

Rapport d'activité 2002 - 2003

Ministère de la Recherche

Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur

950, rue de Saint Priest, 34097 Montpellier CEDEX 5, France

téléphone : +33 4 67 14 14 14

télécopie : + 33 4 67 52 37 63

www.cines.fr

doc@cines.fr

La réalisation de ce rapport a été possible grâce aux concours et à l'excellente mémoire de l'équipe de direction (Francis Daumas, Marcel Pontillon, Jean-Paul Sauter, Georges Urbach), grâce à l'aide d'Olivier Lernout pour l'élaboration et l'édition, à celle de Gérard Vernou pour la collation de données, Elisabeth Gaudron pour la relecture, et de beaucoup d'autres. Qu'ils en soient tous remerciés ainsi que nos utilisateurs sans lesquels ce document n'existerait pas.

SOMMAIRE

1	Présentation du CINES	9
1.1	INTRODUCTION	9
1.2	LES MISSIONS DU CINES	9
1.3	LES EQUIPES DU CINES	10
2	Les moyens informatiques du CINES	13
2.1	LE CALCUL HAUTE PERFORMANCE	13
2.2	LES DONNEES	15
3	Évolutions 2002 et 2003	21
3.1	ÉVOLUTIONS SUR LE CALCUL	21
3.2	ÉVOLUTION DES DONNEES	24
4	Le Calcul Numérique Intensif	27
4.1	PROCEDURE DE DEMANDE	27
4.2	ÉVOLUTION DE LA DEMANDE	27
4.3	ÉTUDE DU CALCUL PAR COMITE THEMATIQUE	29
4.4	REPARTITION DES HEURES PRODUITES	59
4.5	LA VISUALISATION SCIENTIFIQUE	59
4.6	LE COMITE DES CHERCHEURS CALCULANT AU CINES (CCCC)	60
4.7	LE PRIX CINES	60
5	Les données	61
5.1	SUDOC (SYSTEME UNIVERSITAIRE DE DOCUMENTATION)	61
5.2	LIBERFLORIDUS	61
5.3	DEBUCl	61
5.4	IMGT	61
5.5	CLORA	61
5.6	E-BIOSCI	62
5.7	CANAL-U	62
5.8	ÉCOLE FRANÇAISE D'ATHENES	62
5.9	MANUSCRITS MEDIEVAUX	62
5.10	CODOR	63
5.11	COUPERIN	63
5.12	PERSEE	63
5.13	SPARTE	63
6	Les réseaux	65
6.1	LE RESEAU DU CINES	65
6.2	HEBERGEMENTS	65
6.3	EXPERTISES	66
6.4	COLLABORATIONS AVEC RENATER	67
6.5	JRES 2003 : JOURNEES RESEAUX 2003	67
6.6	SERVICES OFFERTS	68
7	Visites de site, accueil scientifique, séminaires, formations	69
7.1	VISITES DE SITES	69
7.2	ACCUEIL SCIENTIFIQUE	69
7.3	JOURNEES THEMATIQUES	69
7.4	FORMATIONS CIREN	70
7.5	FORMATION AU CALCUL PARALLELE	70
Annexes		73
	PERSONNELS DU CINES EN 2002-2003	73
	SIGLES ET ACRONYMES	75

Avant-propos

Le CINES est un jeune établissement (1999) et la période 2002-2003 a été marquée par le premier renouvellement de son Conseil d'Administration et de son Conseil Scientifique. Ces instances sont précieuses car elles apportent un regard extérieur indispensable sur le fonctionnement du Centre et permettent d'orienter ses évolutions. Que tous soient ici remerciés pour leurs nombreuses contributions et par la qualité des échanges que nous avons. L'année 2003, c'est aussi le départ d'Alain Quéré vers d'autres fonctions. Chargé de mettre en place la nouvelle structure (le CINES a succédé au CNUSC), qu'il me soit permis ici de lui rendre hommage pour tout le travail accompli à la tête de cet établissement.

Les années 2002-2003 ont été riches d'activités pour le CINES qui a continué de se développer conformément aux pistes évoquées dans le précédent rapport.

Sur le plan du calcul numérique intensif, le centre a poursuivi sa politique d'équipement avec vigueur, ce qui lui a permis de proposer des ressources à la hauteur des attentes des chercheurs. Suite à un appel d'offres classé sans suite fin 2003, le renouvellement des systèmes actuels, dont la fin de vie prévisible devrait intervenir fin 2004/début 2005, devra rapidement s'opérer pour que le Centre puisse proposer des ressources comparables à nos homologues européens (Angleterre, Allemagne, ...) et internationaux (Etats-Unis, Japon).

Pour la mission sur les données, les projets initiés dans les années 2000-2001 sont maintenant entrés en service et de nouveaux projets prennent la relève. Le développement de « sites à contenus » s'accélère et exige des investissements importants pour accueillir les grands volumes de données associés. Devant les enjeux stratégiques de la diffusion de l'information scientifique et technique, le CINES apporte sa pierre à l'édifice en participant aux réflexions sur le circuit national de dépôt, de signalement, de diffusion et d'archivage des thèses électroniques et sur la mise en place d'un service national d'archivage pérenne.

Enfin, en ce qui concerne la mission réseaux, la collaboration avec RENATER est une indiscutable réussite, notamment sur l'aspect formation puisque près de 175 stagiaires ont été formés au CINES pendant les années 2002-2003.

Le CINES, établissement unique par la complémentarité de ses trois missions statutaires, travaille en étroite collaboration avec d'autres organismes.

Dans le domaine du calcul numérique intensif, les échanges avec l'IDRIS, unité de service du CNRS situé à Orsay, se développent et cela devrait se traduire, à terme, par une meilleure coordination des activités des deux centres et une complémentarité accrue au service de nos utilisateurs.

Sur le plan des données, les relations avec l'ABES se sont intensifiées, notamment face aux grands défis posés par la diffusion de l'information scientifique et technique et l'archivage pérenne.

Thierry Porcher
Directeur du CINES

1 Présentation du CINES

1.1 Introduction

Le CINES, Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur, a été créé par décret du 20 avril 1999 (n° 99-318, JO du 27 avril 1999). C'est un établissement public national à caractère administratif (EPA). Des arrêtés précisent les nominations (pour une durée de 3 ans) de son directeur, de son conseil d'administration et de son conseil scientifique. Ses trois missions statutaires et complémentaires, concernent :

- le calcul numérique intensif ;
- l'exploitation des bases de données d'information et de documentation, notamment celles utilisées dans le secteur des bibliothèques ;
- l'expertise et la formation en matière de réseaux informatiques nationaux et internationaux et en matière de technologies associées.

1.2 Les missions du CINES

1.2.1 Mission calcul numérique intensif

Le CINES fournit un service de calcul intensif à la recherche publique nationale

Le centre donne, aux chercheurs des universités et des organismes publics de recherche français, accès à un ensemble de moyens informatiques permettant non seulement d'effectuer des simulations numériques de grande taille mais aussi d'en stocker les résultats et d'en permettre l'analyse à distance. Les architectures des supercalculateurs mis à disposition autorisent la réalisation de simulations numériques sur un très grand nombre de processeurs (aujourd'hui quelques centaines, dans le futur quelques milliers).

Ce service est disponible 24h/24h, 365j/an et accessible à distance dans d'excellentes conditions (1 Gb/s) via RENATER.

Le CINES participe à l'infrastructure nationale de calcul intensif

Le dispositif actuel national comprend deux centres nationaux : l'IDRIS, unité de service du CNRS, et le CINES. La modalité d'accès à ces deux centres est identique pour tous les chercheurs. Pour le CINES, une attribution annuelle des ressources est effectuée par son Conseil Scientifique après expertise des dossiers par les Comités Thématiques (structures communes aux 2 organismes).

Le CINES propose une assistance à l'utilisation de ses moyens

Une aide à l'utilisation des moyens de calcul et à l'optimisation des codes est proposée, soit à distance (téléphone, courriel), soit dans le cadre d'un accueil sur site. Des journées d'animation thématique complètent le dispositif.

Une structure spécifique, le CCCC (Comité des Chercheurs Calculant au CINES), permet d'établir un dialogue permanent entre le CINES et ses utilisateurs. Un recueil de l'expression des besoins et un retour sur la qualité des services proposés par le CINES sont établis lors de réunions périodiques (tous les trois mois environ).

Le CINES propose des formations à la programmation parallèle et à la visualisation scientifique.

1.2.2 Mission données

Le CINES héberge des applications nationales

Le CINES héberge des applications nationales nécessitant la mise en œuvre de moyens informatiques importants. Il en assure l'administration, la surveillance (exploitation) et la sauvegarde des données.

Le CINES contribue à la diffusion de l'information scientifique et technique

Le CINES met en œuvre des configurations matérielles et logicielles permettant de diffuser, via l'Internet, de grandes masses d'informations scientifiques et techniques. Structurés autour de bases de données de grande taille, de nombreux projets utilisent les ressources informatiques mises en œuvre (une quinzaine de projets à ce jour). Si nécessaire, le CINES peut contribuer au développement d'applications mettant en œuvre des bases de données et des services WEB.

1.3.3 Mission réseau

Cette mission s'appuie très largement sur le partenariat noué avec RENATER.

Dans ce cadre, le CINES organise les formations CiRen sur des thématiques telles que IPv6, le protocole de routage BGP, la sécurité, ...

Par ailleurs, le CINES participe en tant qu'expert, à l'évolution du réseau régional et du réseau métropolitain et dispose d'un réseau IPv6 opérationnel.

1.3 Les équipes du CINES

Le CINES est organisé en quatre services.

Le service assistance

Le service assistance aux utilisateurs comprend 11 permanents et est constitué d'une équipe pluridisciplinaire couvrant principalement deux grands domaines : le calcul intensif et les systèmes d'information.

Calcul intensif

Dans ce domaine, le service assistance :

- aide les utilisateurs à mener à bien leurs calculs sur les supercalculateurs du CINES (800 utilisateurs dont une centaine de nouveaux chaque année pour 250 projets environ) ;
- organise et effectue des formations ;
- propose de l'aide pour la visualisation des résultats des simulations numériques ;
- propose un accueil scientifique sur site pour l'optimisation et la parallélisation de code.

Systemes d'information

Dans le cadre de la mission données, le service assistance effectue du conseil, du développement et de la mise en œuvre d'applications utilisant une ou plusieurs technologies parmi celles du WEB, des bases de données relationnelles, de la diffusion multimédia, ...

Le service a par ailleurs la charge, en liaison avec les autres services du centre, de mettre en place un service national d'archivage pérenne de documents électroniques.

Le service systèmes et réseaux

Composée de 9 personnes (ingénieurs et techniciens), il est l'architecte des systèmes informatiques (matériels, logiciels et réseaux) du CINES.

Ses missions principales sont :

- de définir, de configurer et d'administrer l'ensemble des systèmes informatiques du centre (que ce soit pour des utilisateurs extérieurs ou pour le personnel). Cela concerne notamment : les supercalculateurs, les serveurs (WEB, applicatifs, de fichiers, graphique), les stations de travail, la robotique, ... ;
- de définir, de configurer, d'administrer les infrastructures réseaux ;
- de veiller à la sécurité des systèmes informatiques ;
- d'effectuer des actions de veille technologique pour préparer les évolutions futures du centre.

Le service production

Cette équipe a en charge les moyens de « production », c'est-à-dire l'ensemble des services utilisés quotidiennement par tous nos utilisateurs : chercheurs (pour le calcul intensif), personnels des bibliothèques (pour les services de catalogage) et un public très large pour les divers services W3.

Cette équipe de 8 personnes a pour missions :

- d'assurer un fonctionnement « NON STOP » pour permettre la disponibilité 24h/24 des services du centre. Son organisation interne inclut un système de veille à distance et permet à tout instant, de jour comme de nuit, de disposer d'un personnel apte à intervenir sur tout matériel ou service défaillant ; l'objectif étant de réduire au strict minimum la durée de tout arrêt inopiné ;
- d'offrir un service de « Hot line » qui dialogue avec les utilisateurs et assure l'interface avec les spécialistes du centre.

Cette équipe a la charge d'établir les divers bilans mensuels ou trimestriel qui récapitulent l'usage et les performances des différents services surveillés.

Le secrétariat général

Le CINES, établissement public national à caractère administratif, doit assurer une gestion aussi diversifiée que tout établissement doté comme lui de la personnalité morale et de l'autonomie financière. Les personnels qui sont affectés dans les services administratifs et financiers du centre (11 personnes) doivent faire preuve de compétences polyvalentes et étendues :

- comptabilité, du budget jusqu'au compte financier ;
- achats, y compris les marchés publics dont certaines opérations s'élèvent à plusieurs millions d'euros ;
- gestion « utilisateurs » : conventions, comptes scientifiques ;
- services généraux ;
- gestion des personnels ;
- communication, documentation, formation.

Le service assure aussi la gestion et l'évolution des installations techniques nécessaires au bon fonctionnement des matériels informatiques.

Récapitulatif

- **Effectifs fin 2003**

Services	effectifs
service assistance	12
service systèmes et réseaux	9
service production	8
services administratifs et financiers	11
équipe de direction	6

- **Budget** (hors charges personnels, en M€ HT)

	2001	2002	2003
Fonctionnement	1,48	2,09	2,24
Amortissement	2,42	3,13	3,53
Équipement	5,69	5,49	6,17

2 Les moyens informatiques du CINES

Ce chapitre présente une photographie des équipements en place au centre à la fin de l'année 2003 tant pour le calcul de haute performance que pour les activités concernant la gestion des données sous leurs différentes formes et celles relatives aux réseaux. L'évolution de ces équipements au cours de la période 2002-2003 représente une part importante des activités et fait l'objet du chapitre suivant.

2.1 Le calcul haute performance

Une offre matérielle diversifiée

Sous l'impulsion de la demande et avec l'appui du ministère de la recherche, les moyens de calcul de haute performance ont évolué de manière conséquente durant ces dernières années. Le CINES s'est placé dans les cinquante premiers mondiaux pour la puissance de calcul et la diversité des équipements a été préservée.

Supercalculateur IBM à nœuds SMP

Au 31 décembre 2003 le supercalculateur IBM propose **31 nœuds de calcul** sous le système d'exploitation AIX : 2 nœuds de type Regatta à 32 processeurs et 29 nœuds de type NH2 de 16 processeurs.

Les deux nœuds Regatta sont équipés chacun de 32 processeurs **Power4** à 1,3 GHz qui partagent 64 Go de mémoire. Chaque nœud de calcul de type NH2 est composé de 16 processeurs **Power3+** cadencés à 375 MHz qui partagent une mémoire de 16 Go.

Quatre nœuds NH2 quadri-processeurs sont dédiés aux entrées/sorties. Ils sont équipés chacun de 4 processeurs Power3+, de 2 RIO (Remote I/O Drawer), de 8 Go de mémoire et de 3 cartes SSA.

Le tout est interconnecté par un switch « Colony ».

L'ensemble permet d'afficher une puissance crête théorique de **1 Teraflops** (dont un tiers en technologie Power4).

Un espace de travail de 6 To utiles sur disques SSA de 36,4 Go, configurés en RAID 5 et répartis sur 6 boucles, est directement attaché au calculateur et accessible par le système de fichiers GPFS.

L'architecture de cette machine combine deux niveaux de parallélisme : intra-nœud en utilisant le partage de mémoire, et inter-nœuds par passage de messages.

La répartition des tâches est effectuée par l'ordonnanceur « LoadLeveler » (IBM).



IBM P690/Regatta
64 Power4



IBM SP3/NH2
464 Power3+

Supercalculateur SGI à mémoire partagée

Supercalculateur à mémoire logiquement partagée, l'**ORIGIN3800** est équipé de **768 processeurs R14000** cadencés à 500 MHz. Il offre une puissance crête théorique totale de **768 Gigaflops**.

Ce système est exploité en deux configurations : une à 512 processeurs partageant 256 Go de mémoire et une à 256 processeurs partageant 128 Go de mémoire.

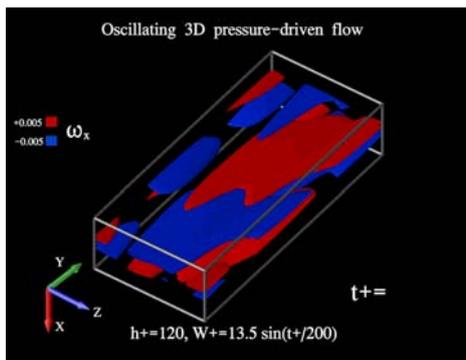
Un espace de travail de 1,6 To utiles sur une baie de disques Fiber Channel TP9400 configurés en RAID 5 est partagé entre les deux configurations via un frontal de services gestionnaire de CXFS (Meta Data Server).

Basée sur le principe d'une mémoire logiquement partagée (technologie ccNuma), chaque configuration fonctionne avec une seule image système. La répartition des tâches est confiée au logiciel LSF de Platform Computing.



SGI ORIGIN3800

Post-traitement



SGI ONYX2

8 processeurs

4 « pipes graphiques »

mémoire 4 Go



Un équipement de visualisation scientifique local permet de représenter par des séquences animées les résultats des calculs. Il s'appuie sur un serveur **Onyx2** équipé de 4 « pipes » graphiques IR3, 8 processeurs et 4 Go de mémoire. Le logiciel Vizserver (SGI) permet de visualiser à distance (sur le bureau de l'utilisateur) les séquences animées en minimisant la bande passante réseau par compression du flux vidéo.

- **Un choix de logiciels**

Afin de tirer le meilleur parti de ces équipements, une palette de logiciels est à la disposition des chercheurs.

- Suivant l'environnement choisi, la gestion du parallélisme s'effectue par des directives OpenMP lorsque la mémoire est partagée et par des appels à la bibliothèque MPI pour le passage de messages.
- PROF, GPROF, PDBX, XPDBX, VT et TotalView sont les outils d'aide à la parallélisation et à la mise au point des codes.
- L'utilisateur peut également faire appel aux bibliothèques mathématiques suivantes : NAG, IMSL, ESSL, PESSL, LAPACK, ScaLAPACK.
- Enfin divers logiciels spécialisés favorisent l'utilisation du parallélisme dans certaines disciplines, notamment la chimie et la modélisation moléculaire (ADF, Amber, CHARMM, Crystal, Discover, Dock, Flexx, Gamess, Gaussian, Gold, Gromos, Hondo, NAMD), la physique (Abaqus, Castem) ou la mécanique des fluides (Fluent, Star CD).
- La visualisation s'appuie sur les logiciels Wavefront et Vizserver. Le logiciel de traitement d'images Huygens (déconvolution) est aussi disponible.

2.2 Les données

Gestion des données pour le calcul

Les deux supercalculateurs ont accès, via des connexions Gigabit Ethernet, à un serveur de fichiers constitué d'un « cluster » de deux **SGI O2100** quadri-processeurs, auquel est reliée en SAN, par l'intermédiaire de 2 « switches » Brocade SW3200 (8 ports à 2 Gb/s), une baie de disques **HDS9570V**. Celle-ci offre **14 To** d'espace disque utile, sécurisé en RAID 5. Les systèmes de fichiers font l'objet de montages **NFS**.

Le logiciel Failsafe assure la haute disponibilité du « cluster » et le système **DMF** de SGI la migration des fichiers sur une robotique **StorageTek 9310** comportant à ce jour 1500 alvéoles disponibles pour 4 lecteurs 9840 et 5 lecteurs 9940. Ce robot assura également, à terme, la sauvegarde des autres données hébergées sur le centre.



Librairie STK 9310
1500 alvéoles



Baie HDS HV9570
14 To



Serveur de fichiers
Cluster : 2 x SGI O2100

Bases de données relationnelles

Un bi-processeur IBM H50, à base de PowerPC604e à 332 MHz, constitue le serveur de bases de données relationnelles. Doté de 512 Mo de mémoire, il gère 80 Go d'espace disque. Le moteur relationnel disponible est le SGBD SYBASE. Cette plate-forme héberge des bases de données à caractère national : DEBUCI (Coopérations Internationales des Universités), IMGT (données en immunogénétique), IFN (Inventaire Forestier National), etc.

Bibliothéconomie

Depuis de nombreuses années le centre fournit des prestations dans le cadre des projets de la SDBD (Sous-Direction des Bibliothèques et de la Documentation). Le catalogue SIBIL et les équipements qui lui étaient dédiés ont été arrêtés dans les premiers jours de 2002. Le CINES héberge pour le compte de l'ABES (Agence Bibliographique de l'Enseignement Supérieur) les plates-formes du Sudoc (Système Universitaire de Documentation). Le Sudoc a migré en 2003 vers un environnement ouvert UNIX, entraînant le remplacement du serveur central TANDEM par un SUN.

Ce serveur central est complété par un frontal de consultation qui est une machine **SUN Ultra Enterprise2** monoprocesseur (US11/200 MHz) équipée de 512 Mo de mémoire. L'administration du Sudoc est confiée à un biprocesseur BULL Estrella.



Sudoc
Serveur SUN



Serveur multimédia
Sun 4500

Multimédia

Un serveur **SUN E4500**, équipé de 6 processeurs Ultra SPARC II/336 MHz et de 2 Go de mémoire centrale, est dédié aux applications multimédia. Un espace disque de 1,6 To est connecté en « Fiber Channel », il offre 800 Go d'espace utile sécurisé en miroir. La sauvegarde de l'ensemble des données est effectuée via TSM sur un robot GRAU ABBA/J dédié aux bases de données et aux données multimédia.

Le serveur multimédia héberge des serveurs W3 qui s'appuient sur Apache et il permet de diffuser des documents de type textes, hypertextes, images, vidéos (Helix).

Ce serveur sera remplacé en 2004 par un ensemble de serveurs partageant les mêmes équipements réseau et la même infrastructure de stockage.

Différents serveurs départementaux dédiés à des applications spécifiques (BIU Montpellier, Plei@d du CNAM-LR, ...) sont également hébergés.

Les réseaux

Des serveurs spécialisés supplémentaires complètent les équipements lourds destinés au calcul ou aux bases de données, avec pour vocation d'offrir des services de type : serveur de listes, serveur Web, serveur de noms, serveur de logiciels (LOGIDEC, Anti-Virus), etc.

Le CINES héberge le NR (Nœud RENATER, anciennement dénommé NRD, nœud régional distribué) du réseau national RENATER et le PCR (Point de Concentration Régional) du réseau régional R3LR. Trois artères à 2,4 Gb/s relient le NR à ses voisins (Toulouse, Lyon, Marseille).

Le CINES est directement connecté sur le NR avec un agrément à 1 Gb/s pour le trafic externe à la région. Parallèlement il possède un accès sur le réseau métropolitain à haut débit HDMON qui relie les organismes montpellierains à 1 Gb/s.

L'accroissement des bandes passantes a permis l'émergence de nouvelles applications s'appuyant sur les nouvelles technologies telles que la visualisation à distance, les expériences de calcul distribué, le « streaming » vidéo ou la visioconférence.

Le réseau interne du CINES comporte schématiquement trois branches correspondant à des niveaux de sécurité différents :

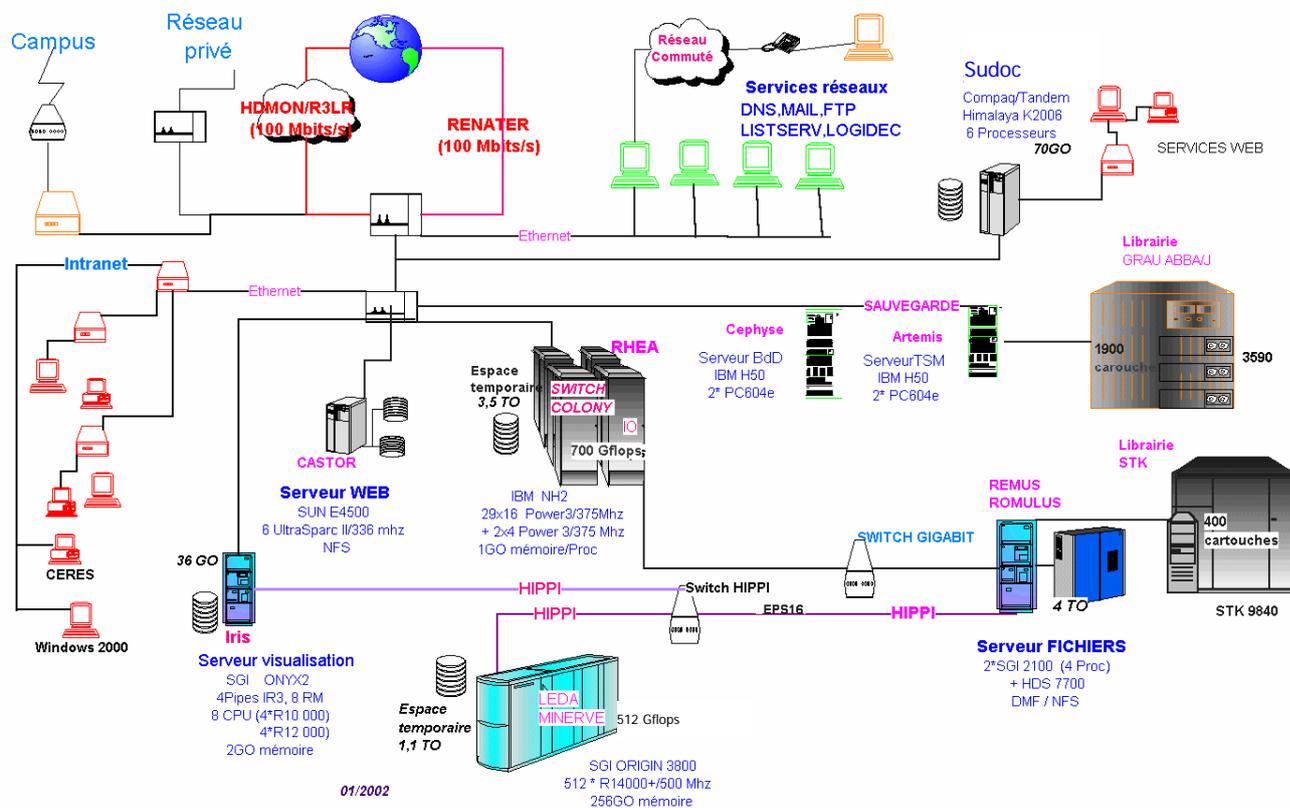
- le réseau interne (intranet) ;
- le réseau des serveurs à accès par identification (calcul, bases de données...) ;
- le réseau des serveurs à accès public (W3, Listserv).

Si l'Ethernet 100 constitue l'ossature de l'intranet , les serveurs « publics », les machines de calcul et le serveur de fichiers sont aujourd'hui interconnectés par des liaisons au Gb/s.

Les deux pages suivantes présentent deux schémas de ce réseau (début 2002 et début 2004).

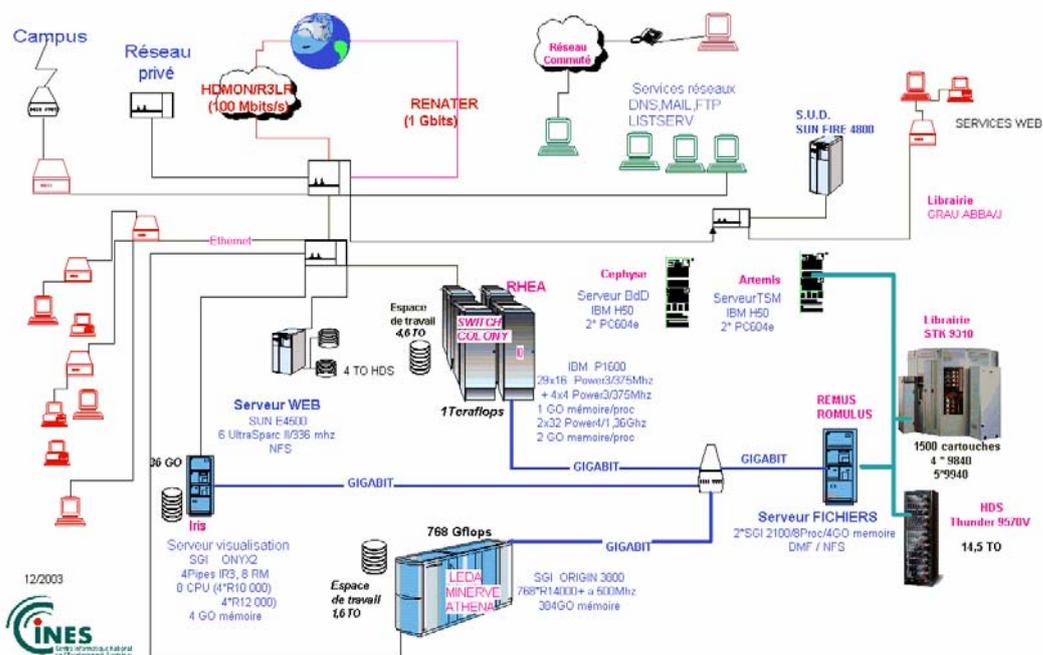
Configuration du CINES

Janvier 2002



Configuration du CINES

Janvier 2004

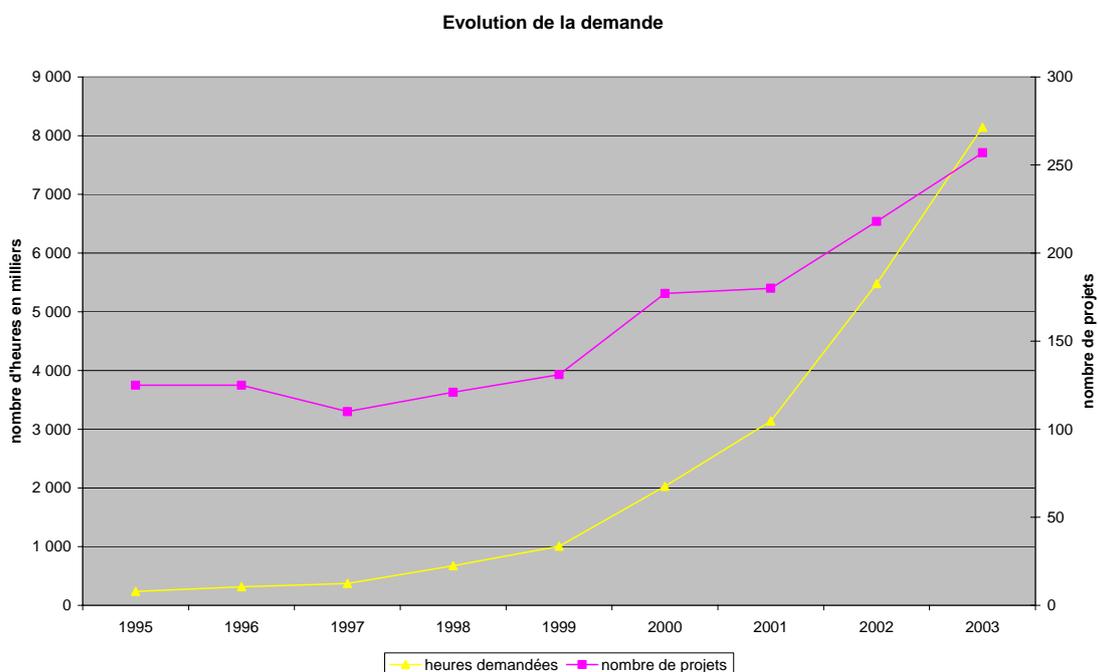


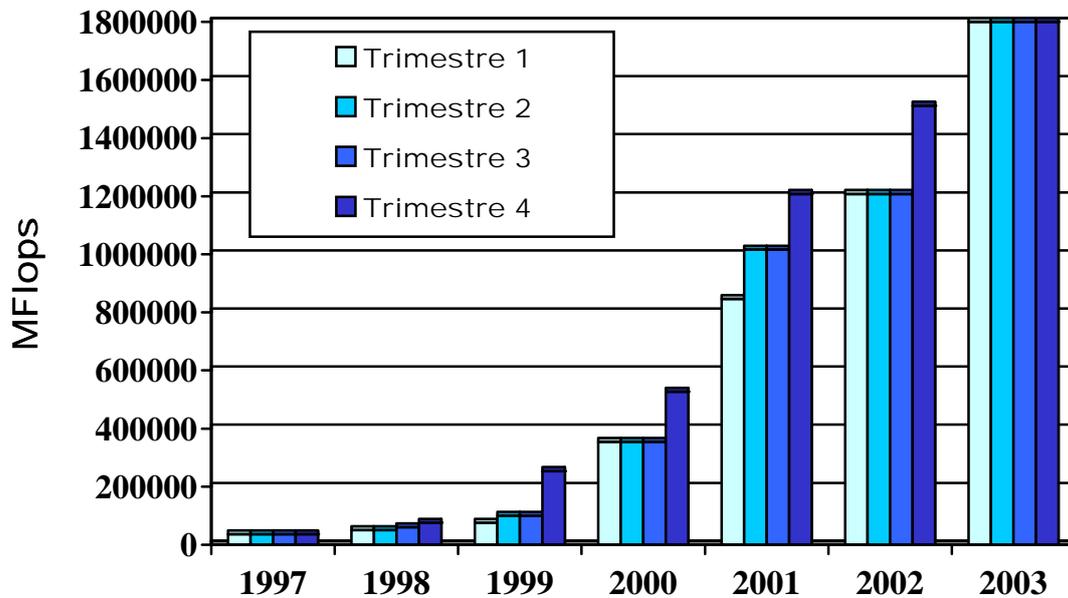
3 Évolutions 2002 et 2003

L'évolution de la puissance de calcul installée au CINES suit la demande et la forte charge régulière des machines montre que les chercheurs sont capables d'utiliser quasi instantanément les ressources mises à leur disposition. Cette évolution de puissance pure doit s'accompagner d'une augmentation des moyens de stockage et d'accès aux données, qui ont constitué l'essentiel des investissements en 2003.

3.1 Évolutions sur le calcul

Le nombre de projets et le volume d'heures demandées ont fortement progressé sur la période 2001-2003 comme le montre le graphique suivant.



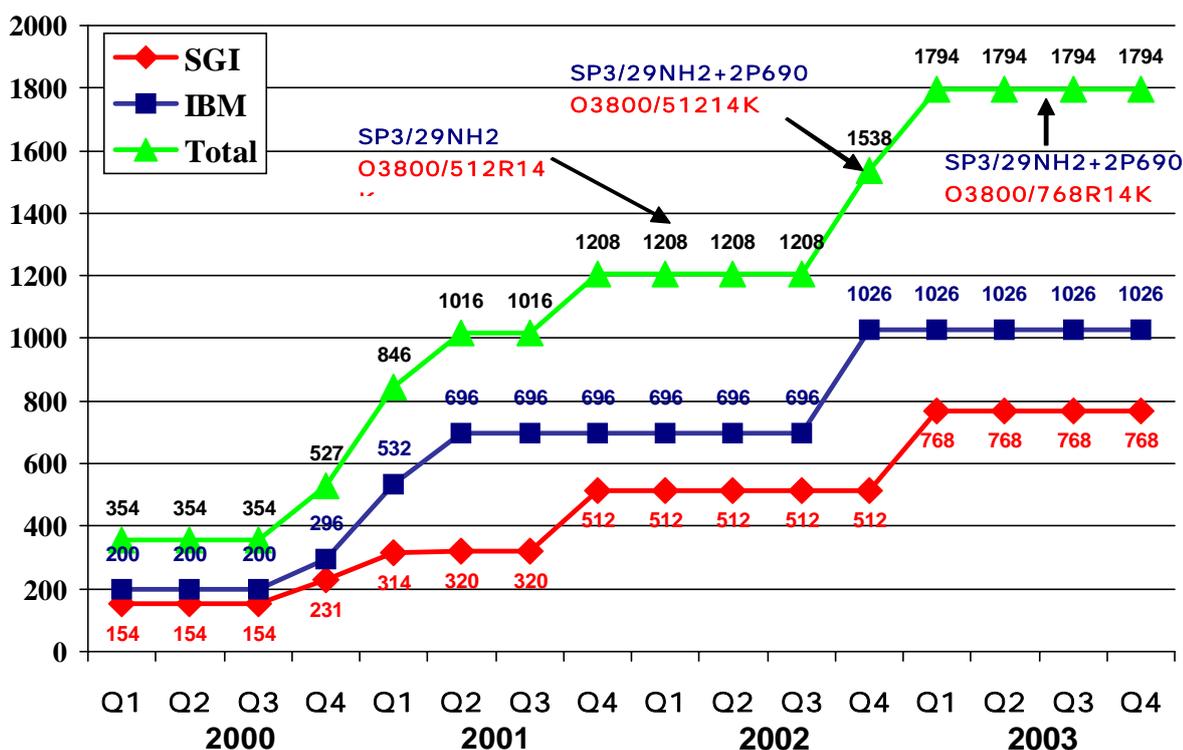


Puissance totale installée

Évolution de la puissance disponible

Depuis juin 1994, à partir des 4 GFlops du premier supercalculateur parallèle installé au centre, la puissance totale offerte croît de façon exponentielle. L'évolution technologique et la baisse des coûts ont permis cette progression. Même si les années 2002-2003 n'ont pas permis de maintenir le rythme d'un quasi-doublement annuel de la puissance, la programmation d'un prochain saut important permettra de dépasser les projections antérieures.

Evolution des systèmes 2001-2003



Date	Configuration	Mémoire	Puissance
Février 2001	installation switch Colony sur SP3 : 1 Go/s		
Mai 2001	O3800 : 160 processeurs R14000/500 MHz	80 Go	160 GFlops
Juin 2001	SP3 : 29 NH2 (16 processeurs P3+/375 MHz)	224 Go	700 GFlops
Juin 2001	O3800 : 320 processeurs R14000/500 MHz	160 Go	320 GFlops
Juillet 2001	Arrêt SP2		
Novembre 2001	Arrêt O2000		
Décembre 2001	O3800 : 512 processeurs R14000/500 MHz	256 Go	512 GFlops
Octobre 2002	SP3 : ajout 2 Regatta (32 procs Power4, 1,3 GHz)	64 Go	330 GFlops
Décembre 2002	O3800 : ajout 256 processeurs R14000/500 MHz	128 Go	256 GFlops

Mémoire distribuée ou partagée

Si la puissance est un paramètre essentiel, la diversité architecturale des environnements proposés est aussi un facteur important dans le choix des utilisateurs. La machine SGI à image système unique et la machine IBM à gros nœuds SMP présentent des offres complémentaires et équilibrées.

Au cours de la période 2002-2003 l'environnement SGI a été complété par une machine de 256 processeurs juxtaposée à la machine de 512 processeurs déjà installée. Côté IBM, partageant le même réseau d'interconnexion « SP2 colony », ont cohabité 29 nœuds SMP de 16 processeurs Power3 et 2 nœuds P690 (Regatta) à base de processeurs Power4 (1,3 GHz).

Outils

MPI est le standard pour le passage de messages et a remplacé PVM. OpenMP est peu utilisé.

Le palmarès des cinq logiciels les plus utilisés au CINES fait apparaître dans l'ordre NAMD (Mécanique des fluides), AVBP, Gaussian (Chimie), CHARMm (Chimie) et Fluent (Mécanique des fluides).

Pré et Post traitements

- Serveurs de mise au point

Le serveur appelé IO qui assure la connexion sur l'environnement IBM SP et la mise au point interactive des programmes est hébergé par un nœud NH2 à 16 processeurs. La connexion sur les machines SGI s'effectue directement sur une partition du calculateur.

- Serveur de fichiers

Comme tous les grands centres, le CINES a connu une très forte progression du volume de données pour les environnements scientifiques. L'apport de puissance supplémentaire dû à l'installation des nouveaux nœuds Regatta de la machine IBM et à l'ajout de la seconde machine O3800 de SGI, a amplifié l'accroissement naturel. Malgré un espace disque de 4To et une gestion de la hiérarchie des supports par le logiciel DMF, la nécessité d'une réflexion globale sur les besoins de stockage s'est avérée urgente. Elle a eu pour effet :

- un doublement de la puissance du serveur NFS (cluster de deux SGI Origin 2100 quadri-processeurs). Quatre interfaces Fiber Channel à 2 Gb/s ont été ajoutées sur chacune des deux machines ;
- l'acquisition, en septembre 2003, d'une baie de stockage HDS 9570V sécurisée offrant 14 To utiles en architecture RAID5. L'appel d'offres concernant cette acquisition permettra de faire évoluer l'espace de stockage jusqu'à 54 To dans les deux ans.

Les supercalculateurs ont accès, via des connexions Gigabits au serveur de fichiers auquel est relié la baie HDS en SAN par l'intermédiaire de 2 « switchs » Brocade SW3200 (8 ports à 2 Gb/s).

Plus de 10 millions de fichiers sont accessibles via NFS depuis le serveur de fichiers. Quelques secondes sont nécessaires pour rapatrier les fichiers sur disque lorsque DMF les a migrés sur support magnétique.

- Espace de travail local

Afin de permettre une exécution fluide des travaux nécessitant de hauts débits d'entrées/sorties, les environnements de calcul ont été dotés d'un espace disque local sur lequel peuvent être copiées temporairement les données :

- un espace de travail de 6 To utiles sur disques SSA de 36,4 Go chacun, configurés en RAID5 et répartis sur 6 boucles, est directement attaché au calculateur IBM et accessible par le système de fichiers parallèle GPFS ;
- la baie de disques SGI TP9400 a doublé de capacité pour offrir 1,6 To utiles. Cet espace est partagé entre les deux supercalculateurs SGI via un frontal de services gestionnaire de CXFS.

3.2 Evolution des données

Le tableau ci-dessous résume les principales évolutions matérielles effectuées dans ce cadre dans la période 2002 et 2003.

Date	Matériel	Caractéristiques	Fonctions
Septembre 2003	Baie HDS9570V	14 To utiles en RAID5	Données du calcul
Novembre 2003	Robot STK9310	5500 alvéoles, 4 lecteurs 9840 et 2 lecteurs 9940	Toutes données

Robotique

Depuis 2001 une librairie Storagetek 9740 était dédiée aux données du calcul, tandis que l'ancien robot GRAU adressait les autres types de données (SGBD, multimédia...). Compte tenu de la forte croissance observée du volume des données hébergées au CINES, une étude sur l'évolution des moyens de stockage magnétique a été réalisée début 2003. Suite aux conclusions de ce travail, les bandothèques existantes ont été remplacées en novembre 2003 par un robot STK 9310, comportant 5500 alvéoles pour une capacité totale théorique de 1,1 Po (Péta Octets) hors compression sur des cartouches 9940 de 200 Go. Dans une première phase, le CINES n'utilise que 1500 alvéoles.

Le robot est équipé de 4 lecteurs 9840 et de 2 lecteurs 9940. Les médias 9840, dont la capacité est de 20 Go, sont utilisés pour la première copie des données car ils permettent d'avoir un meilleur temps de restitution (moins de 10 s) que les 9940. En effet, ces médias offrant une capacité de 200 Go ont un temps d'accès supérieur (1 minute environ) et sont donc réservés à la seconde copie.

Diffusion de documents

Comme indiqué dans le précédent rapport d'activité, plusieurs projets ont démarrés en 2002-2003 concernant l'hébergement de grand volumes de données. Le CINES héberge maintenant, au-delà des sites de références tel que catalogue du Sudoc (ABES) des « sites à contenus ». Citons ici deux projets majeurs opérationnels.

Le 9 avril 2003 était inauguré à Athènes la bibliothèque numérique de l'Ecole Française d'Athènes (EFA). Baptisée **CEFAEL** (Collection de l'Ecole Française d'Athènes En Ligne), elle regroupe l'intégralité des ouvrages publiés par l'EFA depuis 1877, soit plus de 500 volumes pour 250 000 pages. L'hébergement de l'application et de son portail au CINES est la première illustration de cette évolution et certainement le premier pas vers un service élargi à d'autres publications universitaires.

Dans le domaine de la diffusion multimédia, le CINES diffuse depuis avril 2003, via le portail **CANAL-U** (maîtrise d'œuvre SFRS/CERIMES) plus de 14 000 vidéos appartenant à 10 chaînes universitaires.

Vers un service d'archivage national pérenne

Réservoir de documents électroniques à l'échelle nationale, le CINES a entrepris une réflexion sur la mise en place d'un service d'archivage national pérenne. L'objectif premier est de pouvoir conserver sur le très long terme des documents électroniques en prenant en charge le vieillissement des supports et l'obsolescence des formats. Parmi les premières applications qui utiliseront ce service, citons le projet « Thèses électroniques » (DES/SDBD) et PERSEE.

Hébergement de serveurs externes

Profitant du savoir-faire du centre en termes d'exploitation des machines et de la commodité d'excellents accès au réseau, certains établissements géographiquement proches et dépendant du Ministère de l'Éducation Nationale ont souhaité confier leur équipement informatique au CINES. Le centre abrite la machine du système de gestion local de la Bibliothèque Inter-universitaire de Montpellier. De même, le serveur pédagogique du Rectorat de l'Académie de Montpellier (CRDP) est installé au CINES ainsi que le serveur d'enseignement à distance du CNAM (PLEI@D) pour le sud de la France.

4 Le Calcul Numérique Intensif

4.1 Procédure de demande

Depuis 1995 un mécanisme d'appel d'offres national a été mis en place avec l'IDRIS, centre de calcul intensif du CNRS. Chaque année en octobre, les chercheurs peuvent déposer une demande de ressources via un formulaire commun au CINES et à l'IDRIS. Des groupes d'experts regroupés au sein de 9 comités thématiques (voir chapitre 1) analysent les demandes. Ils donnent des avis scientifiques :

- A : projet d'excellente qualité à soutenir
- B : projet acceptable
- C : projet refusé

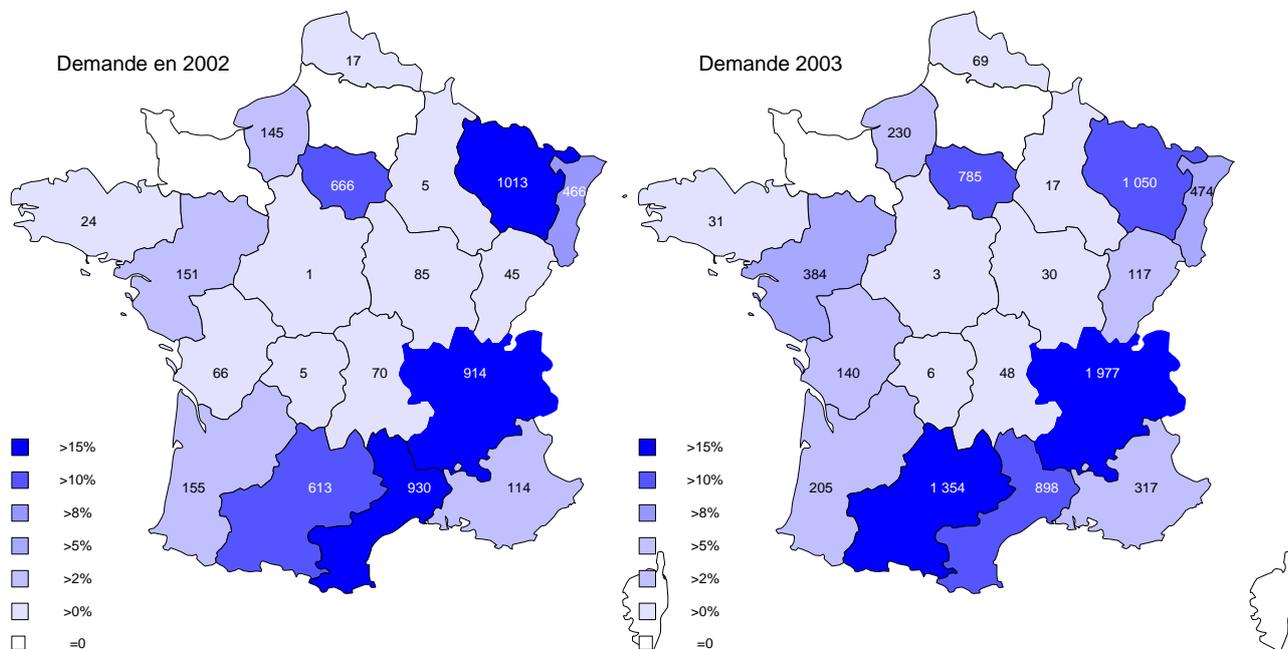
Chaque année en janvier, le Conseil Scientifique du CINES se réunit avec les présidents des comités thématiques pour déterminer les attributions. En cours d'année, sur demande argumentée, il est possible d'obtenir une attribution complémentaire ou de déposer un nouveau dossier. En fin d'année, les chercheurs ayant obtenu des ressources sont tenus de produire un rapport l'utilisation des ressources du centre.

Notons aussi qu'il est possible, notamment avant de faire une demande, d'obtenir une ouverture de compte (très limitée en heures de calcul) pour faire un essai.

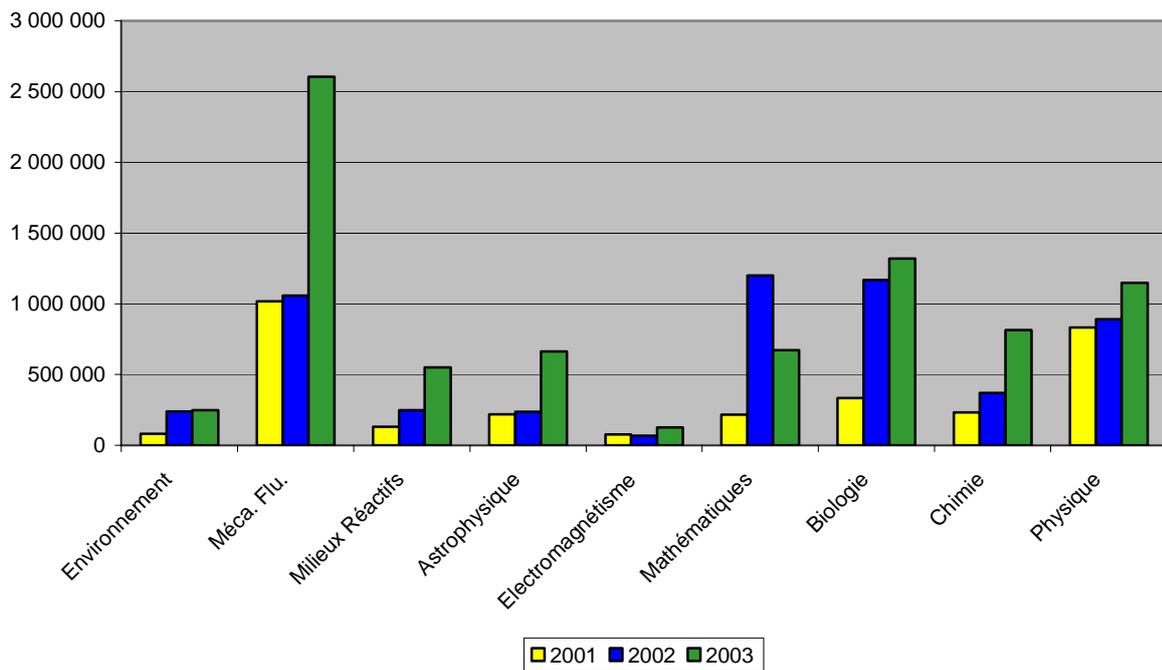
Pour la campagne 2003, la procédure de demande et d'analyse des dossiers a été dématérialisée grâce au logiciel DARI développé en interne.

4.2 Evolution de la demande

Comme le montrent les cartes ci-dessous le CINES est bien implanté sur l'ensemble du territoire national.

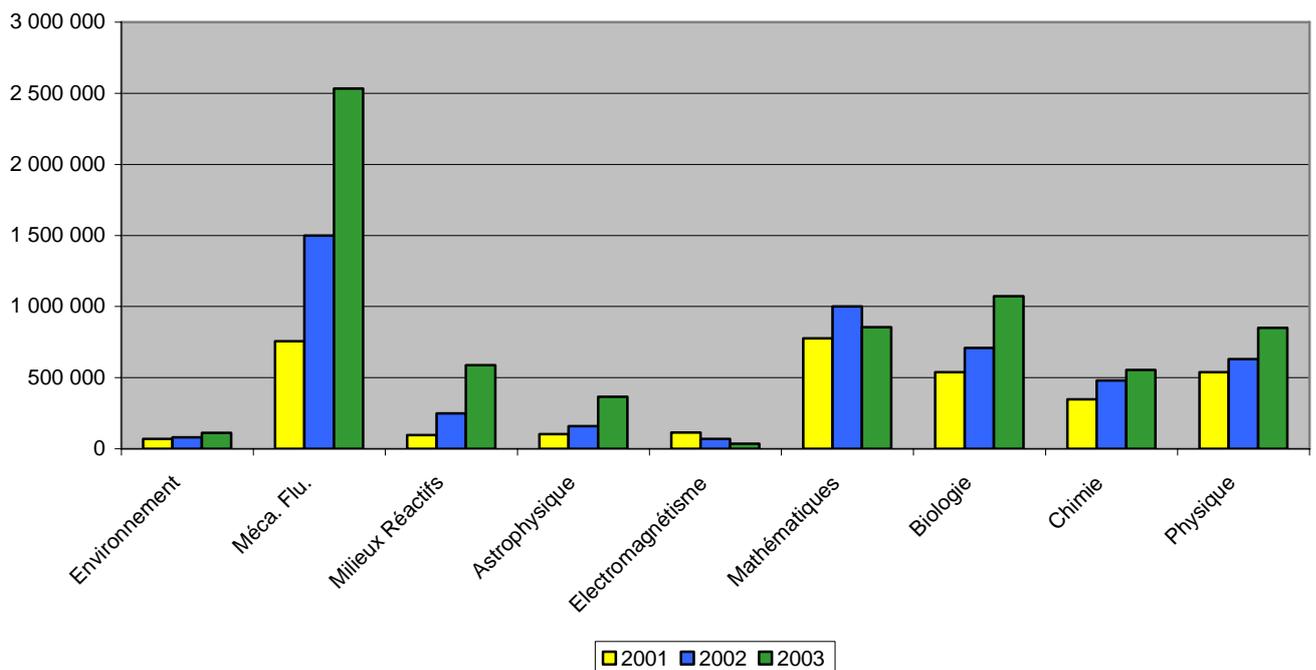


Demande en heures par comité thématique au 1 janvier avant arbitrages



Pour le CT6 (mathématiques), la demande baisse fortement en 2003. Ceci est dû à l'aboutissement d'un gros projet de cryptologie ayant nécessité plus de 1 million d'heures sur 2 ans. Pour le CT2 (Mécanique des fluides), il y a un fort tassement de la demande en 2002 largement compensé par une reprise en 2003. Ceci est lié à la fin concomitante de plusieurs gros projets en 2002 et les nouveaux projets n'ont été déposés que dans le courant de l'année comme on peut le voir sur le graphique ci-dessous de la consommation (1,5 millions d'heures consommées au 31/12/02 alors que la demande au 1/1/02 était de 1 million d'heures).

Consommation en heures par comité thématique au 31 décembre



4.3 Etude du calcul par comité thématique

CT1 Environnement

Président : Patrick Mascart

En 2002-2003 les demandes dans le thème « environnement » se sont stabilisées après une croissance les années précédentes. En moyenne 16 projets ont été examinés chaque année, dont 5 ou 6 sont communs avec l'IDRIS, pour une attribution totale voisine de 200 000 h. Ces chiffres restent faibles par rapport à d'autres disciplines fortes consommatrices au CINES, mais ils montrent qu'une population de chercheurs a été fidélisée par les capacités techniques spécifiques du CINES. Les projets actifs utilisent bien leurs attributions, à plus de 80% pour la majorité. Cependant le taux d'activité de certains projets reste assez peu prévisible d'une année sur l'autre. Sur 17 projets examinés en 2003, seuls 10 ont été actifs par exemple. Cette situation résulte le plus souvent de difficultés pour recruter ou financer des post-docs, ce qui ne facilite pas l'évaluation.

Les projets examinés par le CT1 gardent leur grande étendue thématique qui va de recherches à caractère climatologique ou hydrologique, jusqu'à des problèmes faisant la charnière entre la biologie, l'écologie, et les propriétés physiques ou chimiques des milieux naturels. Les composantes océanographiques et surtout météorologiques apportent les projets les plus actifs, traduisant une fidélisation des équipes concernées. Ces demandes sont très orientées vers le calculateur parallèle SGI-ORIGIN (90% du total 2003) qui est bien adapté à la modélisation de l'environnement. Sa présence a favorisé plusieurs coopérations entre chercheurs français et américains travaillant sur les mêmes gros codes numériques de chaque côté de l'Atlantique, par exemple le modèle RAMS (à Clermont-Ferrand et Orléans).

Un autre groupe de projets a été attiré par les performances parallèles obtenues au CINES. Jusqu'à mi-2003, la machine SGI-ORIGIN du CINES était presque la seule dans la communauté à permettre des tests en vraie grandeur avec un grand nombre de processeurs scalaires sous MPI avec des codes météorologiques complets. Par exemple dans le cas du modèle Mésos-NH, les bonnes performances obtenues ont permis d'attaquer des problèmes nouveaux combinant changements de phases dans les nuages d'eau ou de glace, prise en compte de la chimie atmosphérique, voire électrification des nuages. De ce point de vue le CINES a bien joué en 2002-2003 son rôle de centre pilote.

Ce rôle du centre se manifeste aussi par la présence d'une série de projets visant à rendre portables sur tout environnement de calcul intensif les grands codes communautaires de climatologie et océanographie : on peut citer par exemple les travaux de portage du coupleur PALM, ceux sur le modèle MésosNH, et ceux relatifs au modèle climatique couplé océan-atmosphère de l'IPSL. Très récemment, le CINES a même été capable de fournir un banc d'essais pour alimenter la réflexion stratégique de Météo-France et des équipes universitaires qui lui sont associées concernant l'utilisation du code de prévision météorologique opérationnelle ARPEGE dans un environnement scalaire-parallèle sous MPI (et non plus vectoriel). Ces projets n'utilisent que des ressources négligeables, mais ils contribuent à l'amélioration de la qualité et de la portabilité de l'ensemble des codes climatiques.

SUJETS	RESPONSABLES		HEURES CONSOMMEES	
	NOM	PRENOM	2002	2003
Maintenance et utilisation du code de recherche en mésométéorologie (projet MésosNH) sur O3800 et SP3. Simulation des processus microphysiques dans les nuages en phase mixte. Simulation de l'électrification explicite des nuages en phase mixte	PINTY	Jean-Pierre	20 437	29 625
Couplage d'un module chimique en phase hétérogène de l'ozone avec un modèle 3D météorologique	CHAUMERLIAC	Nadine	4 111	40 863
Simulation tridimensionnelle des nuages orographiques incluant le lessivage des gaz et des particules et les réactions chimiques associées	FLOSSMANN	Andréa	17	11
Evolution chimique et radiative des aérosols désertiques, carbonés et sulfures	CAUTENET	Guy		9 336
Simulation tridimensionnelle de la redistribution des espèces chimiques dans la troposphère	CAUTENET	Sylvie	32 146	18 777
Simulations du transfert radiatif dans les nuages hétérogènes. Application au problème direct (paramétrisation des nuages dans les GCM) et au problème inverse (algorithme de restitution des paramètres nuageux)	SZCZAP	Frédéric	10 999	0
Projet SUB-MESO NANTES : Dynamique de l'Atmosphère Urbaine	BRUCKLER	Laurent	1 379	
Projet SUB-MESO NANTES : Dynamique de l'Atmosphère Urbaine	SINI	Jean-François		550
PALM, projet d'assimilation par logiciel multi-méthodes	MOREL	Thierry	62	0
Reconstitution numérique de la genèse du karst de Milandre (Jura Suisse)	JOSNIN	Jean-Yves	0	
Reconstruction d'image pour la mission SMOS (Soil Moisture and Ocean Salinity)	ANTERRIEU	Eric		353
Développement du système couplé IPSL et partage de données	LE TREUT	Hervé	0	

Estimation du bilan thermique superficiel dans l'Atlantique Nord et études de sensibilité. Etude exploratoire de modélisation Nd dans la gyre subpolaire	AYOUB	Nadia	4 728	3 087
Modélisation hydrologique distribuée (en 3D) sur un bassin versant agricole	GAUCHEREL	Cédric		0
Benchmark	BIRMAN	Dominique	764	183
Modélisation des transferts d'espèces chimiques minoritaires vers la stratosphère via la convection tropicale profonde	PIRRE	Michel	1 142	9 266
	TOTAL HEURES		75 785	112 051

Président : Jean Piquet

L'analyse des trente-cinq projets 2003 fait apparaître que les demandes sont orientées surtout sur la simulation de la turbulence (simulation directe, SND et simulation des grandes échelles, SGE) et sur la modélisation des écoulements complexes turbulents (avec modélisation statistique de la turbulence, Stat) dans des configurations réalistes (turbomachines et autres géométries "industrielles"). Parmi les autres thématiques consommatrices, on notera surtout la physique des écoulements en milieux complexes.

Au niveau des consommations 2003 qui se sont montées à 2 532 695 heures pour la totalité du CT2, trois-quarts des heures ont concerné trois laboratoires, le Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique de l'Ecole Centrale de Lyon (ECL) a consommé 56% des heures (soit 1,4 million d'heures), l'équipe de modélisation numérique de l'Ecole Centrale de Nantes (ECN) 12% des heures (soit 323 000 heures) et l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT), 7% des heures. Trois quarts des heures sont consommées par les huit projets qui mobilisent plus de 100 000 heures chacun. Ces huit projets sont les suivants : le projet Laadhari (ECL, SND en canal) a consommé 811 729 heures, soit près du tiers des heures du CT2. Le projet Benhadid (ECL, SND et SGE d'instabilités en présence de champs magnétiques) a consommé 258 281 heures. Le projet Braza (IMFT, SND, SGE et Stat dans des sillages) a consommé plus de 200 000 heures. Les projets Visonneau et Guilmineau (ECN, Stat, portant sur des méthodes d'optimisation de forme, de raffinement-agglomération automatique des maillages et des écoulements instationnaires d'interactions fluides structures et écoulements sur ailes, entre autres) ont consommé respectivement 166000 et 156000 heures. Trois autres projets ont consommé entre 100000 et 120000 heures ; deux projets ECL : Ferrand (Stat, écoulements instationnaires en turbomachines) et Le Penven (SND, SGE d'éclatements tourbillonnaires dans des pistons) et un projet de l'Université de Paris VI (Adler) portant sur les milieux poreux et fracturés.

Au niveau des efforts de calculs dimensionnants, et en vue de comparer les ressources de calcul parallèle en situation sur les centres nationaux, le projet Laadhari fournit les chiffres suivants : sur la base d'un maillage 256*384*384, et sur 129 processeurs, le temps cpu/itération est de 23,4s sur la SGI du CINES, de 10,8s sur la SP3 du CINES et, selon les processeurs entre 6,7s et 11,7s sur la machine parallèle de l'IDRIS.

SUJETS	RESPONSABLES		HEURES CONSOMMEES	
	NOM	PRENOM	2002	2003
Simulation d'écoulements turbulents	KOOBUS	Bruno	24 110	8 849
Ecoulements turbulents sur des ailes. Extension au couplage fluide-structure	GUILMINEAU	Emmanuel	95 915	156 461
Simulation d'écoulements incompressibles sur des géométries de très grande complexité. Optimisation de formes, raffinement/agglomération automatique de maillages, simulations d'écoulements multiphasés et modélisation LES hybride	VISONNEAU	Michel	74 235	166 733
Analyse statistique spatio-temporelle du phénomène d'intermittence en turbulence développée tridimensionnelle	LEVEQUE	Emmanuel	5 325	9 481
Refroidissement d'un circuit électronique	AMIROUDINE	Sakir	2	
Comparaison Stokes/Reynolds pour l'écoulement dans un assemblage de 2 surfaces rugueuses.	LASSEUX	Didier	0	
Simulation des grandes échelles (LES) de systèmes de vortex : instabilités propres, instabilités jets/vortex, influence de la turbulence atmosphérique	CHEVALIER	Guilhem	52 218	72 577
Applications des techniques de maillages (AMR / patch grids / lois de paroi) aux écoulements 3D Instationnaires et turbulents	CHEVALIER	Guilhem	3 323	81
Un modèle U-RANS/Lois de parois pour la simulation d'écoulements turbulents instationnaires	JOUHAUD	Jean-Christophe		10 003
Simulation instationnaire des écoulements transsoniques turbulents par des méthodes hybrides RANS/LES pour la prévision du tremblement	JOUHAUD	Jean-Christophe		15 352
Instabilités hydrodynamiques en présence d'un champ magnétique tournant	BEN HADID	Hamda	115 828	258 281
Optimisation aéroacoustique de la soufflante du futur avion supersonique dans le cadre du projet MTF	MARUZEWSKI	Pierre	1 070	30 179

Tumult	FERRAND	Pascal	0	504
Simulation d'un phénomène d'éclatement tourbillonnaire. Application de la LES à l'aérodynamique des chambres de moteurs d'automobiles	LE PENVEN	Lionel	44 621	129 443
Etude asymptotique de la turbulence d'ondes en rotation	GODEFERD	Fabien	1 330	60 023
Etude par simulations numériques directes de l'effet du nombre de Reynolds sur les statistiques de proche paroi en canal plan	LAADHARI	Faouzi	229 133	811 729
Ecoulements instationnaires dans les turbomachines.	CARO	Joëlle	161 350	
Simulation numérique du décollement tournant et du pompage dans les turbomachines	LEBOEUF	Francis		318
Ecoulements instationnaires dans les turbomachines	FERRAND	Pascal		116 709
Modélisation des modifications des propriétés d'écoulement et de transport des microfissures et transferts de masse aux interfaces fluides/matériaux	GOUZE	Philippe		53 210
Modélisation des modifications des propriétés d'écoulement et de transport des microfissures en conséquence des transferts de masse aux interfaces fluides/matériaux.	GOUZE	Philippe	43 821	
Milieux poreux et fracturés	ADLER	Pierre	81 373	102 290
Ecoulement en stationnaire en géométries périodiques	BLANCHER	Serge	29 752	10
Modélisation du transport de chaleur et de masse dans la végétation : application à la modélisation de la propagation des feux de forêt	SERO-GUILLAUME	Olivier	3 100	
Convection naturelle 2D et 3D différentiellement chauffée : instabilités et turbulence	LE QUERE	Patrick	466	

Convection mixte avec effet solet en milieu poreux.	MOJTABI	Abdelkader	0	
Hydrodynamique en fluide non newtonien inélastique	ANNE-ARCHARD	Dominique	5 677	0
Simulation directe et modélisation des écoulements tridimensionnels turbulents de type sillage	BRAZA	Marianna	180 446	200 723
Numerical investigation of 3D incompressible unsteady fluid flow in a regular domain and development of parallelization methods for distributed memory computers	ROUX	Bernard		37
Modélisation d'écoulements instationnaires autour des surfaces portantes en rotation	FAVIER	Daniel	0	53
Etude numérique de l'écoulement intra-coronaire après implantation d'une endoprothèse de type "Stent"	PERRAULT	Robert		8 753
Convection naturelle 2D et 3D différentiellement chauffée : instabilités et turbulence	LE QUERE	Patrick		1 193
Etude numérique de l'effet dynamo dans la géométrie du vortex de Taylor-Green	NORE	Caroline	208	55
Modélisation numérique des écoulements compressibles	NEBBACHE	Abderrahmane	116 058	53 738
Couplage fluide-structure. Application aux systèmes propulsifs	HADJADJ	Abdellah		7 869
Simulation numérique des mouvements de convection forcée et de leur influence sur la distribution de température, d'humidité et de polluants (CO ₂ , CO etc...) dans une cabine spatiale habitée en microgravité	ROUX	Bernard	20 542	14 613
Simulation numérique d'écoulements diphasiques à phases dispersées (interaction entre phases)	CLIMENT	Eric	7 151	9 005
Développement et mise au point de la méthode 'Coherent Vortex Simulation' (CVS) pour les écoulements incompressibles	SCHNEIDER	Kai		458

Prallel computing for two-dimensional non-linear regimes of thermo-acoustic convection	FOUGERE	Dominique		76 004
Nappes de vorticit� et turbulence	ABID	Malek		2 072
Simulation num�rique du tremblement et de son contr�le	CORRE	Christophe		2
Analyse dynamique et optimisation d'un avion souple	DERVIEUX	Alain	5 959	6 027
Mod�lisation num�rique de la dispersion de polluants (gazeux ou particules solides) � l'int�rieur d'une pi�ce	BEGHEIN	Claudine	14 778	17 018
Etude de l'�coulement tridimensionnel autour d'un dirigeable avec couplage fluide-structure	SCHALL	Eric		27 767
Simulation num�rique directe d'�coulements multiphasiques	VINCENT	St�phane	498	17 249
M�lange laminaire chaotique r�actif au sein d'un �coulement tridimensionnel ouvert complexe	LE GUER	Yves	142	87 826
Techniques de parall�lisation et de maillage adaptif en hydro et magn�tohydrodynamique.	LAVEDER	Dimitri	0	
simulation et contr�le des effets du vent sur des profils de pont.	PIPERNO	Serge	1	
Caract�risation g�om�trique des milieux poreux et fractur�s et �tude des transferts	THOVERT	Jean-Fran�ois	84 107	
	TOTAL HEURES		1 402 539	2 532 695

CT3 Milieux réactifs

Président : Sébastien Candel

SUJETS	RESPONSABLES		HEURES CONSOMMEES	
	NOM	PRENOM	2002	2003
Etude par simulation numérique directe des transferts pariétaux générés par un mélange multi-espèces	NICOUD	Franck		20 838
Simulation numérique de l'établissement de différents régimes de décharge dans les gaz	LOISEAU	Jean-Francis	7 895	30 895
Prise en compte d'une chimie détaillée dans la modélisation de la combustion turbulente	GICQUEL	Olivier		844
Projet CECT : Calculs Extrêmes en Combustion turbulente	SOMMERER	Yannick		258 483
Simulation des instabilités de combustion	GICQUEL	Laurent	175 974	250 305
Ecoulements réactifs diphasiques : simulations directes et aux grandes échelles	BEDAT	Benoit	45 160	25 275
Instabilités acoustiques en combustion confinée	SEARBY	Geoff		1 159
Application de la méthode de la vérité intrinsèque de dimension réduite au cas du dépôt chimique en phase vapeur - Cas du système Si-C-H mis en jeu lors du dépôt de carbure de silicium(SiC).	DE PERSIS	Stéphanie	122	
	TOTAL HEURES		229 151	587 799

CT4 Astrophysique, géophysique, terre solide

Président : Pierre Valiron

Le CINES est très apprécié par la communauté du CT4 (Astrophysique, Géophysique, Terre solide) pour sa souplesse d'exploitation et pour son assistance. Le taux de renouvellement des demandes est important, de l'ordre de 25% par an, et la croissance des besoins est très soutenue. La communauté prend bien en compte la complémentarité avec l'IDRIS, et les demandes se répartissent équitablement entre les deux centres (pour 2004, 26 projets au CINES et 28 à l'IDRIS, parmi lesquels 12 projets conjoints). La qualité des projets est excellente, et les renouvellements font état de publications de haut niveau.

Curieusement, le poids des demandes en Sciences de la Terre s'affaiblit d'année en année, alors que les centres de calcul thématiques y sont peu importants (y compris à l'Institut de Physique du Globe de Paris, par défaut de jouvence). En 2004 les attributions de cette discipline représentent seulement 15% du total du CT4, avec des projets par ailleurs excellents en géochimie, en analyse spectrale des ondes sismiques et en tomographie, et en modélisation de la circulation convective 3-D du manteau en planétologie comparée. Il conviendra sans doute que les nouvelles sections concernées du comité national identifient les causes de ce déséquilibre.

La progression des demandes est par contre très forte en astrophysique, avec un grand éventail thématique couvert par les projets du CT4 :

- En mécanique céleste, les études sur la stabilité des systèmes planétaires se renouvellent avec la modélisation de l'extrême diversité des systèmes exo-planétaires simples ou multiples. Dans notre système solaire, il convient également de noter les premières prédictions réussies de pluies d'essaims météoritiques (qui devraient autoriser une meilleure maîtrise du risque dans le domaine spatial). Ce dernier projet illustre bien la souplesse du CINES qui a permis de concentrer des moyens importants sur un projet de thèse innovant mais très exploratoire.
- En physique stellaire, les études des processus physiques dans les atmosphères ou les enveloppes prennent beaucoup d'importance (instabilités hydrodynamiques, convection, transfert radiatif, etc). En particulier pour les atmosphères de naines brunes, on commence à modéliser avec succès l'effet des molécules et des poussières sur le spectre observé.
- Les études sur la structuration multi-échelle des objets astrophysiques sont également bien représentées, tant dans le domaine des jets MHD que de l'évolution dynamique des galaxies (en prolongement notamment des études purement gravitationnelles réalisées à Marseille sur des calculateurs spécialisés GRAPE). La poursuite de ces travaux avec des modélisations multi-physiques demandera des moyens considérables.
- L'étude des disques proto-planétaires semble également promise à un grand avenir avec la multiplication des diagnostics observationnels en optique adaptative et en interférométrie millimétrique et bientôt optique. Des projets ambitieux tentent aujourd'hui de comprendre les processus hydrodynamiques en jeu dans ces disques et le rôle de la poussière, et de modéliser l'agrégation des petits corps pour former des planétésimaux. Les modélisations associent dans certains cas des fermes de PC à l'utilisation du CINES. Là aussi des besoins considérables dans le proche avenir sont prévisibles.
- La préparation scientifique des deux satellites cryogéniques Herschel et Planck — qui seront lancés conjointement en 2007 pour étudier respectivement l'univers moléculaire et les fluctuations du fond cosmologique — suscite des modélisations très lourdes, dans les priorités des programmes nationaux correspondants (PCMI et PNC). Ces travaux associent des moyens variés aux calculateurs nationaux (grille de calcul expérimentale de Grenoble, fermes de PC de l'IN2P3). La répartition entre l'IDRIS et le CINES est faite en fonction des moyens disponibles en mémoire centrale et en archivage. Plus généralement, ce type de modélisation, qui anticipe le lancement d'un grand observatoire spatial et qui est appelé à en valoriser la moisson scientifique, semble appelé à se généraliser en astrophysique.

La machine SGI du CINES est appréciée pour son Open-MP particulièrement performant et pour sa compatibilité avec des machines SGI disponibles dans certains sites (notamment pour l'analyse des simulations en cosmologie avec les logiciels développés par l'équipe de l'Institut d'Astrophysique de Paris en vue de la mission Planck). La machine IBM, un peu mieux dotée en mémoire, est plutôt exploitée en MPI.

La qualité de l'exploitation s'est beaucoup améliorée ces dernières années, et le CINES a permis d'amortir la saturation dramatique des ressources scalaires de l'IDRIS en 2003. Certains projets mettent cependant en avant des limitations, principalement dans le domaine des entrées-sorties. La politique d'archivage « en aveugle » semble également inadaptée à la gestion de grands flux de données et de fichiers et provoque trop souvent des blocages pénalisants. Par ailleurs, la communauté souhaiterait disposer d'une mémoire centrale plus grande sur les deux machines du CINES.

SUJETS	RESPONSABLES		HEURES CONSOMMEES	
	NOM	PRENOM	2002	2003
Accélérations radiatives dans les atmosphères stellaires	ALECIAN	Georges	4 097	4 403
H ₂ O dans l'univers. Calcul des taux d'excitation rotationnelle de H ₂ O par H ₂	DUBERNET-TUCKEY	Marie-Lise	13 175	11 152
Stabilité globale des systèmes planétaires	LASKAR	Jacques	19 122	
Stabilité globale des systèmes planétaires	ROBUTEL	Philippe		28 889
Interactions intermoléculaires et processus dynamiques dans le gaz interstellaire : application principalement à H ₂ O	VALIRON	Pierre	13 439	28 597
Calcul par éléments spectraux de la dynamique basse fréquence de la terre	CHALJUB	Emmanuel		4 607
Contraintes apportées par les déterminations d'abondances d'étoiles A et F, d'amas ouvert, sur les processus de transport dans les intérieurs stellaires	RICHARD	Olivier		3 901
Catalogues synthétiques et simulations numériques : un observatoire virtuel	BOUCHET	François		185 106
Cosmologie Primordiale Numérique	RINGEVAL	Christophe		11 937
Modélisation de l'évolution des essaims météoritiques : Application aux léonides	COLAS	François	47 668	45 269
Simulations numériques des champs de vitesses du gaz et des étoiles des galaxies spirales	MICHEL-DANSAC	Léo		1 599
Modélisation de l'évolution structurelle et nucléosynthétique des étoiles	CHARBONNEL	Corinne		2 415
Modélisation de l'histoire thermique des roches de la lithosphère continentale par l'étude de la diffusion de l'argon dans les silicates	ARNAUD	Nicolas		122

Late Dynamical Evolution of Disk Galaxies: A Cosmological Approach	ATHANASSOULA	Lia		5 663
Etude de la convection dans les étoiles	RIEUTORD	Michel		7 610
Hydrodynamical Simulations of Large Scale Structure	DA SILVA	Antonio		0
Convection dans les manteaux planétaires: géométrie 3D sphérique, influence d'un chauffage complexe	CHOBLET	Gael	19 620	5 543
Tomographie du manteau supérieur de la terre	DEBAYLE	Eric		177
Modèles d'Atmosphères Stellaires et SubStellaires	ALLARD	France	33 907	48 545
Disques d'accrétion dans les binaires compactes et disques proto-planétaires	GONZALEZ	Jean-François		0
La poussière dans les disques protostellaires	BARRIERE-FOUCHET	Laure		4
Investigations numériques en cosmologie : un observatoire virtuel	COLOMBI	Stéphane	1 656	
Simulations numériques des champs de vitesses du gaz et des étoiles des galaxies spirales.	WOZNIAK	Hervé	509	
Modélisation de l'évolution structurelle et nucléosynthétique des étoiles	FORESTINI	Manuel	3 793	
Modélisation d'atmosphères d'étoiles massives avec vents stellaires	SCHAERER	Daniel	6	
	TOTAL HEURES		156 992	395 539

CT5 Electromagnétisme et plasmas chauds

Président : Jean-Claude Adam

SUJETS	RESPONSABLES		HEURES CONSOMMEES	
	NOM	PRENOM	2002	2003
Systèmes Atomiques et moléculaires en interaction avec des champs lasers ultras brefs	BACHAU	Henri	835	2 041
Etude des antennes imprimées par la méthode TLM	DUBARD	Jean-Louis	1 915	919
Problèmes inverses par la méthode temporelle et spatiale des lignes de transmission (TLM)	DUBARD	Jean-Louis	15 061	15 926
Calcul haute performance en électromagnétisme	BENDALI	Abderrahmane		13 851
Simulation en physique des plasmas au moyen de codes semi-lagrangiens : Etude de la turbulence ionique et modèle Vlasov3D électrostatique	GHIZZO	Alain	1 487	0
Méthodes multipôles en électromagnétisme	PIPERNO	Serge	38 034	2 099
Etude théorique d'un Radar de sondage du sol martien.	REINEIX	Alain	355	
Calcul haute performance en électromagnétisme	BENDALI	Abderrahmane	6 017	
	TOTAL HEURES		63 704	34 836

CT6 Mathématiques, mathématiques appliquées, systèmes modèles

Président : Pierre Lallemand

SUJETS	RESPONSABLES		HEURES CONSOMMEES	
	NOM	PRENOM	2002	2003
Portabilité, Extensibilité et Prédiction de performances des bibliothèques BSMLlib et BSFC++	LOULERGUE	Frédéric		0
Schémas et Algorithmes Hautes Performances pour les Applications Scientifiques Complexes	RAMET	Pierre		16 052
Résolution parallèle de problèmes NP-complets en mémoire partagée	KRAJECKI	Michaël	12 070	15 724
Etude de l'évolutivité de solveurs parallèles d'algèbre linéaire sur des architectures à mémoire distribuée avec espace d'adressage global ou disjoint	GIRAUD	Luc	6 340	15 071
ACI GRID - Projet TAG	GENAUD	Stéphane	1 506	314
Identification automatique des langues	MAGRIN-CHAGNOLLEAU	Ivan		33
Apprentissage interactif de contraintes	QUINQUETON	Joël		0
Développement d'algorithmes parallèles pour la fouille de données avec la librairie ARCH - Application à la bioinformatique	ADAMO	Jean-Marc	239	657
Mise en œuvre d'algorithmes parallèles efficaces pour l'optimisation et la simulation sur calculateurs à haute performance	EL BAZ	Didier	4 423	675
Enseignement de la programmation parallèle (MPI et OpenMP) en DESS	NICOD	Jean-Marc	0	0
Algorithme numérique parallèle pour le creux et pour l'out-of-core	L'EXCELLENT	Jean-Yves		6 608
Electrodynamique quantique dans les ions et atomes à 2 électrons	INDELICATO	Paul	46 728	48 438

Simulation en 3D par éléments finis de la mise en vibrations de corps déformables en contact frottant	BAILLET	Laurent	2 584	8 460
Calcul de sections efficaces en collisions atomiques	ANCARANI	Ugo		653
QUID : Programmation efficace de Machines Parallèles Hybrides	CAPPELLO	Franck	1 704	0
Etude et développement d'algorithmes parallèles pour la résolution de systèmes linéaires en calcul des structures	CROS	Jean-Michel		0
Etude et développement de méthodes de résolution de problèmes d'élasticité non-linéaires et fortement hétérogènes pour la simulation numérique de structure d'origine industrielle	LENE	Françoise		0
Trinômes générateurs et génération aléatoire	ZIMMERMANN	Paul	675 346	446 963
Etude de la transition nématique-isotrope dans les films bidimensionnels de cristaux liquides	BERCHE	Bertrand	88 184	88 854
Comportement d'échelles dynamique et invariance conforme	HENKEL	Malte	174 549	163 692
Influence d'un désordre corrélé biaxial sur les propriétés critiques du modèle d'Ising bidimensionnel	TURBAN	Loic		39 812
2 mois de test sur IBM SP3	SEDRAKIAN	Ani		277
Algorithmes parallèles pour quelques problèmes de l'optimisation combinatoire : problèmes de découpe, d'assemblage, couverture d'ensembles, knapsack sharing, multi-knapsack, etc	HIFI	Mhand	11	2 024
Parallélisation d'algorithmes numériques	PHILIPPE	Bernard	0	
Calcul distribué sur sites distants	TROMEUR- DERVOUT	Damien	0	

Résolution par méthode directe de grands systèmes linéaires creux sur machines parallèles. Etude de méthodes hybrides (directes-itératives).	PESQUE	Jean-Jacques	6 032	
Résolution de systèmes linéaires creux par méthodes directes	AMESTOY	Patrick	1 082	
Algorithmique parallèle pour des codes InterActions Laser/Plasma.	COULAUD	Olivier	3 155	
Développement d'un noyau de calcul numérique parallèle mixte	DESPREZ	Frédéric	1 982	
Une étude de cas en repartition de charge : la reconstitution volumique	GERMAIN-RENAUD	Cécile	0	
Alignement et analyse de séquences génomiques à hautes performances	ANDONOV	Roumen	0	
Etude et développement de méthodes de résolution de problèmes d'élasticité non-linéaires et fortement hétérogènes pour la simulation numérique de structures d'origine industrielle	REY	Christian	1 943	
Etude des effets de frustration dans le modèle de Potts vectoriel	CHATELAIN	Christophe	765	
Quator : Simulations de trafic sur l'Ile-de-France.	DE PALMA	André	3 550	
	TOTAL HEURES		1 032 193	854 307

CT7 Systèmes moléculaires organisés et biologie

Président : Yves-Henri Sanejouand

Après une forte augmentation entre 2000 et 2002, le nombre de projets du CT7 semble s'être stabilisé (aux alentours de 40). Le nombre d'heures demandées est cependant toujours en phase de croissance. Les plus grosses demandes concernent des simulations de systèmes membranaires (protéines + lipides) décrits explicitement (au niveau tous-atomes). Avec l'augmentation régulière du nombre de structures de protéines membranaires connues, on peut s'attendre à une augmentation du nombre de projets de ce type dans les années à venir, notamment à partir du moment où les structures de "vrais" récepteurs couplés aux protéines G seront connues. Pour le moment, nous n'avons qu'un projet important de Génomique. Ce projet devrait cependant encore grossir jusqu'à ce que le génome humain soit entièrement analysé (ce projet permet d'identifier les séquences codantes). Par ailleurs, on note l'arrivée de projets de « screening virtuel » (criblage in silico de chimiothèques) qui pourraient eux aussi devenir de plus en plus gourmands (les chimiothèques peuvent être de grandes tailles).

SUJETS	RESPONSABLES		HEURES CONSOMMEES	
	NOM	PRENOM	2002	2003
Simulation de la reconnaissance moléculaire et de l'organisation en chime supramoléculaire	WIPFF	Georges	72 675	86 168
Simulation de molécules biologiques et de complex supramoléculaire	STOTE	Roland	30 718	59 689
Conception assistée par ordinateur de ligands de la protéase du VHC. Evaluation de l'énergie libre conformationnelle de boucles protéiques. Prédiction de structure de boucles	KARPLUS	Martin	16 999	42 910
Electronic Structure Calculations for Molecular Dynamics Simulations of Iron-Containing, Reactive Centers of Biomolecules	KARPLUS	Martin	11 697	22 014
Computational Studies of the Rotor Part of ATP synthase	KARPLUS	Martin		17 159
Free Energy Differences in Inhibitor Binding	KARPLUS	Martin	25 944	
Long time molecular dynamics simulation of native Proteins.	SCHAEFER	Michael	0	
The Mechanism of GroEL Assisted Protein (Un) Folding	KARPLUS	Martin	7 618	

Modélisation du mécanisme d'ouverture des paires de bases dans l'ADN	VARNAI	Peter	34 888	37 126
Dynamique moléculaire de "kissing" complexes et de récepteurs membranaires	LAGUERRE	Michel	15 171	17 633
Homo- et Hétéro-dimères de récepteurs nucléaires RXR	CHICHE	Laurent	5 155	3 320
Intégration des variables écologiques dans la quantification des flux de gènes	ESTOUP	Arnaud		22 956
Analyse du comportement d'inhibiteurs de la réplication des virus VIH-1 et VHC	CABROL-BASS	Daniel	9 549	10 737
Etude structurale théorique de la phosphomannose isomérase de candida albicans complexe a un analogue de l'état de transition. Modélisation de nouveaux inhibiteurs	SALMON	Laurent		0
IMGT/LIGM-DB, système international d'information intégré en Immunogénétique	LEFRANC	Marie-Paule	0	0
Etude statique de propriétés en milieu biologique de complexes ayant des propriétés thérapeutiques	GERARD	Hélène		15 245
Criblage d'inhibiteurs de la transconformation de la protéine du prion PrP	VERDIER	Jean-Michel	9 378	10 498
Génomique comparative chez les vertébrés	JAILLON	Olivier	22 685	124 332
Etude théorique MQ/MM des mutants de la GAPDH. Extension de la méthode à l'étude du mécanisme d'action de la phospholipase A2. Extension de la méthode aux complexes du cuivre (I) avec des ligands	CARTIER	Alain	98 627	34 186
Relaxation diélectrique dans les protéines	SIMONSON	Thomas	100 794	42 440
Evolution de la dispersion chez les espèces végétales	IMBERT	Eric	11 060	78 855

Affinement cristallographique à très haute résolution avec le logiciel MOPRO de l'aldose reductase humaine, de l'insuline humaine et de la trypsine	JELSCH	Christian	11 954	12 102
Dynamique des systèmes membranaires. Interactions lipides-protéines et processus de transport	TAREK	Mounir		136 184
Etude par dynamique moléculaire de la relation structure-fonction de l'urate oxydase	MONARD	Gérald		0
Auto-assemblage orienté de peptides cycliques dans les membranes lipidiques. Etude par simulations de dynamique moléculaire	CHIPOT	Christophe	64 729	74 779
Complémentarité de la dynamique moléculaire et des modèles en réseau pour étudier le repliement des protéines	CHIPOT	Christophe	34 861	
Modélisation des interactions inhibiteurs-PLA2	OMBETTA	Jean-Edouard		878
Simulation de changements conformationnels des ARN et conception de ligands dirigés contre des ARN cibles	LECLERC	Fabrice	72 078	76 086
Assemblages complexes de bases nucléiques	HOCQUET	Alexandre	3 410	4 296
Création, exploitation et criblage virtuel de chimiothèques tridimensionnelles	ROGNAN	Didier	21 489	36 283
Etude de structure du site actif de la protéine kinase C epsilon et bêta, comparaison avec la protéine kinase C alpha	DOMARD	Monique	6 130	15 937
Modélisation et étude de la purine nucléoside phosphorylase d'origine parasitaire	WALCHSHOFER	Nadia	0	834
Dynamique des populations parasites et Epidémiologie mathématique	SILAN	Patrick	17 782	12 799
Mécanismes moléculaires de reconnaissance et d'activation de récepteurs d'hormones et mécanismes de signalisation	BONNAFOUS	Jean-Claude	971	0
Calcul des interactions moléculaires par une approche utilisant en parallèle la mécanique moléculaire polarisable et la chimie quantique	GRESH	Nohad	11 818	34 953

Etude des interactions (LIGAND-SITE ACTIF) du récepteur 5-HT4 pour la conception de nouveaux ligands	BESTEL	Isabelle	3 240	13 168
Modélisation de Molécules Biologiques.	DEJAEGERE	Annick	35 061	4 684
Etude du comportement de molécules tensioactives aux interfaces eau/air/huile	ARBELOT	Michel	2 706	8 259
Développement et test de champs de force polarisables pour la spectroscopie optique de molécules d'intérêt biologique. Comparaison avec des simulations de référence de dynamique moléculaire ab initio	GAIGEOT	Marie-Pierre		15 068
Modélisation moléculaire des interactions MAP Kinases - petites molécules pour le criblage haut débit	LABESSE	Gilles	83	
Etermination de l'organisation dynamique des bio-membranes	MARGUET	Didier	2	
Etude de l'interactome au moyen de méthodes microspectrophotométriques d'analyse des interactions moléculaires au niveau cellulaire	DOREE	Marcel	17 192	
Proteomic programs and database tools for high throughput analysis of proteins	LAMB	Ned	50	
Modélisation de protéines membranaires. Etude du récepteur humain de la cholécystokinine et du canal sodium dans un environnement réaliste	MAIGRET	Bernard	65 141	
Modélisation quantique par la méthode DFT de constituants des acides nucléiques: dinucléoside-monophosphate et nucléosides et nucléosides entourés de molécules d'eau	GHOMI	Mahmoud	620	
Modélisation probabiliste des relations écologiques et sociologiques en milieu naturel	ROUSSEAU	Denis-Didier	47	
Etude des cyclothéonamides A,B,C,D et E puissants inhibiteurs de la thrombine et d'autre sérine protéases. Analyse conformationnelle des Ct's et de leurs analogues. Etude de sélectivité Trombine.Trypsine.	THERY	Vincent	264	
	TOTAL HEURES		842 586	1 071 578

CT8 Chimie quantique et modélisation moléculaire

Président : Yves Ellinger

Le CT8 supporte des recherches transversales pour lesquelles la chimie apparaît comme l'élément moteur. Dans cette activité interdisciplinaire, les projets d'inspiration Sciences Chimiques viennent largement en tête avec plus de la moitié des demandes de ressources, le reste se partageant entre les Sciences Physiques, les Sciences de la Vie et Sciences de l'Univers. L'éventail des thématiques abordées est extrêmement large, recouvrant toutes les facettes de la modélisation des structures électroniques de l'atome au solide.

D'un point de vue thématique, les études de structure et réactivité sont largement majoritaires, allant de la recherche de systèmes prébiotiques à la détermination de la structure de composés organométalliques de grande dimension. Dans le même esprit, la recherche des mécanismes réactionnels recouvre des environnements allant de la phase gazeuse aux processus en phase liquide. Ces études sont également accompagnées de travaux à caractère de spectroscopie théorique en vue de la prévision/interprétation des spectres électroniques ou vibrationnels. Le domaine en pleine expansion est celui de la chimie à l'interface des solides. La catalyse hétérogène est l'objet de la majorité des travaux, travaux structurés par un GDR national. Enfin, il faut noter le développement des études relevant de la dynamique moléculaire avec un effort particulier sur la structure des liquides.

SUJETS	RESPONSABLES		HEURES CONSOMMEES	
	NOM	PRENOM	2002	2003
Simulation quantique ab-initio : chimie des métaux de transition et post-transitionnels structure d'agrégats	DEDIEU	Alain		15 049
Simulations quantiques des processus ultrarapides en phase condensée	MEIER	Christoph		11 451
Etude théorique de l'influence du solvant sur la coordination d'une série de métaux de transition	ANTONCZAK	Serge	13 404	14 406
Modélisation de complexes à propriétés catalytiques	CHERMETTE	Henry	11 499	29 679
Propriétés électriques et spectroscopiques des systèmes moléculaires et systèmes tripériodiques (optique non linéaire, coef. de Van der Waals, champ de force anharmonique, polarisation dans les solides, polarisation spontanées, piézoélectricité, charges)	MERAWA	Mohammadou	31 695	24 655
Propriétés électriques, électroniques, structurales et vibrationnelles des systèmes tri-périodiques. Propriétés électriques des systèmes atomiques et moléculaires	MERAWA	Mohammadou		20
Dynamique Car-Parrinello : application aux phénomènes de solvatation et à la réactivité d'organométalliques	PARISEL	Olivier		21 644

Etude théorique de l'interaction de l'hydrogène avec des composés intercalaires du graphite	MARINELLI	Francis	7 678	5 897
Structure et réactivité des complexes de lanthanides : Interaction théorie-expérience	MARON	Laurent	56 135	36 105
Calculs quantiques d'espèces ionisées	OHANESSIAN	Gilles		2 970
Analyse tridimensionnelle des différentes constitutions de la cage électronique construite par l'ion oxygène O ²⁻ dans divers oxydes	VIDAL	Jean-Pierre	0	0
Modélisation moléculaire de processus photochimiques- effets de solvants	ALLONAS	Xavier		4 221
Etude théorique d'une réaction de réduction catalysée par des cations métalliques supportés par une zéolithe	BERTHOMIEU	Dorothee	2 193	5 578
Modélisation de la croissance de zéolithes en solution et de leurs spectres RMN par dynamique ab initio	GOURSOT	Annick	8 695	8 310
Chromophores et fluorophores organiques pour l'ONL	KATAN	Claudine		4 056
Etude des processus physiques et chimiques impliqués dans l'ionisation multiple de molécules d'eau en milieu aqueux : simulation dynamique moléculaire ab initio	POLITIS	Marie-Françoise		3 997
Chimie quantique appliquée à la chimie bioinorganique de l'oxygène et ses dérivés	CANO BOQUERA	Joan	5 198	12 962
Etude théorique du transfert électronique dans différents assemblages A-D-A du tétrathiafulvalène : simulation des spectres RPE (Résonance Paramagnétique Electronique) par calculs ab-initio	GALLEGO PLANAS	Nuria	2 830	1 694
Chimisorption et réactivité de diverses molécules sur des surfaces de métaux et d'alliages métalliques : calculs DFT périodiques	DELBECQ	Françoise	25 268	36 175
Approche modèle de la catalyse hétérogène par calculs DFT	SAUTET	Philippe	14 538	29 947
Prédictions de variétés allotropiques ou polymorphiques de composés moléculaires à l'aide de calculs quantiques	FRAPPER	Gilles	4 240	14 264

Etude de dérives du ferrocene	LEPETIT	Christine	782	3 250
Etudes cinétiques de réactions élémentaires d'intérêt atmosphérique	BOHR	Frédéric	100	1 123
Simulation de la nucléation en phase liquide et de la croissance cristalline	MILLOT	Claude	380	16 728
Simulation de systèmes moléculaires complexes	MILLOT	Claude	878	
Modélisation quantique de complexes macrocycle-substrat	RUIZ-LOPEZ	Manuel		0
Simulation de processus chimiques élémentaires au moyen de potentiels QM/MM	RUIZ-LOPEZ	Manuel	22 123	32 451
Etude théorique de la réactivité chimique : état fondamental et état excité	CASIDA	Mark	9	0
Réactivité des PAH et grains interstellaires	PAUZAT	Françoise	6 759	4 382
Prévision de structures moléculaires pour l'exobiologie	BERTHIER	Gaston	168	1 075
Astrochimie des nuages moléculaires	TALBI	Dahbia	1 788	590
Etude par dynamique moléculaire ab initio de liquides ioniques extrêmes	SIMON	Christian		0
Ionisation dissociative de molécules diatomiques par impact électronique	JOULAKIAN	Boghes	3 581	1 898
Etude de l'ionisation de la molécule d'eau par impact électronique	CHAMPION	Christophe		8
Simulation numérique des interactions entre molécules, photons et atomes	DUNSEATH	Kevin	2 951	2 801

Corrélations entre les énergies de liaison M-C et H-C : vers une approche raisonnée de la sélectivité en chimie organométallique	EISENSTEIN	Odile	60 587	29 477
Etude de l'ouverture d'un canal membranaire : diffusion des ions K ⁺ dans les canaux KCSA	RAMSEYER	Christophe		1 126
Modélisation spectroscopique du mouvement de rotation interne dans des molécules prototypes de petits peptides	KLEINER	Isabelle	263	46
Structure et Dynamique des états de Rydberg moléculaires	COSSART	Claudina	2	0
Dynamique de l'excitation et l'ionisation en couche interne des atomes et ions multichargés	COMBET-FARNOUX	Françoise	0	0
Etude numérique des mécanismes d'interaction d'un laser impulsionnel avec des matériaux en régime nano- et femto-seconde	ITINA	Tatiana		410
Applications de la chimie quantique	MARSDEN	Colin	73 953	91 024
Spectroscopie vibrationnelle en phase liquide par simulation de dynamique moléculaire ab initio	VUILLEUMIER	Rodolphe	10 566	21 455
Complexes de lanthanides luminescents	POTEAU	Romuald	20 591	18 471
Réactivité des composés organométalliques paramagnétiques	POLI	Rinaldo	13 458	2 162
Etude de la sélectivité de la réaction de Wittig dans le cas de dérivés oxindoles acétylés et benzylés, inhibiteurs potentiels des récepteurs de facteurs de croissance des fibroblastes FGFR1.	ABOAB	Bettina	3 435	1 381
Propriétés optiques non linéaires de molécules	SIMON	Daniel		3 208
Structure et dipôle électrique d'agrégats mixtes Alcalins-C60:AnC60	AUBERT-FRECON	Monique		5 114
Compréhension des mécanismes d'isomérisation d'hydrocarbures en catalyse hétérogène	LEGARE	Pierre		2 460

Etude ab initio (Hartree-Fock, post Hartree-Fock et fonctionnelle de la densité) d'interactions moléculaires avec prise en compte des effets de solvant	LE QUESTEL	Jean-Yves	7 476	27 138
Etude théorique par des méthodes statiques et dynamiques de la synthèse de certains ligands chiraux	HUMBEL	Stéphane		0
Solvatation et partition entre phases d'espèces d'intérêt biogéochimique et environnemental	PADUA	Agilio	491	2 305
La chimie des éléments lourds étudiée par des calculs moléculaires relativistes à 4 composantes.	SAUE	Trond	1 769	
Modélisation par calculs DFT de la polymérisation électrochimique de l'éthylènediamine à la surface du graphite.	HERLEM	Guillaume	14 848	
Etude ab initio (statique et dynamique) de la structure de complexes contenant des métaux.	GIESSNER	Claude	14 347	
Stabilités relatives de silicates alcalins	PELLEGATTI	Alain	0	
Etude théorique de la formation et de la réactivité des indolo-2,3-quinodiméthanes	LARONZE	Jean-Yves	1 109	
Détermination théorique des pKa de divers monomères en solution non-aqueuse afin de prédire leurs propriétés de polymérisation	APLINCOURT	Philippe	4 329	
Surfaces d'alliages Pd-NI et influence de la nanostructuration sur les propriétés catalytiques	SIMON	Daniel	660	
Méthode LSCF/MM ab initio : modélisations de propriétés structurales et réactives dans les systèmes étendus	ASSFELD	Xavier	35	
	TOTAL HEURES		450 811	553 163

CT9 Physique, chimie et propriété des matériaux

Président : François Willaime

Les projets relevant du CT9 entrepris en 2002-2003 grâce aux moyens de calcul du CINES couvrent un très large spectre de la physique de la matière condensée aussi bien du point de vue des systèmes modélisés (solides organiques et inorganiques, agrégats, polymères, liquides, gels, verres) avec de plus en plus de systèmes hétérogènes (interfaces, polymères/nanoparticules, solides/gaz) que des propriétés (plasticité, adsorption, propriétés structurales, mécaniques, thermiques, magnétiques ou optiques). Cette diversité se retrouve au niveau des méthodes utilisées : calculs de structure électronique, simulations de dynamique moléculaire ou Monte Carlo, éléments finis... Ceci se traduit par une diversité encore plus grande des codes. En *ab initio*, une certaine standardisation se confirme avec une dominance très forte des codes d'ondes planes (VASP, ABINIT, PWSCF) alors que les méthodes à bases localisées commencent à être utilisées (Gaussian, SIESTA).

On retrouve sans surprise les différents types de calcul demandant actuellement des moyens lourds pour être effectués, avec en premier lieu les calculs de structure électronique *ab-initio*, qui représentent près de la moitié des demandes. L'activité continue à être soutenue et très productive dans le domaine des verres, nanostructures, défauts ponctuels et états excités. Des projets très prometteurs ont démarré dans l'application de ces techniques aux liquides et aux propriétés vibrationnelles. Le domaine de la chimie-physique, se distingue par des études originales telles que les fluides et cristaux sous cisaillement, ou le transfert de chaleur à l'échelle atomique.

SUJETS	RESPONSABLES		HEURES CONSOMMEES	
	NOM	PRENOM	2002	2003
Etude "ab-initio" des processus inélastiques sur des surfaces solides	LORENTE	Nicolas	23 658	28 821
Simulation du transport des charges ioniques dans les solides ionocovalents et relation avec leur réactivité chimique	HENN	François	8 825	3 726
Etude des transferts de chaleur à l'échelle atomique	CHANTRENNE	Patrice	17 378	66 572
Relations structure dynamique dans les oligomères et polymères conjugués	SAUVAJOL	Jean-Louis		76 983
Calcul de l'effet Raman résonnant et non-résonnant dans les nanotubes de carbone	SAUVAJOL	Jean-Louis		351
Dynamique des systèmes fractals : lois d'échelle et diffusion inélastique de la lumière. Application aux aérogels de silice	JULLIEN	Rémi	414	1 045

Etude de biostructures dans des mélanges eau-sucre	AFFOUARD	Frédéric		8 617
Comportement de géomatériaux par synthèse numérique. Passage de l'échelle moléculaire à l'échelle macroscopique	JOUANNA	Paul	527	20 757
Simulation Dynamique Moléculaire de la Formation de Réseaux 3-Dimensionnels de Résines Epoxydes	ABADIE	Marc J.M.	5	17 573
Approche ab initio des propriétés électroniques et structurales de nanostructures Ni/Cu (111)	MAGAUD	Laurence		3 040
Fin de l'étude des couplages intercouches dans les multicouches Fe/Cr avec interfaces imparfaites	STOEFLER	Daniel	10 203	9 942
Propriétés électroniques, magnétisme et couplage d'échange dans les hydroxynitrates des métaux de transition : molécules et systèmes étendus	MASSOBRIO	Carlo	27 535	55 056
Etude des propriétés électroniques et structurales des matériaux hybrides	ALOUANI	Mebarek	52 100	59 896
Propriétés magnétiques de systèmes à base de métaux de transition	DREYSSE	Hugues		15 241
Transport quantique dans des anneaux unidimensionnels désordonnés avec des électrons en interaction	JALABERT	Rodolfo		23 193
Modélisation du comportement mécanique des matériaux par la méthode des éléments finis	MAIRE	Eric	886	23
Calcul ab-initio des excitations électroniques dans les systèmes complexes	ARNAUD	Brice		18 138
Etude ab initio du comportement électrochimique d'électrodes positives au Vanadium du type $AVOXO_4$ ou de formulation Nasicon $AxV_2(XO_4)_3$ (avec $A=Li$; $X=P, As, S$)	BOUCHER	Florent	53 069	36 716
Modélisation de la formation et des propriétés des gels	KOLB	Max	1 631	2 842
Simulation moléculaire de fluides sous cisaillement	DELHOMMELLE	Jérôme	1 095	18 036

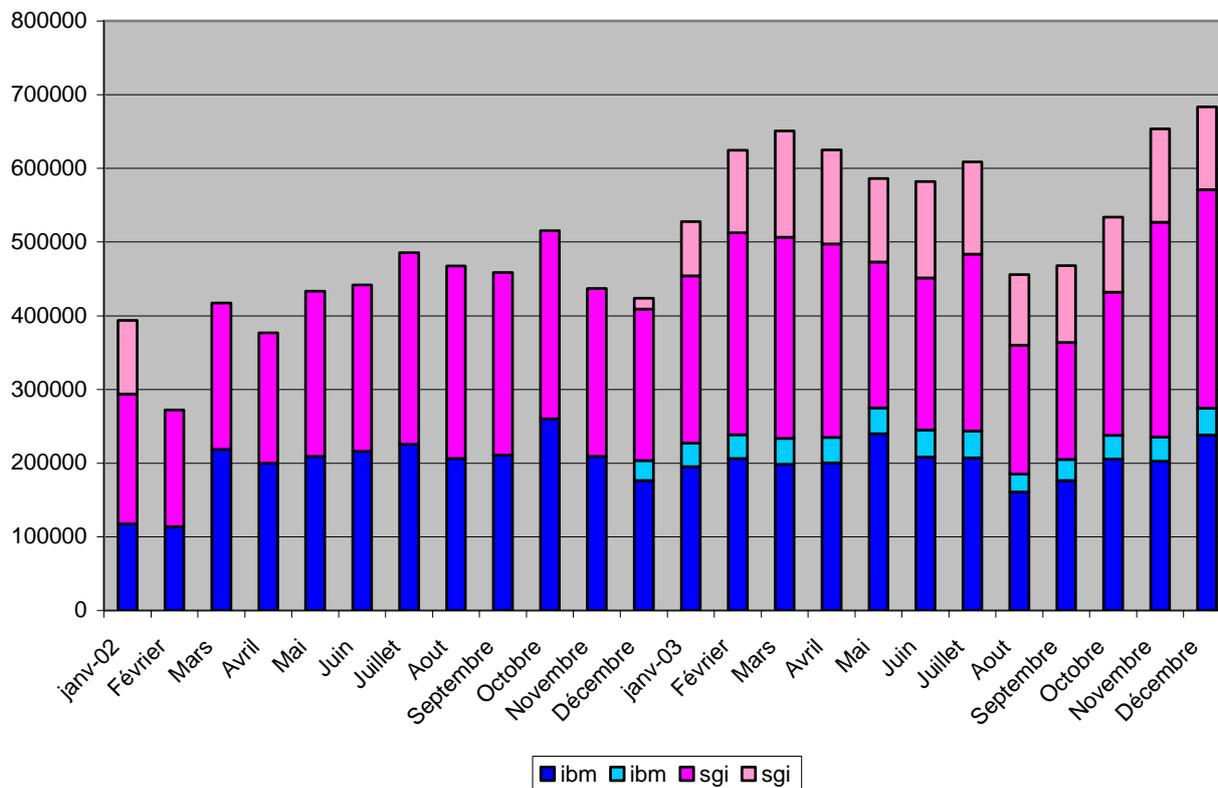
Comportement en fluage à hautes températures de structures complexes : utilisation du code ABAQUS standard. Etude de faisabilité	CHARKALUK	Eric		0
Etude de la mobilité et des propriétés mécaniques des polymères amorphes à hautes performances par dynamique moléculaire. Application aux systèmes membranaires	NEYERTZ	Sylvie	22 400	43 122
Etude de la structure et de la dynamique dans la région interphase d'un système élastomère/nanoparticule	BROWN	David	49 630	45 979
Modélisation du comportement de milieux divisés	ALART	Pierre	15 148	24 409
Etude thermodynamique et cinétique d'alliages métalliques	LEGRIS	Alexandre	19 534	25 406
Etude à l'échelle atomique de propriétés volumiques et interfaciales d'alliages ordonnés Fe-Al-B	BESSION	Rémy		44 719
Etude des défauts dans les oxydes et des interfaces impliquant le silicium	BOUREAU	Gérard	9 988	11 589
Etude des mécanismes d'émission d'électrons par des nanotubes de carbone ou de nitrure de bore	DEVEL	Michel	36	0
Modélisation des réactions à l'interface verre-eau	DEVREUX	François	865	1 195
Structures à bandes interdites photoniques	CASSAGNE	David	17 536	15 081
Structure et propriétés de transport de verres de chalcogenures	JUND	Philippe	1 731	20 898
Etude par dynamique moléculaire des mécanismes et cinétiques de croissance d'un film d'oxyde d'Aluminium	SALAZAR	Marcos	22 175	39 994
Simulation de la rupture de particules intermétalliques dans les alliages à légers à l'aide du logiciel ABAQUS	KLOCKER	Helmut	644	0
Etude ab initio des systèmes vitreux	JULLIEN	Rémi	60 816	48 176

Simulations numériques des verres par dynamique moléculaire classique	JULLIEN	Rémi	25 028	8 247
Modélisation et étude du plissement dans les lignes de recuit continu	POTIER-FERRY	Michel	2 198	2 239
Retournement d'aimantation dans une nanoparticule isolée	LEDUE	Denis	88 377	32 296
Dynamique moléculaire hors équilibre. Simulations de mélanges binaires en fluide libre et en milieux poreux. Calculs des coefficients de transport	DUGUAY	Bernard	9 505	15 656
Simulation par dynamique moléculaire parallèle dans la phase liquide et en surfusion : application au silicium, aux gaz rares et aux mélanges binaires	JAKSE	Noël	5 147	4 456
Coupled Electronic-Ionic Monte Carlo study of hydrogen at high density.	CEPERLEY	David M.	10 782	
Front-End Models for Silicon Future Technology	BEN ASSAYAG	Gérard	1 453	
Etude numérique des effets du confinement sur les transitions de phase des cristaux liquides et d'autres fluides	ANGLARET	Eric	38 422	
Calcul de l'effet Raman résonnant et non-résonnant dans les nanotubes de carbones.	BENOIT	Claude	10 494	
Calcul réaliste du transport polarisé en spin dans les jonctions magnétiques à effet tunnel	CHSHIEV	Mairbek	12 011	
Instabilités d'origine électronique dans les cristaux moléculaires	KATAN	Claudine	0	
Estimation du risque fracturaire. Modélisation de l'os spongieux	RUMELHART	Claude	596	
Calculs par éléments finis de matériaux multiphasés, monocristallins et d'agrégats multicristallins	GALLIET	Isabelle	9	
Etudes de verres de silice en dehors de l'état d'équilibre	TEBOUL	Victor	1	

Interaction Laser Intense-Agrégat.	SURAUD	Eric	34	
Modélisation de la structure électronique des pérovskites ferroélectriques à base de plomb	BALDINOZZI	Gianguido	0	
Propriétés magnétiques des super-réseaux Dysprosium/Terbium	LEDUE	Denis	52 369	
	TOTAL HEURES		674 255	850 030

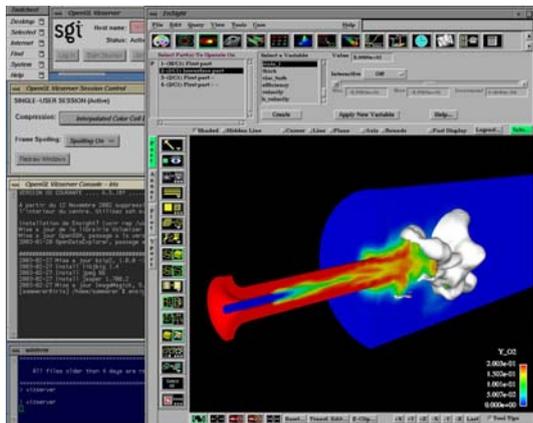
4.4 Répartition des heures produites

Le graphique ci-dessous indique le nombre d'heures de calcul produites chaque mois sur les machines du centre. En janvier 2002 l'Origin 2000 ne faisait plus partie du parc du CINES mais a cependant été utilisée pour un projet spécifique en cryptologie (100 000 heures en janvier 2002).



4.5 La visualisation scientifique

Le CINES a mené plusieurs expériences concluantes sur la visualisation à distance grâce au logiciel VizServer de SGI. Il est désormais possible d'afficher sur son poste de travail local, les résultats des simulations en utilisant une faible bande passante du réseau (quelques Mb/s suffisent !).



Visualisation au CERFACS (Toulouse) de calculs en combustion turbulente. Une collaboration entre N. Monnier, Y. Sommerer (CERFACS) et Ph. Falandry (CINES) a permis de mettre en évidence un gain en temps d'un facteur 3 en utilisant le service de visualisation à distance par rapport à la méthode plus traditionnelle consistant à rapatrier les données en local avant post-traitement graphique.

4.6 Le Comité des Chercheurs Calculant au CINES (CCCC)

En 2002, un comité utilisateur a été créé avec un représentant par comité thématique élu pour 3 ans. Outre les contacts informels avec les équipes du CINES, le CCCC s'est réuni sur le centre les 16 décembre 2002 et 19 décembre 2003.

4.7 Le prix CINES

A l'initiative du Conseil Scientifique du CINES et de son Président, il a été décidé d'attribuer chaque année un prix du CINES destiné à récompenser un chercheur calculant au Centre, responsable d'un projet innovant. Après examen attentif de plusieurs très bons projets, le Conseil a attribué le prix 2002 à Paul Indelicato, Directeur de recherche, responsable des groupes « Interactions fondamentales en Physique Atomique » et « Mesure du rayon du proton par l'étude de l'hydrogène muonique » au sein du laboratoire Kastler Brossel.

5 Les données

5.1 Sudoc (Système Universitaire de Documentation)

Ce projet de l'Agence Bibliographique de l'Enseignement Supérieur (ABES) est hébergé au CINES depuis début 2000. L'ensemble des machines du Sudoc est relié à RENATER via le routeur du centre et le CINES assure le fonctionnement quotidien de ces équipements ainsi que la sauvegarde périodique des données.

Après avoir fonctionné presque trois ans sur des environnements TANDEM, le catalogue Sudoc, conformément aux engagements contractuels passés entre l'Agence Bibliographique de l'Enseignement Supérieur et la société PICA, a été migré sous Unix au début de l'année 2003. La nouvelle plate-forme de production est une machine SUN E4800 sous Solaris qui a pu être intégrée au réseau de sauvegarde automatisée du CINES. La solution UNIX apporte au Sudoc une réelle indépendance entre le niveau fonctionnel et le niveau technique.

Un nouveau projet de portail documentaire a été démarré en 2003 à l'ABES. Son hébergement au CINES est prévu début 2004.

5.2 LiberFloridus

Le serveur WEB LiberFloridus propose à la consultation d'un large public les enluminures des manuscrits médiévaux conservés dans les bibliothèques de l'enseignement supérieur en France.

La base de données est alimentée à partir des manuscrits enluminés issus des fonds des bibliothèques Mazarine et Sainte-Geneviève. L'ensemble comporte près de 30 000 enluminures pour environ 1 600 manuscrits.

Développé par le CINES, le serveur a été ouvert au grand public en octobre 2002 : liberfloridus.cines.fr.

5.3 DeBuCi

Le serveur DeBuCi (<http://debuca.cines.fr>) est une base de données qui recense les actions de coopération internationale en matière de formation et de recherche des établissements d'enseignement supérieur. Sa mise en place a été soutenue par la DRIC. Ce serveur a été entièrement conçu et développé au CINES.

5.4 IMG T

Développé dans le cadre des projets scientifiques, IMG T est un système d'information intégré dans le domaine de l'immunogénétique spécialisé dans les Immunoglobulines (Ig), les Récepteurs des lymphocytes T (TcR) et les molécules du Complexe Majeur d'Histocompatibilité (CMH) de toutes les espèces de vertébrés.

5.5 CLORA

En répondant à un appel d'offres relatif à la migration du serveur du CLORA (CLub des Organismes de Recherche Associés), association basée à Bruxelles, le CINES s'est vu confié, en septembre 2000, l'installation, la réécriture et la maintenance des serveurs web du CLORA :

- un serveur Internet qui diffuse des notes d'information à forte valeur ajoutée sur la Recherche Européenne (www.clora.net) pour 38 organismes publics ou parapublics de recherche : CEA, CEMAGREF, CIRAD, CNAM, CNRS, ...

- un serveur Intranet qui permet au Secrétariat du CLORA d'administrer la base de données (dépôt et gestion des documents, gestion des utilisateurs, statistiques, ...).

En 2002, l'application a fait l'objet d'une complète réécriture.

5.6 E-BIOSCI

Au cours des années 2002-2003, le CINES a collaboré à deux projets en bio-informatique retenus par l'Union Européenne :

E-BioSci (European platform for access and retrieval of full text and factual information in life sciences) est un projet orienté « services » et intégré au programme européen « Quality of life and management of living resources ». L'objectif est de construire un réseau européen de ressources documentaires en sciences biomédicales qui puisse concurrencer l'offre américaine.

Oriel (On line Research Information Environment for Lifesciences), orienté « recherche », est financé pour 3 ans à partir du 1^{er} janvier 2002, dans le cadre du programme européen « Information Society Technologies ». Il a pour but de concevoir et de développer des méthodes et des outils, s'appuyant sur les recherches récentes, pour l'intégration et la diffusion de gros volumes d'informations numérisées complexes et disparates. La validation sera effectuée sur les environnements mis en place dans le cadre de E-BioSci.

5.7 Canal-U

Canal-U est un projet de la communauté universitaire piloté par la Direction de la Technologie, Ministère de la Recherche, Ministère de l'Éducation Nationale. La maîtrise d'œuvre est assurée par le SFRS / CERIMES. Il s'agit de construire un bouquet de « chaînes » sur le Web dans le cadre de l'enseignement supérieur et de la recherche.

Plus de 14 000 vidéos au format RealNetwork et Windows Media sont accessibles via le portail www.canalu.fr.

5.8 École Française d'Athènes

Financé par la Direction de la Recherche dans le cadre du plan de numérisation, le projet CEFAEL, initié en 2001, consistait à produire et mettre en ligne la bibliothèque numérique de l'École Française d'Athènes (EFA) réunissant l'ensemble des publications éditées depuis 1877.

Le volet production centré sur la robotisation de la chaîne de numérisation a été réalisé en partenariat avec la Maison de l'Orient et de la Méditerranée, tandis que la partie hébergement et diffusion s'appuie sur les ressources du CINES.

Au final le portail (cefael.efa.gr) hébergé au CINES donne accès à 550 volumes de l'EFA dont le BCH (Bulletin de la Chronique Hellénistique). Les 250 000 pages correspondantes constituent un patrimoine scientifique de plus de 150 ans de recherches sur le monde grec.

L'inauguration de ce premier portail de publications électroniques sur les études grecques a eu lieu le 9 avril 2003 à Athènes.

5.9 Manuscrits Médiévaux

Le serveur des manuscrits musicaux de la bibliothèque interuniversitaire de médecine de Montpellier a été développé sur un serveur apache (<http://manuscrits-biomed.cines.fr>). Il met à la disposition du grand public 43 manuscrits médiévaux rares dont 417 folios sont commentés par les plus grands spécialistes. Il s'agit d'études musicales et iconographiques. A ce serveur est associé un CDROM.

5.10 CODOR

Serveur de Conférence des Dirigeants d'Organismes de Recherche regroupement des organismes de recherche publique présents en Languedoc Roussillon.

5.11 Couperin

Depuis 2003 le CINES héberge le WEB de Couperin. Couperin est une association de nombreuses universités françaises pour gérer leurs abonnements aux revues scientifiques.

5.12 PERSEE

Ce projet a débuté en 2003 sous l'impulsion de la Sous Direction des Bibliothèques et de la Documentation. L'objectif de la première phase est de mettre à disposition sous forme électronique et d'archiver, d'ici fin 2004, 7 revues (410 000 pages) dans le domaine des sciences humaines et sociales (SHS). Les étapes ultérieures prévoient l'élargissement à d'autres revues avec la constitution, à terme, d'un corpus d'environ 250 revues.

5.13 SPARTE

Le projet SPARTE (Système de Production et d'Archivage de Thèses Electroniques) participe au dispositif de « diffusion électronique des thèses » mis en place par la Sous Direction des Bibliothèques et de la Documentation du Ministère de la Jeunesse de l'Education Nationale et de la Recherche. Dans ce cadre le CINES a été chargé, en collaboration avec l'ABES, d'adapter et d'héberger les outils informatiques permettant de collecter les thèses au format électronique et de constituer les « méta-données » en XML afin d'assurer leur référencement et leur diffusion.

D'autre part le CINES a été désigné comme site national d'archivage pérenne des thèses. Les outils SPARTE seront donc interfacés avec le futur service d'archivage.

6 Les réseaux

6.1 Le réseau du CINES

Le réseau du CINES comporte schématiquement trois branches correspondant à des niveaux de sécurité différents :

- le réseau interne (intranet) ;
- le réseau des serveurs à accès par identification (calcul, bases de données...) ;
- le réseau des serveurs à accès public (W3, Listserv).

Généralisation de l'éthernet Gigabit

Les années 2002/2003 correspondent à une généralisation du Gigabit.

Si l'Ethernet 100 constitue encore une partie de l'ossature de l'intranet, les serveurs « publics », les machines de calcul et le serveur de fichiers sont interconnectés par des liaisons au Gigabit. Celles-ci ont notamment remplacé les connexions HIPPI.

Parallèlement **l'accès du CINES à RENATER, directement sur le NR (Nœud RENATER), est passé de 100 Mb/s à 1 Gb/s en 2003.**

Enfin pour ses liaisons intra-régionales le CINES est connecté au réseau haut débit montpellierain HDMON (partie intégrante du réseau régional R3LR) qui a évolué lui aussi vers des connexions au Gigabit.



6.2 Hébergements

NRD RENATER et Point de Concentration Régional

Le CINES héberge le **NR** (Nœud RENATER) du réseau national RENATER, dont la version 3 a été déployée pendant l'été 2002 avec une architecture en « boucles » reliant les deux nœuds internationaux (Paris et Lyon) et les 21 nœuds régionaux. RENATER 3 banalise les liaisons multi-gigabit et utilise la technologie tout IP.

Le CINES abrite également le **PCR** (Point de Concentration Régional) du réseau régional R3LR-3 opéré par Kaptech pour la dorsale et dont la partie haut débit montpellieraine, HDMON, est opérée par France Télécom depuis août 2001.

Ces matériels bénéficient ainsi de locaux informatiques sécurisés permettant un fonctionnement sans interruption 24h sur 24. Le service d'astreinte du CINES peut également intervenir à la demande.

Dans le cadre de cet hébergement le CINES fournit la logistique et les infrastructures nécessaires à la mise en œuvre de ces matériels et des liaisons associées. Il apporte également son aide et ses compétences aux divers intervenants.

BIU Montpellier

Le CINES héberge le serveur de la bibliothèque de l'Université Montpellier II et assure sur cette machine les sauvegardes systèmes et données. La BIU administre elle-même ce serveur.

PLEI@D

Installée au CINES en janvier 2001, l'application « Plei@d » (Plate-forme d'auto-formation à distance ou « téléformation ») est gérée par le CNAM (Conservatoire National des Arts et Métiers) Languedoc-Roussillon, rassemblant la région « sud-est » du CNAM (Lyon, Nice, Marseille, Montpellier, Toulouse, Perpignan...). C'est un site WEB (<http://sudest.pleiad.net/>) réservé au CNAM. Ainsi, un auditeur du CNAM connecté sur Internet peut suivre un cours avec un navigateur internet classique. L'architecture de cette application est composée de deux machines PC sous Linux (RedHat).

Sudoc

L'application nationale des bibliothèques universitaires, dont le maître d'ouvrage est l'Agence Bibliographique de l'Enseignement Supérieur (ABES), est hébergée au CINES. La société néerlandaise PICA fournit le logiciel et assure sa maintenance. Le CINES participe aux évolutions des systèmes d'exploitation de la plate-forme et assure la gestion du réseau et la sécurité des données.

Serveur de l'Académie de Montpellier

Après avoir participé à la phase de choix, de formation et d'installation avec l'équipe du CRDP de Montpellier, le CINES héberge en 2003 le serveur du Rectorat et en assure l'administration système et réseau (www.ac-montpellier.fr). Celui-ci, un Dell PowerEdge 6000 sous Windows 2000 Serveur, est en service depuis le 10/11/2000.

6.3 Expertises

Conformément à l'article 2 de ses statuts, le CINES intervient sur certains sujets comme expert auprès de partenaires.

R3LR, réseau régional du Languedoc-Roussillon

Depuis 1993 le Réseau Régional de la Recherche du Languedoc Roussillon (R3LR) assure l'interconnexion de l'ensemble des sites de recherche et d'enseignement supérieur implantés en région Languedoc-Roussillon.

Le marché passé par la Région avec France Télécom pour la version 2 du réseau R3LR arrivant à échéance en avril 2002, un appel d'offres a été lancé pour constituer le réseau R3LR-3. Le CINES a participé au comité de rédaction du cahier des charges qui a fixé comme objectif la mise à disposition de la communauté enseignement supérieur-recherche d'une dorsale « littorale » à très haut débit sur laquelle aboutissent les réseaux locaux de collecte. Ces derniers drainent les flux des réseaux métropolitains et ceux des établissements isolés. La dorsale constitue alors le prolongement naturel en région de la boucle nationale de RENATER.

Kaptech a été l'opérateur sélectionné pour offrir cette dorsale. De son côté France Télécom a été chargé d'opérer la partie HDMON (réseau haut-débit Montpelliérain) d'interconnexion à 1 Gb/s de boucles de campus, sur laquelle le CINES est connecté. Rappelons que le CINES dispose aussi d'une prise directe à 1 Gb/s directement sur le NR pour les échanges hors région.

HDMON

Les organismes d'enseignement supérieur et de recherche situés dans les quartiers nord de l'agglomération montpelliéraine avaient exprimé depuis plusieurs années le désir d'être interconnectés par un réseau à haut débit.

Le réseau HDMON (Haut Débit MONTpellier Nord), à l'origine duquel le CINES a été un des moteurs, a pour but de répondre à cette attente. Il est entré en service en 2001 dans le cadre du réseau régional R3LR-2 et prolongé dans le cadre de R3LR-3.

Il est organisé autour de boucles géographiques de type campus, construites essentiellement à base de fibres optiques privées et de quelques liaisons hertziennes internes aux établissements. Actuellement les boucles sont interconnectées par France Télécom par des liaisons au Gb/s.

L'accès de HDMON au réseau national RENATER s'effectue au travers d'un « portail » unique et repose sur le principe de la mutualisation des agréments des différents établissements partenaires.

Chaque site de raccordement dispose d'un commutateur et d'un routeur, éventuellement réunis dans un seul équipement, reliés à l'équipement de concentration de la boucle à laquelle est rattaché le site. Chaque boucle dispose d'un équipement de concentration qui permet de gérer les flux internes et d'assurer l'interconnexion avec les autres boucles.

Comité Réseau des Universités (CRU)

Le CINES participe au Comité restreint du CRU.

A la demande du CRU, le CINES héberge un service national de listes de diffusion.

6.4 Collaborations avec RENATER

Depuis fin 2000 le CINES accueille une antenne du GIP RENATER. Cette antenne comprend aujourd'hui 6 personnes. Sans que les sujets de collaboration soient figés, des thèmes sont prévus : la métrologie, la sécurité, la visioconférence, la formation sur les réseaux.

Dans tous ces domaines, des actions ont été menées dans lesquelles RENATER a apporté ses compétences et le centre son expérience de terrain ou son appui logistique. Au-delà des actions elles-mêmes il faut souligner que l'intérêt est soutenu d'un côté comme de l'autre pour poursuivre et si possible amplifier la synergie entre les deux organismes. Reprenons les différents points :

Sécurité : le CINES a mis en place des actions concertées avec la personne du CERT RENATER localisée à Montpellier.

Suivi de projets : un service de visualisation à distance a pu être mis au point avec la collaboration des équipes RENATER.



Métrologie : le logiciel de métrologie netMET est utilisé au CINES depuis mai 2000.

Formations : des formations régulières (CiRen) co-organisées par le CINES et RENATER, permettent d'aborder de nombreux sujets (IPV6, BGP, Multicast, ...) et d'assurer un large transfert de compétence.

Partenaire du projet européen EUMEDCONNECT, piloté par DANTE, qui vise à déployer une infrastructure de réseau pour l'éducation et la recherche dans le bassin méditerranéen, le GIP RENATER a proposé que la première formation réalisée dans ce cadre ait lieu au CINES la seconde semaine de janvier 2004.

6.5 JRES 2003 : Journées Réseaux 2003

Du 17 au 21 Novembre 2003 ont eu lieu à Lille les « Journées Réseaux 2003 » (JRES2003) organisées par le CNRS et les Universités. Elles ont permis à environ un millier de spécialistes contribuant à l'administration des réseaux et des systèmes informatiques dans les laboratoires et les campus universitaires de se retrouver pour partager leurs expériences.

Le CINES a été impliqué dans cette manifestation de deux façons :

- en participant au comité de programme de ces journées et plus particulièrement sur les thèmes des services avancés (Grid), des protocoles (IPV6), de la sécurité et de la métrologie ;
- en animant des conférences sur les thèmes : garde-barrières et architecture, services avancés GRID, réglementation.

6.6 Services offerts

Le débit entre le CINES et l'extérieur est passé de 100 Mb/s à 1 Gb/s en 2003.

NEWS, DNS de secours

Le CINES offre une gamme de services dont la distribution des « news », la gestion des « DNS », ...

Miroir du serveur national des antivirus.

Suite aux négociations menées par le Groupe Logiciels, mis en place par la Direction de la Recherche afin de négocier avec les éditeurs et auquel participe le CINES, des accords ont été passés pour la diffusion d'antivirus au sein des universités et des organismes de recherche.

Le serveur national « antivirus », situé au CCR de Jussieu (Paris VI), regroupe les logiciels des éditeurs dans leur dernière version ainsi que les signatures les plus récentes. Les centres diffuseurs (14) sont les miroirs de ce serveur national. Chaque Centre de Ressources Informatiques (CRI) d'établissement bénéficie d'un accès sécurisé sur son centre diffuseur auprès duquel il récupère à son tour les logiciels et les signatures pour les diffuser aux utilisateurs en tenant une comptabilité des licences distribuées.

Le CINES est le centre diffuseur pour le périmètre géographique de l'académie de Montpellier.

Listes de diffusion

A la demande du Comité Réseau des Universités (CRU), le CINES gère un service de listes de courrier électronique (logiciel SYMPA) depuis 1998.

Espace de travail collaboratif

Le CINES propose à tous les membres de la communauté « Enseignement Supérieur – Recherche » un espace de travail collaboratif accessible via le WEB. Des groupes de travail inter-organismes peuvent ainsi se former et coopérer (recherches communes, rédaction d'articles, préparation d'ouvrages, gestion de colloques, ...). Ce service repose sur les extensions de « SYMPA », logiciel développé, actualisé et maintenu par le CRU (Comité Réseau des Universités).

Service de visioconférences

Depuis Novembre 2003, RENATER contribue au *backbone* mondial VRVS par la mise à disposition de deux « réflecteurs », l'un à Paris, l'autre à Lyon, ce qui rend utilisable cette solution en France. Le CINES a expérimenté et validé cette solution et fourni à ses utilisateurs les informations nécessaires à l'usage de ce service.

Le CINES est un des acteurs de la grille de visioconférences qui accueille la diffusion des séminaires Aristote et les causeries du FMBone. Ces événements sont retransmis dans la salle de conférences du CINES et sont accessibles aux membres de la communauté académique locale.

7 Visites de site, accueil scientifique, séminaires, formations

7.1 Visites de sites

Le CINES se rend chaque année dans des universités ou organismes de recherche pour :

- rencontrer ses utilisateurs, dialoguer avec eux, recueillir leurs suggestions d'amélioration du service rendu et les évolutions souhaitées ;
- faire connaître le centre et ses missions.

Sur la période 2002-2003, le CINES a ainsi rendu visite à :

- en 2002 : IPG Paris (26/3), Pau (13/6), CERFACS et CICT à Toulouse (14/6)
- en 2003 : Nice (6/6), Bordeaux (9/10), Marseille (16/10), Grenoble (22/10), Montpellier (23/10)

7.2 Accueil scientifique

Le CINES propose à ses utilisateurs une formule appelée « accueil scientifique » qui est encouragée par le conseil scientifique et bien appréciée par celles et ceux qui en ont bénéficié. Il s'agit de séjours au centre (typiquement une semaine) en immersion dans les équipes d'assistance du CINES. Sur le plan matériel, le laboratoire d'origine du chercheur ou du thésard prend en charge le déplacement et le CINES participe aux frais d'hébergement. Les accueils réalisés en 2002 et 2003 concernent des projets très variés allant de la parallélisation de code à la mise en valeur de résultats de simulations par la réalisation de films (visualisation scientifique).

7.3 Journées thématiques

Le CINES organise régulièrement des journées thématiques en collaborations avec ses utilisateurs ou d'experts reconnus dans leur domaine. La plupart de ces séminaires ont eu un franc succès et souvent, les inscriptions ont été limitées à la capacité maximale de la salle (50 places).

En 2002 : Calculs en mécanique (8/3), Visualisation (21/10)

En 2003 : Grilles (19/3), XML (19/9)

7.4 Formations CiRen

Dans le cadre de leurs collaborations, le CINES et le GIP RENATER organisent des cycles de formation communs : les formations CiRen.

Ces formations, proposées à titre gracieux aux membres de la communauté des utilisateurs du réseau RENATER se déroulent dans les locaux du CINES et une salle de travaux pratiques, configurable à la demande, permet aux stagiaires d'expérimenter en grandeur réelle les concepts enseignés.

Année 2002

Sujet	Dates	Nombre de jours	Nombre de participants	
IPv6	28 - 30 janvier	2	20	CiRen02
MPLS	27 - 28 mai	2	17	CiRen03
IPv6	6 - 7 juin	2	10	CiRen04
IPv6	16 - 18 décembre	2	20	CiRen05

Année 2003

Sujet	Dates	Nombre de jours	Nombre de participants	
BGP	15 - 17 janvier	2	11	CiRen06
netMET	24 - 28 mars	4	40	CiRen07
IPv6	23 - 25 juin	2	16	CiRen08
BGP	4 - 6 novembre	2	20	CiRen09
Sécurité	2 - 4 décembre	2	20	CiRen10

7.5 Formation au calcul parallèle

Le CINES organise régulièrement des formations au calcul parallèle, soit dans ses locaux, soit à l'extérieur du centre lorsque le nombre de stagiaires est suffisant.

Formations organisées en 2002

Sujet	Date	Nombre de jours	Nombre de participants	Lieu
Parallélisation avec MPI	23 - 24 janvier	2	20	Pau
Parallélisation avec OpenMP	12 - 14 mars	3	1	CINES
Parallélisation avec MPI	26 - 28 mars	3	11	CINES
Parallélisation avec MPI	4 - 6 juin	3	2	CINES
Parallélisation avec MPI	24- 26 septembre	3	25	Reims
Parallélisation avec MPI	8 - 11 octobre	4	6	CINES
Parallélisation avec MPI	12 - 14 novembre	3	17	Metz
Parallélisation avec MPI	26 - 29 novembre	4	2	CINES

Formations organisées en 2003

Sujet	Date	Nombre de jours	Nombre de participants	Lieu
Parallélisation avec MPI	11 - 14 mars	4	13	CINES
Parallélisation avec MPI	1 - 2 avril	2	17	Nantes
Parallélisation avec MPI	11 - 12 juin	2	12	Toulouse
Parallélisation avec MPI	2- 6 décembre	5	4	CINES

Annexes

Personnels du CINES en 2002-2003

Direction

Alain QUERE (jusqu'au 1/3/2003)
Thierry PORCHER (à partir du 1/3/2003)
Francis DAUMAS
Jean-François PAINTRAND (jusqu'au 1/4/2002)
Marcel PONTILLON (à partir du 12/8/2002)
Jean-Paul SAUTER
Georges URBACH
Elisabeth GAUDRON

Service Assistance

Jean-Louis AMBROSINO
Nicole AUDIFFREN (à partir du 1/10/2002)
Michèle BATLLE
Marc BATLLO
Michel BOULOC
Philippe FALANDRY
Mireille GAY
Abdou MAHJOUR
Alain MANGO
José SANCHEZ
Jean-Pierre THERON
Martine TUAL

Service Production

André ARBIEU
Nathalie AVALLONE
Jean-Luc BRINGUIER
Eric CADARS
Grégory CHANTE
Maurice GAUJAC
Yvan GRAZIOSO
Philippe ROUQUETTE

Service Systèmes et Réseaux

Roger BERTHIOT
Eric BOYER
Thierry CORMIER

Bernard DI MICELI
Marie GALEZ
Gérard GIL
Christine LIBOUBAN
Pascal MATHIEU
Jean OUDEVILLE (jusqu'au 1/6/2003)
Jean-Christophe PENALVA

Secrétariat Général

Solange CANILHAC
Michel COMPAN
Maryse CONTINI
Patricia JALABERT
Claude KINDOU
Olivier LERNOUT
Régine MANDEZ
Gilles RAMBIER
Soutsayta RATHIKOUN
Annie RIVERA
Gérard VERNOU

Sigles et acronymes

ABES : Agence Bibliographique de l'Enseignement Supérieur (Montpellier)

BIU : Bibliothèque Inter Universitaire

CCCC : Comité des Chercheurs Calculant au CINES

CERFACS : Centre Européen de Recherche et de Formation en Calcul Scientifique (Toulouse)

CERIMES : Centre de Ressources et d'Information sur les Multimédias pour l'Enseignement Supérieur (cf. SFRS)

CINES : Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur

CLORA : Club des Organismes de Recherche Associés

CNAM : Conservatoire National des Arts et Métiers

CNRS : Centre National de la Recherche Scientifique

CNUSC : Centre National Universitaire Sud de Calcul

CODOR : COnférence des Dirigeants d'Organismes de Recherche

CRDP : Centre Régional de Documentation Pédagogique

CRI : Centre de Ressources Informatiques

CRU : Comité Réseau des Universités

CT : Comité Thématique

DARI : Demande Annuelle de Ressources Informatiques

DES : Direction de l'Enseignement Supérieur (ministère de l'Éducation Nationale)

DMF : Data Migration Facility

DNS : Domain Name Services

DeBuCi : Données de la Base universitaire des Coopérations internationales

DRIC : Délégation aux Relations Internationales et à la Coopération (ministère de l'Éducation Nationale)

EFA : Ecole Française d'Athènes

EPA : Etablissement Public national à caractère Administratif

GIP : Groupement d'intérêt Public

GPFS : Global Parallel File System (IBM)

HDMON : Haut Débit MONTpellier Nord

HIPPI : High Performance Parallel Interface

IDRIS : Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique

IGH : Institut de Génétique Humaine (Montpellier)

IMGT : ImMunoGeneTics database

IP : Internet Protocol

LIGM : Laboratoire d'ImmunoGénétique Moléculaire

MPI : Message Passing Interface

Mbone : Multicast Backbone

NFS : Network File System

NR : Noeud RENATER

NRD : Nœud Régional Distribué

OpenMP : Open Multi Processor
PCR : Point de Concentration Régional
PVM : Paralel Virtual Machine
R3LR : Réseau Régional de la Recherche du Languedoc-Roussillon
RENATER : Réseau National pour la Technologie, l'Enseignement et la Recherche
SAN : Storage Area Network
SDBD : Sous Direction des Bibliothèques et de la Documentation (Ministère de l'Éducation Nationale)
SFRS : Service du Film de Recherche Scientifique (doit devenir le CERIMES), Vanves
SGBD : Système de Gestion de Bases de Données
SGI : Silicon Graphics, Inc.
SIBIL : Système Informatique pour les BibLiothèques
SMP : Symmetrical Multi-Processing
SP : Scalable POWERparallel
SSA : Serial Storage Architecture
Sudoc : Système universitaire de documentation
TCP : Transmission Control Protocol



Photo C. O'Sughrue

www.cines.fr