

2.2.c - Demande d'un programme pluriformation Contractualisation / année 2004

A fournir en 4 exemplaires au Bureau des contrats pluriannuels DRA1

Etablissement : Université d'Orléans

demande faite à titre principal.

Direction(s) scientifique(s) de la MSU : DS1

Intitulé du programme pluriformation: **PPF** : 'Fédération des Moyens de Calcul du Campus Orléanais'

- Autre(s) établissement(s) formulant également une demande pour le même PPF :

----- à titre principal à titre secondaire

Mots-clés : Restructuration d'un secteur scientifique, simulation, parallélisme, calcul scientifique.

Responsable(s) :

M. / Mme	Nom	Prénom	Corps et Grade	Section C.N.U.
M	CORDIER	Stéphane	Professeur 2 cl.	26

J'autorise la diffusion de mon nom sur internet (annuaire des PPF).

- Adresses (postale, téléphonique, électronique et télécopieur) :

Localisation : UMR 6628 MAPMO , B.P. 6759, 45067 Université d'Orléans

Téléphone : 02 38 41 70 09..

Télécopie : 02 38 41 72 05..

Adresse électronique : Stephane.Cordier@univ-orleans.fr

DATE ET SIGNATURE DU RESPONSABLE DE LA DEMANDE :

DATE ET SIGNATURE DU RESPONSABLE DE L'ETABLISSEMENT DEMANDEUR :

Je donne mon accord à la présente demande.

Annexes à remplir par le responsable du PPF : PROJET SCIENTIFIQUE ; DEMANDE BUDGETAIRE ; LISTE DES EQUIPES CONCERNEES

Rappel des modes d'information des experts

Rubrique	Partie du dossier	Fichier à remonter sur serveur FTP	Saisie SIREDO
PPF	Identification administrative, approche financière et domaine scientifique		Non/Oui
	Projet scientifique et besoin en matériels	Oui	
	Liste équipes impliquées		Non/Oui

Présentation générale :

Cette demande de PPF est indépendante des projets de structures de fédérations de l'établissement même si certains laboratoires associés à cette demande font partie de ces fédérations (notamment la FR EPEE - qui existe et dont le renouvellement est demandé dans le nouveau quadriennal – et Fédération des sciences du vivant avec CBM et ICOA demandée dans le nouveau contrat d'établissement).

Ce projet est **transversal**. Il est par ailleurs porté par l'Ecole Doctorale Sciences et Technologies (EDST) qui offre déjà des modules de formation pour les doctorants sur le calcul haute performance (voir par exemple le module D21 de l'offre de formation <http://www.univ-orleans.fr/EC-DOCTORALE/ST/programmes.html>). Ce PPF comporte notamment un volet « formation », sur l'utilisation de nouveaux outils pour la parallélisation de codes, la répartition de charges, CORBA (voir paragraphe actions envisagées).

Des actions ont déjà été entreprises pour rapprocher quelques unes des différentes équipes participants à ce PPF, par exemple autour de la simulation de particules <http://dirac.cnrs-orleans.fr/simpao.html>, à l'initiative de G. Kneller, ou bien une réunion en mars 2003 entre la FR EPEE et le MAPMO à propos de la modélisation de la chimie rapide et détaillée (ou du moins la moins réduite possible) dans les codes de calculs d'écoulements turbulents. Il manque une organisation légère susceptible d'encourager et de pérenniser ces initiatives.

L'objectif de ce PPF est une réorganisation des moyens tant matériels qu'humains et d'encourager les interactions entre différents acteurs du calcul scientifique sur le campus orléanais, acteurs qui sont actuellement assez isolés.

Ce PPF permettrait d'accroître la cohérence et la complémentarité des investissements réalisés et à venir en terme de calculateurs. Actuellement, les différents projets sont conçus en totale indépendance et le campus dispose de 4 groupes de calculateurs (MPCB, EPEE, LIFO et ICOA, voir partie description des moyens existants). Ces 4 clusters ont des caractéristiques différentes (en terme de capacité de mémoire, de stockage, de bande passante).

Il serait souhaitable que les utilisateurs aient la possibilité de tester ou d'utiliser d'autres machines que celle de leur laboratoire pour une application pour laquelle la machine de leur laboratoire ne s'avérerait pas optimale.

L'existence de ces 4 clusters permet également d'expérimenter des utilisations de type GRID pour des applications telles que la simulation de dynamique moléculaire de protéines (CBM), d'écoulements turbulents (EPEE) ou de data-minig (LIFO)... L'équipement existant sera par ailleurs upgradé, dans le cadre de ce PPF, pour suivre l'évolution rapide des technologies (apparition de nouveaux processeurs 64 bits à bas coûts, par exemple).

Les nouvelles machines qui seraient acquises dans le cadre de ce PPF seraient installées notamment dans les locaux adaptés à cette fonction (ventilés, climatisés, normes anti-incendie...) qui sont disponibles au C.I.T.U. (le nom du C.R.I. D'Orléans) qui est dirigé par Henri Thuillier.

A terme, ce GRID au niveau du campus pourrait constituer un noeud dans un GRID plus ambitieux au niveau national, (voir même un mésocentre au sens de l'appel d'offre du Ministère sur le calcul intensif dirigé par Mme Roucairon à la direction de la recherche), voire à l'échelle européenne. Notons que le LIFO était l'un des acteurs de l'ACI GRID (et plus particulièrement ACI-GRID CARAML, sur le thème de la programmation déclarative parallèle, coordonné par G. Hains, voir <http://www.caraml.org/>) et que les recrutements récents au laboratoire MAPMO (un I.R. (E. LeGuirrec) et un C.R. (F. Filbet)) sont également intéressés par ces aspects (plus précisément au projet ACI-GRID TAG).

S'il est trop tôt pour préciser les spécifications techniques des machines, puisque l'objectif de ce PPF est, justement, que ces choix se fassent de façon concertée entre les différents utilisateurs participants, ce projet de 'fédération des moyens de calcul' vise au moins à un doublement des moyens actuels (soit environ 160 processeurs, voir paragraphe descriptif des moyens existants) sur 4 ans, soit environ 40 processeurs par an. Le montant de la demande pour cet équipement est de 100000 euros, par an dont la moitié dans le cadre du PPF et l'autre moitié par d'autres sources (région, CNRS et partenariats industriels notamment).

Ce PPF permettrait d'accroître la visibilité des équipes travaillant sur le calcul scientifique haute performance – tant en tant qu'activité de recherche principale qu'en tant qu'outil plus occasionnel. Une telle structure et sa visibilité faciliterait également les contacts avec les entreprises de la région, susceptibles d'avoir des besoins en calcul intensif. Cette visibilité nous autoriserait aussi, à terme, à nous positionner sur les demandes destinées aux mésocentres. Les mésocentres, sont des structures intermédiaire entre les centres de ressources nationaux (tels que l'IDRIS ou le CINES) et les moyens dont disposent les laboratoires : il n'existe pas pour le moment de tel mésocentre dans la région centre.

Ce PPF est, enfin, destiné à affirmer l'importance reconnue à l'université d'Orléans aux recherches liées aux simulations numériques.

Actions envisagées

Outre les points déjà évoqués :

- **l'achat, l'installation et la maintenance du matériel** (calculateurs et salle de formation) dont les spécifications seront précisées par le comité de pilotage du PPF,
- les **expérimentations de type GRID** à plusieurs échelles (sur le campus d'Orléans ou en tant que noeud d'un GRID national, lui-même faisant partie d'action à l'échelle européenne, voir par exemple l'expérience de l'ACI GRID),

il est prévu

–Organisation de **sessions de formations** ponctuelles (bi-annuelle, par exemple) et de séminaire réguliers (mensuel par exemple) afin de permettre aux différents utilisateurs de se rencontrer et d'être formé aux (nouveaux) outils utilisés sur telle ou telle architecture (MPI, PVM, OpenMP, CORBA, multithreading...). Notons que l'Ecole Doctorale Sciences et Technologies organise déjà un cours sur le calcul haute performance. Ces formations pourront être données par des personnels du campus ou en faisant appel à des personnalités extérieures,

–Mise en place d'une salle machine dédié aux utilisateurs de calculateurs haute performance (équipé de clients légers étant connectés sur les différents calculateurs du campus) et aux sessions de formation, sans doute en 2005,

–Création d'un site internet, qui sera mis en place très rapidement et permettra de diffuser des informations au fur et à mesure de l'avancement du projet. Une partie « intranet » permettra en outre de mettre en commun des documents « confidentiels » tels que les spécifications des projets à l'étude, les devis reçus, les sources de code non publics...). Le responsable de cette demande, S. Cordier, est par ailleurs « chef de projet WEB » de l'université et il a l'expérience de tels sites internet,

–Création d'une liste de discussion des utilisateurs de calcul scientifique (l'inscription à cette liste étant libre pour tous les personnels de l'université), pour faciliter la diffusion des connaissances, permettre à chacun de faire part des difficultés rencontrées et qui ont parfois été résolues dans le laboratoire voisin,

–Mise en place de facilités d'accès aux centres de calcul nationaux (IDRIS, CINES) en offrant une aide à la rédaction de demandes d'heures de calcul ou d'aide au portage de code sur supercalculateurs

–Des demandes de financements complémentaires pour l'équipement en calculateurs seront faites notamment auprès de la région centre, de partenaires industriels et du COMI (commission des moyens informatiques) du CNRS, sur des projets scientifiques précis.

–Une demande en personnel pour la gestion et la maintenance des nouveaux matériel acquis, par exemple un poste d'assistant ingénieur, placé sous la responsabilité collégiale du comité technique (voir «Organisation») sera faite pour la rentrée 2005,

Organisation proposée

Le comité de pilotage est constitué des directeurs des laboratoires associés à ce PPF (voir liste dans la rubrique laboratoires participants), des membres du conseil scientifique et des membres du comité de pilotage du CITU.

Le conseil scientifique est constitué d'un membre par laboratoire (voir liste dans la rubrique laboratoires participants). Il sera chargé de l'organisation scientifique des formations et des séminaires, des spécifications pour les différents achats entrant dans le cadre de ce PPF, avec l'aide technique du CITU et du comité technique.

Le comité technique sera chargé d'élaborer les cahiers des charges, d'étudier les différentes propositions des constructeurs, de maintenir une veille technologique, et, plus généralement, de conseiller le conseil scientifique. Il aura également pour rôle d'organiser la maintenance, les mises à jour et améliorations nécessaires pour que les calculateurs aient un fonctionnement optimal.

Un rapport d'activité sera réalisé, chaque année et transmis

–au président de l'université, Gérard Besson

- au vice-président recherche pour le conseil scientifique de l'université, Gérald Guillaumet
- au chargé de mission pour l'informatique , Henri Thuillier

Descriptif des moyens existants

Actuellement, les ressources matérielles pour le calcul scientifique haute performance à Orléans (Université et CNRS) sont constituées principalement des quatre équipements suivants

Cluster de la federation **EPEE**

(machines communes aux laboratoires LCSR, GREMI, LME, Aerothermie) : 48 processeurs

Cluster **MPCB** (= Mathématique, Physique, Chimie, Biologie)

(machines communes aux laboratoires CBM, MAPMO, CRMD) : 40 processeurs

Cluster **LIFO** : 32 processeurs

Cluster **ICOA** : 10 processeurs

Soit un potentiel de 130 processeurs (ce qui bien sur n'est pas très significatif mais donne une idée des moyens disponibles actuellement).

Liste des laboratoires associés à cette demande

- Centre de Biophysique Moléculaire (CBM)

<http://dirac.cnrs-orleans.fr/cluster.html>

UPR 4301 - directeur : Jean-Claude Beloeil

Resp. Scie. Gerald Kneller

Resp. tech. Konrad Hinsin

- Informatique (LIFO)

<http://www.univ-orleans.fr/SCIENCES/LIFO/>

FRE 2490 - directeur Gaetan Hains

Resp. Scie. Gaetan Hains

resp. tech M. Exbrayat

- Mathématique (MAPMO)

<http://www.univ-orleans.fr/SCIENCES/MAPMO/>

UMR 6628 - directeur Jean-Philippe Anker

Resp. Scie. Stephane Cordier

Resp. Tech. Emmanuel Leguirriec

- Energétique, espace, environnement (EPEE)

<http://web.cnrs-orleans.fr/~webepee>

FR 0776 - directeur Iskender Gokalp

4 laboratoires de la FR EPEE sont associés à cette demande (Nom, Sigle, Directeur)

-Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs (LCSR, UPR 4211) : Iskender GOKALP

-Laboratoire d'Aérodynamique (UPR 9020) : Jean-Pierre MARTIN

-Groupe de Recherches sur l'Energétique des Milieux Ionisés (GREMI, UMR 6606) : Claude FLEURIER

-Laboratoire de Mécanique et d'Energétique (LME) : Jacques HUREAU

resp. Scie.

Ivan Fedioun (LCSR),
Pascalt Brault (GREMI),
Boujema Izrar (Aérothermique),
Christophe Brun (LME)
resp. Tech. Claude Legentil (Aérothermique) et Michel Roblain (LCSR)

- Chimie (ICOA)

<http://www.univ-orleans.fr/SCIENCES/ICOA/>
UMR 6005 : directeur G. Guillaumet
Resp. Scien. Luc Morin-Allory
Resp. tech. C. Marot

Notons que les différents partenaires dépendent de nombreux départements du CNRS (SPM pour MAPMO, SPI pour EPEE, SC pour le CBM et l'ICOA, STIC pour le LIFO) et que tous ces laboratoires sont également associés à l'école doctorale Sciences et Technologies.

Liste de publications

MAPMO

C. Buet, S. Cordier, P. Degond, M. Lemou, "Fast algorithms for numerical conservative and entropic approximations of the Fokker-Planck-Landau operator", Journal of Computational Physics, vol 133, p. 1036-1053, (1997).

C. Buet, S. Cordier et F. Filbet " Comparison of numerical schemes for Fokker-Planck-Landau equation, <http://www.emath.fr/Maths/Proc/Vol.10/>, ESAIM Proc., Vol 10 - CEMRACS 1999, p 161-181, (2001).

F. Filbet, L. Pareschi, A numerical method for the accurate solution of the Fokker-Planck-Landau equation in the non homogeneous case. Published in J. Comp. Phys. Volume 179, Number 1 pp. 1-26 (2002)

F. Filbet, E. Sonnendrucker and J.-L. Lemaire, Direct Axisymmetric Vlasov Simulations of space charged dominated beams. Published in Lecture Notes in Computer Sciences, ICCS 2002, part 3, pp 305--314 (2002)

F. Filbet, E. Sonnendrucker. Comparison of Eulerian Vlasov Solvers. Published in Comp. Phys. Comm., Volume 150, Number 3 pp. 247-266 (2003)

CBM

G.R. Kneller, K. Hinsén
Computing memory functions from Molecular Dynamics simulations
J. Chem. Phys. 115, 11097-11105 (2001)

G.R. Kneller, K. Hinsén, G. Sutmann
Mass and size effects on the memory function of tracer particles
J. Chem. Phys. 118, 5283-5286 (2003)

K. Hinsén, H.P. Langtangen, O. Skavhaug, A Odegard
Using BSP and Python to Simplify Parallel Programming
accepted by Future Generation Computer Systems

Rog, T., Murzyn, K., Hinsén, K., & Kneller, G., nMoldyn :
A Program Package for a Neutron Scattering Oriented Analysis of Molecular Dynamics Simulations.
Journal of Computational Chemistry, 24(5), 657-667 (2003).

Brutovsky, B., Mulders, T., & Kneller, G.
Accelerating molecular dynamics simulations by linear prediction of time series.
Journal of Chemical Physics, 118(14), 6971-6987 (2003).

ICOA

Vangrevelinghe, E. ; Breton, P. ; Bru, N. ; Morin-Allory, L. Molecular modelling of poly-methylidene malonate 2.1.2) using a continuum solvation approach Polym. Int. 1999, 48, 406-413.

Baurin, N. ; Vangrevelinghe, E. ; Morin-Allory, L. ; Mérour, J. Y. ; Renard, P. ; Payard, M. ; Guillaumet, G. ; Marot, C. 3D-QSAR CoMFA study on imidazolinerigic I2 ligands: a significant model through a combined exploration of structural diversity and methodology J. Med. Chem. 2000, 43, 1109-1122.

Bonnet, P. ; Jaime, C. ; Morin-Allory, L. a-, b-, and g-Cyclodextrin dimers. Molecular modeling studies by molecular mechanics and molecular dynamics simulations J. Org. Chem. 2001, 66, 689-692.

Bonnet, P. ; Jaime, C. ; Morin-Allory, L. Structure and thermodynamics of a-, b-, and g-cyclodextrin dimers. molecular dynamics studies of the solvent effect and free binding energies J. Org. Chem. 2002, 67, 8602-8609.

Antonopoulos, A. ; Bonnet, P. ; Botek, E. ; Debrun, J. L. ; Hakim, B. ; Herbreteau, B. ; Morin-Allory, L. Study of the attachment of Na⁺ on glucose and on some of its methylated derivatives Rapid Commun. Mass Spectrom. 2003, 17, 122-125.

LIFO

Mostafa Bamha, Matthieu Exbrayat. Pipelining a Skew-insensitive Parallel Join Algorithm. In Second International Workshop on High Level Parallel Programming and Applications (HLPP 2003), Paris, June, 16-17, 2003

Blanc, M., Francillon, O., Toinard, C. Collaborative and Distributed Simulation through a Reflective XML Middleware. 4th Int. Symp. On Collaborative Technologies and Systems. Conf. proceed. published by the Society for Modeling and Simulation International. ISBN: 1-56555-258-X, pp. 178-182, 2002

A. Merlin, G. Hains, La Machine Abstraite Catégorique BSP, Journées Francophones des Langages Applicatifs (JFLA 2002), INRIA, january 2002

M. Bamha et G. Hains, A skew-insensitive algorithm for join and multi-join operations on Shared Nothing machines, DEXA 2000, Springer LNCS no.1873, 2000.

M Bamha, F. Bentayeb et G. Hains, An efficient scalable parallel view maintenance algorithm, for shared nothing multi-processor machines, DEXA'99, Springer LNCS no.1677, 1999.

EPEE

LARDJANE N., FEDIOUN I., GÖKALP I., 2001 : *Evaluation of subgrid-scale magnitude in L.E.S. of large density ratio mixing layers*. IUTAM Symposium on Turbulent Mixing and Combustion, Queen's University at Kingston, Canada, June 03-06, 2001

LARDJANE N., FEDIOUN I., GÖKALP I., 2001 : *Direct numerical simulation of binary mixing layers with large density ratio*. 2nd International Symposium on

Turbulence and Shear flow phenomena (TSFP-2), KTH, Stockholm, Sweden, June 27-29, 2001

FEDIOUN I., LARDJANE N., GÖKALP I., 2001 : *Revisiting numerical errors in direct and large eddy simulation of turbulence : physical and spectral spaces analysis*. Journal of Comp. Phys., **174**, pp 816-851

LARDJANE N., FEDIOUN I., GÖKALP I., 2002 : *Accurate initial conditions for the direct numerical simulation of temporal compressible binary shear layers with high density ratio*. Soumis à Computers & Fluids

Personnes concernées (liste non exhaustive, ordre alphabétique)

- M. Bamha (LIFO)
- P. Brault (GREMI)
- C. Brun (LME)
- S. Cordier (MAPMO)
- M. Exbrayat (LIFO)
- I. Fedion (LCSR)
- F. Filbet (MAPMO)
- I. Gokalp (LCSR)
- V. Gouranton (LIFO)
- G. Hains (LIFO)
- K. Hinsén (CBM)
- B. Izrar (aero)
- F. James (MAPMO)
- G. Kneller (CBM)
- E. Leguirriec (MAPMO)
- E. Melin (LIFO)
- L. Morin-Allory (ICOA)
- J.L. Rouet (MAPMO)
- C. Toinard (LIFO)
- H. Thuillier (LIFO)

C2.1 - Liste des achats de matériels souhaités pendant la durée du contrat (en euros, montants H.T.)

Descriptif et nombre	Coût unitaire	Sources de financements (1)	Montants
Moyens de calcul (160 processeurs en 4 étapes sur 4 ans)	2500	Cette demande : 40% CNRS- COMI : 30% (D) Région : 20% (D) Partenaires industriels : 10% (D)	400000 (dont 160.000 pour ce PPF)
Salle de Formation 15 postes	2000	Cette demande	30000
Salle de formation : Serveur et matériel de vidéoprojection	1000	Cette demande	10000
Total			440.000 (dont 200.000 pour ce PPF)

(1) Préciser les cofinancements et s'ils sont Demandés ou Acquis

C2.2 - Demande budgétaire (en euros, montant H.T.)

Type de crédits	2004	2005	2006	2007
Equipement et moyens de calcul	60.000	60.000	40.000	40.000
Fonctionnement (Hors infrastructures)	2000	2000	3000	3000
Vacations				
<i>Pour information : Crédits CPER attendus</i>				
Part Etat :				
<i>Pour information : Crédits CPER attendus</i>				
Part Collectivités :				

Les dotations contractualisées sur 4 ans sont récurrentes. Toutefois l'établissement pourra faire apparaître les modalités de réalisation du programme demandé ainsi que l'échéancier.

Le surcout des deux premières années est du aux équipements nécessaire à la salle de formation (40.000 euros). L'équipement en calculateurs se fera de façon régulière au rythme de 40.000 euros/an. Les dépenses de fonctionnement seront un peu plus élevées lorsque la salle de formation sera opérationnelle, mais il est nécessaire de commencer sans tarder à organiser des séminaires pour favoriser les interactions.

C3 - Liste des équipes participant au programme ou utilisatrices des équipements collectifs

décrits dans le programme

Identification de l'équipe (Type, Numéro, Intitulé)	Nom et prénom du responsable	DS
Laboratoire d'Informatique Fondamentale d'Orléans (LIFO, FRE 2490)	Gaetan HAINS	1
Mathématique Appliquée et Physique Mathématique d'Orléans (MAPMO, UMR 6628)	Jean-Philippe ANKER	1
Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs (LCSR, UPR 4211)	Iskender GOKALP	2
Laboratoire d'Aérodynamique (UPR 9020)	Jean-Pierre MARTIN	2
Groupe de Recherches sur l'Energétique des Milieux Ionisés (GREMI, UMR 6606)	Jean-Michel POUVESLE *	2
Laboratoire de Mécanique et d'Energétique (LME EA 1206)	Jacques HUREAU	4
Institut de Chimie Organique et Analytique (ICOA, UMR 6005)	Gérald GUILLAUMET	4
Centre de Biophysique Moléculaire (CBM, UPR 4301)	Jean-Claude BELOEIL	

* Directeur du GREMI à compter du 1^{er} janvier 2004