

Plate-forme MIRAGE :

Méso-Informatique Répartie pour des Applications en Géophysique et Environnement

1 Rappel des objectifs scientifiques

Le projet MIRAGE regroupe des chercheurs de 5 laboratoires grenoblois travaillant sur le thème de la modélisation numérique du climat et de l'environnement. Ces laboratoires sont :

- **LMC** : Laboratoire de Modélisation et Calcul
- **LEGI** : Laboratoire des Ecoulements Géophysiques et Industriels
- **LTHE** : Laboratoire d'étude des Transferts en Hydrologie et Environnement
- **LGGE** : Laboratoire de Glaciologie et Géophysique de l'Environnement
- **LEA** : Laboratoire Ecosystèmes Alpains

Ce projet a été élaboré de façon “naturelle”, à partir de nombreuses collaborations pré-existantes. Les objectifs scientifiques et techniques de ce projet sont :

- Se doter d'un équipement méso-informatique commun, complémentaire du service fourni par les centres nationaux, et qui permette de gagner en efficacité pour le développement et la mise au point des codes de calcul, les travaux de pré- et post-traitement, et la réalisation des simulations de taille moyenne.
- Favoriser le partage de codes de calcul et d'outils informatiques et numériques
- Favoriser le dialogue et le partage de compétences scientifiques et techniques entre chercheurs

Pour ce faire, nous sommes vigilants à conserver l'unité scientifique du projet, et sa “taille humaine”.

2 Aspects matériels et financiers

2.1 Configuration matérielle

La plate-forme de calcul MIRAGE est constituée de 7 stations de travail bi-processeurs Compaq DS-20 : processeurs EV6, 2.5 Go de RAM, 5 Go de swap et environ 30 Go de mémoire disque disponible par machine. Ces machines sont réparties sur 3 sites : 4 machines au LEGI-LTHE, 2 au LMC et 1 au LGGE. Sur chaque site, les machines sont reliées entre elles par une liaison constructeur “Memory Channel” à très haut débit. Les sites sont reliés entre eux par le réseau du campus universitaire : liaison Gigabit ethernet

entre les deux sites principaux, et lien à 100 Mo/s avec le site du LGGE. De plus, chaque site est doté d'une baie disque sécurisée (RAID-5) d'une centaine de Go. La plate-forme est équipée des outils logiciels standards séquentiels et parallèles de calcul scientifique (CXML, MPI, OpenMP, Totalview,...) ainsi que du gestionnaire de batchs LSF (Load Sharing Facility) permettant une meilleure répartition des charges sur l'ensemble des machines de la plate-forme.

2.2 Chronologie

La chronologie de mise en place de ces moyens a été la suivante :

- 1999 : Montage du dossier, demandes de financement, choix du matériel
- Début 2000 : Arrivée des machines
- Mai 2000 : Finalisation d'une première configuration de travail satisfaisante
- Septembre 2000 : Recrutement de Laurence Viry, IR à l'UJF en calcul scientifique, et responsable technique de la plate-forme Mirage
- Janvier 2001 : ajout d'un routeur sur le site LEGI-LTHE, qui a conduit à une amélioration de la stabilité et des débits du réseau Gigabits entre les deux sites principaux
- Mai 2001 : passage à la version 5.1 de *True64 Unix*, cette version apporte une gestion "cluster" des machines à l'intérieur de chaque site ainsi qu'une plus grande fiabilité du système
- Septembre 2001 : installation et première configuration de LSF, le logiciel gestionnaire de batchs.

2.3 Budget

Le budget initial d'acquisition et installation du matériel s'élevait à 1540 KF, doté par le CNRS-COMI, l'UJF/MENRT, l'IMAG, l'INPG, l'INSU, et une participation des laboratoires.

Le budget annuel de fonctionnement s'élève à 60 KF doté par le contrat quadriennal de l'UJF, auxquels s'ajoute un auto-financement du même ordre de grandeur, via des contrats de recherche. De plus, dans l'optique d'un upgrade des machines, l'INRIA a accordé une somme de 200KF en 2000 et 2001.

3 Le point technique en septembre 2002

3.1 Evolutions 2001-2002

Si l'essentiel des efforts techniques fournis en 2000-2001 était orienté vers une meilleure stabilité de la plate-forme, l'année 2001-2002 a été consacrée à une meilleure utilisation

de la plate-forme à travers:

- l'adaptation de la configuration LSF aux besoins de ressources des utilisateurs,
- l'installation de nouveaux outils améliorant l'utilisation des machines et le développement d'applications,
- des présentations-formations sur des points techniques relevant du calcul hautes performances en général et adaptées à la plate-forme Mirage

Analyse de Performance et Optimisation de codes

Introduction au calcul parallèle - adaptation à la plate-forme Mirage

Formation à l'utilisation de LSF

Cette expérience de formation devrait permettre à Mirage de participer à un projet de formation continue sur le calcul hautes performances à l'UJF dans lequel seraient impliqués de façon plus générale les intervenants des projets de Ciment.

- l'amélioration du site web (<http://mirage.imag.fr>), sur lequel sont centralisées notamment les informations techniques relatives aux outils matériels et logiciels ainsi que des informations plus générales concernant le calcul hautes performances.

Les points faibles demeurent:

- la liaison éthernet à 100Mo/s avec le site du LGGE, qui "isole" un peu ce site des autres, et rend plus difficile le transfert de masses de données importantes avec ce site
- l'impossibilité de faire du parallélisme inter-site performant en terme de vitesse de communications. Ceci provient de l'impossibilité d'utiliser la bibliothèque MPI constructeur (très performante) sur le réseau Gigabit entre les deux sites principaux. D'autres bibliothèques ont été testées (MPICH, LAM), mais ne fournissent pas de performances satisfaisantes en terme de latence et de débits des communications. On ne peut donc envisager du parallélisme inter-site qu'à travers des applications peu communicantes.

Un upgrade de la plate-forme est prévu fin 2002, début 2003, avec le soutien financier de l'INRIA. Contrairement à l'idée initiale qui consistait à passer au processeur EV68, ce qui devait nous assurer un gain de vitesse d'un facteur 2 environ par rapport au processeur actuel, mais ce qui imposait un changement presque total de la machine (incompatibilité des composants), nous envisageons l'ajout d'un ou plusieurs noeuds encore à définir sur un ou plusieurs sites. Des benchmarks seront réalisés cet été et à l'automne. Cette solution devrait permettre également un accroissement d'un facteur de l'ordre de deux de la puissance de calcul.

3.2 Utilisation des ressources

Le taux d'utilisation des machines est bon, avec actuellement entre 45 et 50 utilisateurs déclarés.

L'usage démontre que les machines sont stables et bien occupées. La mise en place du gestionnaire de ressources LSF (Load Sharing Facility) a permis une meilleure répartition de la charge CPU sur l'ensemble des machines, ainsi qu'une vision plus précise de l'utilisation des ressources.

Bien que des tests aient été réalisés, très peu de travaux font appel pour le moment à la fois aux ressources de plus d'un site. Ceci provient de l'impossibilité d'utiliser la bibliothèque MPI constructeur (très performante) sur le réseau Gigabit entre les deux sites principaux.

Par contre l'utilisation de LSF favorise un parallélisme intra-site plus efficace, par une réservation exclusive des machines.

3.3 Complémentarité avec les centres nationaux

L'usage de la plate-forme Mirage est bien conforme à nos souhaits initiaux. Les ressources sont essentiellement utilisées pour des tâches expérimentales de mise au point d'algorithmes et de méthodes numériques, et de réalisation de simulations relativement légères. Par contre, tous les travaux de production nécessitant des moyens lourds sont systématiquement réalisés sur les calculateurs nationaux.

A cet égard, la plate-forme Mirage est "processeur-compatible" avec les machines Compaq de l'IDRIS (6 noeuds de 24 processeurs) et du CGCV-CEA (284 processeurs), ce qui permet une bascule extrêmement aisée des codes de calcul fonctionnant sur Mirage avec ces deux machines.

4 Production scientifique

Comme nous l'avons indiqué précédemment, les thématiques scientifiques abordées dans le cadre de ce projet sont centrées sur la modélisation numérique de l'environnement et du climat. Plus précisément, les principaux thèmes de recherche développés par les utilisateurs de la plate-forme Mirage sont essentiellement les suivants :

- Modélisation des calottes polaires, sur des échelles temporelles de l'ordre de 100 000 ans
- Couplage entre glace et atmosphère
- Modélisation des circulations océaniques, sur des échelles temporelles allant de quelques jours à quelques dizaines d'années
- Assimilation de données en océanographie physique et biologique
- Modélisation de l'interface sol-végétation-atmosphère
- Modélisation hydrologique couplée à la modélisation météorologique de méso-échelle

Plusieurs collaborations de recherche existent entre les chercheurs impliqués dans Mirage, sur des thèmes complémentaires ou transverses, comme par exemple le couplage de modèles ou le raffinement de maillage, et qui impliquent des co-directions de thèses.

Le couplage de modèles impliquent souvent la réutilisation de codes existants, voire même d'applications complètes, ceux-ci étant développés avec des technologies hétérogènes (langages, systèmes d'exploitation, machines et réseaux), ce qui nous a amené à envisager l'utilisation de l'encapsulation de ceux-ci dans des objets CORBA. Ces objets sont alors utilisables pour bâtir de nouvelles applications qui pourront être distribuées. Le choix de cette méthode offre une solution ouverte et évolutive, modulaire et portable. Une expérimentation est en cours sur le couplage d'un modèle végétal (SVAT) et d'un modèle hydrologique, l'application à d'autres couplages pourra ensuite être envisagée.

L'objectif n'est pas ici de fournir un rapport d'activité scientifique complet sur tous ces thèmes. Nous avons plutôt choisi ici de donner trois illustrations, pour la réalisation desquelles l'outil Mirage s'est révélé particulièrement adapté.

4.1 Assimilation d'observations dans les modèles couplés de circulation océanique et d'écosystèmes marins

Le calcul scientifique est un outil de plus en plus utilisé par les océanographes biogéochimistes pour simuler la dynamique des écosystèmes marins et comprendre leur comportement sous la contrainte de l'hydrodynamique. Au LEGI et au LMC, des travaux sont menés en collaboration pour développer des méthodes d'assimilation de données dans les modèles couplés physico-biogéochimiques de façon à rendre les simulations numériques réalistes et cohérentes avec les observations disponibles. Ces travaux sont motivés par un nombre croissant de systèmes spatiaux qui permettent d'observer la variabilité spatio-temporelle de la " couleur de l'océan " qui représente une mesure du contenu chlorophyllien de l'océan. Cette approche intégrée doit permettre ultimement de quantifier avec précision la production primaire dans l'océan, et d'évaluer le rôle de la biologie marine dans le cycle du carbone.

Deux approches d'assimilation sont actuellement explorées par les équipes grenobloises : l'approche variationnelle basée sur la théorie du contrôle optimal, et l'approche séquentielle d'estimation statistique optimale. Chacune de ces méthodes requiert la maîtrise de méthodes numériques performantes et l'utilisation de calculateurs scientifiques de pointe.

L'assimilation variationnelle vise à optimiser les paramètres des modèles bio-géochimiques qui sont généralement mal connus ou ne correspondent à aucune réalité mesurable. Ces paramètres sont ajustés de façon à minimiser une fonctionnelle qui mesure l'écart entre les observations et leur équivalent modèle, et éventuellement l'écart entre les paramètres et leur estimation a priori. La minimisation de cette fonctionnelle fait appel à l'utilisation du modèle linéaire tangent et à son adjoint. Des expériences d'assimilation ont été réalisées sur le site DYFAMED en Mer Ligure, démontrant que l'optimisation des paramètres permet d'améliorer objectivement la représentation de la floraison phytoplanctonique grâce à des observations de chlorophylle en surface, à condition toutefois de bien contrôler la

limitation en sels nutritifs (thèse de B. Faugeras). Cependant, l'utilisation d'un rapport carbone/chlorophylle constant dans le modèle ne permet pas de représenter dans une même simulation le maximum de production printannière en surface et la poussée estivale de sub-surface représentative des conditions oligotrophes.

La méthode précédente fait implicitement l'hypothèse que l'environnement physique qui conditionne le développement des variables biologiques est parfaitement modélisé, ce qui constitue dans la plupart des situations une approximation relativement sévère. Par conséquent, nous avons également exploré l'approche d'estimation statistique qui, en principe, permet de prendre en compte des imperfections-modèles de toute nature. Un filtre de Kalman de rang réduit (SEEK) a été mis en oeuvre pour assimiler des données dans la composante hydrodynamique et dans la composante biologique du modèle, afin d'étudier la complémentarité potentielle d'observations physiques et biologiques sur le contrôle du système couplé (thèse de S. Magri). Nous avons ainsi pu quantifier l'impact de données physiques assimilées sur la représentation des processus de diffusion verticale qui conditionnent l'évolution de l'écosystème. Par ailleurs, la difficulté principale rencontrée lors de l'assimilation de profils de données biogéochimiques est de délimiter l'espace des variables contrôlables et d'identifier les covariances d'erreur susceptibles de donner lieu à des corrections multivariées significatives.

Cette approche a également été utilisée pour assimiler des observations de couleur de l'eau SeaWiFS dans le modèle couplé de circulation et d'écosystème DIADEM sur le bassin Atlantique Nord. La figure 1 illustre la correction apportée par les données spatiales sur la distribution du phytoplancton dans la couche euphotique lors une étape d'analyse représentative du mois de mai 1998.

De nouvelles pistes seront explorées prochainement, visant à combiner les potentialités des approches séquentielles et variationnelles par une utilisation conjointe ou par une hybridation adéquate des ces deux types de méthodes (thèse de L. Berline, LEGI).

Références :

Carmillet V., Brankart J.M., Brasseur P., Drange H., Evensen G. and Verron J., 2001 : A Singular Evolutive Extended Kalman filter to assimilate ocean colour data in a coupled physical-biochemical model of the North Atlantic ocean, *Ocean Modelling*, 3, 167-192.

Faugeras B., Lévy M., Mémery L., Blum J. and Verron J., 2002 : Estimating the parameters of a 1D biogeochemical model to assimilate data from the DYFAMED station in the Northwestern Mediterranean Sea, *J. Marine Systems*, to appear.

Magri S., Brasseur P. and Lacroix G., 2001 : Data assimilation in a marine ecosystem coupled to a mixed layer model of the upper ocean. 33rd Int. Liège Colloquium on Ocean Hydrodynamics, May 2001.

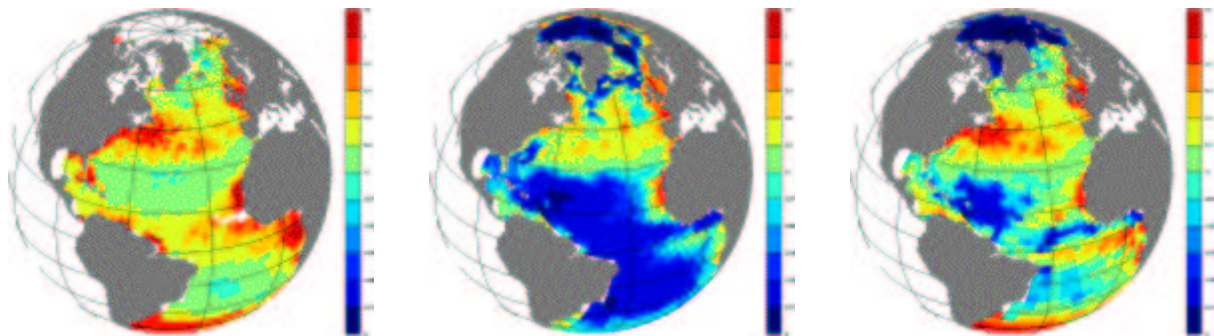


Figure 1: Distribution moyenne de la concentration en phytoplancton (en mmol-N/l) dans la couche de mélange résultant de l'assimilation d'observations SeaWiFS acquises en mai 1998. Comparaison entre les données satellitales (à gauche), la prévision du modèle avant assimilation (au centre) et l'estimation après assimilation (à droite)

4.2 Atmosphère des vallées alpines et évolution des polluants photochimiques

A l'échelle d'une vallée, les mouvements atmosphériques sont dominés par des effets de canalisation par le relief et par des mouvements d'origine thermique. Sous l'effet du rayonnement solaire, le sol voit sa température s'élever et réchauffe l'air générant ainsi des mouvements convectifs qui sont à l'origine des vents de pente et des vents de vallée. Cette dynamique convective est dominante dans les situations critiques de pollution atmosphérique. Des couches d'air stable, les inversions, peuvent s'installer et persister plusieurs heures voire plusieurs jours, maintenant la vallée dans un confinement propice à l'accumulation de taux élevés de pollution sous l'effet d'émissions dues essentiellement au trafic routier.

Les modèles utilisés sont des solveurs tri dimensionnels de mécanique des fluides associés à des modèles de sol (modèle ARPS) qui génèrent des champs repris par des modèles de transport-diffusion-réaction chimique. La raideur des systèmes différentiels associés à la cinétique chimique impose des schémas numériques spécifiques. Les concentrations de 50 à 70 espèces chimiques sont calculées explicitement. Les maillages sont typiquement 90X90X35 pour des durées de 24 heures à quelques jours avec des pas de temps de l'ordre de quelques secondes. Le code ARPS peut être activé en mode parallèle.

La première catégorie d'études porte sur des études de processus dans des configurations volontairement simplifiées. L'établissement puis l'érosion de la couche d'inversion sont étudiées sur une géométrie idéalisée de vallée au dessus d'un sol homogène. La faible largeur des vallées alpines donne un rôle particulier aux vents anabatiques dans la déstabilisation des couches d'inversion. Des couplages entre dynamique et photochimie sont réalisés sur sol plat homogène dans une configuration idéalisée de couche limite purement convective. La figure 2 montre ainsi la distribution des différentes espèces chimiques en

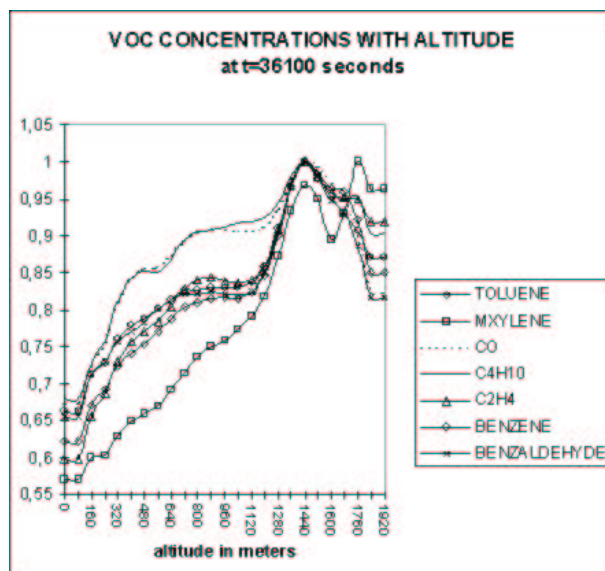


Figure 2: Concentration de Composés Organiques Volatils en fonction de l'altitude Normalisation en ppb: TOLUENE : 3,14 ; MXYLENE : 0,34 ; CO : 514,14 ; C4H10 : 0,28 ; C2H4 : 3,08 ; BENZENE : 3,6 ; BENZALDEHYDE : 0,12

fonction de l'altitude à 5 heures de l'après midi en été.

La deuxième catégorie d'études porte sur des sites réels, tenant compte du détail du relief et de la diversité de nature du sol. Un des objectifs du projet POVA (pollution des vallées alpines) est la production de scénarios couplés dynamique atmosphérique - photochimie pour les vallées de Chamonix et de Maurienne. Des vents de pente et de vallée s'établissent sous le seul effet du réchauffement du sol. Un module de suivi d'un vecteur de traceurs scalaires passifs non réactifs a été introduit dans le code ARPS, on voit sur la figure 3 une isoconcentration, en fin de matinée, de traceurs émis respectivement au centre de Chamonix et à la sortie du tunnel. Ces scalaires passifs sont non seulement de bons traceurs des circulations atmosphériques mais sont aussi représentatifs d'espèces chimiques lentement réactives, telles que CO.

Références :

Kerbiriou, M.A., Brulfert, G., Chollet, J.P., Staquet, C., 2002, Atmospheric dynamics in narrow valleys, 9 the European turbulence conference, Southampton

Chollet J.P., Brulfert G, 2002, Photochemistry in a Convective Layer and in Narrow Valleys, international symposium on transport and air pollution, Graz, edited by P. Sturm, S. Minarik, Publ. VKM-THD Mitteilungen, p. 309-314

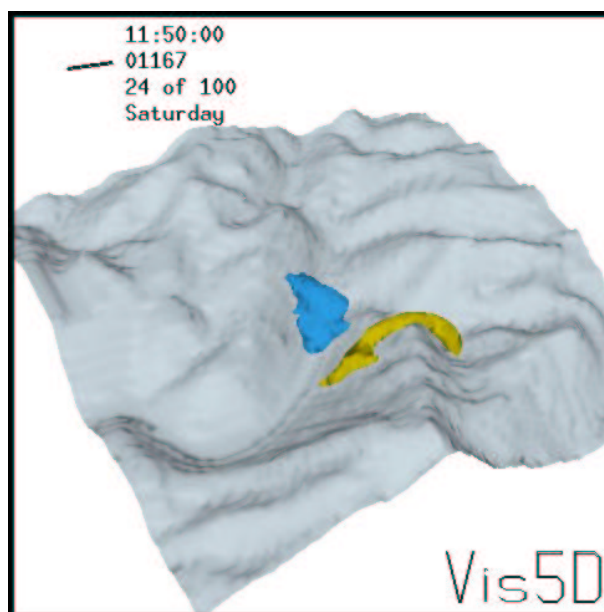


Figure 3: Iso surface de concentration de scalaire passif en vallée de Chamonix

4.3 Couplage météorologie-hydrologie (LTHE - Christophe Mes-sager)

Dans le cadre du couplage météorologie-hydrologie l'agrégation et la désagrégation des flux à l'interface des deux modèles imposent une connaissance des surfaces de recouvrement entre les grilles de ces modèles. Ces grilles sont souvent de formes très différentes (quadrilatère pour les modèles météorologiques et parfois quelconque pour les modèles hydrologiques) et il est donc nécessaire de posséder un outil permettant de calculer ces recouvrements dans un même espace (au sens mathématique du terme) et ceci avec une grande précision (complètement liée à la taille des plus petites mailles). Ce pré-traitement comporte donc deux aspects importants, la description des maillages à la fois dans un espace plan ayant une métrique Euclidienne, et dans un espace courbe à géométrie non-Euclidienne, et le calcul du recouvrement dans un même espace avec une métrique identique.

La détermination du **maillage hydrologique** dépend de beaucoup du type de modèle choisi. Ici nous supposons que le ou les modèles hydrologiques utilisés auront des mailles déterminées par des critères topographiques, géologiques ou d'occupation des sols (ou les trois à la fois). Toutefois, cela n'impose aucune condition a priori sur la forme de ces mailles (polygones quelconques ou contours fermés). En effet, le SIG (Système d'Information Géographique) permet d'échantillonner un contour quelconque par un quadrillage de fine résolution à partir duquel on peut définir des surfaces élémentaires qui servent ensuite à la détermination des recouvrements.

A l'aide d'un SIG (Système d'Information Géographique), ici en l'occurrence GRASS (Geographic Resources Analysis Support System), l'utilisation d'un modèle numérique de terrain (MNT)

permet de déterminer les bassins versants et leurs sous bassins. On peut alors extraire chaque bassin versant et définir alors son maillage.

Le maillage météorologique est défini dans l'espace géographique avec les coordonnées latitude, longitude, par construction le maillage est carré.

Pour déterminer les surfaces de recouvrement, il faut alors ramener les deux maillages dans un même espace car les deux maillages sont dans des systèmes de coordonnées différents.

Projection dans un espace Euclidien Coordonnées UTM (Universal Transverse Mercator) "dérivée ". Le calcul des surfaces de recouvrement est très délicat à effectuer dans des géométries non Euclidiennes (espace à courbure variable comme c'est le cas du géoïde terrestre), il apparaît donc plus aisé d'effectuer des projections dans un espace Euclidien où la quadrature des polygones est triviale (en effet, c'est cette quadrature qui permet de calculer très aisément des aires de polygones quelconques). La projection est un problème classique de cartographie, toutefois il est ici primordial de bien choisir la méthode de projection et de l'adapter au problème. Pour ce calcul de recouvrement, il est nécessaire d'avoir une projection de type conforme (respect des angles) mais aussi équivalente (conservation des surfaces) et équidistante (conservation des distances). Aucune projection ne peut répondre à ce souhait universel. Toutefois, il apparaît que la projection de Mercator transverse (conforme) puisse répondre à ces besoins moyennant quelques "aménagements " et des conditions d'utilisation strictes. C'est donc cette projection : UTM " dérivée " qui a été utilisée pour projeter les deux maillages dans un espace à géométrie Euclidienne muni d'un système de coordonnées cartésiennes.

Le calcul des aires des différentes fractions de la maille hydrologique contenue dans les mailles météorologiques est alors simple mais complexe algorithmiquement étant donné le grand nombre de cas à englober. Un algorithme utilisant la notion d'intersection et la nature des polygones permet de calculer plus rapidement la quadrature de ces polygones et ainsi en déduire leurs aires. Cette méthode est à utiliser pour chaque maille hydrologique. A la fin de ce travail, on connaît la surface que prend chaque maille hydrologique dans les mailles météorologiques.

Précision de la méthode Pour notre projet Lmeteo=40km et Lhydro peut varier de la centaine de mètres à un kilomètre. Pour des mailles hydrologiques ayant des longueurs caractéristiques du kilomètre la précision de conservation des distances est de l'ordre de la dizaine de centimètre ; et du mètre pour les mailles météorologiques. Il en résulte une très faible erreur sur les surfaces, 3km² sur 1500km² pour les mailles météorologiques et 0.0008km² sur 1km² pour les mailles hydrologiques.

Conclusion: Cette chaîne de pré-traitement permet de connaître la fraction des mailles hydrologiques sous les mailles météorologiques. La méthode assure une grande précision dans le positionnement des mailles et le calcul des surfaces, absolument nécessaire pour le couplage et pour des mailles hydrologiques très petites devant les mailles

météorologiques. Cet outil indispensable pour le couplage est néanmoins “gourmand” en CPU puisqu’il requiert environ 1 seconde de calcul par maille hydrologique sur une Origin 2100. Toutefois ce calcul est à faire une seule fois.