage en quatre catégories (superordinateur ; entreprise ; division ; département) fournit une analyse plus sectorielle.

<http://www.idc.com>

<http://64.122.81.35/>

### ➔ Intel rachète la division "Performance" de Pallas

Pallas, une des rares sociétés européennes ayant des activités logicielles importantes dans le domaine du calcul de haute performance, a annoncé, le 12 septembre, le rachat de ses activités HPC par Intel. La transaction comprend la reprise de 23 spécialistes et l'acquisition des droits de propriété industrielle de Pallas dans ce domaine. Ceci permettra au constructeur américain de disposer des technologies et de l'expertise de Pallas pour les clusters utilisant les processeurs Xeon et Itanium.

<http://www.pallas.com>

### ➔ Un cluster de 11 Tflops/s à Los Alamos

Dans le cadre du programme ASCI, le LLNL (Los Alamos National Lab.) a choisi Linux Network pour concevoir, réaliser et fournir un cluster d'une puissance crête (théorique) de 11 Tflops/s. Ce cluster, surnommé "*Lightning*", comprendra 2816 processeurs Opteron d'AMD. Le montant total de ce contrat serait proche de 10 millions de dollars.

### ➔ Un "metacluster" à l'Université de l'Utah

Le centre de calcul de l'Université de l'Utah va recevoir un "metacluster" composé de 1000 processeurs (500 noeuds) Opteron AMD. Il se situera aux environs de la 30<sup>ème</sup> position dans le Top500.

<http://www.chpc.utah.edu>

### ➔ Un Cray X1 à l'Université de Varsovie

L'Université de Varsovie a commandé un Cray X1, avec un passage ultérieur vers le X1e.

<http://www.icm.edu.pl/eng>

### ➔ Pittsburgh se connecte au TeraGrid

Le superordinateur situé à l'Université de Pittsburgh (3000 processeurs Alpha, 6 Tflops) a été connecté aux superordinateurs de l'Illinois et de Californie dans le cadre du projet TeraGrid. Financé par la NSF, ce projet fournit l'infrastructure de calcul distribué la plus puissante disponible actuellement pour la recherche académique non classifiée.

<http://www.teragrid.org>

### ➔ Amsterdam : 2,2 Tflops à SARA

Le cluster SGI Altix 3700 de 416 processeurs Itanium-2 à 1,3 GHz du centre de calcul d'Amsterdam est maintenant complet et ouvert aux utilisateurs. Sa puissance crête est de 2,2 Tflops.

<http://www.sara.nl>

---

## Agenda

- 14 au 17 octobre : **Renpar 2003** : Rencontres francophones du parallélisme (La Colle sur Loup, Alpes Maritimes)
- 16 au 18 octobre : **ISPDC 2003** : Second International Symposium on Parallel and Distributed Computing (Ljubljana, Slovénie)
- 19 au 24 octobre : **VIS 2003** : IEEE Visualization 2003 (Seattle, Wa, Etats-Unis)
- 20 au 21 octobre : **PVG 2003** : Sixth IEEE Symposium on Parallel and Large-Data Visualization and Graphics (Seattle, Wa, Etats-Unis)
- 30 octobre au 1<sup>er</sup> novembre : **CASES 2003** : Int. Conference on Compilers, Architecture and Synthesis for Embedded Systems (San Jose, Ca, Etats-Unis)
- 3 au 7 novembre : **DOA 2003** : Fifth International Symposium on Distributed Objects and Applications (Sicile)
- 3 Au 7 novembre : **OTM 2003** : The first Workshop on Java Technologies for Real-Time and Embedded Systems (Catania, Sicile)
- 10 au 12 novembre : **SBAC-PAS 2003** : The 15<sup>th</sup> Symposium on Computer Architecture and High-Performance Computing (Sao Paulo, Brésil)
- 15 au 21 novembre : **SC'2003** : Supercomputing Conference and Exhibition (Phoenix, Az, Etats-Unis)
- 17 novembre : **Grid'2003** : 4th International Workshop on Grid Computing (Phoenix, Az, Etats-Unis)
- 17 novembre : **DGRID03** : First Advanced Topics Workshop on Desktop Grids : Critical Systems and Applications Research (Phoenix, Etats-Unis)
- 19 au 21 novembre : **DAIS'2003** : Distributed Applications and Interoperable Systems (Paris)
- 1 au 4 décembre : **Cluster'2003** : IEEE International Conference on Cluster Computing (Hong Kong).
- 2 décembre : **WASP'03** : 2<sup>nd</sup> Workshop on Application Specific Processors (San Diego, Ca, Etats-Unis)
- 3 au 5 décembre : **RTSS'03** : The 24th IEEE Real-Time Systems Symposium (Cancun, Mexique)
- 8 décembre : **LCI** : Linux Clusters Institute Workshop (Albuquerque, Etats-Unis)

- 17 au 20 décembre : **HiPC'2003** : 10<sup>th</sup> International Conference on High Performance Computing (Hyderabad, Inde)
- 27 au 30 décembre : **IWDC'2003** : Fifth International Workshop on Distributed Computing (Calcutta, Inde)
- 19 janvier : **Globus World2** (San Francisco, Ca, Etats-Unis)
- 28 au 30 janvier : **AxGrids 2004** : The 2<sup>nd</sup> European across Grids Conference (Nicosie, Chypre)
- 29 au 30 janvier : **HealthGrid** : Second European HealthGrid Conference (Clermont-Ferrand)
- 11 au 13 février : 17 au 19 février : **PDP 2004** : 12<sup>th</sup> Euromicro Conference on Parallel, Distributed and Network-based Processing (A Coruna, Espagne)

Des informations complémentaires, en particulier les adresses http de ces manifestations, sont disponibles sur le serveur Web d'ORAP.

---

## Appel à informations

Le contenu de BI-ORAP dépend, pour partie, de ses lecteurs ! N'hésitez pas à nous communiquer toute information concernant vos activités dans le domaine du calcul de haute performance : installations de matériel, expérimentations de nouvelles technologies, applications, organisation de manifestations, formations, etc.

Merci d'adresser ces informations au secrétariat d'ORAP ou directement à Delhaye@irisa.fr



HOISE - Europe On-line Information Service

PRIMEUR ! - Advancing European Technology Frontiers

<http://www.hoise.com/primeur/>

**Organisation Associative du Parallélisme**  
**Structure de collaboration créée par**  
**le CEA, le CNRS et l'INRIA.**

Secrétariat : [chantal.letonqueze@irisa.fr](mailto:chantal.letonqueze@irisa.fr)  
IRISA, campus de Beaulieu, 35042 Rennes cedex  
Tél : 02.99.84.75.33, Fax : 02.99.84.74.99  
<http://www.irisa.fr/orap>