
InterCell

Simulateur interactif distribué pour le
calcul à grain fin large échelle

Proposition de projet MIS

Composition du document :

Partie I Contenu de la proposition.

Partie II Annexes.

Coordinateur : Hervé Frezza-Buet
(Herve.Frezza-Buet@supelec.fr)

13 février 2007

Table des matières

I	Présentation synthétique du projet	7
1	Équipes impliquées	9
1.1	Informatique	9
1.2	Physique	9
1.3	Mathématiques	10
1.4	Personnes impliquées	10
2	Objectifs scientifiques	11
2.1	Motivations	11
2.1.1	Nécessité et intérêt de localiser les calculs	11
2.1.2	Domaines concernés	11
2.1.3	Développement aisé sur plateforme parallèle interactive	12
2.2	Réalisations antérieures et besoins existants	12
2.2.1	Réalisations antérieures	13
2.2.2	Besoins existants	13
2.3	Collaborations existantes	14
2.3.1	Cortex + Supélec	14
2.3.2	Algorille + Supélec	14
2.3.3	LMOPS + Supélec	14
2.3.4	Algorille + LPMIA	15
3	Réalisations envisagées dans le cadre du projet	17
3.1	Comité scientifique du projet	17
3.2	Constitution d'un cluster interactif	17
3.3	Construction du simulateur	18
3.4	Expérimentations	18
3.4.1	Modélisation neuro-mimétique	18
3.4.2	Automatisation de la résolution d'équations aux dérivées partielles	20
3.4.3	Photo-réfractivité	20
3.4.4	Étude des plasmas	20
3.4.5	Optimisation des caractéristiques et de la propagation de lumière dans les nano-structures	21
3.5	Évaluation de performances	21
3.6	Retombées attendues	21
3.7	Road map	22
3.8	Critères de réussite	23
4	Financement d'un cluster interactif	25
4.1	Description du cluster	25
4.2	Coûts	25

II Compléments	31
A Présentation détaillée des partenaires	33
A.1 Équipe IMS de Supélec	33
A.2 Équipe Algorille du Loria	33
A.3 Équipe Cortex du Loria	33
A.4 Laboratoire Matériaux Optiques, Photonique et Systèmes - CNRS UMR 7132	34
A.5 Équipe « plasmas chauds » LPMIA	34
A.6 UMI 2958	35
B Enjeux pour les sciences physiques	37
B.1 LMOPS	37
B.1.1 Photo-réfractivité tridimensionnelle des semi-conducteurs	37
B.1.2 Modélisation 3D des structures semiconductrices multicouches	38
B.1.3 Problèmes de dérive des composants d'optique intégrée sur LiNbO_3 liés à des relaxations de charges engendrées par la polarisation de ces composants	38
B.2 LPMIA	38
B.3 UMI 2958	39
C Réalisations antérieures	41
C.1 Cortex	41
C.2 Supélec	41
C.3 Algorille	44
C.4 Escapade	44
D Expérience du site de Supélec pour l'hébergement de clusters	47

Cette proposition implique des partenaires de disciplines diverses, qui ont chacun des intérêts complémentaires à ce que le cluster que nous proposons voie le jour. La diversité des approches et des rôles de chacun conduit à un argumentaire pour le cluster articulé suivant divers points de vue. Afin de mettre en avant une vue synthétique du projet sans masquer la pluralité des contributions, nous avons choisi de présenter ce document en deux parties. La première, synthétique, présente une vue globale du projet et de ses enjeux, alors que la seconde, argumente plus finement les points abordés dans la première.

Première partie

Présentation synthétique du projet

1 Équipes impliquées

Nous montrerons en 2, que ce projet a une dimension pluridisciplinaire, rapprochant les domaines de la physique et de l'informatique, et impliquant au sein même de ces domaines des problématiques scientifiques différentes. Pour l'informatique en effet, l'étude de systèmes neuromimétiques est concernée, ce qui aura des retombées dans le domaine plus vaste des sciences cognitives. Toujours en informatique, sont également impliquées par le projet des recherches en parallélisme, aux enjeux et objectifs différents des premières. En ce qui concerne la physique, se retrouvent sur ce projet des domaines là aussi très différents, comme l'étude des plasma chauds, l'étude des composants optiques. L'ambition de ce projet est de rassembler ces problématiques autour d'une plate-forme matérielle et logicielle commune, de sorte que chacun des partenaires en présence, mais aussi dans le futur d'autres laboratoires, puisse tirer parti de cette mise en commun de matériel et de méthodes.

Une description plus détaillée des partenaires est donnée en [A](#) page 33.

1.1 Informatique

Les partenaires informaticiens sont au nombre de 3. Deux d'entre eux sont des équipes du Loria de Nancy, il s'agit des équipes Cortex et Algorille, et l'autre est l'équipe IMS de Supélec, basée sur le campus de Metz.

L'équipe Algorille et une partie de l'équipe IMS s'investit dans la réalisation d'architectures informatiques permettant de porter sur machines parallèle des calculs exprimés par des paradigmes « grain fin ». En effet, ces paradigmes mettent en avant des calculs légers qui communiquent intensément entre eux, alors que les architectures matérielles sont plutôt favorables aux calculs massifs, isolés sur chaque processeur, qui communiquent lors de phases ponctuelles de synchronisation.

L'équipe Cortex et une partie de l'équipe IMS s'investit dans l'étude des systèmes neuromimétiques, plus précisément dans l'étude des modèles informatiques des fonctionnalités du cortex cérébral. L'accent dans ces recherches est mis sur la validation sur plate-formes robotiques disponibles au Loria et à Supélec.

Enfin, l'équipe IMS contribue, avec le LMOPS, à la conception et à la mise en œuvre d'un algorithme de résolution d'équations aux dérivées partielles, « détournant » à cet effet des travaux réalisés pour l'expérimentation de modèles neuromimétiques.

1.2 Physique

L'une des retombées du projet est de proposer au domaine de la physique un environnement de simulation parallèle accessible avec un effort qui se limite le plus possible à l'effort de modélisation. Il nous apparaît donc essentiel d'impliquer dans la conception de la plate-forme des équipes qui en seront destinataires.

Ainsi, l'équipe « plasmas chauds » du LPMIA à Nancy travaille avec des modèles impliquant la discrétisation d'équations différentielles sur des espaces à 6 dimensions, conduisant à des maillages de l'ordre de la centaine de million de points. Le thème central de l'équipe est la modélisation et l'expérimentation numérique en physique des plasmas où les effets cinétiques sont dominants, en particulier dans les problèmes liés à l'interaction laser-matière et la fusion inertielle, la turbulence dans les plasmas de tokamaks et la fusion magnétique.

D'autre part, le LMOPS, à Metz, étudie les matériaux pour les composants optiques. Les modèles manipulés impliquent la discrétisation d'équations aux dérivées partielles sur un maillage tridimensionnel de l'espace, mais aussi une discrétisation du temps, dans la mesure où les effets non linéaires étudiés se basent sur la migration de porteurs de charges dans le matériau. Cette équipe est également impliquée, avec l'équipe IMS, dans la définition d'une architecture originale de résolution numérique d'équations aux dérivées partielles (EDP).

1.3 Mathématiques

La résolution des EDP, en particulier du système Vlasov-Maxwell utilisé par le LPMIA, nécessite une approche inter-disciplinaire entre mathématiciens, informaticiens et physiciens. Cette approche s'est concrétisée par un projet INRIA CALVI¹ pour le développement de nouveaux algorithmes, d'optimisation, de parallélisation du code et de décomposition de domaine.

1.4 Personnes impliquées

Les personnes impliquées sont les suivantes :

- IMS (Supélec) :
 - Stéphane Vialle : Algorithmique parallèle.
 - Hervé Frezza-Buet : Systèmes neuro-mimétiques et logiciel de résolution d'EDP.
 - Patrick Mercier : Installation et maintenance du cluster.
- Algorille (Loria) :
 - Jens Gustedt : Algorithmique parallèle.
 - Pierre-Nicolas Clauss.
- Cortex (Loria) :
 - Frédéric Alexandre : Systèmes neuro-mimétiques.
 - Nicolas Rougier : Systèmes neuro-mimétiques.
- LMOPS :
 - Nicolas Fressengeas : Matériaux photo-réfractifs et logiciel de résolution d'EDP.
 - Remy Claverie : Installation et maintenance du cluster.
 - Jean Paul Salvestrini : Modélisation.
 - Sidi Ould Saad Hamady : Modélisation.
- LPMIA :
 - Alain Ghizzo.
 - Pierre Bertrand.
 - Thierry Reveille.
 - Nicolas Besse.
 - Étienne Gravier.
- UMI-2958 :
 - Ali Adibi
 - Bertrand Boussert
 - Mohammed Cherkaoui
 - Michael McCracken
 - David McDowell
 - Steve McLaughlin
 - Abdallah Ougazzaden
- CALVI :
 - Simon Labrunie
 - Jean-Rodolphe Roche
 - Vladimir Latocha

¹<http://www-irma.u-strasbg.fr/annexes/calvi>

2 Objectifs scientifiques

2.1 Motivations

2.1.1 Nécessité et intérêt de localiser les calculs

La course à l'accélération des fréquences des processeurs arrive aujourd'hui à un point où la question de l'organisation spatiale des composants qui communiquent devient un critère limitant. En effet, au sein même d'un processeur, les différents modules électroniques qui s'échangent de l'information le font à une vitesse physiquement limitée à celle de la lumière, ce qui crée des latences dans ces communications. Ces problèmes de latence se manifestent bien sûr de la même façon si l'on étend les systèmes considérés de l'échelle du processeur à celle de machines mises en réseau.

Dans la mesure où la technologie a suffisamment avancé pour que se pose ce problème de latence des communications, la conception d'architectures informatiques se doit de tenir compte de ces effets, ce qui conduit à décentraliser la gestion du calcul, la ramenant à des calculs qui communiquent de préférence avec des composants qui leurs sont physiquement proches.

Il s'avère que dans certains domaines, la nature même des calculs se prête à la constitution d'architectures qui puissent exploiter la localisation sur le support physique, ce qui est une propriété dont on peut tirer parti dans un contexte où l'optimisation peut porter sur une gestion des temps de latence de communication. On a dès lors intérêt à poursuivre les efforts de modélisation des problèmes étudiés sous forme de calculs localisés.

2.1.2 Domaines concernés

En Lorraine, différentes équipes de recherche se sentent aujourd'hui limitées par la puissance de calcul que peut fournir la technologie. Parmi ces équipes, le présent projet réunit des équipes des domaines de la physique et de l'informatique.

En informatique tout d'abord, l'équipe Cortex du Loria, ainsi qu'une partie de l'équipe IMS de Supélec s'intéresse à la compréhension et la conception de calculs inspirés du fonctionnement du cerveau humain, en insistant plus particulièrement sur le cortex. Du fait de leur inspiration biologique, ces travaux conduisent à la conception de systèmes neuromimétiques, dont la structure est celle d'un réseau d'unités de calcul à grain fin. Ce réseau possède de plus l'avantage, pour ce qui concerne ce projet, de reposer sur une connectivité « petit monde », c'est-à-dire une connectivité locale forte, augmentée de faisceaux de connexions moins denses vers des unités lointaines. On pourra remarquer à cette occasion que le système nerveux central, basé sur une « technologie » lente en terme de vitesse de communication, est de fait confronté aux problèmes de latence. Il n'est donc pas étonnant que des architectures informatiques inspirées du cerveau soient candidates aux technologies qui basent leur évolution sur une gestion de la latence des communications par une exploitation de la localité des calculs.

En ce qui concerne, dans un deuxième temps, la physique et la mécanique, les laboratoires LMOPS, UMI-2958, et LPMIA et traitent des problématiques dont la modélisation conduit la plupart du temps, dans le cadre de la physique des milieux continus, à des problèmes différentiels, donc exprimés localement. L'exploitation de ces modèles passe souvent par une résolution numérique. Selon la technique de résolution employée, les calculs peuvent conserver le caractère local du problème différentiel initial, localité à la fois spatiale et temporelle. C'est en ce sens que ces

problèmes, à l’instar des problèmes de modélisation neuro-mimétiques, nous apparaissent être en mesure de profiter d’un support informatique comme celui visé par ce projet.

2.1.3 Développement aisé sur plateforme parallèle interactive

L’objet de ce projet est de constituer une plate-forme logicielle et matérielle dédiée aux calculs « localisables », et de démontrer les avantages de cette plate-forme par un ensemble de réalisations dans les domaines de la physique et de l’informatique neuro-mimétique. La constitution de la plate-forme logicielle en elle-même est également un enjeu pour l’informatique, et sera assumée par l’équipe Algorille du Loria et l’équipe IMS de Supélec, impliquant des chercheurs spécialistes de ces questions.

L’objectif de la plate-forme est avant tout d’exploiter la localité des calculs qu’elle réalise pour en proposer une exécution parallèle sur un réseau de machines, exécution rendue possible par une gestion des problèmes de latence des communications.

À l’heure actuelle, la démarche de porter une simulation sur une architecture parallèle requiert, de la part du modélisateur physicien ou du concepteur d’architectures neuro-mimétiques, une expertise de développement parallèle (programmation en `OpenMP`, `MPI`, etc.) qui, lorsqu’elle existe, est extrêmement coûteuse en temps, quand elle n’est pas rédhibitoire. Un des objectifs de cette plate-forme est de prendre en charge les aspects relatifs à l’exploitation de la localité des calculs, en masquant ces problèmes au modélisateur, qui se contente alors d’exprimer son problème de la façon qui lui est la plus naturelle, à l’aide d’un formalisme de haut niveau.

D’autre part, une demande forte des concepteurs de systèmes neuro-mimétiques est que cette plateforme puisse être interactive à deux titres. Premièrement, en terme de visualisation, on souhaite disposer d’une interaction avec le processus au cours de l’exécution. En effet, les systèmes neuro-mimétiques sont basés sur des notions d’émergence, mal maîtrisées mathématiquement, et pour lesquels un retour visuel continu permet de vérifier le bon déroulement ainsi que de corriger des erreurs de conception durant les phases de mise au point. Cette interactivité de visualisation est également utile pour les physiciens car elle permet d’observer le processus de résolution numérique, afin là encore de détecter avant la fin de la simulation un problème de convergence issu par exemple d’une erreur de modélisation. Deuxièmement, une interactivité est également souhaitée par les concepteurs d’architectures neuromimétiques au niveau des entrées-sorties, puisque ces architectures sont en général utilisées comme contrôleurs de systèmes robotiques, ce qui exige qu’elles puissent être incluses dans la boucle perceptivo-motrice qui régule les interactions entre le robot et son environnement. Dans un cas comme dans l’autre, il s’avère que la disponibilité que fournissent les clusters actuels, qui délivrent de la puissance de calcul de façon différée (en batch) est trop limitée pour ce qui nous concerne.

La finalité de cette plateforme de simulation interactive et de l’environnement de programmation parallèle de haut niveau associé est de permettre aux chercheurs des thématiques concernées d’utiliser la simulation large échelle dès les premières phases de conception.

2.2 Réalisations antérieures et besoins existants

La faisabilité du projet repose sur la mise en commun de travaux de recherche qui ont déjà conduit à des réalisations logicielles mûres (cf. fig. C.1), ce qui permet de bien cerner les verrous à lever et les moyens pour y parvenir. Ainsi, il existe à l’heure actuelle un prototype de simulateur tel que celui que nous visons, et nous souhaitons étendre ce prototype sans avoir à reconstruire une architecture de zéro. Ceci nous apparaît être une garantie de faisabilité à moyen terme, et motive notre demande d’accompagnement dans le cadre du pôle MISN. D’autre part, en plus d’être réalisable, ce projet répond à un besoin manifesté par plusieurs équipes de recherche lorraines, besoin qui s’il était satisfait permettrait à ces équipes de produire des travaux originaux, que d’autres équipes du même domaine ne produisent pas du fait de l’absence de simulateur adéquat.

Cette section présente donc ces deux aspects, faisabilité justifiée par les réalisations existantes et pertinence au regard des limitations que rencontrent les équipes partenaires dans leur activité de recherche. Nous présentons ces points équipe par équipe plus en détail en C page 41, afin de mieux cerner la contribution attendue des partenaires et l’avantage qu’ils ont à se retrouver sur ce projet.

2.2.1 Réalisations antérieures

Dans le domaine du parallélisme, Stéphane Vialle et Jens Gustedt ont rassemblé leurs travaux respectifs, *ParCeL-6* et *SSCRAP*, pour constituer une bibliothèque permettant de porter un automate cellulaire à grain fin sur cluster, *parXXL* (cf. 2.3.2 page 14). Au dessus de *ParCeL-6*, Hervé Frezza-Buet a développé un environnement interactif de programmation et de visualisation d'automates cellulaires, *grumpf*, initialement destiné au systèmes neuro-mimétiques. Une collaboration avec Nicolas Fressengeas a permis de profiter de *grumpf* pour mettre en œuvre la résolution d'équations aux dérivées partielles. Cette mise en œuvre est automatisée par une suite logicielle, *Escapade*(cf. 2.3.3 page 2.3.3). Nous mentionnons également ici le développement logiciel réalisé par Nicolas Rougier concernant l'ergonomie de visualisation 3D et d'interaction avec un simulateur neuronal en cours d'exécution.

L'ensemble de ces logiciels sont libres, destinés au bénéfice de la communauté scientifique et industrielle la plus large.

2.2.2 Besoins existants

Ce paragraphe souligne la nature des besoins de calcul exprimés par les partenaires du projet, mais il est clair que la plate-forme n'est pas dédiée à ces seuls partenaires.

Besoins en Neuro-mimétisme

L'activité logicielle de l'équipe Cortex mentionnée dans ce document est bien entendu support d'une recherche plus fondamentale, dont un axe est l'étude des systèmes neuro-mimétiques, avec en particulier un accent assez fort sur les systèmes de champs neuronaux dynamiques [Rougier, 2006, Rougier and Vitay, 2006]. Ces systèmes sont extrêmement gourmands en unités de calcul et en connexions entre elles, et nombre de simulations sont limitées à quelques milliers d'unités, nombre que ce projet devrait pouvoir permettre de largement dépasser. À Supélec également, les logiciels mentionnés ont également vu le jour sous la pression des besoins de calcul et de visualisation requis par l'étude des systèmes neuromimétique, où l'accent est mis sur la multi-modalité. Dans l'entreprise de modélisation de systèmes d'inspiration corticale, on peut isoler des structures d'automates cellulaires inspirées de la régularité cyto-anatomique du tissu cortical des êtres vivants. Favoriser la programmation de ces structures avec un minimum de développement suppose de spécifier encore le modèle d'exécution *grumpf*, trop général en soi¹ dans ce contexte. Durant la thèse d'Olivier Ménard [Ménard, 2006, Ménard and Frezza-Buet, 2005] co-financée par la Région Lorraine, nous avons développé une librairie objet au dessus de *grumpf*. Cette librairie, *Bi jama*², est l'outil principal impliqué dans les recherches neuro-mimétiques à Supélec. C'est dans l'utilisation de ces outils que nous avons rencontré les limitations les plus fortes, en terme de nombre d'unités à émuler pour des systèmes d'inspiration corticale. En particulier, nous avons dans notre ligne de mire le projet de modéliser la structuration d'aires visuelles, guidée par l'utilisation de la modalité visuelle par un robot dans sa boucle sensori-motrice. Cette approche est originale, en se sens que la plupart des modèles actuels de la rétine sont des modèles bottom-up, qui visent à reproduire des résultats d'observations biologiques et non la conception de nouveaux algorithmes pour le traitement d'image situé. Or notre approche, pour originale qu'elle soit, requiert de pouvoir gérer des dizaines de milliers d'unités connectées par des graphes petits mondes, ce qui pose sur les architectures à mémoire partagée actuelles des problèmes d'encombrement mémoire et de temps d'exécution rétroactifs.

En physique

De façon assez générale dans le domaine de la physique, et a fortiori en ce qui concerne les partenaires physiciens de ce projet, les limitations rencontrées, que ce projet vise à lever, sont de deux ordres. Le premier ordre est le passage d'un modèle à son exécution sur un cluster, ce qui requiert des compétences de programmation parallèle, qui restent difficilement mobilisables dans une équipe de physique, même si des outils comme MPI aident à ce type de réalisation. Le deuxième

¹C'est aussi son intérêt d'être générique.

²Biologically Inspired Joint Associative Maps.

problème rencontré est la taille du problème à modéliser, taille qui conduit à simplifier les modèles (limitation à deux dimensions, etc.) pour qu'ils puissent être simulés. Le présent projet propose une avancée sur ces deux points, en prenant d'une part en charge le portage sur cluster par des bibliothèques logicielles qui masquent les difficultés de programmation parallèle³ et permettent l'accès à un grand nombre de machines pour une simulation.

2.3 Collaborations existantes

L'un des points forts de ce projet est selon nous qu'il réunit des partenaires qui ont déjà collaboré avec succès par le passé. Les partenaires ont donc déjà travaillé ensemble de façon au moins bipartite, et leur réunion dans ce projet prolonge ces collaborations dans un contexte encore plus coopératif. Ces collaborations antérieures sont rappelées dans les paragraphes suivants.

2.3.1 Cortex + Supélec

L'équipe Cortex du Loria et Supélec entretiennent depuis 2000 une collaboration étroite sur la thématique de la modélisation de systèmes corticaux [Frezza-Buet and Alexandre, 2002], avec en particulier une participation commune au projet AVIM du programme interdisciplinaire Robea du CNRS, ainsi que lors du projet Européen IST-FET Mirrorbot, au cours desquels a été plus spécifiquement développé le modèle *Bijama* impliqué dans le présent projet. Ce modèle, en effet, est un des résultats de la thèse d'Olivier Ménard, dirigée par Frédéric Alexandre (Cortex) et co-encadrée par Hervé Frezza-Buet (Supélec), thèse co-financée par la Région Lorraine. Des collaborations existent également sur ce thème entre Hervé Frezza-Buet et Nicolas Rougier (Cortex), plus orientée sur l'étude des champs de neurones dynamiques et leur implication dans les contrôleurs robotiques d'inspiration corticale. Les deux équipes partagent également des ressources robotique ainsi qu'un ensemble de logiciels permettant leur intégration dans des systèmes neuromimétiques. Elles se rejoignent dans le présent projet par la nécessité commune de pouvoir réaliser l'exécution d'algorithmes connexionnistes à grain fin pour la modélisation de processus situés impliquant la gestion de boucles sensori-motrices et des mécanismes attentionnels, validés par l'implémentation sur plate-forme robotique réelle.

2.3.2 Algorille + Supélec

parXXL est une bibliothèque de calcul et de communication à grande échelle, destinée à l'implantation d'algorithmes à « grain fin » (les calculs et les communications sont du même ordre de grandeur) sur des architectures « à gros grain » (comme des clusters, des grilles ou des mainframes).

Historiquement, *parXXL* est la fusion de deux projets différents : *ParCeL-6* (de Supélec) et *SS-CRAP* (de l'INRIA). L'objet de *ParCeL-6* était la modélisation et l'implantation de réseaux d'entités de calculs à grain fin (réseaux de cellules), et celui de *SSCRAP* était l'algorithmique parallèle à gros grain. L'intégration de ces deux bibliothèques a permis d'obtenir un environnement opérationnel de distribution de calculs à grain fin, et de le valider sur un ensemble varié d'applications. La bibliothèque *parXXL* suit les spécifications du modèle « PRO », qui est un modèle de programmation adapté aux algorithmes à gros grain, co-développé par l'équipe Algorille. Les caractéristiques de *parXXL* sont développées plus amplement en C.3 page 44.

2.3.3 LMOPS + Supélec

Après une première collaboration dans le cadre du CPER 2000-2006 et du centre Charles Hermite (cf. paragraphe B.1.1), une nouvelle collaboration entre le LMOPS et l'équipe IMS de Supélec a permis de développer une méthode de résolution d'équations différentielles aux dérivées partielles [N. Fressengeas and H. Frezza-Buet, 2006], détaillée en C.4 page 44.

Cette suite logiciel, *Escapade*, permet au modélisateur physicien de construire un programme parallèle *ad hoc* au problème qu'il cherche à résoudre, ce qui n'est pas un handicap puisque ce programme est généré automatiquement à partir d'une description haut niveau de ce problème.

³Cet avantage est aussi essentiel pour les concepteurs informaticiens de modèles neuromimétiques, qui ne sont pas spécialistes des questions de parallélisme.

2.3.4 Algorille + LPMIA

Ces deux équipes se sont déjà réunies dans un passé récent pour le montage de projet ANR (projet ESMEAD). Bien que ce projet n'ait pas abouti, ces partenaires ont déjà bien identifié leurs besoins et formalisé les points de collaborations possibles entre eux, ce dont le présent projet tirera parti.

3 Réalisations envisagées dans le cadre du projet

3.1 Comité scientifique du projet

La mise à disposition du cluster aux équipes lorraines doit suivre certaines contraintes, si l'on veut pouvoir réaliser les avancées scientifiques portées par ce projet. En effet, **il ne s'agit pas simplement ici de mettre une ressource de calcul en libre accès**, mais bel et bien d'**exploiter le fait que les automates cellulaires à grain fin peuvent se paralléliser sur un cluster** en assurant la disponibilité **d'interactions avec les calculs**. La vérification d'un usage du cluster conformément à ces objectifs est une compétence informatique ; il appartient donc aux partenaires informaticiens d'InterCell, réunis en un comité scientifique, d'analyser les projets soumis au cluster selon la nature du traitement de l'information que ces projets requièrent, et à veiller à une **utilisation du cluster en accord avec les arguments qui justifient son financement**.

Ce comité scientifique sera mis en place dès que les couches logicielles permettront l'exploitation du cluster. Il sera constitué de deux membres de chacune des équipes suivantes : Algorille, Cortex et IMS. Bien entendu, l'ensemble des partenaires sera sollicité pour éclairer le comité sur la nature des calculs impliqués dans les projets candidats.

Pour préciser les choses, nous insistons sur le fait qu'une fois exploitable, ce cluster s'adressera aux équipes ayant besoin de ressources de calcul à grain fin. Plus précisément, ce besoin doit s'accompagner d'interactivité, soit parce que les calculs ont vocation à s'opérer en ligne (cas du contrôle d'un robot par exemple), soit parce que leur visualisation en ligne est requise (compréhension d'effets émergents, détection d'erreurs de conception ou de problèmes de convergence dans le prototypage de simulations non interactives, etc.)

En phase de fonctionnement, les équipes ayant soumis des projets de calcul sur le cluster fourniront un rapport, au moins annuel, faisant état de ce que leur a apporté, en termes d'avancées scientifiques, la mise à disposition du matériel et du logiciel. Les rapports seront rassemblés pour rendre compte auprès des financeurs de l'utilisation du matériel. Nous proposons également un séminaire annuel où les travaux réalisés sur le cluster seront présentés.

3.2 Constitution d'un cluster interactif

Contrairement aux clusters déjà disponibles en Lorraine, celui-ci aura vocation à être utilisé de façon interactive. L'accès aux utilisateurs physiciens et modélisateurs de concepteurs neuromimétiques se fera par l'utilisation de bibliothèques haut niveau qui masquent le parallélisme en prenant en charge automatiquement la répartition des calculs au sein du réseau.

Ce projet vise à permettre d'établir rapidement et facilement des modèles de divers problèmes (optique, physique des plasmas chauds, réseaux neuromimétiques...), puis d'évaluer ces modèles confortablement en contrôlant des simulations interactives. Pour cela, les applications distribuées exécutées sur ce cluster devront l'être en mode interactif et non pas en mode *batch*. De plus, certaines simulations prendront en entrée des paramètres issues de monde réel en flux continu (comme des images caméras, ou des sorties de capteurs), et produiront des flux permanents de contrôle de ces processus (commandes de robots, pilotage de bancs de mesures...). Par conséquent, chaque noeud du cluster devra être capable de réaliser des entrées-sorties intensives. Il est impensable d'isoler totalement ce cluster derrière un frontal. En revanche, il n'est pas non plus possible de

laisser ce cluster en libre accès. Un pirate ayant accès à ce cluster disposerait alors d'une énorme puissance d'attaque!

Par le passé Supélec a déjà géré ce genre de situations, en créant une Grille de contrôle de robots entre (donc fortement interactive) l'Université Italienne de Salerne, et avec des machines situées sur des réseaux de prestataires d'accès Internet comme Wanadoo et Free. Une solution à base de VPN crypté et sécurisé, incluant des sites fixes (le cluster, des machines des laboratoires partenaires) et des postes mobiles, nous semble la solution la plus opérationnelle. Des surcoûts seront inévitables pour traverser les différentes couches logicielles, les *firewalls* et le chiffrement et décryptage du VPN, mais nos expériences passées nous ont montré que l'ensemble reste interactif face à des processus présentant les constantes de temps de robots mécaniques ou de caméras acquérant un nombre limité d'images par seconde. En revanche, un tel cluster doit être entièrement dédié aux expérimentations auxquelles il est destiné. Il doit être disponible à tout moment pour des expérimentations interactives, et le VPN doit se limiter aux participants du projet pour être gérable et rester sécurisé.

3.3 Construction du simulateur

L'ossature des travaux logiciels impliqués par le projet est constituée d'une part de l'extension de `grumpf` de façon que cette librairie puisse s'appuyer sur `parXXL` (cf. figure 3.1), et d'autre part de l'enrichissement de `parXXL` pour offrir sur un cluster les fonctionnalités d'interactivité nécessaires à `grumpf`. On pourra ainsi proposer aux utilisateurs l'ergonomie et l'interactivité de `grumpf` non plus sur machines à mémoire partagée, mais sur le cluster interactif en bénéficiant de l'extensibilité de `parXXL`. L'interfaçage de `grumpf` et `parXXL` profitera de l'expérience des auteurs qui ont déjà réalisé l'interfaçage entre `grumpf` et `ParCeL-6` pour l'exécution sur machines multi-processeurs à mémoire partagée. Néanmoins l'extension de l'exécution sur cluster supposera de repenser les modes d'accès aux unités (problème de désignation et d'accès mémoire lors des interactions), mais aussi les modalités de déploiement du réseau, dont la description ne peut plus tenir dans la mémoire d'une machine qui jouerait le rôle de centralisateur. `parXXL` fournit pour cela une collection de réseaux cellulaires optimisés dont seront dérivés les réseaux nécessaires à ce projet. Côté clients de visualisation, il faudra également étendre certaines fonctionnalités, initialement plus dédiées aux visualisations de champs de neurones, de sorte à autoriser une représentation plus conventionnelle de résultats de physique. Enfin, une fois ce simulateur construit, et à l'aide de la nouvelle version de `grumpf`, on pourra réécrire le logiciel qui, dans `Escapade`, transforme la description des automates cellulaires en code C++, de sorte que ce code soit compatible avec les changements opérés dans `grumpf`.

Une fois les premières étapes de recherche passées et un modèle mis au point, les simulations suivantes peuvent s'enchaîner plus rapidement avec moins de contrôle de l'évolution des calculs. Par conséquent, pour les étapes de recherche une fois le modèle établi et pour les phases d'exploitation, le mode *direct* permet à `Escapade` de générer directement un automate cellulaire en `parXXL`, sans utiliser `grumpf`, sans contrôle interactif. Il est alors possible d'exécuter un grand nombre de simulations distribuées en mode *batch* sur des clusters traditionnels et des machines de production.

3.4 Expérimentations

3.4.1 Modélisation neuro-mimétique

Grâce au simulateur, les équipes Cortex et Supélec pourront expérimenter la scalabilité de leurs modèles. En effet, à l'heure actuelle, les modèles sont limités en taille du fait de leur encombrement mémoire, alors qu'une étude de leurs propriétés est à réaliser lorsqu'ils sont utilisés à grande échelle. Ainsi, indépendamment des performances, le simulateur permettra à ces modèles de pouvoir exister en mémoire, dans la mesure où c'est de la mémoire du cluster tout entier dont il s'agit et non plus de la mémoire d'une seule machine multi-processeurs. De plus, le caractère interactif du cluster sera exploité lors de son utilisation dans un contexte robotique, puisque les modèles connexionnistes réalisés sont destinés à contrôler un robot en ligne. Des flux de données issus de capteurs sont dans ce cas envoyés aux processeurs, et des flux de contrôles seront émis par les processeurs vers

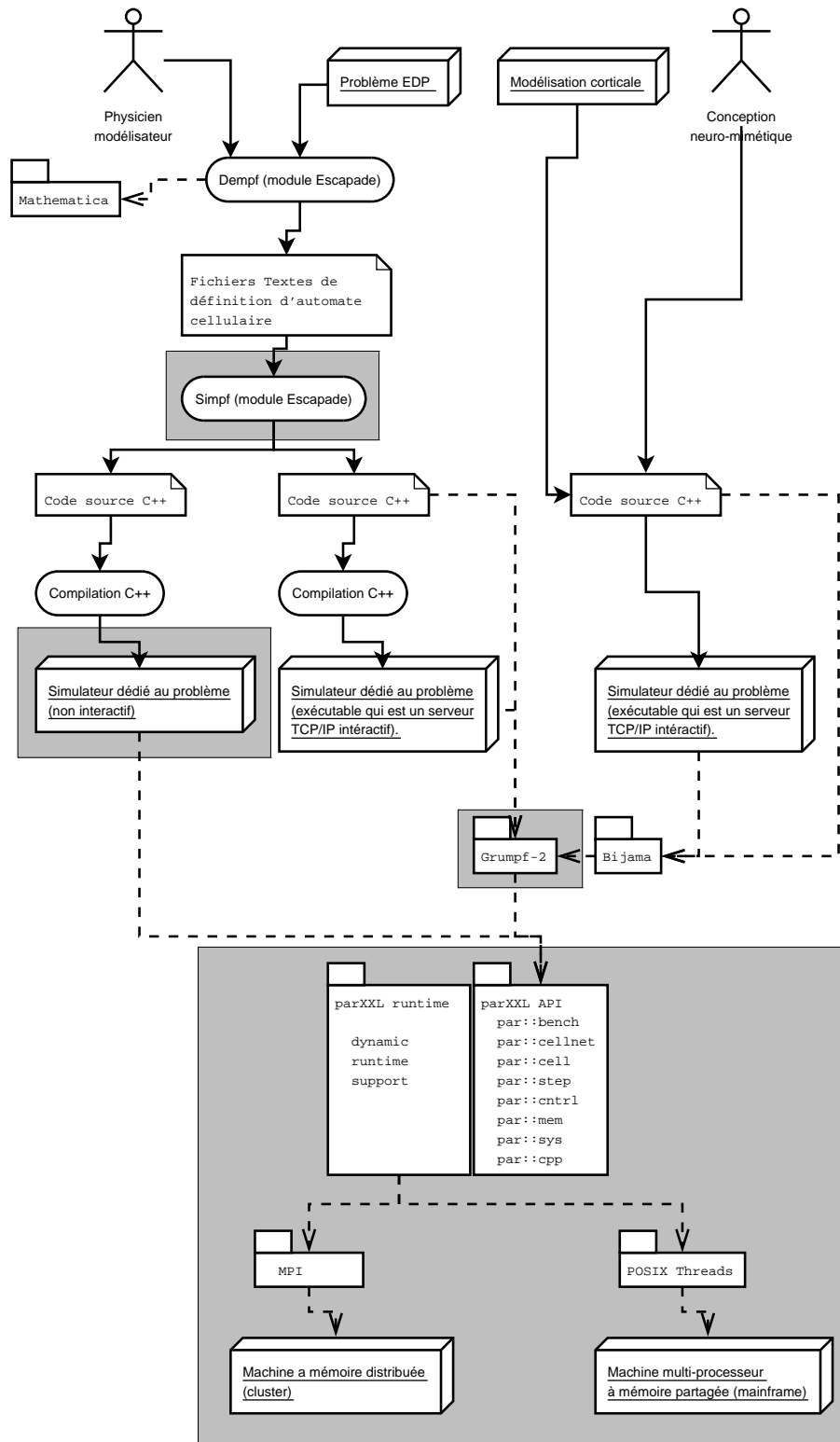


FIG. 3.1 – Figure similaire à la figure C.1, où les modifications relatives au passage sur cluster de PC sont grisées. Le côté très ciblé de ces modifications, du fait de la modularité de l’approche, est un argument pour la faisabilité de l’approche.

le robot. Cette interactivité-là, plus spécifique des systèmes neuro-mimétiques situés, est cohérente avec celle requise par la visualisation et lui est complémentaire.

Par ailleurs, nous profiterons de l'outil et des collaborations au sein de MIS pour tester Escapade à grande échelle et très probablement réaliser les optimisations du code formel (Mathematica) pour accélérer, si besoin est, le calcul par Escapade de l'automate cellulaire dédié au problème.

3.4.2 Automatisation de la résolution d'équations aux dérivées partielles

L'utilisation d'Escapade et du calcul automatisé de l'automate cellulaire ad hoc. permettra de réaliser rapidement des expérimentations à grande échelle, c'est-à-dire pendant les phases même de mise au point des modèles corticaux. L'objet essentiel des calculs qui seront menés sur ce type de réseau concernera le passage à l'échelle, ce qui revient dans le contexte actuel des simulations à passer à la troisième dimension, voire à la quatrième (le temps). Ces dimensions restent le plus souvent inaccessibles avec les moyens de calcul actuels.

3.4.3 Photo-réfractivité

Pour ce qui concerne la photoréfractivité infrarouge, nous implémenterons un modèle ne nécessitant que peu d'approximations afin d'obtenir une description fidèle du comportement de nos matériaux, et ce dans l'objectif de comprendre nos expériences et de proposer un nouveau simulateur de la propagation des faisceaux fin dans les matériaux semi-conducteurs photoréfractifs. Ces études peuvent avoir des retombées importantes dans le domaine des composants tout optique pour les télécommunications.

Pour ce qui est des couches minces semi-conductrices, l'objectif est d'une part d'aider à concevoir de nouveaux dispositifs multicouches grâce à la modélisation des propriétés de transport, et d'autre part d'interpréter les mesures expérimentales, grâce à la mise au point d'un outil de simulation tenant compte de la complexité des phénomènes physiques et permettant d'étudier des dispositifs avec des géométries réalistes (deux et trois dimensions). Les retombées attendues concernent essentiellement la mise au point et l'étude de nouveaux composants à semi-conducteurs, et particulièrement dans le domaine de l'optoélectronique dans l'ultraviolet.

Dans le même esprit, nous comptons réaliser une modélisation tridimensionnelle inédite, avec le moins d'approximation possible, de la répartition des charges et des courants dans les modulateurs électro-optiques au Niobate de Lithium car nous avons montré que c'est là qu'il faut chercher l'origine de la dérive de leur point de fonctionnement. Cette modélisation est décrite par un système différentiel que nous chercherons à résoudre de manière tridimensionnelle, avec un maillage suffisamment fin. Nous obtiendrons ainsi une carte 3D de la conductivité électronique, laquelle nous permettra de stabiliser le composant.

3.4.4 Étude des plasmas

L'utilisation de grille de calcul requiert en particulier d'utiliser des méthodes dites « locales », c'est-à-dire d'effectuer des calculs au voisinage d'un processeur donné et de minimiser en particulier les transferts de message avec les processeurs voisins. En effet la technique que nous utilisons est basée sur une intégration des équations de Vlasov-Maxwell le long de ses caractéristiques dans le cadre d'une approche semi-lagrangienne. L'avantage de cette méthode est indéniable par rapport à une méthode eulérienne puisque l'on n'est plus soumis aux conditions restrictives sur le pas de temps (conditions de Courant-Friedrich-Levy) qui sont si pénalisantes dans les méthodes eulériennes. Par ailleurs l'utilisation d'une grille fixe dans la méthode semi-lagrangienne présente l'avantage, par rapport aux méthodes particulières (méthodes lagrangiennes), de garantir une bonne répartition de la charge entre les divers processeurs lors d'une décomposition de domaines. En effet il n'est pas possible de rencontrer une concentration anormale de particules sur un processeur donné du fait de l'utilisation d'une grille fixe. La méthode est alors basée sur une technique d'intégration de la fonction de distribution le long des caractéristiques vers l'arrière et une technique d'interpolation par spline cubique pour la recherche du pied de la caractéristique. Cependant ceci nécessite le recours à l'inversion d'une matrice tridiagonale, ce qui conduit généralement à une perte de la propriété de localité. Pour éviter ce problème et conserver le caractère local, il est envisagé d'utiliser

des splines locaux ou d'autres techniques. Le recours à des simulations dites "interactives", pour des systèmes de tailles réduites, prend donc toute son importance dans ce contexte. En effet il est primordial de contrôler la convergence de la solution avec ces méthodes dites "locales" ainsi que d'optimiser le transfert de messages dans des cas test. Cette expertise est en particulier nécessaire si l'on désire recourir par la suite à des grilles de calcul de taille supérieure (Grille 5000 ou/et Grille européenne DEISA). Une approche inter-disciplinaire dans le cadre d'une collaboration avec les informaticiens du LORIA et de l'équipe IMS de Supélec est alors nécessaire.

3.4.5 Optimisation des caractéristiques et de la propagation de lumière dans les nano-structures

La conception de composants semi-conducteurs à nanostructures et à band-gap photonique pour des applications aux longueurs d'onde des communications optiques est un des axes de recherche de l'UMI 2958. Les pseudo-cristaux ainsi réalisés présentent des caractéristiques intéressantes pour « mouler » le flux de lumière les traversant. Le pseudo-cristal est formé d'un réseau à deux ou trois dimensions via lequel la lumière sera diffractée. La simulation numérique est ici un élément clé pour optimiser la conception des composants en :

- modélisant l'effet des défauts d'homogénéité et de rugosité générés lors de la croissance des pseudo-cristaux et des matériaux fortement désaccordés en paramètre de maille au sein de la centrale technologique et mesurant leur effet sur les caractéristiques du composant.
- prédisant les phénomènes de propagation par diffraction de lumière dans le cristal à band-gap photonique représenté par un réseau à deux ou trois dimensions.

La modélisation est basée sur la résolution des équations de Maxwell par la méthode des éléments finis à l'aide du logiciel commercial Comsol Multiphysics. La visualisation des effets cités ci-dessus nécessite une résolution en trois dimensions qui ne nous est pas possible actuellement.

3.5 Évaluation de performances

La suite logicielle développée dans ce projet sera évaluée selon deux critères : par l'amélioration de la facilité de développement, et par ses performances à l'exécution (accélération, accroissement de la taille des problèmes traités, extensibilités de l'architecture). Le premier critère est plutôt qualitatif, mais est néanmoins primordial : aucun logiciel ne peut avoir du succès s'il ne remporte pas l'adhésion des utilisateurs, et sa facilité d'emploi reste en cela un élément clé. Le deuxième critère est plus classique du parallélisme et du *Grid computing*. Il est assez simple de distribuer efficacement une application sur 10 machines, mais il reste difficile de la distribuer sur 100 ou 1000 machines ! Or, traiter des problèmes complexes avec précision nécessitera des automates cellulaires de grande taille, qui devront être distribués sur de grands clusters pour disposer d'assez de mémoire et obtenir une interactivité confortable. Obtenir un système *extensible* sera un enjeu majeur de ce projet : être capable de maintenir le temps d'exécution constant en augmentant le nombre de ressources utilisées quand le problème traité augmente en taille ou en complexité.

3.6 Retombées attendues

En ce qui concerne la modélisation de systèmes neuromimétiques, le cluster, comme nous l'avons déjà évoqué, devrait permettre d'envisager une boucle sensori-motrice incluant la modalité visuelle, en traitant cette modalité par des modules inspirés des corps genouillés latéraux chez l'homme, ainsi que des aires visuelles du cortex (aires du cortex dénommées V1 et V2). L'inclusion de cette architecture dans la boucle sensori-motrice d'un robot devrait permettre de vérifier expérimentalement que la structuration de V1 peut s'obtenir comme le résultat de la nécessité de traiter l'information visuelle dans un comportement, ce qui dépasse les considérations actuelles où V1 n'est qu'un élément d'un processus bottom-up d'extraction de contour. Obtenir ce résultat par une expérimentation robotique neuro-mimétique serait à notre connaissance une première.

Dans le domaine de la photo-réfractivité, l'utilisation d'un simulateur interactif conçu pour fonctionner efficacement sur un cluster à grande échelle serait à notre connaissance une innovation. Nous pensons obtenir des résultats importants dans nos domaines de recherche propres : notamment

la simulation à haute résolution de la propagation des faisceaux infrarouges fins dans les matériaux photoréfractifs ouvrant la voie vers le routage tout optique sans pièce mobile.

En ce qui concerne les couches minces semi-conductrices, la mise au point d'un outil de simulation permettant d'étudier des semi-conducteurs en couches minces est particulièrement importante pour développer de nouveaux dispositifs dans la mesure où il permettra de s'affranchir des principales limitations des outils actuels, à savoir l'impossibilité de simuler des dispositifs en trois dimensions avec des géométries arbitraires et suivant une procédure fiable et interactive. Les retombées concerneront plus particulièrement la recherche de nouveaux matériaux semi-conducteurs dans l'optoélectronique (essentiellement les lasers UV) mais aussi dans la micro-électronique.

La compensation de la dérive des modulateurs au Niobate de Lithium permettrait, grâce à cette nouvelle modélisation 3D, de mettre au point une nouvelle solution de stabilisation de ces modulateurs, complémentaire des solutions existantes. C'est ainsi qu'une cartographie 3D systématique des composants, insérée dans la chaîne de fabrication, pourrait permettre d'obtenir des composants sans dérive à moindre coût.

Enfin, il est clair que dans le domaine de l'étude des plasmas, la puissance de calcul requise fait de ce cluster un outil incontournable, mais le projet est d'autant plus intéressant que les méthodes impliquées se proposent de prendre en charge les difficultés de parallélisations, encore très coûteuses en temps dans les phases de mise au point des modèles.

Ceci dit, toutes ces simulations serviront également de test à grande échelle de notre nouvel outil de simulation automatisé **Escapade**. En effet, nous espérons grâce à ce genre de concept pouvoir diminuer de manière importante la tâche de programmation traditionnellement dévolue au physicien numéricien, lequel a en général peu de compétences pointues en parallélisme. C'est ainsi que, moyennant un apprentissage rudimentaire d'un logiciel de calcul formel, les utilisateurs de **Escapade** pourront accéder à la simulation parallélisée de manière efficace sur un cluster à grande échelle, chose qui est actuellement impossible, sauf à bénéficier des compétences d'un spécialiste en parallélisation.

3.7 Road map

Une part importante des réalisations est conditionnée par la mise en œuvre effective du cluster (WP1), difficile à planifier, que l'on considérera comme s'étalant sur une période de 2 mois, qui devra être terminée au bout de 6 mois.

Dès le début du projet toutefois, Stéphane Vialle et Jens Gustedt entameront l'adaptation de **parXXL** à l'interactivité requise pour le projet (WP2), ce qui devrait prendre 12 mois. Hervé Frezza-Buet se chargera de rendre **grumpf** compatible avec cette nouvelle évolution des couches parallèles (6 mois), et d'autres fonctionnalités d'interface seront rajoutées, à l'aide d'un travail commun avec Nicolas Rougier (6 mois) (WP3).

En ce qui concerne **Escapade**, qui fera le lien avec les simulations physiques, Nicolas Fressengeas travaillera sur l'optimisation du package Mathematica impliqué (3 mois, WP4), afin d'optimiser ses performances (temps de calcul) sur des gros problèmes. La version actuelle en effet est un prototype. Stéphane Vialle réalise actuellement un module permettant d'interfacer **Escapade** avec une exécution parallèle sur **parXXL** sans interactivité. Cette réalisation (encore 3 mois de travail) permettra un portage des simulations exprimées avec **Escapade** sur le cluster en mode batch, ce qui a le double avantage d'offrir rapidement la puissance de calcul du cluster aux partenaires physiciens, mais aussi de terminer la mise au point de **parXXL** sur des problèmes réels.

Enfin, une fois que l'interactivité du cluster est assurée jusqu'au niveau **grumpf**, le logiciel **Escapade**, pour la physique, mais aussi les bibliothèques de modélisations neuro-mimétiques (comme **Bijama**) pourront être portées sur le cluster (WP5).

Enfin, les expérimentations des partenaires sur le cluster interactif seront réalisées, avec visualisation et usage de robots *en ligne* (WP6).

Donc pour résumer (cf. tableau 3.1), la première année concerne la mise en œuvre du cluster, et l'adaptation des réalisations existantes au calcul sur cluster, sans interactivité. Dès lors, les premiers tests d'applications physiques pourront être menés, ce qui devrait influencer sur les travaux de modélisation des partenaires physiciens. La deuxième année verra l'aboutissement des problèmes de visualisation interactive et d'entrée-sortie, permettant le test des approches neuro-mimétiques.

La troisième année sera une année d'exploitation du cluster comme outil, ce qui permettra la finalisation de la mise au point des différentes couches impliquées, puisqu'elles seront utilisées sur des problèmes « grandeur nature ».

01-03	04-06	07-09	10-12	13-15	16-18	19-21	22-24	25-27	28-30	31-33	4-36
WP1-cluster											
WP2-parXXL interactif											
WP4-Opt. Escapade											
							WP3-grumpf sur cluster + visu				
								WP5-Escapade+neuro			
										WP6-Expérimentations	

TAB. 3.1 – Déroulement du projet sur les 36 mois.

3.8 Critères de réussite

Nous pensons qu'un tel projet en début de CPER devrait permettre d'amorcer des travaux de recherche qui pourront rentabiliser l'investissement consenti par des réalisations lorraines originales et ambitieuses, dont les retombées scientifiques seront visibles tout au long des 4 années suivantes couvertes par l'action de MISN. Au bout des 3 ans toutefois, les critères permettant d'évaluer la réussite du projet sont, à nos yeux :

- L'installation effective d'un matériel opérationnel.
- Réalisation d'une librairie (finalisation de **parXXL**) permettant de prendre en charge la parallélisation de systèmes d'automates cellulaires à *grain fin* sur le cluster.
- Réalisation des couches logicielles permettant *l'interactivité* : sauvegarde, visualisation, interaction en ligne avec un robot.
- Version opérationnelle de la méthode **Escapade** sur le cluster.
- Premières réalisations expérimentales dans les domaines de la physique et des sciences cognitives.

À partir de ces résultats, il sera possible de mieux cerner ce que l'on peut attendre du cluster, et ainsi d'offrir sa puissance de calcul à d'autres projets dont la nature des calculs est compatible avec ceux réalisés par le cluster. En particulier, pour ce qui est de l'interaction pour la visualisation, ce projet constitue une étude de faisabilité grandeur nature, et on pourra cerner les modalités suivant lesquelles des travaux de visualisations plus ambitieux que ceux impliqués ici pourront, dans les années qui suivent, se greffer sur le cluster. Cet axe pourra, au regard de nos résultats, être développé plus avant dans un projet suivant par l'équipe CALVI dont c'est la spécialité.

4 Financement d'un cluster interactif

L'investissement impliqué par ce projet concerne la mise en œuvre d'un cluster interactif sur le site de Supélec, campus de Metz. Ce site héberge deux des partenaires : le LMOPS et Supélec, qui s'engagent à fournir *les moyens humains* pour la maintenance de ce cluster.

4.1 Description du cluster

Le cluster envisagé est constitué de 256 machines, réparties sur 11 armoires (rack de 24 PC). Afin d'être interactif, tout en respectant des contraintes de sécurité informatique, il sera protégé par l'installation d'un réseau VPN, géré par 5 serveurs répartis sur les différents sites. Les machines qui constituent le cluster seront des PC récents (2.4 GHz, 2Go de RAM), l'ensemble devant être climatisé et ondulé.

4.2 Coûts

Le chiffrage des investissements matériels est donné dans la table 4.1. La mise en œuvre de ce matériel nécessite des moyens humains, chiffrés dans la table 4.2. Apparaissent également dans cette table les frais de gestion du cluster une fois installé. Ils correspondent à la mise à disposition de 2 ingénieurs, Patrick Mercier pour Supélec et Rémy Claverie pour le LMOPS, à 10% de leur temps. Ces personnes ont déjà l'habitude de travailler en binôme.

	Prix HT	Quantité	Total HT
Armoires			
Rack 24 PC	1800	11	19800
Commutateurs 12 écrans	250	22	5500
Swich pour 1 armoire	600	11	6600
Switch pour connexion backbone	600	11	6600
Connectique (estimation)			3850
Total armoires			42350
Aménagements de la salle			
Onduleur (pour 5 armoires)	8000	3	24000
Climatisation (pour 5 armoires)	8000	3	24000
Total aménagements			48000
Noeuds			
PC 2GoRAM 2.4GHz 160GoHDD	800	256	204800
Marge d'intégration (facteur de risque financier)		0.1	29515
Serveurs (VPN, firewall, DHCP, DNS)	3000	5	15000
Terminaux (ordinateur+écran)	800	10	8000
Disques de stockage			20000
Total équipement HT			367665

TAB. 4.1 – Équipement pour le cluster.

	Cout journalier	Nb de jours	Total
Personnel pour mise en oeuvre			
Electricien (câblage)	230	5	1150
Technicien	230	15	3450
Ingénieur	530	5	2650
Total			7250
	Cout nominal	Taux	Total
Frais de maintenance Supélec			
Ingénieur (Patrick Mercier) : cout annuel	100170	0.1	10017
Surface batiment au metre carré	30	30	900
Frais de maintenance LMOPS			
Ingénieur (Rémy Claverie) : cout annuel	100170	0.1	10017
Total maintenance annuel			20934

TAB. 4.2 – Personnel pour l'installation et la maintenance informatique du cluster.

Financement du projet (en gras celui demandé)	
Equipement : cluster	367665
Fonctionnement : Mise en oeuvre	7250
Fonctionnement : Logistique et maintenance (sur 7 ans)	146538
Cout total du projet	521453
Dont demandé au titre de MIS	374915

TAB. 4.3 – Coût total. Les parties en gras sont celles demandées à l'action MIS pour ce projet.

Bibliographie

- [Bertrand, 2005] Bertrand, P. (2005). Iter, un passage obligé. *Pour la Science*, 334 :8–9.
- [Bertrand et al., 2995] Bertrand, P., Albrecht-Marc, M., Reveille, T., and Ghizzo, A. (2995). Vlasov models for laser-plasma interaction. *Transport Theory and Statistical Physics*, 34 :127–149.
- [Besse, 2004] Besse, N. (2004). Convergence of a semi-lagrangian scheme for the one-dimensional vlasov-poisson system. *siam. J. Numer. Anal.*, 42 :350–382.
- [Besse and Sonnendrücker, 2003] Besse, N. and Sonnendrücker, E. (2003). Semi-lagrangian schemes for the vlasov equation on an unstructured mesh of phase space. *J. Comput. Physics*, 191 :341–376.
- [Boniface, 2000] Boniface, Y. (2000). *Etude et développement d'une bibliothèque d'adaptation du parallélisme neuromimétique au parallélisme MIMD - Design and implementation of a library to adapt neuromimetic parallelism to MIMD one*. PhD thesis, University Henri Poincaré - Nancy I.
- [Boniface et al., 1999] Boniface, Y., Alexandre, F., and Vialle, S. (1999). A library to implement neural networks on MIMD machines. *LNCS vol. 1685, Proceedings of Euro-Par'99*, pages 935–938. Toulouse, France.
- [Bouزيد et al., 2001] Bouزيد, M., Chevrier, V., Vialle, S., and Charpillat, F. (2001). Parallel simulation of a stochastic agent/environment interaction. *Integrated Computer-Aided Engineering*, 8(3).
- [Filbet et al., 2001] Filbet, F., Sonnendrücker, E., and Bertand, P. (2001). Conservative numerical schemes for the vlasov equation. *J. Comput. Phys.*, 172 :166–187.
- [Fressengeas et al., 1996] Fressengeas, N., Maufoiy, J., and Kugel, G. (1996). Temporal behavior of bi-dimensional photorefractive bright spatial solitons. *Phys. Rev. E*, 54 :6866.
- [Frezza-Buet and Alexandre, 2002] Frezza-Buet, H. and Alexandre, F. (2002). From a biological to a computational model for the autonomous behavior of an animat. *Information Sciences*, 144(1-4) :1–43.
- [Ghizzo et al., 2006] Ghizzo, A., Johnston, T., Reveille, T., Bertrand, P., and Albrecht-Marc, M. (2006). Stimulated-raman-scatter behavior in a relativistically hot plasma slab and an electromagnetic low-order pseudocavity. *Phys. Rev. E*.
- [Grandgirard et al., 2006] Grandgirard, V., Brunetti, M., Bertrand, P., Besse, N., Garbet, X., Ghendrih, P., Manfredi, G., Sarazin, Y., Sauter, O., Sonnendrücker, E., Vaclavik, J., and Villard, L. (2006). A drift-kinetic semi-lagrangian 4d code for ion turbulence simulation. *J. Comput. Phys.* to appear.
- [Gustedt et al., 2006] Gustedt, J., Vialle, S., and Vivo, A. D. (2006). parxxl : A fine grained development environment on coarse grained architectures. In *PARA-06 : Workshop on state-of-the-art in scientific and parallel computing*, Umea, Sweden.
- [Huot et al., 2003] Huot, F., Ghizzo, A., Bertrand, P., Sonnendrücker, E., and Coulaud, O. (2003). Instability of the time splitting scheme for the one dimensional and relativistic vlasov-maxwell system. *J. Comput. Physics*, 185 :512–531.
- [Khelfaoui et al., 2006] Khelfaoui, N., Wolfersberger, D., Kugel, G., Fressengeas, N., and Chauvet, M. (2006). Time resolved applied electric field masking in photorefractive semiconductors. *Optical and Quantum Electronics*, 38(1-3) :63–69.

- [Lhomme et al., 2002] Lhomme, F., Wolfersberger, D., Vialle, S., and Fressengeas, N. (2002). Parallel simulation of photorefractive material for the design of all-optical components. In Fagerholm, J., Haataja, J., Järvinen, J., Lyly, M., Raback, P., and Savolainen, V., editors, *Applied Parallel Computing. Advanced Scientific Computing : 6th International Conference, PARA 2002*, number 2367 in Lecture Notes in Computer Science, page 578. Springer, Helsinki, Finland.
- [Ménard, 2006] Ménard, O. (2006). *Mécanismes d'inspiration corticale pour l'apprentissage et la représentation d'asservissements sensori-moteurs en robotique*. PhD thesis, Université Henri Poincaré - Nancy I. In french.
- [Ménard and Frezza-Buet, 2005] Ménard, O. and Frezza-Buet, H. (2005). Model of multi-modal cortical processing : Coherent learning in self-organizing modules. *Neural Networks*, 18(5-6) :646–655.
- [N. Fressengeas and H. Frezza-Buet, 2006] N. Fressengeas and H. Frezza-Buet (2006). Generic method for solving partial differential equations through the design of problem-specific continuous automata.
- [Rochel and Martinez, 2003] Rochel, O. and Martinez, D. (2003). An event-driven framework for the simulation of networks of spiking neurons. In *Proc. 11th European Symposium on Artificial Neural Networks, ESANN 2003*.
- [Rougier, 2006] Rougier, N. (2006). Dynamic neural field with local inhibition. *Biological Cybernetics*, 94(3) :169–179.
- [Rougier and Vitay, 2006] Rougier, N. and Vitay, J. (2006). Emergence of attention within a neural population. *Neural Networks*, 19(5) :573–581.
- [Vialle et al., 2002] Vialle, S., Dedu, E., and Timsit, C. (2002). Parcel-5/parssap : A parallel programming model and library for easy development and fast execution of simulations of situated multi-agent systems. *SNPD'02*. Madrid.
- [Vialle et al., 1998] Vialle, S., Lallement, Y., and Cornu, T. (1998). Design and implementation of a parallel cellular language for mimd architectures. *Computer languages*.
- [Vialle et al., 2004] Vialle, S., Ménard, O., and Frezza-Buet, H. (2004). Making cortically-inspired sensorimotor control realistic for robotics : Design of an extended parallel cellular programming model. In *International Conference on Advances in Intelligent Systems - Theory and Applications. In cooperation with the IEEE Computer Society*.
- [Wolfersberger et al., 2000] Wolfersberger, D., Fressengeas, N., Maufof, J., and Kugel, G. (2000). Self-focusing of a single laser pulse in a photorefractive medium. *Phys. Rev. E*, 62.
- [Wolfersberger et al., 2001] Wolfersberger, D., Fressengeas, N., Maufof, J., and Kugel, G. (2001). Numerical simulation of the propagation of a single laser pulse in a photorefractive medium. *Optical Materials*, 18 :81.

Deuxième partie

Compléments

A Présentation détaillée des partenaires

A.1 Équipe IMS de Supélec

L'équipe IMS¹ de Supélec est située sur le campus de Metz de Supélec, et réunit 14 enseignants-chercheurs. Elle s'occupe de traitement du signal, de calcul parallèle et d'intelligence artificielle distribuée, avec une orientation vers l'intégration de flux d'informations multimodales dans des systèmes situés. L'utilisation de grilles de calculs pour des simulations de systèmes physiques large échelle ou de systèmes d'inspiration corticale *ab initio* est un des objectifs de l'équipe IMS, qui motive particulièrement sa contribution à ce projet.

Pour ce qui concerne le projet à proprement parler, les deux principaux intervenants seront Stéphane Vialle et Hervé Frezza-Buet, l'un pour les points relatifs à la parallélisation d'automates cellulaires, l'autre pour la définition de systèmes de calculs d'inspiration corticale pour la robotique. Leur participation profitera également de leur contribution aux suites logicielles **parXXL**, **Escapade** et **Bijama**, impliquées dans ce projet. A cette participation s'ajoute celle de Patrick Mercier, responsable des ressources informatiques de Supélec, qui possède une compétence en déploiement et gestion de clusters et de grilles de calcul.

A.2 Équipe Algorille du Loria

La possibilité d'accéder aux ressources de calculs distribuées sur Internet permet d'envisager de nouveaux types d'applications utilisant la puissance des machines et celle du réseau. L'accès transparent et efficace aux ressources distribuées, formant ce que l'on appelle la grille, est un des enjeux majeurs des technologies de l'information. Cependant, ceci nécessite de mettre en œuvre des techniques et des algorithmes pour faire communiquer les machines, inter-opérer les applications, allouer les ressources, améliorer la qualité de service et la sécurité des transactions.

Dans ce projet seront en particulier impliqué Jens Gustedt et Pierre-Nicolas Clauss pour la modélisation d'algorithmes grains fins sur des dispositifs gros-grains, et pour leur réalisation avec la suite logiciel **parXXL**.

A.3 Équipe Cortex du Loria

L'équipe CORTEX, constituée de 8 permanents et d'une dizaine de doctorants, a pour but d'élaborer des modèles neuromimétiques plus particulièrement destinés à l'émulation de fonctions cognitives. En effet, une des caractéristiques de l'intelligence humaine est de donner des réponses satisfaisantes, alors que le sujet est confronté à des situations complexes, peu structurées et incluant de nombreux paramètres. Dans le domaine du traitement automatique de l'information, cette capacité est recherchée pour des problèmes comme la navigation dans des environnements inconnus ou l'analyse et l'interprétation de données. Nous étudions la capacité des modèles connexionnistes à donner des outils satisfaisants dans ce domaine.

¹Information, Multimodalité et Signal.

A.4 Laboratoire Matériaux Optiques, Photonique et Systèmes - CNRS UMR 7132

Le LMOPS (CNRS UMR 7132) est une unité de Recherche Commune à l'Université de Metz et Supélec et au CNRS, situé en majeure partie dans les locaux de Supélec à Metz, mais également à l'Institut de Physique et d'Electronique de Metz et à St Avold.

Il regroupe 27 permanents dont 23 enseignants-chercheurs dont les activités s'étendent dans le domaine des matériaux pour l'optique, de leur conception et leur croissance avec des techniques d'épitaxie, en collaboration avec l'UMI 2958 (Metz), à leur utilisation pour des dispositifs de routage optique, en passant par l'étude approfondie du Niobate de Lithium, véritable "Silicium de l'Optique".

Les membres du laboratoire qui participeront plus spécifiquement au projet sont d'une part Nicolas Fressengeas pour la conception d'une interface entre les problèmes différentiels des physiciens et le simulateur interactif parallèle, et d'autre part les physiciens du laboratoire dont les besoins en simulation numérique justifient l'utilisation du calculateur : Jean Paul Salvestrini pour l'étude de la relaxation diélectrique dans les modulateurs au Niobate de Lithium, Siddi Ould Saad Hamady pour l'étude de la répartition tridimensionnelle des charges et courants dans les structures semiconductrices multicouches et, encore une fois, N.Fressengeas pour l'étude tridimensionnelle des matériaux photoréfractifs semi-conducteurs.

En soutien à ces projets de recherche et à l'ensemble du projet présenté dans ces pages, Rémy Claverie propose en outre ses compétences en matière d'administration système informatique en général et cluster en particulier.

A.5 Équipe « plasmas chauds » LPMIA

L'équipe « plasmas chauds » dirigée par Pierre Bertrand est l'une des trois équipes du laboratoire LPMIA -UMR CNRS 7040 de l'Université Henri Poincaré qui regroupe actuellement une quinzaine d'enseignants-chercheurs. Les membres du laboratoire qui participent plus spécifiquement au projet sont A. Ghizzo, P. Bertrand, T. Reveille, N. Besse et E. Gravier.

Le thème central de l'équipe est la modélisation et l'expérimentation numérique en physique des plasmas où les effets cinétiques sont dominants, en particulier dans les problèmes liés à l'interaction laser-matière et la fusion inertielle, la turbulence dans les plasmas de tokamaks et la fusion magnétique.

La technique que nous utilisons est basée sur la résolution des caractéristiques de l'équation de Vlasov de telle façon que ces caractéristiques passent toujours par une grille fixe eulérienne dans l'espace des phases. Cette méthode dite « semi-lagrangienne » permet de résoudre directement le système couplé des équations de Vlasov - Maxwell, d'où le nom de code *Vlasov*.

Le succès de cette famille de codes, qui sont maintenant bien utilisés par un nombre d'équipes sans cesse grandissant, tient à ce qu'ils présentent un niveau de bruit numérique incomparablement plus faible que les habituels codes particuliers et offrent une meilleure résolution de description de l'espace des phases, y compris pour des faibles niveaux de la fonction de distribution.

Les activités de l'équipe « Plasmas Chauds » du LPMIA s'insèrent très largement dans les programmes en fusion magnétique ou inertielle, dans des collaborations formalisées dans le cadre européen d'EURATOM (LRC no DSM 99-18) avec le CEA et d'autres équipes CNRS (Nancy est avec Marseille et Palaiseau l'un des trois pôles retenus en charge du programme amont d'accompagnement d'ITER). D'autre part, comme membre de l'Institut Laser-Plasma, le LPMIA est également impliqué dans le programme Laser Mega Joules (LMJ) sur la fusion inertielle.

Les activités du LPMIA permettent à l'Université Henri Poincaré - Nancy-1 d'être le seul partenaire universitaire français à être impliqué tant pour la recherche que pour la formation, dans l'ensemble des programmes sur la fusion contrôlée (de la fusion par confinement inertiel la fusion par confinement magnétique avec le projet ITER).

A.6 UMI 2958

L'Unité Mixte Internationale, UMI 2958, a été créée en avril 2006 afin de favoriser les activités de recherche entre les laboratoires du Georgia Institute of Technology et ceux du CNRS. Les thèmes de recherche intéressés par cette collaboration concernent l'optimisation des caractéristiques optiques et mécaniques de nano-structures. Les applications sont liées aux domaines des télécommunications optiques ainsi qu'à celui des nouveaux matériaux.

B Enjeux pour les sciences physiques

B.1 LMOPS

B.1.1 Photo-réfractivité tridimensionnelle des semi-conducteurs

Le LMOPS a une expérience de plus d'une dizaine d'années dans le domaine des matériaux photoréfractifs, domaine dans lequel nous nous sommes intéressés plus particulièrement à la propagation de faisceaux fins. En effet, ces matériaux ont la particularité, sous certaines conditions, de permettre à ces faisceaux de créer leur propre guide d'onde —*leur propre fibre optique*— à l'intérieur du matériau [Fressengeas et al., 1996]. La caractéristique principale de cet effet non-linéaire qu'est l'effet photoréfractif est de fonctionner à de très faibles intensités, compatibles avec les lasers à faible coût et les réseaux de télécommunication optique. La raison en est qu'il s'agit en fait d'une cascade d'effets linéaires. En conséquence, le prix à payer pour cette forte sensibilité est la complexité des phénomènes mis en jeu et donc de la modélisation résultante.

Nos premiers modèles ont pu être résolus sans l'aide du calcul intensif [Fressengeas et al., 1996], par l'utilisation d'approximations *ad hoc*. Toutefois, dès que les conditions de modélisation n'ont plus permis ces approximations, nous avons eu recours au calcul parallèle dans le cadre du CPER 2000-2006¹ via le Centre Charles Hermite.

Les calculs ont été menés sur la machine à mémoire partagée du Centre, grâce à la collaboration de Stéphane Vialle de Supélec, qui nous a permis de concevoir une programmation bas niveau dédiée afin de répartir efficacement nos calculs sur la machine [Lhomme et al., 2002]. Ces travaux ont permis de montrer le comportement nanoseconde des matériaux photoréfractifs [Wolfersberger et al., 2000, Wolfersberger et al., 2001] dans le cas des lasers impulsifs. Ils ont cependant nécessité un important effort de développement et l'affectation d'un contrat Post-Doctoral d'un an au laboratoire (F.Lhomme).

Aujourd'hui, nous nous intéressons aux matériaux photoréfractifs semi-conducteurs pour lesquels les phénomènes physiques mis en jeu sont encore plus complexes, du fait de la nécessité de considérer les porteurs générés thermiquement. Dans ce cas, les méthodes de modélisation et simulation classiques atteignent leurs limites [Khelifaoui et al., 2006]. C'est sous l'impulsion de ce problème que nous avons développé l'outil, décrit en détail en C.4, afin de disposer d'une méthode fiable pour la résolution de ce problème. Malheureusement, du fait de la complexité des équations mises en jeu, les facteurs limitants sont maintenant la vitesse de calcul et la quantité de mémoire disponible. L'utilisation d'un cluster de calcul de grande taille permettrait de repousser ces limites en utilisant conjointement de nombreux processeurs et en cumulant leur quantité de mémoire.

En effet, nous devons mettre au point nos modèles pas à pas, ce qui nécessite de pouvoir interagir avec les calculs, d'une part en temps réel pour déterminer les causes de divergence des calculs, et d'autre part après convergence, afin d'affiner le modèle. Ceci nécessite donc l'interactivité mentionnée précédemment et une rapidité de calcul inatteignable sans parallélisation. Par ailleurs, si les besoins en mémoire ne se font pas encore sentir, c'est que nos modèles ne sont pas tridimensionnels. Quand ils le deviendront, ce besoin deviendra criant et il sera alors nécessaire de répartir cette mémoire sur toutes les unités du cluster.

¹Thématique *intelligence logicielle*, thème *Calcul, Réseau et Graphisme Haute Performance*, fiche d'action *Simulateur de composants optroniques* <http://cch.loria.fr/presentation/CCH_2/cper_crg_actions/cper_crg_actions005.html>

Pour terminer, il faut préciser que la modélisation des matériaux photoréfractifs semi-conducteurs est applicable telle quelle aux semi-conducteurs non photoréfractifs —auxquels on n’applique pas de lumière— dont la modélisation est une demande très importante de l’industrie de l’électronique. C’est l’objet du projet décrit ci-dessous.

B.1.2 Modélisation 3D des structures semiconductrices multicouches

Dans le cas de nouveaux matériaux semi-conducteurs en couches minces, la simulation numérique, en corrélation avec la caractérisation, est très importante pour étudier et optimiser les propriétés électroniques pour les applications visées. Les structures comportent typiquement une dizaine de couches avec des dimensions de quelques dizaines à quelques centaines de nanomètres. Il s’agit de remonter aux propriétés de transport (évolution du potentiel électrique, de la densité de courant et de la distribution des électrons et des trous) dans ces structures grâce à la résolution numérique des équations couplées de Poisson, de continuité et de transport. Pour résoudre ce type d’équation, des outils, essentiellement basés sur les méthodes de type éléments finis ou différences finies, ont été développées aussi bien par des industriels que par des universitaires. Ces logiciels ne permettent pas (ou difficilement) de modéliser des dispositifs avec des géométries et des conditions aux limites arbitraires, et la complexité des calculs devient rédhibitoire en deux ou trois dimensions. De plus ils sont peu adaptés à l’étude de matériaux nouveaux pour lesquels il y a très peu de données dans la littérature et qui demandent par conséquent une grande souplesse dans la simulation. L’objectif ici est de mettre en oeuvre une méthodologie fiable permettant de simplifier la résolution des équations de transport pour ces structures semi-conductrices et accélérer ainsi le développement de nouveaux dispositifs. Dans ce cadre l’utilisation de la plateforme développée par Supélec et le LMOPS (cf. C.4 page 44) pourra permettre de concevoir une méthode de simulation adaptée à ces dispositifs, grâce notamment à la description formelle du problème et à la simplification du choix de la géométrie et des conditions aux limites. Pour cela il faut disposer de la puissance de calcul nécessaire, surtout dans cette phase de conception où la maîtrise de chaque étape, de la description formelle aux simulations numériques, est primordiale. L’outil ainsi développé trouvera son application aussi bien dans la recherche de nouveaux matériaux semi-conducteurs en couches minces que dans l’industrie.

B.1.3 Problèmes de dérive des composants d’optique intégrée sur LiNbO_3 liés à des relaxations de charges engendrées par la polarisation de ces composants

Nous travaillons depuis 5 ans à la résolution d’un problème majeur des composants d’optique intégrée sur LiNbO_3 qui concerne la stabilité de leur fonctionnement. Nous avons pu montrer que l’origine prépondérante des dérives observées dans ces composants provenait des relaxations électriques qui avaient lieu dans la structure complexe (substrat de LiNbO_3 , guides d’ondes obtenus par diffusion titane, couche de silice) et largement hétérogène de ces composants, lors de leur polarisation à un point de fonctionnement donné. Nous avons également pu montrer qu’une solution à ce problème consistait à modifier la conductivité électrique de surface, plus précisément à lui donner un profil tel que les phénomènes de relaxations électriques en surface (sur moins de 10 microns de profondeur) puissent s’opposer à ceux qui existent dans le volume du substrat. La détermination du profil de conductivité nécessaire (en 2D voire 3D) passe par la résolution d’un système d’équations différentielles qui n’admet de solution que moyennant un certain nombre d’approximations que nous souhaiterions ne pas avoir à faire car elles pourraient ne pas toutes être justifiées. L’outil *Escapade* devrait pouvoir être utilisé avec succès pour cette étude.

B.2 LMPIA

La France est le siège avec ITER et le Laser MegaJoule (LMJ) des deux grands programmes correspondant aux deux filières, magnétique et inertielle dont l’enjeu est avant tout scientifique et technique, mais aussi économique et industriel à long terme. Ces expériences mettent en jeu des réactions de fusion de noyaux d’atomes de la famille de l’hydrogène, avec la promesse de la mise

au point d'une gigantesque source d'énergie [Bertrand, 2005]. Cependant des questions-clés, scientifiques et techniques, conditionnent la mise au point de réacteurs thermonucléaires techniquement fiables et économiquement viables. Il est en effet nécessaire de pouvoir confiner un plasma très chaud (plus de 100 millions de degrés) soit par voie magnétique (ITER) soit par voie inertielle (LMJ).

La plupart des simulations de turbulence résolvent les équations de la mécanique des fluides en présence d'un champ électromagnétique. Le défaut de ces simulations est qu'elles ne décrivent pas correctement l'interaction résonnante entre ondes et particules du plasma (résonances Landau). De ce fait, les coefficients de transport turbulent sont en général surestimés. Une description plus précise du problème requiert l'utilisation d'un modèle cinétique (modèle Vlasov gyrocinétique) sur lequel le LPMIA a acquis une compétence internationale reconnue. Mais l'espace de description de ce modèle pose un redoutable défi de calcul scientifique et d'informatique car il nécessite jusqu'à cinq dimensions [Grandgirard et al., 2006]. De même, la description de l'interaction d'une impulsion laser ultra-intense avec un plasma (LMJ) requiert en particulier la prise en compte des effets relativistes [Ghizzo et al., 2006, Bertrand et al., 2005]. Ceci impose d'abandonner les schémas numériques classiques des années 80 [Filbet et al., 2001] et d'utiliser des techniques récentes d'advections multidimensionnelles sans technique de séparation [Huot et al., 2003]. Le modèle décrivant ces milieux liés à la fusion magnétique ou inertielle est donné par le système d'équations aux dérivées partielles (EDP) Vlasov-Maxwell. La résolution de ces EDP couplées et fortement non-linéaires exige le recours à la simulation numérique et vise l'utilisation de grilles de calcul du fait de la taille des plasmas multi-échelles envisagées et du haut degré de complexité du problème (problème à 5 dimensions!). Cela passe par le développement d'algorithmes spécifiques liés à des méthodes numériques locales pertinentes [Besse and Sonnendrücker, 2003, Besse, 2004] pour le parallélisme à grande échelle. La montée en puissance des ordinateurs parallèles et notamment des grilles de calculs (grille d'expérimentation GRID-5000, grille européenne d'exploitation DEISA) rend désormais possible l'utilisation des codes Vlasov 2D (c'est-à-dire à quatre dimensions dans l'espace des phases). Ce type de problème répond parfaitement à une demande de plus en plus forte de la communauté des physiciens des plasmas chauds, comme en témoigne l'émergence depuis peu de projets équivalents aux états-Unis liés au développement et à l'utilisation intensive de codes Vlasov gyrocinétiques pour l'étude du transport anormal en fusion magnétique.

B.3 UMI 2958

La modélisation des structures périodiques à band gap photonique est basée sur la résolution des équations de Maxwell et se déroule en deux phases :

- analyse fréquentielle
- analyse temporelle

A l'heure actuelle, l'analyse fréquentielle d'une monocouche de cristal photonique peut se traiter sur un poste simple car elle requiert peu de puissance processeur et d'espace mémoire. Par contre le traitement multi-couche est plus demandeur en processeur et en espace mémoire.

Dans un deuxième temps, l'analyse temporelle permet de visualiser la propagation d'une onde lumineuse dans le cristal photonique. Cette résolution est basé sur la résolution des équations de Maxwell par la méthode des éléments finis à l'aide du logiciel commercial Comsol Multiphysics. La résolution de problèmes bi-dimensionnels peut être réalisée sur un système à bi-processeur et avec un maillage normal (pour une structure typique de $8 \mu m \times 8 \mu m$, about 180000 elements or 360000 degrés de liberté sont nécessaires). L'accès à des maillages plus fins n'est pas possible.

Par ailleurs, la résolution des équations de Maxwell pour des structures tri-dimensionnelles à band-gap photonique est tout à fait inaccessible à l'heure actuelle. Ce point est crucial pour le développement et l'optimisation des caractéristiques de ces structures par la centrale technologique. En effet, la bonne connaissance des caractéristiques spatiales et des défauts imprévus liés à la croissance ou des défauts liés au composant - forme, caractéristiques géométriques, aspérités - de la structure périodique vont nous permettre d'optimiser la croissance du composant et ses performances.

Des perspectives de développement sont envisagées pour prédire le comportement macroscopique des matériaux nanocristallins à partir d'un nombre limité de simulations de dynamique moléculaire couplées à l'utilisation d'un réseau de neurones artificiels.

C Réalisations antérieures

Les réalisations antérieures sont présentées équipe par équipe, afin de bien clarifier les compétences de chacun. Toutefois, la plupart de ces réalisations ont été obtenues lors des collaborations mentionnée dans ce document (cf. 2.3 page 14).

C.1 Cortex

L'équipe Cortex étudie depuis une dizaine d'année les systèmes d'inspiration biologique, et développe pour cela ses propres outils logiciels. Elle s'est également impliquée par le passé dans des travaux de parallélisation de systèmes parallèles à grain fin, que ce soit dans le cadre de réseau de neurones à codage fréquentiel [Boniface, 2000] ou impulsions [Rochel and Martinez, 2003]. Plus récemment, Nicolas Rougier, qui expérimente des modèles d'attention visuelle sur plate-forme robotique, a lui aussi développé un simulateur de réseaux de neurones à grain fin. Ce dernier, dont une extension est envisagée dans le cadre du projet, n'est pas parallèle mais est en revanche plus avancé en ce qui concerne l'interaction, puisqu'il propose un architecture « pilotable » et modifiable en cours d'exécution, basée sur les propriétés ergonomique de l'interpréteur `python`. Le modélisateur peut ainsi s'immiscer au sein de la simulation pendant qu'elle s'exécute, pour en modifier des paramètres, des éléments, avec un retour de visualisation `openGL` immédiat. Les solutions d'ergonomie développées dans le cadre de ce projet seront importées dans la présente proposition.

C.2 Supélec

`ParCeL-6` est le dernier modèle et la dernière bibliothèque de programmation cellulaire développés dans le projet `ParCeL` mené à Supélec depuis 1989, et visant à distribuer divers types de simulations à grain fin sur des architectures à gros grain [Vialle et al., 1998, Boniface et al., 1999, Bouzid et al., 2001, Vialle et al., 2002]. `ParCeL-6` fournit les fonctionnalités nécessaires pour créer et connecter des cellules, et définir ainsi des réseaux cellulaires dynamiques [Vialle et al., 2004]. Chaque cellule créée et associée à des fonctions d'initialisation, d'itération et de terminaison, qui définissent le fonctionnement de la cellule à sa création, au cours de sa vie et à sa mort. Ces fonctions peuvent manipuler des variables locales, des variables privées de la cellule et des canaux de communications avec les autres cellules. L'ensemble du réseau cellulaire suit un fonctionnement cyclique : chaque cellule est activée une fois et une seule à chaque cycle. Selon le type de son canal de sortie, les valeurs de ce canal (les résultats de la cellule) sont propagées aux cellules connectées à la fin du cycle (après les calculs), ou à tout moment lorsqu'une cellule désire lire ces valeurs, ou bien plusieurs fois au cours du cycle de calcul mais vers un processeur différent à chaque fois. Ces trois modes de communications correspondent à des fonctionnements synchrones, ou asynchrones, ou bien « hybrides » des cellules. La plupart du temps un fonctionnement synchrone avec des communications regroupées en fin de cycle suffit, mais dans certains cas de systèmes corticaux un fonctionnement plus asynchrone à base de communications en cours de cycle de calcul est nécessaire pour assurer la convergence du système cortical. Ces trois modes de communication et de fonctionnement peuvent être implantés sur des architectures à mémoire partagée, alors que les architectures à mémoire distribuée ne supportent efficacement que le mode synchrone et certaines versions du mode hybride. Dans tous les cas, `ParCeL-6` assure la distribution des cellules sur les différents processeurs de l'architecture, ainsi que l'équilibrage de charge de ces processeurs.

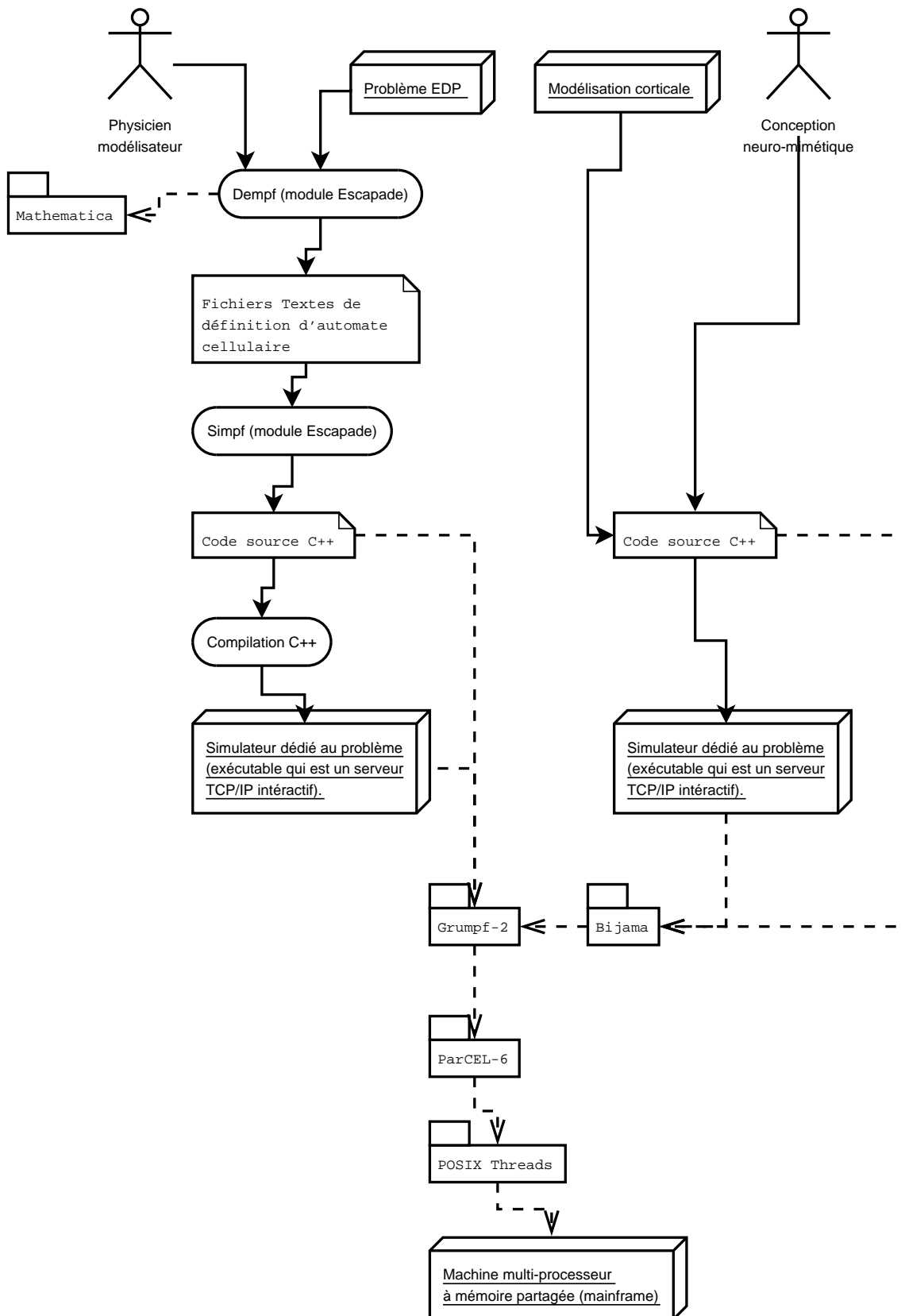


FIG. C.1 – Ce diagramme résume les relations entre les réalisations logicielles existantes. Les flèches pleines décrivent l'enchaînement logique des étapes, les flèches en pointillé désignent la dépendance de la source vis-à-vis de l'extrémité. Voir le texte pour une description du rôle de chacun des modules.

ParCeL-6 a été initialement développé au dessus des POSIX-threads pour des architectures à mémoire partagée. Une deuxième version devait être développée au dessus de MPI pour des clusters, mais il est apparu plus intéressant de la développer au dessus de SSCRAP qui s'adapte autant aux architectures à mémoire partagée qu'aux architectures à mémoire distribuée. L'ensemble a donné naissance à la suite logicielle parXXL qui possède plusieurs runtimes, en s'appuyant notamment sur les POSIX-threads ou MPI, et qui peut s'exécuter indifféremment sur des architectures à mémoire partagée ou à mémoire distribuée [Gustedt et al., 2006].

ParCeL-6 fournit donc un ensemble de fonctionnalités permettant d'implanter des calculs à grain fin sur un réseau de « cellules », et de paralléliser leur exécution sur une machine multi-processeurs à mémoire partagée. S'appuyant sur ces fonctionnalités, nous avons défini la bibliothèque `grumpf`¹. Cette bibliothèque ajoute à ParCeL-6 des fonctionnalités permettant d'en faire une plateforme de développement plus élaborée. Premièrement, `grumpf` permet de définir un réseau d'automates cellulaires, de connectivité quelconque, à l'aide d'héritages de classes C++. Cette librairie encapsule la parallélisation, exprimée sous forme de cellules par ParCeL-6, par des concepts tels que des classes d'unités et de connexions. De plus, avec `grumpf`, le réseau constitué devient *de facto* un serveur TCP/IP, que l'on peut interroger par des clients de façon interactive. Ainsi, le réseau d'automates cellulaires peut sans efforts de développement s'exécuter sur une machine multi-processeurs, et cette exécution peut être contrôlée (pauses, sauvegarde, inspection de certaines unités, visualisation) depuis des postes clients, qui contrairement à la machine parallèle sont les postes de travail des concepteurs du réseau d'automates. Il existe aujourd'hui un ensemble d'outils (cf. figure C.2) faisant de `grumpf` un environnement de développement orienté objet, fournissant des outils de visualisation et de mise au point (debug, watch points,...)

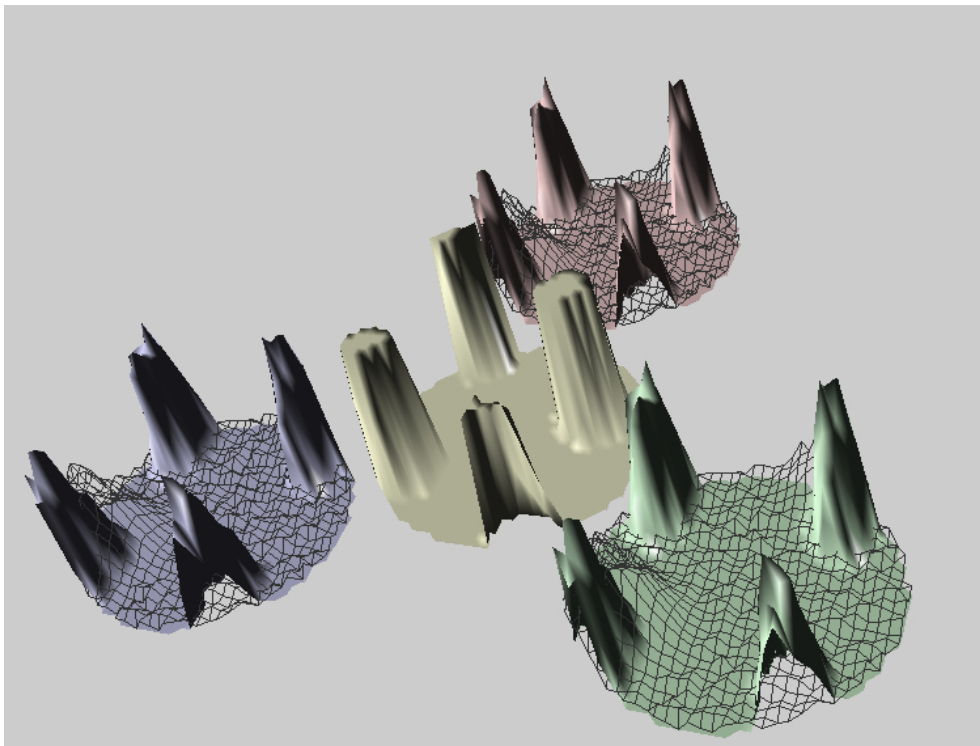


FIG. C.2 – Exemple de visualisation 3D interactive d'un automate cellulaire, réalisée par un client `grumpf`.

¹Graphical Utilities for the Modelling of Parallel Functions.

C.3 Algorille

La réalisation principale de l'équipe Algorille qui sera mobilisée au cœur du projet est la bibliothèque `parXXL`, consécutive de la fusion de travaux de Jens Gustedt (Loria) et Stéphane Vialle (Supélec), comme mentionné en 2.3.2.

Du point de vue du programmeur, `parXXL` se présente comme une pile de toolboxes :

- `par::cpp` : un ensemble d'interface avec le langage C++
- `par::sys` : une interface avec la norme POSIX,
- `par::mem` : des outils de gestion mémoire,
- `par::step` : des outils de gestion de « supersteps » utilisés dans le modèle PRO et dans la programmation des architectures distribuées à gros grain,
- `par::cell` : des outils de gestion de cellules de calcul et de réseaux cellulaires,
- `par::cellnet` : une collection de réseaux cellulaires prédéfinis et optimisés,
- `par::bench` : des outils de test et de mesure de performances pour la réalisation de benchmarks.

`parXXL` constitue une couche d'abstraction entre l'expression naturelle d'un algorithme à grain fin et son implantation réelle sur différentes architectures parallèles et distribuées avec différents supports de communications. La version courante de `parXXL` est disponible sur : <http://parxxl.gforge.inria.fr/> Elle intègre trois implantations de la couche de communication : avec *MPI* pour l'envoi de messages sur architectures distribuées, avec les *threads POSIX* pour le partage de mémoire sur architecture à mémoire partagée, et avec avec *mmap* par « mapping » de fichiers en mémoire pour la gestion de données de très grande taille. Ces trois implantations permettent d'exécuter des applications indifféremment sur une couche de communication ou sur une autre, et d'être efficace en adoptant la couche de communication la plus adaptée à l'architecture utilisée. De plus, l'architecture de `parXXL` permet de gérer un grand nombre de threads (en mémoire partagée) ou de processus MPI (sur une architecture distribuée), et de mener ainsi des expériences à très grande échelle sur des mainframes ou des clusters. De telles expérimentations ont prouvé l'extensibilité de notre approche en termes d'ingénierie, de modélisation et d'algorithmique : les programmes testés ont exhibé de très bonnes accélérations, proche du maximum théorique et se sont avérées reproductibles sur diverses plate-formes.

En plus de `parXXL`, plusieurs projets et réalisations sont issues de l'équipe AlGorille, en particulier nous créons avec nos partenaires des algorithmes et logiciels d'ordonnancement de calcul, pour l'expérimentation d'hétérogénéité de machines, pour la compression à la volée de communications et une suite complète de simulation de grilles (SimGrid).

En terme de plates-formes de calcul, AlGorille est le leader en Grande Région Est pour la plate-forme nationale d'expérimentation de grilles, Grid5000. Cette partie régionale est pilotée par Emmanuel Jeannot et les machines sont accueillies par le LORIA. L'INRIA met à disposition un ingénieur associé pour la gestion et pour l'aide à la mise en place d'expérimentations.

C.4 Escapade

Escapade est un projet développé par Nicolas Fressengeas (LMOPS) et Hervé Frezza-Buet (Supélec), ce projet est déjà opérationnel pour les exécutions parallèles sur machines à mémoire partagée (cf. figure C.1), et s'inclut naturellement dans les perspectives du présent projet (cf. figure 3.1).

L'idée qui dirige cette méthode consiste à exploiter la localité intrinsèque à un problème différentiel pour sa résolution. Nous avons montré comment on pouvait transformer automatiquement un problème exprimé sous forme d'un système différentiel aux dérivées partielles en un automate cellulaire. Ce que nous avons établi est que l'automate cellulaire ainsi obtenu, constitué de plusieurs types de cellules², converge vers un état qui est justement solution du problème différentiel. L'originalité de l'approche tient en ce que la méthode permet d'implémenter tout type de système différentiel pourvu que l'on puisse l'exprimer avec des conditions aux limites de type Dirichlet, dans la version actuelle. Nous insistons sur le fait que le calcul de l'automate cellulaire à partir

²Un type de cellule correspond à une règle de mise à jour.

du problème différentiel discrétisé est automatisé et que cette dernière discrétisation peut être automatisée dans les cas usuels. Précisons également que le résultat de cette automatisation est un ensemble de fichiers textes décrivant l'automate cellulaire. Un logiciel permet ensuite, à partir de cette description, de générer automatiquement un ensemble de fichiers C++, qui une fois compilés et liés avec `grumpf/ParCeL-6`, font du processus de résolution un automate cellulaire parallèle interactif sur machine multi-processeurs à mémoire partagée.

D Expérience du site de Supélec pour l'hébergement de clusters

Supélec a, comme de nombreux sites en France, investi beaucoup d'énergie tant en matériels qu'en logiciels et surtout en personnels sur les sujets connexes au Grid computing.

Dans le cadre des activités en recherche amont, en recherche appliquée et en transfert de technologies, l'école et particulièrement le campus de Metz a été amenée à développer plusieurs types de grilles et de nombreuses compétences.

Clusters et Grid à Supélec :

- un cluster de 32+1 PC 'desktop' sous Linux, utilisé pour :
 - projet ANR ("ANR-CIGC "GCPMF") en technologie Java distribué en collaboration avec Inria-Sophia et Pricing Partners
 - projet parXXL, en collaboration avec l'Inria-Lorraine et le LMOPS (en prévision : pour des pbs du LPMIA)
- un cluster plus ancien de 8 PC serveurs, utilisé pour :
 - une grille de contrôle interactif et tolérant aux pannes de robots à travers Internet, associé à un cluster de Université De Salerne, et en collaboration avec l'Université de Potenza (Italie).
 - déploiement et évaluation de middleware de Grille (Globus-4 et ProActive) à travers Internet en collaboration avec Université de Potenza.
 - Expérimentation et conception d'algorithmes adaptés à une mémoire partagée virtuelle (Kherriged de l'Inria-Rennes).
- un cluster de desktop de 14 PC sous windows en collaboration avec Summit-Systems (qui a rejoint le groupe Misys) pour concevoir et réaliser des serveurs de calculs financiers distribués (Convention d'Etude Industrielle entre Supélec et Summit).
- un cluster hétérogène de 3 PC quadripro, 2 PC bipro et 2 PC monopro : utilisés pour la conception d'algorithmes de calcul intensif pour des systèmes connexionnistes d'inspiration biologique.
- un cluster interactif expérimental de 2 PC bi-opterons préfigurant un ensemble plus complexe dédié à la gestion des ressources audio et vidéo de la SMART ROOM du campus.