

# **ACTION CONCERTEE INCITATIVE 2002**

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

**DOSSIER COMPLET**

## **INSCRIPTION**

DATE LIMITE D'ENVOI : **lundi 21 janvier 2002**

2 EXEMPLAIRES PAPIER :

Ministère de la Recherche  
Département Sciences Mathématiques et STIC  
Maryse LA GREVE  
ACI-GRID  
1, Rue Descartes  
75231 Paris cedex 05

CONTENU : Description détaillée : 4 à 8 pages,  
L'ensemble n'excédant pas 15 pages.

*Pour toute information complémentaire contacter :*

[ACI-GRID@sophia.inria.fr](mailto:ACI-GRID@sophia.inria.fr)

Tel : 04.92.38.77.95

Fax : 04.92.38.79.78

# ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

DOSSIER COMPLET

Catégorie :

**PROJET PLURIDISCIPLINAIRE**

Référence et titre du Projet : ***CiGri - CIMENT GRID***

Coordinateur du projet : Laurent Desbat  
TIMC-IMAG

Liste des établissements et des laboratoires partenaires du projet :

Laboratoires participants :

Techniques de l'Imagerie de la Modélisation et de la Cognition (TIMC-IMAG )  
Informatique et Distribution (ID-IMAG)

Laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés (LPMMC)

Laboratoire d'AstrOphysique de Grenoble (LAOG - Observatoire de Grenoble)

Laboratoire de Modélisation et Calcul (LMC-IMAG - plate forme MIRAGE)

Centre d'Expérimentation du Calcul Intensif en Chimie (CECIC)

Etablissements concernés :

Université Joseph Fourier de Grenoble (UJF)

Institut National Polytechnique de Grenoble (INPG)

INRIA Rhône-Alpes (INRIA)

Visa du directeur du laboratoire      Professeur Jacques Demongeot  
auquel appartient le coordinateur  
du projet :

(ce visa n'est demandé que sur les deux  
exemplaires papier à envoyer au Ministère de la  
Recherche)

## ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

### DOSSIER COMPLET

#### **A- Identification du Coordinateur et des autres partenaires du Projet :**

##### A1- Coordinateur du Projet :

M. ou Mme. Prénom Nom	M. Laurent Desbat
Fonction	Professeur (chargé de mission pour le calcul scientifique à l'UJF/coordonateur du projet CIMENT)
Laboratoire	TIMC-IMAG
Adresse	IAB, Faculté de Médecine, 38706 La Tronche
Téléphone	04 76 54 96 00
Fax	04 76 54 95 55
Mél	<a href="mailto:Laurent.Desbat@imag.fr">Laurent.Desbat@imag.fr</a>

##### A2- Autres partenaires du Projet :

M. ou Mme. Prénom Nom	M. Denis Trystram
Fonction	Professeur
Laboratoire	Informatique et Distribution (ID-IMAG)
Adresse	51 rue Jean Kuntzmann, 38330 Montbonnot St. Martin
Téléphone	0476 61 20 57
Fax	0476 61 20 99
Mél	<a href="mailto:Trystram@imag.fr">Trystram@imag.fr</a>

M. ou Mme. Prénom Nom	M Alain Pasturel
Fonction	Directeur de recherche CNRS
Laboratoire	Laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés (LPMMC)
Adresse	Maison des magistères, CNRS, BP166, 38042 Grenoble cedex
Téléphone	04 76 88 79 85
Fax	04 76 88 79 81
Mél	<a href="mailto:Alain.Pasturel@polycnrs-gre.fr">Alain.Pasturel@polycnrs-gre.fr</a>

## **ACTION CONCERTEE INCITATIVE 2002**

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

### **DOSSIER COMPLET**

M. ou Mme. Prénom Nom	M. Pierre Valiron
Fonction	Directeur de Recherche CNRS
Laboratoire	Laboratoire d'AstrOphysique de Grenoble (LAOG)
Adresse	Observatoire de Grenoble, BP 53, F-38041 GRENOBLE Cedex 9
Téléphone	04 76 51 47 87
Fax	04 76 44 88 21
Mél	<a href="mailto:Pierre.Valiron@obs.ujf-grenoble.fr">Pierre.Valiron@obs.ujf-grenoble.fr</a>

M. ou Mme. Prénom Nom	Mme Laurence Viry
Fonction	Ingénieur de Recherche, Centre de Ressource Informatique de Proximité, (CRIP-UJF)
Laboratoire	Laboratoire de Modélisation et Calcul (LMC-IMAG) Plate forme MIRAGE (CIMENT)
Adresse	Tour IRMA, BP 53, F-38041 GRENOBLE Cedex 9
Téléphone	04.76.51.40.83
Fax	04 76 63 12 63
Mél	<a href="mailto:Laurence.Viry@imag.fr">Laurence.Viry@imag.fr</a>

M. ou Mme. Prénom Nom	M. Pierre Vatton
Fonction	Ingénieur de Recherche, CNRS
Laboratoire	Laboratoire d'Etudes Dynamiques et Structurales de la Sélectivité (LEDSS)
Adresse	Centre d'Expérimentation du Calcul Intensif en Chimie (CECIC)
Téléphone	04.76.51.48.02
Fax	04 76 51 43 82
Mél	<a href="mailto:Pierre.Vatton@ujf-grenoble.fr">Pierre.Vatton@ujf-grenoble.fr</a>

# ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

## DOSSIER COMPLET

### **B- Description du Projet :**

#### **B1- Objectif, contexte et description du projet (4 à 8 pages) :**

##### **B1.1 Introduction**

Le projet CIMENT (<http://www.ujf-grenoble.fr/CIMENT>, Calcul Intensif, Modélisation, Expérimentation Numérique et Technologique) inscrit au CPER, est né en 1998 au sein des universités scientifiques grenobloises pour favoriser le développement cohérent de plates formes matérielles et logicielles pour la modélisation numérique et l'expérimentation du calcul intensif. Lors de la genèse du projet, il a paru essentiel d'associer la communauté de l'informatique distribuée aux communautés de modélisation et calcul, afin que les plates formes mises en place soient à la fois expérimentales et donc dynamiques, tout en permettant aux utilisateurs de faire des calculs sur leurs problèmes de modélisation. Le projet CIMENT est donc par essence pluridisciplinaire. Concrètement, il est composé de 6 plates formes d'équipement pour la modélisation numérique, le calcul et l'expérimentation de l'informatique distribuée. Par ordre chronologique de mise en place, il s'agit :

- Du SCIOG (Service de Calcul Intensif de l'Observatoire de Grenoble, Pierre Valiron et Françoise Roch), construit autour d'un SMP IBM 16 processeurs, 16GO, 24Gflops) et quelques quadriprocesseurs IBM. Les projets scientifiques concernent principalement la communauté des sciences de l'univers (astrophysique, planétologie, géophysique interne).
- De la plate forme MIRAGE (Mésio-Informatique Répartie pour des Applications en Géophysique et Environnement, Eric Blayo et Laurence Viry) construite autour de 7 Bi-Processeur alpha à 2,5Go répartis sur 3 sites différents et reliés par un réseau hétérogène (Memory Channel en local et Gigabit inter-site). Les projets scientifiques concernent principalement l'environnement et le climat et la modélisation numérique associée.
- Du projet de grappe de PC (du laboratoire Informatique et Distribution, IMAG-INRIA, Denis Trystram et Philippe Augerat). L'expertise du laboratoire ID a de nombreux supports matériels (comme la grappe de 225 processeurs HP entrée au rang 385 du TOP 500 des supercalculateur mi-2001). Une grappe configurée pour l'expérimentation du calcul intensif (de quelques centaines de PC, probablement en myrinet) sera mise en place mi-2002 dans le cadre du projet CIMENT. Les projets scientifiques relatifs à CIMENT concernent principalement les systèmes d'administration de grappes, les méthodes et algorithmes de placements optimaux et de répartition de charge, l'analyse de performance.
- Du CECIC (Centre d'Expérimentation du Calcul Intensif en Chimie, Serge Perez et Pierre Vatton) qui regroupe la communauté de la chimie calculatoire. La solution matérielle est un cluster de 3 quadriprocesseurs IBM et un quadriprocesseur SGI qui sert aux calculs de chimie quantique, dynamique moléculaire, etc., avec implication de bases de données.
- De la plate forme BioIMAGE (Bio-informatique, Imagerie et Modélisation médicales, Analyse Génétique spatialisée, Laurent Desbat et Guy Bourrel) qui regroupe la communauté d'imagerie, de modélisation et de Bio-Informatique du pôle santé. La première tranche se matérialisera (début février 2002) par une grappe de 24 Bi-pro Athlon XP1800+,3Go en double attachement Ethernet 100. Les projets scientifiques concernent la reconstruction en imagerie X ou nucléaire 3D ou 4D, l'IRM, la modélisation bio-mécanique, la modélisation cellulaire et biologique, la bio-informatique.
- De PhyNum (Physique Numérique, Alain Pasturel et Françoise Berthoud) qui regroupe la communauté de la physique numérique de Grenoble. La solution de calcul mise en place au cours de l'année 2002 reste à identifier : SMP IBM ou grappe de PC ? Le choix sera fondé sur les expériences développées par la communauté PhyNum, en particulier sur les autres plates formes de CIMENT. Les projets scientifiques concernent la propagation des ondes, la supraconductivité, les états quantiques, la croissance cristalline et l'auto-organisation des nano-structures, la dynamique réactionnelle de surface, les transitions de phase, etc.

Il est clair que le projet CIMENT est fortement pluri-disciplinaire, chaque pôle étant fortement spécialisé dans un domaine scientifique. Tous les acteurs ont en commun un vif intérêt pour le calcul numérique intensif et l'informatique distribuée (en tant que chercheur ou utilisateur) et ce sont ces thèmes qui fédèrent le projet. Enfin, la diversité des plates formes matérielles construites, réparties géographiquement sur des sites distants de plusieurs kilomètres et donc interconnectées par des réseaux hétérogènes, permet une expérimentation réaliste des grilles de calcul sur des applications diverses dans un cadre géographique restreint, ce qui facilite le travail. La construction d'une grille regroupant les plates formes CIMENT est le premier objectif de ce projet.

Les plates formes CIMENT sont administrées par des ingénieurs expérimentés dans la gestion de machines dédiées au calcul intensif. De nombreux chercheurs sont utilisateurs de centres de calcul nationaux (une vocation des plates formes CIMENT étant de servir de tremplin vers l'IDRIS et le CINES). Notre communauté a constaté qu'il n'existe pas de gestionnaire bien adapté à l'administration efficace de calculs répartis de type

# ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

## DOSSIER COMPLET

paramétriques, notamment à gros grains, sur une machine parallèle multi-utilisateurs et plus généralement sur une grille de calcul. Ce type de calcul pourrait pourtant utiliser efficacement des plages de calcul libérées sur des processeurs éventuellement éparpillés sur différentes architectures de la grille. Des méthodes de distribution des données et de régulation de charge doivent donc être développées pour le déploiement des calculs de type Monte Carlo ou plus généralement paramétriques sur une grille.

L'objectif principal du projet CIMENT GRID est l'expérimentation du calcul sur grille. Il interagira avec d'autres projets de l'ACI GRID afin d'utiliser au maximum les technologies logicielles d'exploitation de grille de calcul qui y sont développés. De ce point de vue, la grille CIMENT permettra une validation sur des applications réelles de ces technologies. Les projets de l'ACI GRID avec lesquels nous avons un projet de partenariat sont les projets logiciels :

- Le projet CGP2P : Calcul Global Pair à Pair : Intégration des systèmes de Calcul Global et Pair à Pair dirigé par Frank CAPPELLO (LRI)
  - Le projet RMI Objets distribués haute performance pour la grille de calcul dirigé par Christian PEREZ (IRISA)
- et le projet pluri-disciplinaire
- ASP : Approche clients-serveurs pour la simulation sur la grille Frédéric DESPREZ (LIP)

### **B1.2 Les objectifs scientifiques et les résultats attendus**

#### **B1.2.1 Construction de la grille locale CIMENT**

Chacun des partenaires des pôles CIMENT s'engage à mettre à disposition de l'ensemble de la communauté expérimentatrice de la grille (informaticiens et modélisateurs) une fraction du temps de l'utilisation de sa plate forme de calcul (pour fixer les idées, dans la limite de l'ordre de 10% du temps de calcul produit avec pour objectif l'utilisation principale pour la grille du temps improductif de la plate-forme).

#### **Mise en œuvre sur de la grille**

Développement, installation et validation des logiciels permettant de faire fonctionner la grille CIMENT :

Un des principaux objectifs actuels est de faire fonctionner les grilles comme une machine unique, si possible de façon transparente pour les utilisateurs. De nombreux problèmes sont induits pour pouvoir réaliser ce but, en particulier autour de la sécurité des sites reliés, de l'interopérabilité des logiciels tournant localement, de la gestion de l'hétérogénéité des ressources, ou encore du passage à l'échelle de solutions validées sur des petites configurations locales.

Dans ce projet, nous entendons développer des méthodes pour la gestion efficace des ressources de calcul, pour le placement des tâches des applications cibles et l'optimisation des communications induites.

La méthode de travail que nous proposons est de nous concentrer sur une classe d'applications génériques en simulation : les méthodes de types Monte Carlo, qui sont utilisées sous différentes formes chez chacun des partenaires CIMENT. La restriction à cette classe spécifique mais importante d'applications, facilitera l'étude et le développement de prototypes logiciels. Notre idée est de fournir des bancs d'essais et des composants logiciels qui s'adapteront aux différentes applications de Monte Carlo et seront utilisables avec un minimum d'efforts. Les fortes implications et collaborations existantes des membres de CIMENT sont un gage de réussite. D'une part, les fonctionnalités à implémenter seront dictées par les utilisateurs eux-mêmes, d'autre part, l'utilisation intensive des composants développés permettra une mise au point plus rapide et plus sûre.

Pour une mise en place efficace de la grille de calcul CIMENT nous pensons nous appuyer sur les résultats et expertises développés dans le cadre de l'ACI-GRID.

1. Tout d'abord, des liens forts existent avec le projet Relation ACI-GRID CGP2P auquel participe Olivier Richard du laboratoire ID. L'ACI-GRID CGP2P a pour objectif principal de développer un intergiciel en vue d'une exploitation efficace des plates-formes de très grande taille. Plus précisément, cette action se concentre sur une forme particulière de grille que peut représenter les ressources inutilisées des machines connectées sur Internet ou sur un ensemble d'Intranet. Bien que les logiciels développés dans cette action ne répondent pas exactement à celle nécessaire dans l'ACI-GRID CiGri CIMENT une forte complémentarité peut se dégager suivant les points suivants :

- Un certain nombre d'éléments de base des intergiciels à mettre en place sont communs aux 2 actions.
- Les protocoles et les mécanismes de coopération qui sont à développer dans les deux actions pourraient voir leur mise en œuvre factoriser.
- Certains membres du laboratoire ID participent directement aux 2 actions ce qui facilitera la communication et les travaux communs entre les 2 actions.

## **ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002**

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

### **DOSSIER COMPLET**

- L'action CGP2P est aussi demandeuse de plate-forme physique pour l'expérimentation ce qui est un des points fort de l'action CiGri CIMENT.  
L'ensemble de ces points de contacts fait qu'une coopération entre les 2 actions sera assurément profitable à l'ensemble des partenaires et de leurs objectifs réciproques.
- 2. Un lien doit être établi avec le projet avec le projet RMI Objets distribués haute performance pour la grille de calcul dirigé par Christian Perez. Le projet concerne en particulier des composants de programmation pour grilles qui permettent d'intégrer des modes de programmation différents grâce à des approches corba/java de haut niveau. Un des objectifs est d'exploiter les performances des réseaux. Les applications cibles concernées sont plutôt le couplage de très grosses applications ce qui n'est pas a priori notre premier objectif. Cependant, d'une part la grille CIMENT pourrait servir de plate forme d'expérimentation à ce projet, d'autre part des applications de ce type pourraient émerger au sein de CIMENT. Enfin, l'expérience de ces technologies permettra d'enrichir l'expertise du projet.
- 3. Enfin, il est très naturel d'établir des liens avec le projet ASP de Frédéric Desprez, dont l'objectif est de fournir des serveurs d'applications plutôt orientées gros grain, et de les valider sur des applications réelles. Des solutions telles que NetSolve et DIET (Distributed Interactive Engineering Toolbox ) permettant d'effectuer des calculs numériques sur les réseaux sont au centre des préoccupations des utilisateurs de CIMENT. De même que dans le projet RMI de Christian Perez, l'expérimentation d'ASP sur une grille CIMENT pourrait être envisagée. Enfin, les collaborations entre le Pôle de Simulation et de Modélisation Numérique de l'ENS de Lyon et l'équipe de Frédéric Desprez, proches dans leur forme et dans leurs objectifs de celles développées au sein de CIMENT, associées à notre proximité régionale nous incite à renforcer nos collaborations.

#### **B1.2.2 Validation par des expérimentations multidisciplinaires sur la grille**

Les trois premiers projets concernent la modélisation numérique de phénomènes physiques. L'objectif est une meilleure compréhension de la physique de la matière. Les enjeux économiques sont grands : ils concernent en particulier la conception de nouveaux matériaux d'intérêt industriel pour des applications en électronique par exemple ou dans le domaine du nucléaire.

##### **SIMULATION MONTE CARLO DE LA CROISSANCE CRISTALLINE PAR EPITAXIE PAR JETS MOLECULAIRES [Philippe PEYLA (LPMMC)]**

La croissance cristalline par épitaxie par jets moléculaires est un sujet en plein essor. Cette technique de croissance à relativement basse température (très inférieure à la température de fusion des matériaux) permet l'obtention de couches minces aux interfaces bien localisées (quelques mono-couches atomiques). Les méthodes numériques que l'on utilise pour simuler un tel type de croissance sont des simulations de Monte Carlo Cinétique. L'algorithme que nous avons développé pour traiter le problème est inspiré de l'algorithme de Bortz Kalos et Lebowitz [J. Comp. Phys. 17, 10 (1975)] utilisé pour les verres de spins, la différence résidant dans le fait que le système que nous étudions est hors équilibre (flux d'atomes permanent sur la surface). La comparaison entre ces simulations numériques, l'expérience et les théories de champ moyen sont en parfait accord (voir les publications ci-dessous).

Si l'utilisation de la mémoire est relativement faible, en revanche le temps de simulation est relativement long. Typiquement, pour simuler le dépôt d'une seule couche constituée de 256 x 256 atomes, il faut (dépendant de la température simulée) entre 5 minutes et une heure de calcul sur une machine de type RISC 6000. La parallélisation du code pourrait permettre de simuler des surfaces beaucoup plus grandes et ainsi accéder à la simulation de phénomènes à de plus grandes échelles comme par exemple l'influence de gradients de température.

##### **METHODES DE MONTE CARLO EN SCIENCE DES MATERIAUX [Alain PASTUREL (LPMMC)]**

L'objectif de ces études est de coupler des simulations de type Monte Carlo à des calculs de mécanique quantique afin d'avoir une compréhension la plus exacte possible des mécanismes régissant à la fois la stabilité et les propriétés de matériaux d'intérêt industriel. Ici, nos axes de recherche concernent la modélisation de la croissance de SiC (matériau pour l'électronique) et les transformations de phases dans les alliages de Plutonium (matériau pour le nucléaire). Ces études permettent d'étudier les matériaux le plus souvent dans des conditions où les expériences ne sont pas réalisables ou n'amènent pas d'informations concernant la compréhension directe des propriétés ciblées. Ces méthodes sont cependant très coûteuses en temps calcul car les cellules de simulation comportent le plus souvent un grand nombre de particules. Elles nécessitent une infrastructure informatique très importante (grappe de PCs ou supercalculateur).

# ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

## DOSSIER COMPLET

### **MAGNETO-OPTIQUE DES SYSTEMES DESORDONNES [Bart VAN TIGGELEN (LPMMC), Felipe PINHEIRO (thésard au LPMMC)]**

Le but principal du projet est de démarrer une étude numérique de la propagation des ondes et en particulier de la localisation forte d'Anderson dans un milieu fortement désordonné et sous champ magnétique. La méthode de Monte-carlo est nécessaire pour générer un nombre très élevé de réalisations microscopiques d'un système désordonné, dont on connaît la statistique. Un code numérique existe qui traite la polarisation de la lumière. Cela est crucial pour les effets magnéto- optiques. Les enjeux sont la compréhension de la localisation forte de la lumière sous champ magnétique, l'étude sur la possibilité de déduire la chiralité (symétrie par miroir brisée) des systèmes désordonnés par des mesures optiques. Le but scientifique est de faire tourner les logiciels d'une façon efficace pour un maximum de diffuseurs ( $> 1000$ ). La formulation théorique d'un nouveau code existe. Il devrait inclure les effets magnéto-optiques. Cette formulation a exigé une petite modification de la méthode numérique. L'implémentation de cette modification est en cours. Quelques modifications et extensions de l'allocation mémoire seront également nécessaires.

### **METHODES DE MONTE CARLO ET MULTIPARAMETRIQUES EN ASTROPHYSIQUE [Pierre Valiron]**

Les profils de code de l'Observatoire sont très variés de par la diversité des applications traitées. Parmi ces applications, nous pouvons cependant identifier un certain nombre de calculs de type Monte Carlo, ou encore des calculs de type paramétriques, par exemple :

#### **Evolution dynamique dans les systèmes planétaires au moyen d'intégrateurs symplectiques (Hervé Beust)**

Les observations récentes à haute résolution de jeunes systèmes planétaires et la détection d'exo-planètes nécessitent une meilleure compréhension de la dynamique gravitationnelle dans ces systèmes stellaires jeunes (simples ou multiples) en présence des instabilités dynamiques provoquées par un ou plusieurs « Jupiters ». La modélisation de système de type Beta Pictoris permet également la validation de l'approche FEB (Falling Evaporating Bodies) par l'observation transitoire en absorption des matériaux évaporés des comètes, permettant ainsi la détermination directe de la composition chimique des petits corps dans le disque d'un exo-système planétaire. Les calculs sont de type multi-paramétriques. Chaque calcul est lui-même parallélisé en Open-MP et bénéficie le cas échéant d'une plate forme SMP à quelques processeurs. Le portage du code f90 sur une plate forme bi-PC ne devrait pas poser de problème.

#### **Propagation des ondes acoustiques ou élastiques dans une milieu hétérogène (Céline Lacombe)**

Nous cherchons à modéliser la propagation des ondes acoustiques ou élastiques dans un milieu hétérogène. Cette étude est appliquée à la propagation des ondes sismiques dans la lithosphère. Pour ce type d'étude nous résolvons une équation de transport grâce aux techniques de Monte Carlo. Cette technique consiste à simuler la marche aléatoire de millions de particule dans un milieu contenant des hétérogénéités. Chaque particule étant indépendante des autres.

**Evolution stellaire – Modélisation de la fin de la vie des étoiles de masse intermédiaire (Manuel Forestini, Gwenaëlle Leclair).** Nous nous intéressons à l'évolution de la composition chimique de surface des étoiles de masse intermédiaire pendant la phase ultime de leur évolution (phase AGB). Ces étoiles enrichissent alors fortement le milieu interstellaire en éléments lourds synthétisés dans leur cœur nucléaire, puis éjectés ensuite dans l'espace depuis leur surface par un vent violent se déclenchant à ce moment. Ces éléments chimiques se retrouvent ensuite dans les nuages interstellaires à l'origine des générations successives d'étoiles et de planètes. Pour tester les prédictions des modèles évolutifs dans le contexte de l'évolution chimique du milieu interstellaire, il convient de réaliser, au moyen d'un seul et même code d'évolution stellaire (afin d'éviter l'absence de biais liés aux différents modèles) de vastes grilles en masse et en composition chimique (pour reproduire au mieux les générations successives d'étoiles) et de suivre les calculs jusqu'au terme de la phase AGB (puisque c'est alors que la contribution des étoiles de masse faible et intermédiaire est maximale). La constitution d'une telle abaque multi-paramétrique nécessite actuellement des dizaines de milliers d'heures de calcul sur les calculateurs nationaux, et constituerait une excellente validation d'une approche multi-paramétrique sur la grille des calculateurs CIMENT.

**Milieu Interstellaire : Calcul ab-initio de surfaces d'interaction moléculaires pour la prédiction de taux d'excitation inélastiques en appui aux futures observatoires spatiaux et sol (Alexandre Faure, Claire Rist, Pierre Valiron, Laurent Wiesenfeld).** L'excitation collisionnelle des molécules interstellaires ou circumstellaires doit être modélisée en détail pour permettre l'interprétation des intensités des raies qui sont et seront observés dans le sub-millimétrique et dans l'infrarouge lointain, et remonter ainsi à la connaissance des conditions physiques et chimiques dans les objets astrophysiques eux-mêmes. La sensibilité et la qualité des futurs observatoires justifie une investigation précise de ces processus d'excitation moléculaire. Les calculs de collision reposent sur la détermination des potentiels d'interaction obtenus par des techniques de chimie théorique ab-initio du type coupled-cluster.



## **ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002**

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

### **DOSSIER COMPLET**

Ce type de calculs ab-initio est bien ciblé pour une exécution modérément parallèle sur une machine parallèle, ou un réseau de machines avec des architectures éventuellement hétérogènes (voir l'article de la Gazette du CINES du 1<sup>er</sup> juillet, sous <http://www.cines.fr/textes/gazette8.pdf>.) Par ailleurs l'exploration d'une surface de potentiel intermoléculaire nécessite le calcul de plusieurs milliers à plusieurs dizaines de milliers de calculs indépendants pour assurer un échantillonnage suffisant des degrés de liberté intermoléculaires (distance et orientations relatives) et intra-moléculaires (vibrations). Ces calculs multi-paramétriques lourds ont donc vocation à être distribués sur une grille, du moment que les ressources nécessaires en mémoire et en entrées-sorties pour chaque calcul peuvent être réservées par le logiciel d'accès aux ressources de la grille.

Ce type de calculs est théoriquement bien ciblé pour une exécution parallèle sur une machine parallèle, ou un réseau de machines avec des architectures éventuellement hétérogènes. Les calculs effectués sont généralement à gros grain en terme de CPU, ou encore d'espace mémoire requis, ou bien encore d'espace disque nécessaire. La taille du grain est typiquement de plusieurs heures CPU, de l'ordre de 1 Go de mémoire et un à plusieurs Go d'espace disque. Les données sont soit des calculs intermédiaires, soit des données issues d'observations. Dans ce dernier cas, les données doivent être vue par les nœuds de calcul au moment de l'exécution.

Pratiquement, la gestion de tels programmes est plus compliquée. Pour les calculs de ce type, nous avons jusqu'à présent été amené à développer nos propres outils pour une exécution sur les centres nationaux (notamment un outil `rump` qui utilisait initialement la librairie PVM et qui a été réécrit par un ingénieur du CINES en MPI ; cet outil a été utilisé par plusieurs utilisateurs du CINES qui avaient la même problématique). Ces outils « maison » sont bien sur très basiques et ne sont de loin pas la solution idéale ; ils ne font que refléter l'absence d'outils évolués pour le traitement optimal de calculs de type paramétriques.

#### **OPTIMISATION DE LA CONSISTANCE DES DONNEES EN TOMOGRAPHIE [L. Desbat, TIMC]**

En imagerie médicale nucléaire, on cherche à reconstruire, à partir de mesures externes de l'activité du patient, la distribution de concentration d'un traceur radioactif qu'il a inhalé ou qu'on lui a injecté. Le modèle mathématique correspondant est celui de la projection (intégrale) de la fonction d'activité sur les différents plans associés aux positions du détecteur. Une difficulté majeure de la reconstruction de l'activité est liée à l'atténuation, en général inconnue, par les tissus environnants, des photons émis. Les images obtenues sont de résolution médiocre (5mm) et seulement qualitative. La quantification des images nucléaires est un des grands enjeux de l'imagerie médicale. Outre l'intérêt évident d'une bonne quantification pour le diagnostic clinique, on peut citer parmi les applications potentielles le suivi dosimétrique en curie-thérapie par exemple. Cette technique locale et faiblement invasive de traitement de cancer (cancer du foie par exemple) consiste à implanter quelques sources radio-actives au sein des foyers tumoraux. Un suivi dosimétrique précis par imagerie nucléaire est alors nécessaire pour le contrôle et l'évaluation de la thérapie.

Afin de pouvoir estimer précisément les valeurs distribuées d'activité il faut corriger de l'atténuation et de la diffusion. L'atténuation ou sa correction à partir des données peuvent être estimées à partir des conditions de consistances des données. En effet, pour que les données soient consistantes, elles doivent vérifier des équations indépendamment de l'activité et dans lesquelles intervient la fonction d'atténuation. L'idée est d'ajuster la fonction d'atténuation pour rendre consistantes les données. Les méthodes d'optimisation employées pour la maximisation de la consistance sont essentiellement non différentiables. Elles conduisent à l'évaluation de la consistance pour un grand nombre de jeux de la paramétrisation de l'atténuation (en général un modèle déformable). En deux dimensions, le coût de l'optimisation est de plusieurs dizaines de minutes sur un processeur moderne pour une paramétrisation très faible (5 paramètres) du modèle de l'atténuation. On peut estimer à plusieurs dizaines d'heures le coût de l'estimation dans un problème en trois dimensions. Enfin le couplage d'une telle méthode avec une modélisation de la diffusion (par des techniques de Monte Carlo) devra être envisagé. Les résultats attendus sont une meilleure quantification en imagerie nucléaire et une plus grande diffusion de ces techniques coûteuses en temps de calcul. Ce type d'approche pourrait être généralisé à la correction du bougé du patient dans un scanner médical et à l'estimation de la fonction d'assombrissement centre bord en imagerie Doppler en astrophysique.

#### **METHODES MC POUR L'ANALYSE GENETIQUE SPATIALISEE [O. François (PR, TIMC), Stéphanie Manel (Mdc au laboratoire de biologie des populations d'altitude), M. Blum (DEA, Ing. Ensimag), plate forme BioIMAGE]**

Les progrès technologiques opérés depuis quelques années dans le domaine de la biologie moléculaire permettent désormais d'envisager l'étude de la structuration génétique à l'échelle de populations entières en exploitant l'information de génotypes multilocus (marqueurs moléculaires dominants ou codominants) ou les puces à ADN. Cette explosion de l'information génétique nécessite le développement de méthodes probabilistes et statistiques nouvelles souvent fondées sur l'approche "computationnelle" impliquant des moyens de calcul importants. Le contexte de l'opération s'inscrit dans une politique du développement durable et vise à faciliter la conservation des populations naturelles, ainsi qu'à prédire l'évolution de telles populations (gestion de la

# ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

## DOSSIER COMPLET

biodiversité, maladies émergentes). En génétique des populations, l'estimation de la dispersion est un préalable essentiel à la bonne compréhension de la structuration des populations [S. Wright. Isolation by distance. *Genetics*. (1943) 28, 114-138].

Le grand nombre de données génétiques produites par les techniques modernes issues de la biologie moléculaire (marqueurs, séquences) permet d'envisager depuis quelques années l'estimation des paramètres présents dans les modèles théoriques tels que les taux de mutation, de migration, les tailles efficaces des populations, etc. Les gènes à un locus donné sont reliés dans une population par un arbre généalogique décrivant les relations avec les ancêtres communs les plus récents. Mutation, migration, recombinaison et sélection laissent leur empreinte sur ses arbres généalogiques pour chaque locus. L'objectif de cette démarche consiste à estimer le rôle de chacun des événements précédents dans l'historique du gène afin de comprendre la structure actuelle d'une population.

L'approche que nous souhaitons adopter s'inscrit dans la mouvance de Felsenstein et ses collaborateurs [LAMARC : <http://evolution.genetics.washington.edu/lamarc/migrate.html>] et [Beerli, P. and J. Felsenstein (2001) Maximum likelihood estimation of a migration matrix and effective population sizes in n subpopulations by using a coalescent approach. *PNAS* 98(8): 4563-4568]. Il s'agit d'estimer ces paramètres en utilisant des méthodes de Monte Carlo par Chaîne de Markov (Metropolis, échantillonnage parfait, Swendsen Wang) fondées sur un modèle de généalogie appelé modèle de la coalescence [Site d'oxford : [www.stats.ox.ac.uk/mathgen/software.html](http://www.stats.ox.ac.uk/mathgen/software.html)] et [R. Griffiths S. Tavaré, D. Balding, P. Donnelly. Inferring coalescence times from DNA sequence data. *Genetics*. (1997) 145, 505-518.]. La généalogie n'étant pas observée, la méthode en question sert à intégrer les généalogies les plus vraisemblables au vu des données moléculaires actuelles (modèle statistique à données manquante dit "bayésien"). La méthode est extrêmement coûteuse et délicate à calibrer (plusieurs heures de calcul pour un très petit jeu de données comportant une centaine d'individus) et l'opportunité de pouvoir distribuer le calcul est cruciale. Les résultats que nous attendons concernent des modèles pour lesquels une information spatiale est superposée à l'information moléculaire actuelle. Nous estimerons en particulier par une méthode de Monte Carlo par MC un coefficient de diffusion de la population dans le temps.

### B1.2.3 Bilan des résultats attendus

Le premier objectif est d'étudier le passage des méthodes de déploiement de codes de calcul et de régulation de charge d'une grappe vers une grille pour la classe des applications de type Monte Carlo et paramétriques.

L'objectif est donc de construire un prototype d'environnement spécifique de soumission de « jobs » sur une grille de calcul CIMENT qui sera testé par une communauté multidisciplinaire d'utilisateurs du calcul scientifique sur des calculs de type Monte Carlo et paramétriques. L'intérêt est double : valider une grille expérimentale sur des applications réelles de domaines divers et contribuer aux développements scientifiques des domaines d'application.

Une perspective intéressante serait d'envisager un couplage de la grille CIMENT à d'autres initiatives de même nature. Dans un contexte régional, une interaction doit être mise en place avec le projet ASP de l'ACI-GRID [Approche clients-serveur pour la simulation sur grille] et le PSMN (Pôle de Simulation et de Modélisation Numérique) d'une part. Celle-ci devrait se prolonger au niveau national vers des réseaux plus large d'autre part, comme le Réseau Grand Est par exemple.

### B1.3 Les réalisations logicielles

#### B1.3.1 Logiciels pour la mise en œuvre de la grille

Beaucoup de réalisations logicielles ont été mises au point par les partenaires du laboratoire ID et du projet APACHE, et sont utilisés dans la communauté CIMENT ou à l'extérieur. Ces réalisations concernent principalement deux niveaux : une couche "basse" dont l'objectif est de fédérer des applications grâce à Corba, MPI ou TCP-IP, et une couche haute pour exprimer le parallélisme.

Quelques prototypes préliminaires permettent de réaliser la gestion des ressources et le placement des tâches sur une grappe. Des détails peuvent être trouvés sur le site web <http://www-id.imag.fr>. Il reste à développer des prototypes avec des fonctionnalités identiques pour les grilles, et surtout dans le cadre de notre projet, de travailler sur la couche logicielle de gestion des ressources et répartition de charge.

Prototype de logiciels pour la mise en œuvre des calcul de type Monte Carlo et multi-paramétrique sur la grappe : une première approche consiste à supposer que l'utilisateur fournit un code avec des jeux de paramètres et laisse la charge au gestionnaire de travaux de le faire exécuter sur la grille. Un des premiers problèmes est d'être certain que le programme pourra être compilé, optimisé et que les éventuels outils logiciels dont il a besoin seront disponibles sur les différents nœuds de calcul. Le second problème est de lui garantir les ressources nécessaires à son exécution sur la grille. Une seconde approche consiste à fournir sur la grille un certain nombre de services logiciels (par exemple des bibliothèques telles que Gaussian ou Matlab) à distance. Un client fera appel à des agents fournissant ces services à distance et qui répartissent la charge entre les différents nœuds de calcul.

# ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

## DOSSIER COMPLET

Ceci limite davantage la panoplie des applications qui peuvent être traitées mais d'un autre côté l'utilisateur est certain de trouver sur tous les nœuds de calcul les logiciels requis.

Une interface spécifique pour la soumission de calculs de type Monte Carlo et paramétriques sera donc développée pour que cette soumission ne nécessite que très peu d'effort pour l'utilisateur.

### **B1.3.2 Logiciels réalisés pour les applications**

La majorité des codes de simulation numérique présentés dans le paragraphe B1.2.1 sont déjà développés pour des architectures parallèles. Ils devront être portés sur les architectures de la grille et être interfacés aux logiciels de gestion de la grille.

### **B1.4 Calendrier des différentes phases du projet**

1. Analyse des besoins, état de l'art et spécification [M0(Mois 0) à M9]  
Partant de l'expertise acquise depuis des années par les chercheurs du laboratoire ID sur les outils d'administration des grappes et les recherches amont sur les techniques algorithmiques de gestion des ressources parallèles, les experts des projets partenaires CIMENT sur leurs codes opérationnels de type Monte Carlo devrait permettre de dériver rapidement des spécifications génériques.
2. Déploiement de logiciels existants (comme globus) et développement des prototypes de logiciels spécifiques [M9 à M18]
  - Mise en place effective et test de la grille CIMENT [3 mois M9 à M12]
  - Mise au point d'une procédure générique de soumission de calcul Monte Carlo et de calcul paramétrique sur une grille [9 mois M9 à M18] ; test sur une grappe de PC homogène puis test sur la grille.
  - Portage et tests des différentes applications sur les différentes plates-formes matériel CIMENT, premières évaluations de performance sur les différentes plates formes puis sur une grille de grappes de PC [9 mois M9 à M18]
3. Evaluation des applications sur une grille hétérogène CIMENT [M18-M24]
4. Etude de l'intégration de la grille CIMENT dans des grilles régionales, nationales, etc. [M18-M24]

### **B1.5 Calendrier des réalisations**

- Rapport sur l'état de l'art [M3]
  - Outils logiciels de mise en œuvre de grilles
  - Outils logiciels de soumission et de gestion automatique de calculs Monte Carlo et calculs multiparamétriques
  - Etat de l'art sur chacune des applications visées.
- Description et spécification de la solution [M9]
  - Description des solutions retenues et spécification des logiciels spécifique à développer pour la mise en œuvre et la gestion sur la grille des calculs de Monte Carlo.
  - Spécification des interfaces aux applications visées.
- Rapport sur les premiers test d'une grille CIMENT de PC [M12].
- Rapport sur le portage des codes des applications (test et évaluation) et sur les premiers test sur une grille CIMENT de grappes de PC [M18]
- Résultats scientifiques obtenus grâce au calcul sur la grille CIMENT [M24]
- Rapport sur l'étude de la participation (par des accès croisés) à des projets de grille régionale, nationale, etc. [M24]

### **B1.6 Implication des différents partenaires dans chacune des phases du projet**

- Etat de l'art : tous les partenaires (principalement ID sur la mise en œuvre des grilles, les autres partenaires sur les applications envisagées)
- Spécification : tous les partenaires sous la responsabilité de Philippe Augerat ID.
- Déploiement de logiciels existant et développement de prototypes de logiciels spécifiques.
  - Mise en place des outils logiciels de la grappe (administration et gestion de code Monte Carlo) [ID]
  - Portage de codes sur plate forme (chaque responsable d'application en collaboration avec les ingénieurs qui administrent les plate formes CIMENT).
- Evaluation des applications (chaque responsable d'application en collaboration avec les ingénieurs qui administrent les plate formes CIMENT et les ingénieurs recrutés en CDD pour la mise en œuvre de la grille [ID]).

## ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

### DOSSIER COMPLET

- Intégration de la grille CIMENT dans des grilles plus importantes : le comité de pilotage de CIMENT + les experts informaticiens d'ID + des partenaires extérieurs à identifier au cours du projet.

#### B1.7 Mode d'organisation du projet

##### Pilotage du projet

CIMENT-GRID est un projet fédérateur du projet CIMENT : il est inscrit dans les objectifs de CIMENT. Il bénéficie donc de l'organisation du projet CIMENT. Un comité de pilotage définit les orientations principales de CIMENT. Ce comité, présidé par le coordinateur du projet, est composé d'un responsable scientifique et d'un responsable technique de chacune des plates formes CIMENT :

- Pierre Valiron et Françoise Roch (Observatoire de Grenoble) : SCIOG (Service de Calcul Intensif de l'Observatoire de Grenoble)
- Eric Blayo et Laurence Viry (LMC-IMAG) : plate forme MIRAGE (Mésio-Informatique Répartie pour des Applications en Géophysique et Environnement).
- Denis Trystram et Philippe Augerat (ID-IMAG) : grappe de PC.
- Serge Perez et Pierre Vatton (CERMAV et LEDSS) : CECIC.
- Laurent Desbat et Guy Bourrel (TIMC-IMAG) : plate forme BioIMAGE
- Alain Pasturel et Françoise Berthoud (LP2MC) : plate forme PhyNum

Sa vocation est typiquement l'administration de projets communs comme celui de GRID (cf <http://www.ujf-grenoble.fr/CIMENT>). En tant que projet mis en place par les acteurs de CIMENT, CIMENT-GRID sera présenté et évalué (en plus des évaluations prévues par l'ACI) par le Conseil Scientifique annuel présidé par Claudine Schmidt Lainé et auquel participent des experts extérieurs pour chaque plate forme, dont Michel Cosnard sur la plate forme « grappe de PC ».

##### Responsables des tâches

- Etat de l'art : Laurent Desbat, TIMC, au sein du comité de pilotage de CIMENT.
- Spécification : Denis Trystram, ID.
- Outils logiciel de la mise en place de la grille : responsable Olivier Richard, ID. [la réalisation de cette tâche repose fortement sur un ingénieur en CDD obtenu par cette ACI et la contribution des ingénieurs des autres pôles CIMENT (Françoise Berthoud, Guy Bourrel, Françoise Roch, Pierre Vatton, Laurence Viry)].
- Logiciel prototypes spécifiques pour la soumission et la gestion de calcul multi-paramétrique ou Monte Carlo sur grille : Olivier Richard (la réalisation repose fortement sur le même ingénieur CDD, cité précédemment, obtenu par cette ACI).
- Portage des applications sur les plates-formes hétérogènes de CIMENT : chaque application visée a pour responsable le premier auteur dans la liste des applications (cf. B1.2.1). Les applications bénéficieront du support effectif d'un nouvel ingénieur CDD « application » obtenu dans le cadre de l'ACI et des contributions des chercheurs et ingénieurs des pôles concernés.
- Evaluation des applications et production de résultats scientifiques : même chose que précédemment.
- Préparation/contribution à la construction de grilles plus large : Philippe Augerat [ID], avec le comité de pilotage CIMENT.

**L'interaction globale des partenaires** est coordonnée par le comité de pilotage. Les interactions ponctuelles sur le portage de codes de calcul sont organisées entre les ingénieurs des plate formes et les utilisateurs. Les évaluations de la grille seront coordonnées par Philippe Augerat du laboratoire ID.

**L'organisation budgétaire** du projet est extrêmement simple dans la mesure où la majorité du budget de l'ACI sera affectée à des mois d'ingénieur en CDD recruté via le Centre des Ressources Informatique de Proximité de l'UJF (qui permet le partage des ingénieurs sur le projet CIMENT). Le budget de fonctionnement du projet (essentiellement des missions pour l'organisation de séminaire, la participation à des conférences et à des réunions liées à l'ACI) sera affecté en comité de pilotage. L'ensemble du financement sera donc géré sur une ligne budgétaire de l'Université Joseph Fourier.

#### B2- Partenaires :

Nom	Prénom	Laboratoire ou équipe de rattachement	Poste statutaire	% du temps de recherche consacré au projet
-----	--------	---------------------------------------	------------------	--------------------------------------------

## ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

### DOSSIER COMPLET

Desbat François Bourrel Manel	Laurent Olivier Guy Stéphanie	TIMC-IMAG (plate forme BioIMAGe)	Professeur Professeur IR-CNRS MdC UJF	20% 10% 30% 10%
Trystram Richard Dutot Eyraud Augerat	Denis Olivier Pierre François Lionel Philippe	ID-IMAG (plate forme grappe de PC)	Professeur MdC BDI-CNRS Thésard IR-MRT	20% 20% 20% 30% 30%
Pasturel Peyla Van Tiggelen Berthoud	Alain Philippe Bart Françoise	LPMMC (plate forme PhyNum)	DR CNRS MdC DR CNRS IE UJF	10% 10% 10% 30%
Valiron Roch	Pierre Françoise	LAOG (SCIOG)	DR CNRS IR CNRS	10% 30%
Vatton	Pierre	CECIC	IR CNRS	30%
Viry	Laurence	LMC-IMAG MIRAGE	IR UJF (CRIP)	30%
Ingénieur CDD Système GRID	A recruter	CRIP – UJF	Ingénieur CDD demandé à cette ACI	100% sur 2 ans
Ingénieur CDD Développement et support d'applications	A recruter	CRIP – UJF	Ingénieur CDD demandé à cette ACI	100% sur 1 an

### B3- Références :

- **Liste de quelques publications les plus significatives d'acteurs du projet.**

P. Dutot and D. Trystram, Scheduling on hierarchical clusters using Malleable Tasks , in Proceedings of the 13th annual ACM symposium on Parallel Algorithms and Architectures - SPAA 2001, pp. 199-208, 2001.

R. Lepere and D. Trystram and G.J. Woeginger, Approximation Scheduling For Malleable Tasks under Precedence constraints, International Journal of Foundation in Computer Science, to appear

D. Trystram, Scheduling on Hierarchical Clusters using MT, in Workshop on Scheduling and Communication, IPDPS 2001, San Francisco, invited paper, 2001.

Georges Da Costa, Evaluation de protocole Peer to Peer en utilisation à grande échelle : Etude de cas Freenet, Rapport de DEA, LIP, 2001.

Pierre Lombard and Yves Denneulin, nfsp: a distributed NFS server for clusters of workstations, in Proc. of the International Parallel and Distributed Processing Symposium, to appear 2002,

C. Martin and O. Richard, Parallel lancer for cluster of PC, in PARCO 2001, Wolrd Scientific, Imperial College Press, London, 2001.

A.Pimpinelli, P.Jensen, H.Larralde, P.Peyla. Scaling and crossovers in models for thin film growth. Morphological organization in epitaxial growth and removal. Ed. World Scientific Series - Condensed Matter Physics -(1999).

A.Pimpinelli and P.Peyla. Deposition and growth with desorption in molecular beam epitaxy. Journal of Crystal Growth 183, 311-322 (1998).

A. Pasturel. Theory of surface segregation in metallic alloys. Computational Materials Science 15 , 144 (1999)

A. Pasturel . Phase stability in the Al-Nb system. Phys. Rev. B 56, 552 (1997)

David LACOSTE, thèse Université Joseph Fourier- Grenoble, *Diffusion de la lumière dans les milieux magnéto-optiques ou chiraux* (novembre 1998).

B.A van Tiggelen et G.L.J.A. RIKKEN, *Manipulating Light with a Magnetic Field*, dans: Optical Properties of Random Nano-structures, edited by V. M. Shalaev (Springer Verlag, Heidelberg, 2001) Topics in Applied Physics.

## ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

### DOSSIER COMPLET

- Beust H., Morbidelli A., " Falling Evaporating Bodies as a clue to outline the structure of the beta Pictoris young planetary system ", *Icarus* 143, 170, 2000.
- Thebault P., Beust H., " Falling Evaporating Bodies in the beta Pictoris system :Resonance refilling and long term duration of the phenomenon ", *Astronomy and Astrophysics*, 376 621, 2001.
- Faure A., Rist C. and Valiron P., "Ab initio determination of the CN-NH<sub>3</sub> capture potential energy surface", *Chem. Phys.*, 241, 29—42, 1999.
- Faure A., Rist C. and Valiron P., "Rate constant calculations for the CN+NH<sub>3</sub> reaction at interstellar temperatures : beyond capture theories ? », *Astron. Astrophys.*, 348, 972—977, 1999.
- Noga J., Valiron P. and W. Klopper, «The accuracy of atomization energies from explicitly correlated coupled cluster calculations", *J. Chem. Phys.* 115, 2022-2032, and Erratum, 2001.
- Noga J., Valiron P., "Explicitly Correlated Coupled Cluster R12 Calculations ", To appear in : *Computational Chemistry : Reviews of Current Trends Vol. 7*, edited by J. Leszczynski, World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, 2001.
- L. Desbat and C. Mennessier. On the invertibility of Doppler imaging: an approach based on generalized tomography. *Inverse Problems*, (15):193-213, 1999.
- R. Faghihi and L. Desbat. Experiments on the DCC for SPECT and CT Scanner Data Registration. In *NSSMIC2001 abstract book*, page 112. IEEE, 2001.
- C. Mennessier, F. Noo, R. Clackdoyle, G. Bal, and L. Desbat. Attenuation correction in SPECT using consistency conditions for the exponential ray transform. *Phys. Med. Biol.*, 44:2483-2510, 1999.
- A. Cercueil, O. Francois. Sharp asymptotics for fixation times in a stochastic population processes with low mutation probabilities, *J. Math Biol.*, submitted .
- A. Bienvenue, M. Joannides, J. Berard, E. Fontenas, O. Francois. Niching in Monte Carlo Filtering Algorithms. In *EA01*, C. Fonlupt et al. eds, *Lecture Notes in Computer Science*, pp.11--22, 2002.
- A. Cercueil, O. Francois Monte Carlo simulation and population-based optimization, *Congress on Evolutionary Computation 2001*, pp. 651--658 , COEX center, Seoul, IEEE Press, 2001.
- O. Francois Global optimization with exploration/selection algorithms and simulated annealing, To appear in *The Annals of Applied Probability*.
- O. Francois. Geometric inequalities for concentrated Markov chains, *Journal of Applied Probability*, 37, 1, 2000, pp. 15 - 28.
- O. Francois. Parallel simulation in ferromagnetic spin systems, *Journal of Physics A: Math. and Gen.*, 30, 1997, pp. 3393-3405.

- ***Liste des logiciels développés et évaluation de leur diffusion.***

Les applications scientifiques développées sont des logiciels académiques qui sont destinés essentiellement à comprendre notre univers. Ils sont en majorité conçus dans le seul but de faire progresser nos connaissances et ne sont donc pas fortement diffusés en dehors de la communauté restreinte des collaborateurs de chaque projet. Cependant, certains font l'objet d'applications protégées par des brevets (par exemple en imagerie médicale, cf. ci-dessous).

- ***Quelques brevets en rapport avec certaines applications.***

M. Fleute, S. Lavallée et L. Desbat. Reconstruction de surfaces en trois dimensions par utilisation de modèles statistiques. Demande de brevet n99/11848 de l'Université Joseph Fourier de Grenoble, no de publication :2798760, 1999.

Thomas Rodet, Pierre Grangeat et Laurent Desbat. Procédé de reconstruction accélérée d'une image tridimensionnelle. Brevet Français no 0007278, pages 1,20, 2000.

## ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

### DOSSIER COMPLET

#### B4 – Moyens financiers demandés et durée dans le cadre de l'ACI (en Euros TTC) :

Le projet CIMENT est correctement doté dans le cadre du CPER pour l'équipement en matière de calcul : nous ne demandons donc aucun budget d'équipement dans le cadre de cette ACI. En effet, les équipements acquis dans le cadre du CPER serviront de support à l'expérimentation du projet CIMENT GRID.

Notre demande porte sur

- 3 années de CCD d'ingénieur (coût de 3600 Euros par mois, soit 131760 Euros pour 36 mois de CDD)
  - 1 ingénieur sur la durée du projet pour le déploiement de la grille CIMENT et le développement de méthodes spécifiques pour la mise en place de calcul de type Monte Carlo.
  - 1 ingénieur en support pour les applications sur 1 année du mois 6 (participation aux spécifications) au mois 18
- Un budget de fonctionnement annuel de 15000 Euros pour le projet CIMENT-GRID

#### Récapitulatif global (en Euros TTC) :

	Année 1	Année 2	Année 3	Total
Equipement	0	0		0
Fonctionnement	15000	15000		30000
Personnels (CDD)	65880	65880		131760
Total / année	80880	80880		161760

#### B5 – Autres soutiens financiers apportés au projet :

Le budget global **d'équipement obtenu** du projet CIMENT dans le cadre du CPER est le suivant (en Euros) :

Période	INRIA	MRT	Région	Métro	Ville	Total
2000-2003	381123	76225	495459	304898	99092	1356796
2004-2007	0	457347	304898	99092	68602	929939
TOTALE	381123	533572	800357	403990	167694	2286735

CIMENT n'a pas de budget de fonctionnement.

La ventilation de ces crédits d'équipement du CPER dans le projet CIMENT est le suivant :

Projets	2001	2002	2004	2005-2006
Grappe de PC	564061			
Chimie calculatoire	228674			
Physique numérique		228674		
BloIMAGE	121959	152449		
Soutien à la formation		60980		
Jouvences				
SCCIOG			304898	
MIRAGE			228674	
Autres Jouvences				396367
Total	1356796		929939	

Il faut souligner que la réponse à l'appel à projet du ministère pour l'équipement en matériel de calcul intensif (Guy René Peyrin) a permis de financer en 1999 les plates formes SCIOG (600kF + 600kF COMI CNRS) et MIRAGE (600kF + 600kF COMI CNRS), ainsi qu'une part de la future grappe de PC (800kF).

Enfin, le projet ne fait pas l'objet d'une demande ou d'un soutien dans le cadre d'une autre ACI.

## **ACTION CONCERTEE INCITATIVE 2002**

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

### **DOSSIER COMPLET**

#### **B6 – Autres actions contractuelles dans lesquelles les partenaires sont engagés :**

Les différents partenaires sont actifs dans des projets nationaux et internationaux :

- RNTL CLIC - ID, Mandrake, Bull - développement d'une distribution Linux pour cluster de PC - 2 ans (2002, 2003).
- Projet européen MI3 d'imagerie 3D interventionnelle minimalement invasive (sous la responsabilité de TIMC et PRAXIM, Laurent Desbat et Stéphane Lavallée- termine fin 2002). Un des objectifs de ce projet est de fournir des reconstructions 3D en salle d'opération : il requiert du calcul intensif.
- Participation de TIMC au projet RNTS DiRaN (dirigé par le LETI/CEA - termine mi-2002). Nous sommes concernés par la reconstruction 3D à partir d'un capteur plan fixe et une source mobile : application de l'imagerie médicale. Ce projet implique du calcul intensif.
- Philippe PEYLA et Alain PASTUREL participent au GDR 687 "relaxation des contraintes dans les couches nanométriques épitaxées" et au GDR 1866 "Simulations moléculaires en synthèse au traitement de matériaux par voie gazeuse".