

**CIMENT**  
**Calcul Intensif, Modélisation,**  
**Expérimentation Numérique et**  
**Technologique**

**Rapport d'activité – 2003**

**Laurent Desbat**  
**Université Joseph Fourier**  
**Grenoble.**

**TIMC-IMAG, UMR CNRS 5525,**  
**In<sup>3</sup>S, Faculté de Médecine, UJF**  
**38706 La Tronche**  
**04 76 54 96 00**  
[Laurent.Desbat@imag.fr](mailto:Laurent.Desbat@imag.fr)



# 1 Introduction

## 1.1 Origines du projet

Le projet CIMENT regroupe les Universités scientifiques grenobloises, l'Institut National Polytechnique de Grenoble, l'Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique, l'Université Joseph Fourier, en particulier l'institut d'Informatique et de Mathématiques Appliquées de Grenoble et l'Observatoire de Grenoble. Son objectif est de favoriser l'accès aux moyens de calcul pour la modélisation numérique des phénomènes mathématiques, physiques, chimiques ou biologiques. Bien entendu, cet accès concerne en premier lieu les centres de calcul nationaux :

- Les laboratoires ont recours aux centres de calcul nationaux (IDRIS, CINES).
- Notre participation et notre soutien au partenariat régional avec le CEA nous donne un accès au centre de calcul du CEA civil.

Cependant,

- afin de décharger les centres de calcul nationaux de la mise au point des algorithmes parallèles ou exploitant finement les architectures superscalaires ou vectorielles,
- afin de maintenir le développement d'une expertise locale du calcul intensif,
- afin d'encourager les échanges entre les spécialistes de l'informatique distribuée et les utilisateurs dont les projets de recherche dépendent de moyens de calcul intensifs,
- afin de diffuser les techniques de modélisation et du calcul intensif au sein des communautés qui n'y sont pas familiarisées alors que leurs problématiques scientifiques s'ouvrent maintenant largement vers le calcul numérique intensif (c'est particulièrement le cas dans le domaine des sciences du vivant, biologie, génétique, santé),

nous avons développé des plates formes méso-informatiques pour la modélisation scientifique, l'expérimentation numérique et technologique. Il s'agit des projets de plates-formes :

- **SCCIOG (Service Commun de Calcul Intensif de l'Observatoire de Grenoble)**, responsable scientifique : Pierre Valiron et responsable technique : Françoise Roch
- **MIRAGE (Méso-Informatique Répartie pour des Applications en Géophysique et en Environnement)**, responsable scientifique : Eric Blayo et responsable technique : Laurence Viry
- **CECIC (Centre d'Expérimentation pour le Calcul Intensif en Chimie)**, responsable scientifique : Serge Perez et responsable technique : Pierre Vatton
- **BioIMAGE (Biologie Informatique, Imagerie, Modélisation et Analyse Génétique)**, responsable scientifique : Laurent Desbat et responsable technique : Nicolas Capit.
- **Grappe de 200PC** de la communauté de l'informatique et du parallélisme, responsable scientifique : Denis Trystram et responsable technique : Philippe Augerat et Nicolas Capit.
- **PhyNum (Physique Numérique)**, responsable scientifique : Alain Pasturel et responsable technique : Françoise Berthoud.

En effet, des regroupements de laboratoires ont démontré que des projets de calcul intensif, basés sur des matériels de type intermédiaire entre les machines des centres nationaux et les petits équipements des laboratoires, pouvaient très efficacement répondre à des besoins de calcul. Le **SCCIOG** et la plate forme **MIRAGE** en sont de parfaits exemples. La modélisation et le calcul intensif induisent de nombreuses collaborations entre biologistes, chimistes, mathématiciens, médecins, numériciens, physiciens. CIMENT offre un séminaire semestriel pour favoriser ces échanges. Chaque séminaire est organisé conjointement par deux pôles CIMENT. Notre dernier séminaire, organisé par PhyNum et BioIMAGE, traitait des méthodes

de Monte Carlo pour la physique et la biologie. Notre prochain séminaire est organisé par le CECIC et le SCCIOG : il concernera la chimie quantique. De plus, la mise en commun de compétences et leur coordination permet des économies d'échelle et contribue à une meilleure cohérence et performance globale. Nous citons par exemple le CRIP (*Centre de Ressources Informatiques et de Proximité*) de l'UJF dirigé par Jacques Eudes et la structure RMI (Réseau et Moyens Informatiques) de l'IMAG dirigé Pierre Laforgue.

Pour toutes ces raisons, nous avons demandé depuis le printemps 1998 aux utilisateurs de nos universités d'exprimer leurs besoins en matière de calcul et d'élaborer des projets associés. Cette enquête a permis de confirmer l'intérêt fort de la communauté scientifique Grenobloise pour le calcul intensif. L'UJF a donc mis le thème du calcul intensif comme prioritaire dans le Contrat de Plan Etat Région. En 1999 deux projets ont obtenu un soutien du MENRT (dans le cadre de l'appel à projet de Guy René Perrin, pour l'équipement en matière de calcul) et du COMI CNRS : *Le SCCIOG (Service Commun de Calcul Intensif de l'Observatoire de Grenoble)* autour d'une solution IBM (hexa-pro et quadri-pro) et la plate forme *MIRAGE (Méso-Informatique Répartie pour des Applications en Géophysique et en Environnement)* autour de bi-pro alpha distribués sur le campus. Fin 2001, le projet *CECIC (Centre d'Expérimentation pour le Calcul Intensif en Chimie)* a démarré son activité autour de deux machines multi-processeurs (IBM et SGI). Le projet *BioIMAGE (Biologie Informatique, Imagerie, Modélisation et Analyse Génétique)* a débuté la mise en place d'une grappe de 24 bi-processeurs Athlon en mars 2002 (avec un début effectif du projet en octobre 2002 suite à un problème de ventilation sur les processeurs et un hébergement provisoire à l'Observatoire en attendant un déménagement définitif vers le pavillon D). Le projet *PhyNum (Physique Numérique)* a mis en place en octobre 2002 une grappe de 40 bi-processeurs Athlon. Ce projet est hébergé à l'Observatoire de Grenoble dans le cadre de la transformation (soutenue par CIMENT) d'une salle de terminaux en une informatique au *SCCIOG*. Enfin, après être entré au TOP 500 des supercalculateurs, la *Grappe de 200PC* (104Bi-pro ItaniumII HP) hébergée à l'INRIA vient de démarrer.

## 1.2 Réalisations transversales actuelles

L'objectif du projet CIMENT est de coordonner, au sein de nos universités, les projets de calcul et de modélisation avec le développement des réseaux, avec l'attribution de postes d'ingénieur en informatique, de veiller à une bonne articulation de ces projets avec le développement des moyens de calcul nationaux, de développer des formations associées (techniques du calcul intensif, modélisation numérique, administration de grappes,...), de favoriser les collaborations techniques et scientifiques entre les différents projets.

Pendant cette première phase de développement des projets CIMENT nous avons:

1. Donné, au niveau du campus, une priorité aux projets CIMENT pour le déploiement des réseaux rapides (GigaBit). Le CRIP met en place une migration du réseau fédérateur de l'UJF de la technologie 10/100 vers la technologie 100/1000. Cette évolution nécessite la pose à certains endroits (contraintes de distance) de fibres monomodes et le déploiement de matériels actifs de technologie "Gigabit". Les projets de calcul intensif bénéficient du déploiement de ces technologies.
2. Mis en place un Conseil Scientifique qui joue le rôle de comité de suivi et de pilotage du projet CIMENT (Les trois premières réunions ont eu lieu le 28 septembre 2000, le 27 septembre 2001 et le 13 janvier 2003, cf. <http://ciment.ujf->

- grenoble.fr. La prochaine réunion du CS a lieu le 26 janvier 2006 et sera l'occasion d'une inauguration du projet).
3. Mis en place un séminaire semestriel (cf. <http://ciment.ujf-grenoble.fr>) sous forme de demi-journées thématiques organisées par deux pôles du projet CIMENT. La dernière demie-journée fut organisée par *PhyNum* et *BioIMAGE* sur les méthodes de Monte Carlo pour la Physique et la biologie (responsables de l'organisation : F. Berthoud et L. Desbat). Le prochain concernera la chimie quantique et sera organisé par le *CECIC* et le *SCCIOG*.
  4. Soutenu le projet *MIRAGE* par la création d'un poste d'Ingénieur de Recherche UJF. Au niveau de la politique d'attribution des postes, l'UJF retient comme critère d'affectation l'aspect fédérateur des projets. Les projets de calcul intensifs mettent en commun des moyens et des compétences. Ils bénéficient donc du soutien de l'UJF en matière de postes d'ingénieurs. Les postes d'ingénieurs pour la mise en place et le maintien des matériels et logiciels restent un point dur du projet CIMENT malgré les soutiens des différents organismes. Après un soutien de l'INPG, Philippe Augerat a obtenu un poste d'IR CNRS affecté au laboratoire ID. Françoise Berthoud a obtenu un poste d'IR CNRS. Ces promotions montrent la qualité des ingénieurs impliqués dans nos projets. Le poste d'AI CNRS affiché comme AFIP pour le laboratoire TIMC avec le soutien de l'IMAG n'a pas été pourvu. Il aurait pu permettre à Guy Bourrel (qui a été promu CR1 par le CNRS il y a 2 ans) de dégager plus de temps pour le projet *BioIMAGE*. En 2003 la situation s'est tendue au niveau de la disponibilité des ingénieurs sur les projets CIMENT. D'une part, Philippe Augerat consacre la majorité de son temps à des activités de valorisation (la valorisation des technologies logicielles de clustering est un succès de l'Informatique Distribuée, mais l'absence de Philippe Augerat fragilise CIMENT). L'INRIA a affecté un de ses ingénieurs à la mise en place et la maintenance de la grappe de 104 bi-pro ITANIUM qu'il héberge. D'autre part, l'augmentation des charges des ingénieurs dans le cadre de l'installation du laboratoire TIMC à l'In3S a conduit à l'abandon de Guy Bourrel du projet *BioIMAGE*. Ces projets, fragilisés, ont profité pleinement de la structure CIMENT. D'une part, Françoise Berthoud (*PhyNum*) et Françoise Roch (*SCCIOG*) ont participé à la jouvence logicielle de *BioIMAGE* après son déménagement à l'In3S, d'autre part Nicolas Capit, ingénieur expert UJF du projet CiGri, a pris la responsabilité du projet *BioIMAGE* et de l'interface projet de grappe de 200PC. Enfin, un projet de grappe de bi-xeon au *CECIC* a profité du soutien des mêmes ingénieurs CIMENT. Nous maintenons donc une demande de soutiens en poste d'ingénieur pour ce projet. La solution que nous proposons actuellement est la suivante : il faut mettre en commun le poste d'ingénieur UJF affecté en soutien au démarrage de *MIRAGE* d'une part, il faut prévoir d'autre part un recrutement d'ingénieur pour le maintien de la gille de calcul grenobloise mise en place et gérée par Nicolas Capit (Ingénieur Expert UJF en CDD jusqu'en novembre 2004).
  5. Contribué à la structuration des projets de calcul au niveau des universités grenobloises. Ainsi, le projet « Couplage modélisation hydrologique et météorologique » de G.M. Saulnier et B.Galabertier, s'est associé au projet *MIRAGE*. Les projets d'analyse génétique spatialisée de Taberlet et de biologie informatique se sont associés au projet d'imagerie médicale pour donner le projet *BioIMAGE*. Le projet *PhyNum* s'est associé au *SCCIOG* : il est hébergé à l'Observatoire (CIMENT a soutenu les travaux de bâtiment pour la transformation de salles de terminaux en une salle informatique à l'Observatoire de Grenoble). Enfin, l'Observatoire a hébergé le projet *BioIMAGE* d'octobre 2002 à octobre

2003, en attendant le déménagement de TIMC vers le pavillon D. L'intérêt de tels regroupements est évident en terme d'économie d'échelle engendrée mais aussi en terme d'interactions techniques et scientifiques qu'ils favorisent. Enfin, le projet de calcul de la communauté des chimistes a été un élément structurant qui a conduit à la création du **CECIC**. La structuration des projet calcul se poursuit actuellement dans le cadre de

- La mise en commun de la seconde tranche matérielle de PhyNum et BioIMAGE dans le cadre de la seconde tranche de leur opération : un appel d'offre commun sera mise en place début 2004 et le matériel acquis sera en partie partagé.
  - Le projet de mise en place d'une plate forme interdisciplinaires de chimie théorique d'une part et d'une plate forme de modélisation et calcul d'autre part en fin de contrat de plan état Région.
6. Accueilli le CINES à Grenoble le 22 octobre 2002. Une collaboration a été envisagée autour de la formation. Nous avons participé à la journée CINES-IDRIS de l'automne 1999 par un exposé du projet de CIMENT et plus particulièrement du **SCCIOG**, ainsi qu'à celle de l'automne 2000.
  7. Proposé une formation doctorale transversale au Calcul Haute Performance sous la forme de deux modules : une introduction aux concepts et outils du calcul distribué (architectures, optimisation de code, MPI, OPEN MP) d'une part et une formation à la modélisation et au calcul intensif d'autre part. Le second module s'appuie sur le premier pour proposer des TP de résolution de problèmes de physique, de chimie, etc., dont la modélisation numérique est présentée dans le cadre d'un cours précédent le TP. Nous avons eu dans chacun de ces modules une vingtaine d'étudiants en 2001-2002-2003. Ils devraient être reconduits 2004. l'accès des salles de TP informatique est la grande difficulté de l'organisation de ces cours hébergés par l'UFR IMA. Un projet de salle équipée en terminaux, pour l'enseignement doctoral, est prévu par le collège doctoral de l'UJF. CIMENT s'est associé à ce projet et le soutient.
  8. Mis en place des formations permanentes sur les méthodes du calcul distribué et intensif, le déploiement et l'administration de grappes. L'évolution des matériels informatiques, des logiciels, des réseaux, la mise en commun de plus en plus fréquente des ressources informatiques et algorithmiques ainsi que le développement de l'informatique distribuée ont fait apparaître de nouvelles techniques assurant la performance et un certain nombre de critères de qualité d'une application de calcul scientifique. Des formations autour de la modélisation numérique et de ces nouvelles techniques sont proposées dans le cadre du projet CIMENT. Dans le cadre de la formation des personnels, une formation a été organisée par des ingénieurs de CIMENT (L. Viry, F. Roch, F. Berthoud et C. Robert) dans le cadre des universités d'automne (20-24 octobre 2003). Elle s'est adressée à des ingénieurs et des chercheurs Universitaires ou CNRS utilisant l'informatique au travers de la modélisation et de la simulation numérique. Les thèmes suivants ont été traités :
    - \* Analyse de performances, optimisation, outils de développement
    - \* Langages de programmation - programmation objets
    - \* Bibliothèques mathématiques
    - \* Parallélisme (Généralités, programmation parallèle par échange de messages MPI, OpenMP, ...)

Cette formation, nationale, a été suivie par une vingtaine de personnes en 2003. Son bilan est extrêmement positif. Toutes les demandes n'ayant pu être satisfaites,

une nouvelle formation du même type est planifiée à l'automne prochain (organisée soit dans le cadre d'une université d'automne, soit dans le cadre de la formation permanente du CNRS), ouverte à un public plus large.

Une formation à l'administration des grappes de PC a été mise en place par Philippe Augerat, du laboratoire ID, dans le cadre de la formation permanente CNRS.

9. Construit une grille légère pour le calcul paramétrique sur les plates formes CIMENT. L'objectif de ce projet de l'ACI-GRID (projet CiGri : CIMENT GRID) débuté en novembre 2002, est de réaliser en 2 ans une grille CIMENT pour l'expérimentation des calculs de type Monte Carlo ou paramétriques. La première version de CiGri est en cours de tests sur des applications réellement dimensionnantes. Nous développons spécifiquement cette partie dans le court rapport d'activité technique CiGri.

### 1.3 Point financier

La Région Rhône Alpes, la Metro et la Ville de Grenoble, se sont engagées à solder leurs financements d'équipement du projet meso-informatique CIMENT du CPER début 2004. Ces financements nous permettront de mettre en place les jouvences nécessaires des plates formes **SCCIOG** et **MIRAGE** ainsi qu'une petite grappe pour le projet CECIC. Enfin, le solde de l'engagement de l'Etat (290k€) permettra de soutenir un projet de plate forme interdisciplinaire pour la chimie théorique d'une part et une plate forme interdisciplinaire pour la modélisation en environnement et santé.

Financements en k€	Première tranche			Seconde tranche	
	2001	2002	2003	2004	2005-2006
Projets					
Grappe de PC	564	24			
CECIC	229			50	
Physique numérique		192	37		
BioIMAGE	106		169		
Jouvences					
SCCIOG		16	4	289	
MIRAGE		17		212	
Plate forme Interdisciplinaire de Chimie Théorique					236
Projet BioIMAGE-MIRAGE modélisation et Calcul					143
Total			1358		930

Les petites sommes de la première tranche de SCCIOG et MIRAGE concernent respectivement le soutien aux travaux d'équipement d'une salle informatique (électricité, onduleurs, climatisation, insonorisation...) à l'Observatoire et le soutien à la maintenance du projet MIRAGE. Les 24k€ 2002 de soutien à grappe de PC concernent le doublement de l'espace disque de la grappe de 200PC demandé par les utilisateurs de CIMENT. Les 37 et 169 k€ 2003 de PhyNum et BioIMAGE concernent un appel d'offre qui sera mis en place en commun début 2004.

Dans la suite du document, nous présentons les rapports d'activité scientifique de tous les projets de CIMENT

- Le projet [SCCIOG, Service Commun de Calcul Intensif de l'Observatoire de Grenoble](#), en service depuis plus de 10 ans.
- Le projet [MIRAGE, Méso-Informatique Répartie pour des Applications en Géophysique et en Environnement](#), en exploitation depuis le début du CPER.
- Le projet [CECIC, Centre d'Expérimentation pour le Calcul Intensif en Chimie](#), en exploitation depuis 2ans
- Le projet [BioIMAGe, Biologie Informatique, Imagerie, Modélisation et Analyse Génétique](#), en exploitation depuis septembre 2002.
- Le projet [PhyNum, Physique Numérique](#), en exploitation depuis septembre 2002.
- Les projets de [grappe de 200 PC](#) qui vient de démarrer l'exploitation du icluster2, cluster HP de 104 bi-processeurs ITANIUM2.

Enfin, nous donnons en annexe un court [compte rendu de l'activité technique du projet CIMENT-GRID](#) débuté en novembre 2002.