

*Projet ScAlApplix**Schémas et Algorithmes Hautes
Performances pour les Applications
Scientifiques Complexes**Futurs*

THÈME 4B

*R* *apport
d'Activité*

2002

Table des matières

1. Composition de l'équipe	1
2. Présentation et objectifs généraux	2
3. Fondements scientifiques	2
3.1. Introduction	2
3.2. Schémas pour la mécanique des fluides	3
3.3. Schémas et méthodes rapides pour la chimie moléculaire	4
3.4. Algorithmique et solveurs hautes performances	4
3.4.1. Solveurs très hautes performances multi plates-formes	4
3.4.2. Méthodes multipôles	5
3.5. Algorithmique parallèle hétérogène	6
3.6. Mise en œuvre hautes performances	7
3.6.1. Machines à nœuds SMP et PCs en cluster	7
3.6.2. Couplage de codes en chimie moléculaire	7
3.7. Visualisation et pilotage de simulations numériques distribuées	7
4. Domaines d'application	9
4.1. Introduction	9
4.2. Mécanique des fluides	9
4.3. Chimie moléculaire	9
4.4. Dynamique des populations	10
5. Logiciels	11
5.1. Introduction	11
5.2. MUMPS	11
5.3. PaStiX	12
5.4. Scotch	12
5.5. QC++	13
5.6. SMC	13
5.7. FluidBox	14
5.8. EPSILON	14
6. Résultats nouveaux	14
6.1. Schémas et algorithmique pour la mécanique des fluides	14
6.1.1. Schémas distributifs compacts	15
6.1.2. Schémas distribuant le résidu d'ordre très élevé	15
6.1.3. Schémas distribuant le résidu sur maillage structuré	15
6.1.4. Schémas pour les écoulements diphasiques	15
6.1.5. Problèmes de suivis de fronts	16
6.1.6. Aéroacoustique	16
6.2. Schémas et algorithmique pour la chimie moléculaire	16
6.3. Schémas et algorithmique pour la dynamique des populations	17
6.4. Algorithmique et solveurs hautes performances	18
6.4.1. Décomposition de domaines et renumérotation de matrices creuses	18
6.4.2. Solveurs directs hautes performances multi plates-formes	18
6.4.3. Méthodes hybrides de résolution de grands systèmes linéaires creux	19
6.5. Algorithmique hétérogène	19
6.6. Visualisation et pilotage de simulations numériques distribuées	20
7. Contrats industriels	21
7.1. Contrat CEA d'expertise scientifique en calcul scientifique hautes performances	21
7.2. Contrats CEA de recherche et développement	21

8. Actions régionales, nationales et internationales	21
8.1. Actions nationales	21
8.1.1. ACI GRID EPSN	21
8.1.2. ACI GRID TLSE	21
8.2. Actions internationales	22
8.2.1. Projet NSF - INRIA	22
10. Bibliographie	22

1. Composition de l'équipe

SCALAPPLIX est un projet commun INRIA - CNRS - Universités Bordeaux 1 et Bordeaux 2, porté par le Laboratoire Bordelais de Recherche en Informatique (LaBRI, UMR 5800) et le Laboratoire de Mathématiques Appliquées de Bordeaux (MAB, UMR 5466). Il est aussi soutenu par l'École Nationale Supérieure d'Électronique, d'Informatique et de Radiocommunications de Bordeaux (ENSEIRB). SCALAPPLIX a été créé le 1^{er} novembre 2002 (<http://www.labri.fr/scalapplix>).

Responsable scientifique

Jean Roman [Professeur, ENSEIRB - LaBRI]

Personnel INRIA

Christophe Berthon [Chargé de Recherche, Maître de Conférences en délégation de l'Université Bordeaux 1 à partir de septembre 2002]

Olivier Coulaud [Directeur de Recherche]

Pascal Hénon [Chargé de Recherche à partir de décembre 2002]

François Pellegrini [Chargé de Recherche, Maître de Conférences en détachement de l'ENSEIRB à partir de septembre 2002]

Personnel Université Bordeaux 1

Boniface Nkonga [Maître de Conférences HDR, MAB]

Pierre Ramet [Maître de Conférences, LaBRI]

Personnel ENSEIRB

Olivier Beaumont [Maître de Conférences, LaBRI]

Vincent Boudet [ATER 2002 - 2003, LaBRI]

Chercheurs doctorants

Aurélien Esnard [Allocataire MESR, LaBRI]

Pierre Fortin [Allocataire BDI, LaBRI]

Sébastien Gaucel [Allocataire MESR, MAB]

Guillaume Latu [Allocataire MESR, LaBRI]

Mohamed Mezine [Allocataire MESR, MAB]

Mikaël Papin [Contrat CEA, MAB]

Ingénieurs experts ou associés

Michaël Dussère [Ingénieur associé INRIA à partir d'octobre 2002]

Dimitri Lecas [Ingénieur expert INRIA à partir de septembre 2002]

Jean-Claude Okon [Ingénieur associé INRIA jusqu'au 31 octobre 2002]

Collaborateurs extérieurs

Rémi Abgrall [Professeur, Université Bordeaux 1 et IUF, MAB]

Patrick Amestoy [Maître de Conférences HDR, ENSEIHT¹-IRIT²]

Serge Chaumette [Maître de Conférences HDR, Université Bordeaux 1, LaBRI]

Michel Langlais [Professeur, Université Bordeaux 2, MAB]

Gérald Monard [Maître de Conférences, Université Henri Poincaré de Nancy, GCTN³]

Stagiaires

Cyril Banino [DEA Informatique de février 2002 à juillet 2002]

Damien Baudry [PFE MatMéca de février 2002 à juillet 2002]

Sébastien Christy [PFE ENSEIRB puis Contrat avec le CEA Ile-de-France d'avril 2002 à mars 2003]

Séverin Marret [PFE MatMéca chez Dassault de février 2002 à juillet 2002]

Fabien Marret [DEA Mathématiques Appliquées de février 2002 à juillet 2002]

¹École Nationale Supérieure d'Électrotechnique, d'Électronique, d'Informatique, et d'Hydraulique de Toulouse.

²Institut de Recherche en Informatique de Toulouse, UMR 5505.

³Équipe de Chimie et Biochimie Théoriques de Nancy, UMR 7565.

Déborah Pucheu [PFE MathMéca à la SNPE de février 2002 à juillet 2002]
Frédéric Raoult [PFE ENSEIRB et DEA Informatique de février 2002 à juillet 2002]
Corentin Travers [PFE ENSEIRB et DEA Informatique de février 2002 à juillet 2002]

2. Présentation et objectifs généraux

L'objectif de SCALAPPLIX est la mise en œuvre de compétences scientifiques complémentaires pour une recherche pluridisciplinaire dans les domaines de l'informatique hautes performances et de la modélisation numérique, et ce dans le but d'analyser et de résoudre efficacement des problèmes de calcul scientifique provenant d'*applications complexes nécessitant des puissances de calcul et manipulant des tailles de données téraflopiques*. La résolution effective de cette gamme de problèmes est un véritable défi qui nécessite clairement une approche pluridisciplinaire. Cette synergie de compétences scientifiques concernent plus particulièrement en mathématiques appliquées le domaine des schémas numériques, et en informatique les domaines de l'algorithmique parallèle et du savoir-faire de la mise en œuvre de codes hautes performances sur diverses plates-formes de calcul.

Il s'agit donc, dans le cadre de cette synergie scientifique, de *contribuer à toutes les étapes de la chaîne qui va de la conception de schémas performants à la mise en œuvre optimisée et efficace de codes de simulation pour des applications complexes et/ou de très grande taille*. Cette chaîne contient aussi la partie interprétation des résultats ; ceci se fera en pilotant les codes de calcul hautes performances parallèles et/ou distribués par une application de type réalité virtuelle, faisant ainsi de la simulation numérique un outil efficace pour interagir avec la modélisation via une analyse de sensibilité interactive des paramètres de cette simulation.

Tout naturellement, ce projet contient un important volet de transfert technologique et de valorisation dans le cadre de collaborations avec des industriels ayant à traiter des applications grandes consommatrices de puissance de calcul et manipulant des grandes masses de données.

3. Fondements scientifiques

3.1. Introduction

Mots clés : *applications scientifiques de grande taille, schémas numériques, modélisations multi-échelles et multi-physiques, algorithmique parallèle, hautes performances, pilotage de simulations.*

Les grandes applications que nous visons dans SCALAPPLIX sont *complexes* au sens où elles nécessitent des simulations de très grandes tailles, *plusieurs dizaines ou centaines de téraflows comme masse de calcul sur plusieurs téraoctets de données*, et qui sont issues de modélisations *multi-physiques* ou *multi-échelles* donnant lieu à des *couplages fins*. La simulation fine de phénomènes physiques, chimiques, ...nécessite de plus en plus la prise en compte de modélisations à des échelles d'espace et de temps différentes. Les informations issues des échelles les plus fines sont remontées aux échelles plus grossières pour améliorer la précision des phénomènes simulés (turbulence, réactions chimiques, ...). La mise en œuvre de ces couplages de modèles est nécessaire, soit parce qu'on ne sait pas résoudre dans des temps raisonnables à l'échelle la plus fine (par exemple simuler un système biologique de plusieurs milliers d'atomes avec un modèle électronique [71]), soit parce que le modèle n'est valable que pour de toutes petites échelles en temps ou en espace. Il est important que le couplage ait une cohérence physique ce qui implique de définir des schémas qui conservent cette cohérence et qui tiennent compte aussi des différentes approximations numériques des modèles pour avoir la meilleure approximation globale au moindre coût. Les trois types d'applications décrites plus loin illustrent bien cette problématique ; elles constitueront les problèmes de référence dans les recherches de ce projet.

Les axes de recherche qui constituent le cœur de ce projet recouvrent donc de manière complémentaire *la modélisation et les schémas numériques*, ainsi que *l'algorithmique parallèle hautes performances*. En s'appuyant sur les compétences acquises ces dernières années, nous travaillons tout d'abord sur de nouveaux schémas pour la mécanique des fluides pour la simulation numérique d'écoulements complexes (schémas

compacts multidimensionnels distribués), ainsi que sur des schémas et des méthodes rapides pour la chimie moléculaire (méthodes hybrides QM/MM/CM, schémas à croissance linéaire). Nous travaillons aussi sur les algorithmes parallèles briques de base hautes performances, et sur les techniques algorithmiques nécessaires à l'obtention de ces grandes performances pour des simulations de très grandes tailles faisant intervenir plusieurs dizaines de millions d'inconnues pour des problèmes 3D (solveurs hybrides directs - itératifs pour la résolution de très grands systèmes linéaires creux, méthodes multipôles, ...). Nous travaillons enfin sur *le couplage d'environnements de réalité virtuelle avec nos logiciels de simulation numérique parallèle et/ou distribué* afin de visualiser et surtout de piloter ces simulations. La partie fondamentale concernant les aspects mise en œuvre (sur de grandes machines parallèles à nœuds SMP, ou sur des plates-formes de type GRID Computing) est systématiquement menée de manière transversale par l'ensemble des participants du projet.

3.2. Schémas pour la mécanique des fluides

Mots clés : *maillages non structurés, schémas décentrés, modèles physiques complexes.*

Un très grand nombre de problèmes industriels se modélisent naturellement comme des problèmes de mécanique des fluides compressibles couplés à un ou plusieurs autres modèles physiques. On peut citer à titre d'exemple les problèmes d'aéroélasticité déjà bien étudiés par des équipes de l'INRIA.

Un autre exemple est donné par les problèmes d'interfaces, par exemple l'impact d'un module de rentrée dans l'océan, problème intéressant EADS. On peut citer encore les problèmes de conduites pétrolières dans lequel le fluide (mélange eau-gaz-huile) possède des propriétés physiques mal connues, les problèmes d'aéroacoustique qui deviennent de plus en plus importants dans la vie moderne, certains problèmes de l'industrie spatiale qui nécessitent le développement d'outils numériques pour des fluides possédant des lois d'états exotiques, le calcul d'écoulements instationnaires, ...

Certes, il existe de nombreux codes commerciaux permettant une approche numérique à certain de ces problèmes, mais les solutions proposées sont loin d'être satisfaisantes : la qualité des résultats est souvent problématique, les techniques numériques employées sont rarement les plus modernes, et enfin le savoir-faire qui permet la conception de ces codes n'est pas accessible. À titre d'exemple, le calcul du bruit généré par un tourbillon traversant une couche de choc est, à notre connaissance, hors de portée des techniques actuelles : les schémas ne sont pas assez précis, et les ressources numériques qui seraient nécessaires sont tout à fait considérables. Dans le même ordre d'idée, le calcul d'écoulements instationnaires compressibles, par exemple une couche de mélange, dans des géométries complexes comme celle d'un réacteur, est aussi hors de portée : il est nécessaire de capturer des échelles physiques et temporelles très disparates.

Afin de tendre vers cet objectif, nous travaillons sur certains aspects fondamentaux d'analyse numérique des problèmes hyperboliques non linéaires afin de développer des schémas pouvant s'adapter aux architectures modernes des calculateurs. De manière concrète, nous nous intéressons à une famille de schémas numériques adaptés aux maillages non structurés, possédant une molécule de calcul la plus compacte possible compatible avec l'ordre d'approximation désiré qui varie typiquement de deux à quatre. La compacité du schéma permet d'avoir une implémentation simple sur machine parallèle ainsi qu'une plus grande robustesse du schéma. La contrepartie est double. D'une part, on ne peut pas aborder les problèmes instationnaires exactement de la même manière que les problèmes stationnaires. Ensuite les schémas adaptés aux problèmes instationnaires sont nécessairement implicites. Ceci étant dit, la compacité des schémas permet d'envisager rapidement d'employer les méthodes d'algèbre linéaire parallèle développées par le projet. De nouveaux thèmes de recherches doivent émerger de cette convergence.

Parallèlement à ces problèmes d'analyse numérique fondamentaux, nous nous attachons à adapter des méthodes numériques plus classiques à des problèmes de physique tels que ceux présents dans les écoulements à interface, turbulents ou multiphasiques. Ces sujets sont insuffisamment compris et abordés dans la littérature.

À moyen terme, nous souhaitons employer l'ensemble algorithmique traité par le projet afin d'aborder des problèmes physiques actuellement difficilement accessibles aux calculateurs numériques grâce au savoir-faire obtenu sur les schémas distribués compacts. Il s'agit de problèmes de physique complexe tels que ceux considérés en aéroacoustique par exemple, ou encore des problèmes multiphysiques cités plus haut.

3.3. Schémas et méthodes rapides pour la chimie moléculaire

Mots clés : *méthode hybrides, méthode à croissance linéaire.*

La description d'un phénomène biochimique comme un assemblage de protéines, le suivi d'une réaction chimique, ...nécessite de tenir compte du comportement des électrons et donc d'avoir une approche de type mécanique quantique. De plus, le phénomène étudié n'est pas rapide par rapport aux mouvements du système, et nécessite donc de longues simulations pour le capturer [54].

Cependant, ceci est loin d'être réalisable à la fois à cause de limitations conceptuelles et de limitations informatiques :

- la taille des systèmes est généralement de quelques dizaines de milliers d'atomes au minimum ; or les méthodes usuelles de la mécanique quantique [71] ne permettent de simuler sur les ordinateurs actuels que des systèmes moléculaires comportant typiquement moins de 200 atomes. L'usage d'un parallélisme intensif ne peut être considéré ici comme la seule réponse possible car la complexité des calculs impliqués croît, au minimum, comme la puissance 3 du nombre d'atomes dans le système.
- le nombre de calculs à effectuer est intrinsèquement très important. En effet, de par les lois de la statistique, il est nécessaire de simuler le comportement des systèmes biologiques durant des temps allant de $10^{-9}s$ à $10^{-3}s$; or chaque calcul ne représente actuellement qu'une tranche d'évolution de quelques femtosecondes ($10^{-15}s$) tout au mieux. Le nombre de calculs à accomplir varie donc de 10^6 à 10^{12} itérations (rappelons que si une itération coûtait 1 seconde, le nombre maximal d'itérations calculables par an serait « seulement » de 31×10^6 itérations).

Récemment, de nouvelles méthodes et de nouveaux algorithmes ont vu le jour. Certaines, comme les méthodes hybrides [72] dites QM/MM ou encore les méthodes à croissance linéaire [58], permettent de modéliser de très gros systèmes réactifs, alors que d'autres, comme les schémas d'intégration à pas multiples [79], permettent d'atteindre des temps de simulation importants. Cependant, dans ces deux domaines, de nombreux progrès sont encore à réaliser. Mais, dès aujourd'hui, il est possible grâce à la puissance croissante des ordinateurs et au développement d'outils efficaces pour améliorer le parallélisme des codes, d'aborder des problèmes qui étaient hors de nos possibilités il y a seulement quelques années.

Nous nous intéressons à deux types de méthodes pour diminuer le coût des calculs en simulation moléculaire. La première approche consiste à développer des méthodes hybrides qui couplent différents modèles (mécanique quantique, mécanique classique, continuum) pour aborder des problèmes de grande taille. La simulation de phénomènes complexes nécessite très souvent l'utilisation conjointe de plusieurs modèles soit pour modéliser des effets, des comportements différents, soit pour diminuer la taille du système. Nous nous intéressons à construction des schémas d'intégration en temps pour conserver des invariants du système couplé.

La deuxième approche consiste à proposer des algorithmes ayant un complexité moindre et qui conduisent à des temps d'exécution presque proportionnels au nombre d'atomes. L'idée principale de ces méthodes est de remarquer que les coefficients de la matrice de densité $[P]$ décroissent rapidement en fonction de la distance entre atomes, et on négligera alors tous les éléments en dessous d'un seuil donné. Cette approche conduit à des matrices creuses sur lesquelles on pourra appliquer tout le savoir-faire développé dans la partie algorithmique creuse du projet.

3.4. Algorithmique et solveurs hautes performances

Mots clés : *partitionnement de grands graphes irréguliers, algèbre linéaire creuse, méthodes multipoles, algorithmique et calcul parallèle hautes performances.*

3.4.1. Solveurs très hautes performances multi plates-formes

La résolution de très grands systèmes linéaires creux $Ax = b$ est une brique de base algorithmique fondamentale pour les applications scientifiques de calcul intensif [67][76]. C'est souvent l'étape la plus consommatrice aussi bien en temps CPU qu'en espace mémoire. La taille des systèmes utilisés pour les grandes applications complexes fait que le calcul hautes performances est de fait incontournable (on doit résoudre aujourd'hui des systèmes de *plusieurs millions ou dizaines de millions d'inconnues* pour des problèmes 3D). La résolution performante de ces systèmes passent par la conception et l'utilisation d'algorithmes parallèles performants et ayant une (très) bonne extensibilité pour permettre l'exploitation effective de plate-formes de calcul ayant un grand nombre de processeurs et cumulant un grand espace mémoire.

Dans nos travaux, nous avons contribué doré et déjà à l'analyse, la conception et le développement d'outils logiciels parallèles concernant les méthodes *directes* de résolution [56][57] qui sont bien connues pour être très robustes numériquement même pour des problèmes très mal conditionnés comme ceux provenant du domaine de la mécanique des structures (voir [60][59] et les références incluses). L'algorithmique mise en place est très fine et nécessite essentiellement des techniques de mathématiques discrètes issues de la théorie des graphes. Ainsi, nous avons travaillé sur toutes les étapes de post-traitement des données, et sur les solveurs parallèles eux-mêmes ; cela concerne plus particulièrement les points suivants.

- *Le partitionnement de graphes et de maillages irréguliers.* Nous avons travaillé sur le découpage sous contraintes (coupe sommet ou arête minimale avec équilibrage des parties séparées) de graphes de calcul ou représentant des maillages d'éléments finis en utilisant des méthodes multi-niveaux [75].
- *Les techniques de renumérotation des inconnues* des systèmes permettant de minimiser le remplissage lors de la factorisation, et de maximiser les indépendances dans les calculs du solveur parallèle. Nous utilisons pour cela des méthodes hybrides obtenues en couplant une heuristique globale de type « *divide and conquer* » à base de partitionnement de graphe (dissections emboîtées) et une heuristique locale (degré minimum sous contraintes) [73].
- *La distribution/régulation statique ou dynamique des données et des calculs.* Nous avons développé des distributions par blocs 1D et/ou 2D permettant d'exploiter au mieux les différents niveaux de parallélisme de l'algorithme de factorisation avec des ordonnancements des calculs associés calculés soit de manière statique, quand on ne fait pas de pivotage pour des matrices symétriques définies positives, soit de manière dynamique quand on fait du pivotage pour des matrices non symétriques. Ce calcul tient compte aussi des caractéristiques matérielles des architectures utilisées [47][46][63][64].
- *La mise en œuvre et le test en vraie grandeur* (systèmes à plusieurs millions d'inconnues pour des problèmes 3D) pour une validation expérimentale des solveurs par blocs parallèles hautes performances symétriques ou non issus de ces travaux.

Ce savoir-faire algorithmique développé dans le cadre de collaborations académiques nationales (avec P. Amestoy de l'ENSEEIH - IRIT et J.Y. L'Excellent du Projet INRIA Rhône-Alpes Remap) et internationales (USA), et aussi dans le cadre de collaborations industrielles (CEA), a conduit à la réalisation d'un ensemble de logiciels en constante évolution (MUMPS, SCOTCH, PASTIX), qui se comparent très favorablement avec les meilleurs logiciels de référence américains du moment (voir section 5.1).

3.4.2. Méthodes multipoles

Dans de nombreux domaines issus des « grands challenges » comme les systèmes biologiques, l'astrophysique, l'électromagnétisme, ..., les méthodes classiques pour calculer les potentiels ont des complexités en termes d'opérations trop élevées pour être utilisées dans un processus itératif. Typiquement en biologie, le calcul des interactions coulombiennes entre atomes coûte $O(N^2)$ opérations où N est le nombre d'atomes, et la résolution d'un système linéaire dense issu d'une formulation intégrale par exemple en électromagnétisme à une complexité en $O(N^3)$ où N est le nombre de degrés de liberté. En raison de cette complexité, il n'est

pas envisageable avec des méthodes classiques de vouloir améliorer la précision en augmentant la taille du système. Depuis les années 1980, de nouvelles méthodes (Barnes et Hut [50], FastMultipole [61]) basées sur la théorie des graphes sont apparues et ramènent la complexité en $O(N \ln N)$, voire même en $O(N)$. La généralisation de ces méthodes et leur implémentation efficace est un enjeu majeur sur les machines parallèles actuelles. De nombreuses études montrent que l'efficacité dépend fortement de l'implémentation [62][78]. De plus, l'extension de ces méthodes à des domaines périodiques dans deux et trois dimensions d'espace et à des approximations plus élevées pour les équations intégrales reste d'actualité.

La mise en œuvre de ces méthodes est cruciale dans la plate-forme SMC (voir section 5.6) pour pouvoir traiter des systèmes biologiques de grandes tailles allant de plusieurs centaines d'atomes à plusieurs millions d'atomes selon les modélisations utilisées. Ces méthodes interviennent dans les trois modèles quantique, moléculaire, et continuum avec des variantes : interactions atomes-atomes en mécanique quantique et moléculaire ainsi que atomes-surface pour le couplage entre continuum et les autres modèles, calcul rapide du produit matrice/vecteur dans la méthode itérative pour résoudre le système linéaire issu de la formulation intégrale de la méthode du continuum. Nous nous proposons donc d'étudier ces différentes méthodes et de proposer des algorithmes parallèles efficaces pour les intégrer dans la plate-forme de simulation. Cette étude sur les multipôles hautes performances se fera de manière complémentaire à celle menée sur les solveurs hybrides généralistes.

La diminution de la complexité algorithmique pour calculer les interactions entre deux entités (atomes, ...) se traduit par un algorithme irrégulier plus difficile à implémenter de manière efficace sur les machines parallèles pour conserver la complexité théorique lors de la simulation. Le problème de construction et de parcours de l'arbre utilise des algorithmes similaires à ceux utilisés dans les problèmes d'algèbre linéaire creuse. L'expérience acquise en particulier dans les études relatives à SCOTCH et à PASTIX (voir section 5.1) devrait conduire à des implémentations efficaces de ces algorithmes sur des clusters de SMP.

3.5. Algorithmique parallèle hétérogène

Mots clés : *algorithmique hétérogène, grilles de calcul, ordonnancement.*

Récemment, de nombreux travaux ont porté sur l'étude des grilles de calcul. De telles architectures sont caractérisées par leur hétérogénéité (ressources de calcul et de communication ayant des performances différentes) et leur caractère distribué et non dédié ; ceci pose des problèmes de tolérance aux pannes, de sécurité et de dynamique des plates-formes. Les aspects concernant la tolérance aux pannes et la sécurité sont l'objet de nombreux travaux ; nous nous sommes concentrés sur les aspects algorithmiques, en étudiant quelques paradigmes de programmation (maître esclave, tâches divisibles [51]), dans le contexte de plates-formes hétérogènes, distribuées, dont les réseaux d'interconnection sont lents et dont les performances peuvent varier pendant l'exécution d'une application.

Notre but est de concevoir des algorithmes d'ordonnancement adaptés à ce type de plates-formes. Malheureusement, les résultats de complexité sont négatifs si on conserve les objectifs classiques de l'ordonnancement, en particulier la minimisation du temps total d'exécution de l'application. En effet, de nombreux résultats d'inapproximabilité ont été démontrés [68], même pour des problèmes relativement simples. Par contre, la complexité du déploiement d'applications sur des grilles de calcul restreint en général l'utilisation de celles-ci à de grosses applications régulières. Ainsi, il est possible de considérer non plus la minimisation exacte du temps d'exécution de l'application, mais plutôt son comportement asymptotique quand la taille de l'application devient grande.

Nous avons montré qu'il est possible de concevoir des algorithmes asymptotiquement optimaux pour de larges classes d'applications. Les techniques utilisées s'inspirent des travaux de Bertsimas et al. dans le domaine des réseaux, et reposent sur des techniques de relaxation de fluides [49].

Beaucoup de ces travaux ont été développés en collaboration avec Yves Robert et Arnaud Legrand du projet Remap de l'UR INRIA Rhône-Alpes, dans le cadre du co-encadrement de la thèse d'Arnaud Legrand (par Yves Robert et Olivier Beaumont).

3.6. Mise en œuvre hautes performances

Mots clés : *MPI, OpenMP, threads, objets CORBA parallèles, couplage de codes.*

Cette problématique ne doit pas être vue comme un axe de recherche à proprement parler, mais plutôt comme un axe transversal aux deux thèmes principaux (la modélisation et les schémas numériques, l'algorithmique parallèle hautes performances). Cependant, la validation expérimentale en vraie grandeur, qui est fondamentale dans notre démarche, mobilise l'ensemble des participants du projet. Ainsi, le développement de schémas et d'algorithmes efficaces pour des applications « téraflopiques » nécessite une mise en œuvre sur des machines conventionnelles puissantes à nœuds SMP et/ou sur de grands Clusters de PCs. D'autre part, pour des applications nécessitant beaucoup de ressources mémoire ou CPU, on sera amené à développer aussi nos implémentations sur des machines distribuées géographiquement, mais reliées par des réseaux rapides (VTHD) ; cela nous permettra d'acquérir une bonne expertise en *simulation numérique distribuée*.

3.6.1. Machines à nœuds SMP et PCs en cluster

Pour ces plates-formes qui commencent maintenant à être bien répandues, l'objectif essentiel est d'adapter les logiciels déjà réalisés ou en cours en optimisant surtout la prise en compte des différents niveaux hiérarchiques pour la manipulation des données : caches des processeurs - mémoire partagée - réseau. Cela intervient donc au niveau de la distribution des données et de l'ordonnancement des calculs, et en utilisant toujours notre expérience concernant les modes de programmation basés sur MPI, OpenMP et les Threads.

3.6.2. Couplage de codes en chimie moléculaire

Le développement des méthodes hybrides en chimie moléculaire nécessite de coupler des modèles différents au travers de codes. De manière classique, pour chacun de ces modèles (électronique, atomique et continuum), il existe des codes performants avec des langages, des modèles de programmation, des spécificités...très différents, et il n'est pas réalisable tant du point de vue de sa conception, de son évolution que de sa maintenance, de vouloir développer un code unique pour traiter globalement notre hiérarchie de modèles. Nous utilisons plutôt une approche modulaire faisant coopérer ces codes existants. Au sein de l'ARC SIMBIO, nous avons commencé le développement d'un environnement de simulation distribuée. Cette architecture, basée sur le bus logiciel CORBA, permet d'une part de coupler des codes existants en spécifiant une interface, et d'autre part d'avoir une interactivité avec la simulation. La plate-forme de simulation SMC est constituée aujourd'hui de quatre composants (voir section 5.6).

Le couplage de codes parallèles pose des problèmes pour obtenir de bonnes performances. En effet, actuellement seul un processus d'une application est vu par l'autre application, soit par le bus logiciel, soit par MPI, et donc toute l'information à échanger doit transiter par ce processus. Si le nombre de processeurs est important et/ou si le réseau d'interconnexion est lent, il y a un goulot d'étranglement qui limite la performance globale de l'application. Pour contourner ce goulot d'étranglement, nous essayons au sein de l'ARC COUPLAGE d'intégrer les objets CORBA Parallèles développés au sein du projet Paris de l'IRISA.

3.7. Visualisation et pilotage de simulations numériques distribuées

Mots clés : *visualisation interactive, pilotage de simulations, environnements immersifs.*

Avec l'arrivée au sein des laboratoires de machines de calcul puissantes et de systèmes immersifs reliés par des réseaux rapides, le développement de systèmes permettant de réaliser des simulations dirigées devient un enjeu important. Le guidage interactif d'une application de simulation peut intervenir à deux niveaux, soit pour la piloter, soit pour diriger un phénomène modélisé par cette application. Le pilotage par la visualisation permet d'avoir un retour visuel immédiat de l'influence de tel ou tel paramètre du modèle. Dans ce cadre-là, on peut afficher les grandeurs physiques de la simulation ou des grandeurs liées à l'exécution du modèle, modifier la géométrie, les conditions aux limites ou les paramètres des méthodes utilisées dans l'application. D'un autre côté, de nombreux phénomènes apparaissent à des échelles de temps ou d'espace différentes ; aussi, influencer un choix plutôt qu'un autre peut être plus facile grâce à la visualisation interactive.

Par exemple, le déroulement d'un calcul sur un cycle de moteur (admission, compression, détente et échappement) nécessite des interventions manuelles pendant le calcul pour commander le changement de topologie : fermeture et ouverture des soupapes. Le but recherché est d'utiliser la visualisation interactive pour donner de la souplesse à la prise en compte du changement de la topologie du maillage, et d'introduire un contrôle de l'évolution des paramètres caractéristiques de l'écoulement en fonction de quelques actions prédéfinies : levée de la soupape, régime du moteur, taux de compression.

Ces systèmes de pilotage d'une simulation consistent à coupler un environnement immersif avec une structure logicielle de simulation numérique distribuée. Un tel système est constitué de trois composants majeurs : l'interface utilisateur (code de visualisation), l'application (code de simulation) et une couche de communication entre l'interface utilisateur et l'application. Nous nous intéressons plus particulièrement aux deux derniers composants. Ce système est développé en collaboration avec l'équipe Image et Son du LaBRI dirigée par Pascal Guitton. Il permettra d'interagir avec les applications du projet, et cela de manière interactive depuis son écran ou depuis un grand écran d'un centre de réalité virtuelle. Ce projet s'appuie sur l'expérience que nous avons acquise avec la plate-forme SMC (Simulation Moléculaire Complexe) développée dans le cadre des ARC SIMBIO et COUPLAGE pour une application de dynamique moléculaire couplant différents codes de simulation. Pour aller plus loin en terme de pilotage performant de l'application ainsi que dans la diversité des applications à piloter, il est nécessaire de revoir fortement la plate-forme. Pour cela, nous ne souhaitons pas redévelopper complètement une nouvelle plate-forme de metacomputing, mais plutôt réutiliser des technologies développées dans la communauté du calcul distribué en les adaptant aux spécificités du guidage d'applications.

L'objectif principal est de permettre le pilotage de codes disséminés sur le réseau, tout en offrant une interaction forte entre ces codes et les utilisateurs. Pour réaliser cela, nos objectifs scientifiques s'articulent autour des trois points suivants :

- *La spécification de la plate-forme.* Les systèmes de pilotage actuels sont dédiés à une application. Aussi changer d'application conduit en général à réécrire la plate-forme. Nous souhaitons spécifier de manière formelle ce qu'est une plate-forme de pilotage d'application de façon à pouvoir se détacher le plus possible des applications elles-mêmes. Cela passe par une spécification de ce qu'est une simulation pilotable, en précisant les interactions possibles, les actions de pilotage ainsi que les interactions 3D possibles. Cette démarche devra nous permettre de pouvoir définir une interface la plus générique possible pour pouvoir coupler à moindre coût une nouvelle application.
- *Une contribution à l'algorithmique du couplage.* Nous souhaitons contribuer à l'algorithmique et à la mise en œuvre performante d'un couplage fin et robuste entre codes de simulation numérique distribuée sur ce type de plate-forme avec les nouvelles contraintes qu'elle impose, en particulier en terme de redistribution de données.
- *Une Validation en vraie grandeur.* Le dernier objectif est bien sûr de valider la démarche de conception d'applications couplées et leur mise en œuvre en vraie grandeur sur des études de cas complexes multi-physiques et multi-échelles dans les domaines de la chimie moléculaire (gros systèmes biologiques de type assemblage de protéines ou d'acides nucléiques), de l'environnement (systèmes hôtes-parasites, acoustique) et de la mécanique des fluides (écoulements dans un moteur). Les expérimentations utiliseront les centres de réalité virtuelle de Nancy et de Bordeaux, les calculateurs locaux des laboratoires associés au projet, ainsi que les moyens de calcul du projet M3PEC (CRI Bordeaux 1) et des centres nationaux comme le CINES.

Ce thème de recherche s'intègre dans un projet plus vaste relatif à l'ACI GRID. Ce projet EPSN (Environnement pour le Pilotage de Simulations Numériques distribuées) a été accepté en 2002.

4. Domaines d'application

4.1. Introduction

Nous souhaitons que SCALAPPLIX soit un projet « tiré » par les applications complexes de grande taille. Ceci permet de valider les schémas, les algorithmes, les composants logiciels génériques et les logiciels dédiés que nous développons. Pour cela, nous envisageons deux approches.

La première approche consiste à vouloir regarder, sans restriction de domaine applicatif, des applications de très grandes tailles sur lesquelles nous pouvons appliquer nos techniques. Nous travaillons actuellement sur l'amélioration des techniques algorithmiques et sur l'optimisation de codes parallèles pour des applications issues de l'électro-magnétisme (solveurs creux hautes performances), des interactions laser plasma (méthodes PIC et semi-lagangiennes), de la propagation d'un faisceau laser dans une chaîne de composants optiques de type laser Méga-Joule (FFT multidimensionnelles) et des problèmes de dynamique des dislocations (méthode des éléments diffus). Ces travaux applicatifs sont en cours et ont fait l'objet de contrats de recherche et développement avec le CEA/CESTA et avec le CEA/Ile-de-France.

D'autre part, nous étudions plus spécifiquement trois domaines d'applications de référence, à savoir les écoulements aéro-acoustiques, la chimie moléculaire, et les systèmes hôtes-parasites en dynamique des populations.

4.2. Mécanique des fluides

Mots clés : *mécanique des fluides, écoulement, écoulement instationnaire, écoulement diphasique, couche de mélange, tourbillon, onde de choc, bruit, maillage non structuré, ingénierie.*

À l'heure actuelle, la simulation numérique d'écoulements instationnaires est toujours un défi, tant au niveau de la définition de schémas performants que du calcul numérique et de l'implémentation en machine. Ce défi est encore plus grand si l'on souhaite s'intéresser à des problèmes de taille industrielle ; en particulier, les géométries ne sont plus académiques, et les maillages utilisés ne sont pas nécessairement réguliers.

Parmi les problèmes que l'on peut lister, il y a les calculs de couche de mélange, les interactions tourbillons/ondes de choc ou de détente, le calcul du bruit généré par un écoulement. Ce dernier point nécessite clairement des schémas de très haute précision, les meilleurs schémas actuels utilisant exclusivement des maillages très réguliers. Un des objectifs que nous nous fixons est donc d'étudier des schémas de très haute précision sur des maillages non structurés.

Une autre application nécessitant des ressources de calcul importantes est la simulation d'écoulements diphasiques. Ici, on rencontre le problème de l'instationnarité de l'écoulement, des géométries souvent complexes, le tout couplé à la richesse du modèle physique que l'on doit employer afin d'avoir une représentation réaliste du problème.

4.3. Chimie moléculaire

Mots clés : *chimie moléculaire, protéine, réaction enzymatique, membrane, médicament, biopolymère, biologie, santé, simulation biologique, dynamique, couplage, équation intégrale, parallélisme, dynamique moléculaire, méthode du continuum, mécanique quantique.*

Les principaux progrès réalisés par l'apparition de nouvelles méthodes et d'ordinateurs puissants sont la description de plus grands systèmes au niveau atomique, des simulations sur des échelles de temps plus grandes et une représentation plus réaliste des forces intra-moléculaires. Avec ces améliorations, la modélisation moléculaire a permis avec succès de trouver des relations entre la structure et la fonction pour des médicaments et des biopolymères.

De nombreux progrès sont encore à réaliser pour avoir une bonne modélisation pour les systèmes biologiques, et les problèmes à régler sont les suivants :

- la simulation des assemblages biologiques (membranes, interactions protéines - ADN, ...), actuellement de quelques milliers d'atomes, et qui doivent être étendus à plusieurs centaines de milliers d'atomes ;

- la durée des simulations, de quelques nanosecondes, et qui doit être fortement allongée. Les domaines concernés sont par exemple les réactions enzymatiques, le repliement de protéines dans leur forme native. C'est dans ce dernier cas que la plus longue simulation a eu lieu : une microseconde sur un système de 40000 atomes. Cette simulation a duré deux mois sur 256 processeurs d'un Cray T3D ;
- la description des forces atomiques qui doit être améliorée, d'une part par l'ajout de forces de polarisation et d'autre part en combinant mécanique moléculaire et mécanique quantique.

Pour aller vers de telles modélisations, il faut augmenter de plusieurs ordres de grandeur d'une part la vitesse des simulations pour traiter des systèmes de plus grandes tailles, et d'autre part la taille des pas de temps d'intégration. Pour atteindre ces objectifs, il faut exploiter conjointement les avancées technologiques des processeurs, des méthodes numériques et des algorithmes parallèles. L'aspect pluridisciplinaire des études à mener dans ce domaine, la taille des applications et les enjeux économiques en font un domaine d'application naturel du projet.

4.4. Dynamique des populations

Mots clés : *biomathématique, dynamique des populations, système hôte-microparasite, système hôte-macroparasite, modèle matriciel, modèle déterministe, modèle individu-centré, structuration spatiale, agrégation, santé.*

En dynamique des populations, les modélisations déterministes sont habituellement basées soit directement sur un système discret non linéaire, ce qui conduit à un modèle matriciel, soit sur un système d'équations différentielles ou aux dérivées partielles non linéaires, soit encore sur une discrétisation d'un tel système. Les problèmes traités dans ce cadre reposent généralement sur un nombre restreint de paramètres ; ils ont pour objectif principal de reproduire des dynamiques de populations en exploitant peu de données quantitatives sur les populations étudiées. Ces modèles font abstraction de certains processus se déroulant à l'échelle des individus, et cherchent à capturer les phénomènes macroscopiques au niveau des populations. D'un autre côté, une approche radicalement différente qui connaît actuellement un développement soutenu, est basée sur des modèles individus centrés aussi appelés multi-agents. Le principe est de reproduire les interactions entre des individus (ou agents) et l'environnement, ou bien entre les individus entre eux selon certaines règles spécifiques aux populations étudiées. Ces modèles se proposent de reproduire fidèlement des processus élémentaires naturels, mais de ce fait conduisent parfois à des coûts de calcul élevés. Des modèles centrés sur les individus ont été implémentés sur machines parallèles, car certains systèmes complexes nécessitent de grandes puissances de calcul disponibles uniquement sur ces machines. Pour des problèmes de dynamique des populations intégrant une structuration spatiale, des techniques de calcul d'algèbre linéaire creuse ont été utilisées pour des modèles matriciels en environnement hétérogène, et le calcul parallèle a été employé pour des méthodes utilisant des automates cellulaires.

La qualité de réalisme des simulations diffère donc selon le type d'approche envisagée : déterministe (plutôt grossier) ou bien centrée sur les individus (modélisation fine). Les modèles utilisés dans nos travaux sont déterministes, mais utilisent de nombreuses observations de terrain concernant les hôtes et leurs parasites : système hôte-microparasite (renard-rage) ou système hôte-macroparasite (bar-Diplectanum). Cette approche est donc hybride par rapport à celles qui viennent d'être présentées. Elle permet un niveau de détail fin, notamment grâce aux concepts de structuration en âge, en genre ou en espace des hôtes, en âge des parasites, et grâce au concept de l'agrégation prioritaire des parasites sur les hôtes déjà les plus parasités. Le coût de simulation est très élevé. On trouve dans la littérature peu de références à des simulateurs réalistes qui utilisent des modèles déterministes en temps discret, et encore moins qui soient vraiment implantés sur machines parallèles. Réaliser de tels simulateurs réalistes performants est un des objectifs de nos travaux. Nous voulons aussi développer un simulateur stochastique individu-centré basé sur le même modèle, et ainsi pouvoir comparer les résultats des deux simulateurs. L'ensemble de ces travaux est mené en collaboration avec M. Langlais et J. Burie (Université Bordeaux 2 - MAB) et avec P. Silan (UMR CNRS 5000 - GPI, Sète).

5. Logiciels

5.1. Introduction

Durant les recherches relatives aux thèmes décrits ci-dessus, nous avons eu doré et déjà l'occasion de développer un certain nombre de logiciels génériques (bibliothèques algorithmiques hautes performances) ou dédiés à certains types d'applications, et de les valider en vraie grandeur sur des cas académiques ou industriels. Ceci s'est fait en utilisant des techniques par transmission de messages (MPI), à base de tâches légères (Threads), le langage OpenMP ou des technologies Java et CORBA.

Nous développons deux types de logiciels. Le premier concerne des composants logiciels de base à intégrer dans des applications plus grosses. Ces briques de base sont un partitionneur de graphes irréguliers (SCOTCH), des solveurs creux parallèles hautes performances (MUMPS, PASTIX). Le deuxième type correspond à des enchaînements de programmes pour traiter une application particulière comme SMC en chimie moléculaire, FLUIDBOX en mécanique des fluides et EPSILON pour visualiser et piloter une simulation numérique parallèle dans un environnement de réalité virtuelle.

5.2. MUMPS

Participant : Patrick Amestoy [correspondant].

Mots clés : *solveur multifrontal parallèle asynchrone.*

Dans le contexte du projet PARASOL (Esprit IV Long Term Project, 1996-1999), les équipes du CERFACS et de l'ENSEEIH-IRIT ont conçu et développé des solveurs directs pour la résolution de systèmes linéaires creux de grandes tailles sur architectures parallèles à mémoire distribuée. L'approche algorithmique originale retenue nous a permis d'obtenir un code (MUMPS, *MUltifrontal Massively Parallel Solver*) de résolution de systèmes linéaires creux par une méthode directe multifrontale, et dont les fonctionnalités disponibles sont :

- type de systèmes : symétriques définis positifs, symétriques généraux ou non symétriques ;
- format d'entrée : matrice assemblée ou par éléments, centralisée sur un seul processeur ou distribuée ;
- détermination du rang et calcul d'une base du noyau pour les problèmes singuliers ;
- factorisation partielle avec calcul du complément de Schur ;
- pivotage partiel pour assurer la stabilité numérique pour les matrices non symétriques et symétriques générales.

Pour adresser toutes ces possibilités, l'algorithme retenu est complètement asynchrone (pour permettre un recouvrement plus naturel des calculs et des communications) avec des structures de données dynamiques (pour prendre en compte les problèmes numériques) et un séquençement distribué et dynamique des tâches de calcul (pour s'adapter automatiquement à une variation de la charge des processeurs dans un environnement multi-utilisateurs). Le code parallèle est distribué (Fortran90, MPI), portable, validé sur de nombreux problèmes industriels et a été comparé à d'autres codes et approches de référence.

À la fin du projet PARASOL (en juin 1999), le logiciel MUMPS a été mis à la disposition de la communauté scientifique dans la bibliothèque PARASOL. En mars 2000, une version modifiée résultant de travaux complémentaires effectués ensuite a été installée sur le serveur web de l'ENSEEIH (<http://www.enseeiht.fr/apo/MUMPS>).

Une grande partie de notre activité a été durant l'année 2002 consacrée à la stabilisation logicielle et à l'amélioration du comportement de ce solveur multifrontal MUMPS pour des architectures à mémoire distribuée possédant un nombre de processeurs supérieur à 128 (voir [32]). Ces travaux, réalisés en collaboration avec J. Y. L'Excellent du projet Remap INRIA Rhône-Alpes ainsi qu'avec I. Duff et J. Koster du CERFACS, ont contribué au développement d'une nouvelle version du solveur MUMPS 4.2 beta [45], mise à disposition de la communauté en décembre 2002.

5.3. PaStiX

Participants : Pascal Hénon, Dimitri Lecas, François Pellegrini, Pierre Ramet [correspondant], Jean Roman.

Mots clés : *solveur supernodal parallèle.*

L'objectif du projet PASTIX est de réaliser une plateforme efficace et complète dédiée à la résolution parallèle haute performance par méthode directe de (très) grands systèmes linéaires creux symétriques définis positifs dans un cadre éléments finis. Ce travail a été initialisé par un contrat de 3 ans entre le LaBRI et le CEA/CESTA, dont les applications cibles concernaient la mécanique des structures et l'électromagnétisme.

Nous avons tout d'abord conçu et développé un algorithme séquentiel de prétraitement de faible complexité calculant une « bonne » partition 1D et/ou 2D en blocs de la matrice creuse ainsi que sa distribution sur les processeurs de la machine cible. Ceci se fait en calculant un ordonnancement statique des calculs par blocs et des communications par l'intermédiaire d'une simulation utilisant une modélisation des opérateurs BLAS et une modélisation de la communication sur l'architecture cible. Nous utilisons la bibliothèque de partitionnement de graphes SCOTCH (voir section 5.4) pour la renumérotation des inconnues du système. Ces travaux ont conduit à la réalisation d'un produit fini, PASTIX (<http://www.labri.fr/~ramet/pastix>), qui se compare très favorablement avec le logiciel de référence actuel utilisant une approche similaire, PSPASES.

Les factorisations acceptées sont LL^T (Cholesky) et LDL^T (Crout) en réel simple et double précision. Une version pour traiter les coefficients complexes à déjà été réalisée et pourra être intégrée dans la future distribution. Une autre version intégrant la factorisation LU avec pivotage statique (pour des matrices non symétriques, mais à structure symétrique) est en cours de développement pour répondre aux problèmes issus de la mécanique des fluides et de certains cas tests du CEA.

Nous avons également montré une bonne adaptation de nos techniques d'ordonnancement aux machines parallèles de type « cluster de SMP ». Enfin, pour obtenir une bonne scalabilité mémoire, nous avons également étudié le problème de la gestion efficace d'un mécanisme d'agrégation partielle, ainsi que d'un schéma d'accès aux données pour une version *out-of-core* de PASTIX.

L'ensemble a été testé intensivement sur de très grosses matrices provenant d'applications réelles issues du monde industriel : nous avons ainsi traité plusieurs millions d'inconnues en 3D, et jusqu'à 25 millions d'inconnues pour des problèmes $2\frac{1}{2}D$ sur les calculateurs SP3 du CINES et TERA du CEA/DAM, et ce avec d'excellentes performances (entre 40 et 50 % de la puissance crête a été atteint). Ces résultats ont été publiés dans [65][66].

Enfin, pour traiter des problèmes encore plus importants, nous travaillons actuellement sur des solveurs par blocs hybrides basés sur un couplage fin entre méthodes directes et méthodes itératives. À partir de numérotations de type dissections emboîtées, nous allons calculer en parallèle un préconditionneur de type Cholesky incomplet par blocs, qui sera ensuite intégré dans des versions parallèles par blocs d'algorithmes de type gradient conjugué ou GMRES.

5.4. Scotch

Participant : François Pellegrini [correspondant].

Mots clés : *partitionnement de graphes, placement statique, renumérotation par blocs de matrices creuses.*

L'objectif initial de SCOTCH était d'offrir une plate-forme efficace de partitionnement et de placement statique pour des applications décrites par des graphes valués de processus ayant une topologie quelconque. La contribution originale a consisté à définir et à mettre en œuvre une approche de type « *divide and conquer* » pour laquelle les processus sont placés récursivement sur les processeurs en utilisant des algorithmes de bisections de graphes appliqués de manière duale au graphe inter-processus et au graphe inter-processeurs ; on peut tenir compte ainsi de la topologie et de l'hétérogénéité du graphe valué décrivant le réseau d'interconnexion et ses ressources (puissance des processeurs, débit des liens de communication). Cette technique conduit à des placements de très bonne qualité avec un coût très faible en complexité [74].

À partir de ces travaux, un partitionneur de graphes basé sur une approche multi-niveaux, et dont l'objectif est de construire une partition équilibrée de l'ensemble des sommets par l'intermédiaire d'un séparateur

sommet de taille minimum, a été défini et implémenté. Cette technique de partitionnement de graphes est utilisée pour générer des renumérotations des inconnues de grands systèmes linéaires creux combinant à la fois une bonne conservation du creux lors de la factorisation de la matrice, ainsi qu'une bonne optimisation de l'indépendance des calculs pour une implémentation parallèle de cette factorisation [75]. La contribution originale a été d'étudier et d'implémenter en vraie grandeur un couplage fin entre la méthode des dissections emboîtées et celle du degré minimum approché ; ce travail a été mené en collaboration avec Patrick Amestoy de l'ENSEEIH-IRIT [73]. La méthode a été testée intensivement sur de très gros graphes provenant d'applications réelles issues du monde industriel.

La distribution SCOTCH (<http://www.labri.fr/~pelegri/scotch/>) fait référence dans le domaine et se compare très favorablement avec le meilleur logiciel américain actuel, METIS.

5.5. QC++

Participants : Olivier Coulaud [correspondant], Jean-Claude Okon, Gérald Monard.

Mots clés : *mécanique quantique, semi-empirique, simulation, parallélisme.*

QC++ est un code qui permet de résoudre les équations de Hartree-Fock en couche fermée sous des approximations semi-empiriques. Le code connaît les modèles MNDO, AM1 et PM3. Il permet de calculer l'état fondamental d'un système moléculaire et d'optimiser la géométrie pour obtenir un état fondamental de plus basse énergie. Dans la dernière version, nous avons introduit la méthode « *divide and conquer* » pour les molécules linéaires. QC++ est écrit en C++ et s'appuie sur les bibliothèques d'algèbre linéaire BLAS et LAPACK. Il est porté sur les architectures Linux, AIX, DEC, et IRIX. Ce travail est mené en collaboration avec Gérald Monard du GTCN.

5.6. SMC

Participant : Olivier Coulaud [correspondant].

Mots clés : *dynamique moléculaire, simulation, parallélisme.*

Le développement de méthodes hybrides s'accompagne par la mise en place d'un environnement pour les simulations numériques distribuées en chimie moléculaire. L'objectif de la plate-forme est de valider les schémas numériques et les algorithmes parallèles développés pour le traitement efficace de systèmes comprenant de quelques milliers à 1 million d'atomes.

Cette architecture, basée sur le bus logiciel CORBA, permet de coupler des codes existant en spécifiant une interface, et d'avoir une interactivité avec la simulation. La plate-forme est constituée aujourd'hui de quatre composants :

1. TAKAKAW : code de dynamique moléculaire (Athapascan - MPI + Threads POSIX ; langage C, C++);
2. BEMP2 : code d'équation intégrale pour la méthode du continuum. La surface est approchée par une approximation quadratique et la solution par une approximation linéaire. Ce code, développé en Fortran90 est parallélisé à l'aide de directives OpenMP ;
3. PILOTE : application Java pour diriger, suivre et interagir avec la simulation ;
4. VISUAVS : module AVS/Express⁴ pour visualiser en temps réel l'évolution de l'interface entre la mécanique classique et la méthode du continuum.

Cette plate-forme de simulation a été une application servant de test au RNTL VTHD (Vraiment Très Haut Débit) dont l'objectif est l'étude d'un réseau GigaBits au niveau national, ainsi que pour le réseau PLAGÉ.

⁴Advanced Visual System, Inc.

5.7. FluidBox

Participants : Christophe Berthon, Boniface Nkonga [correspondant], Rémi Abgrall.

Mots clés : *écoulements fluides, fluides inertes, fluides réactifs, écoulements multimatériaux, écoulements diphasiques.*

FLUIDBOX est un code de calcul dédié à la simulation numérique d'écoulements fluides inertes ou réactifs, capable de simuler des écoulements multimatériaux et diphasiques. Il existe en version bi- et tridimensionnelles, la version bidimensionnelle étant bien plus achevée que la version tridimensionnelle. Cette version bidimensionnelle sert de maquette de recherche. Deux classes de schémas sont implémentées : les schémas classiques de type volumes finis et des schémas décentrés de type distributif. Ce code est parallélisé avec et sans recouvrement de maillage, et est utilisé dans nos relations industrielles : CEA/CESTA, EADS, SNPE.

5.8. EPSILON

Participants : Serge Chaumette, Olivier Coulaud [correspondant], Michaël Dussère, Aurélien Esnard, Guillaume Latu, Boniface Nkonga, Jean Roman.

Mots clés : *pilotage de simulations, CORBA.*

EPSILON est le prototype logiciel séquentiel de la plate-forme EPSN, qui sera un environnement pour le pilotage de simulations numériques distribuées. L'objectif de cet environnement est de coupler (par le réseau) un code de simulation existant écrit en C, C++ ou Fortran avec des outils de visualisation plus ou moins évolués (de OpenGL à AVS/Express).

L'environnement permet dès à présent de connecter plusieurs utilisateurs à un même code de simulation, de le contrôler (marche, arrêt de la boucle de calcul), d'accéder aux données en lecture/écriture. Nous travaillons actuellement sur la visualisation temps réel des données extraites de la simulation. Pour ce faire, nous avons développé une application OpenGL qui nous a permis d'obtenir des premiers résultats. Parmi les fonctionnalités de la plate-forme restant à développer, on notera en particulier le pilotage par la visualisation, les points de reprise et les extensions du mode collaboratif.

Le prototype EPSILON est développé en C++ sous Linux et utilise l'intergiciel CORBA (omniORB4). Une fois stabilisé, il sera porté sur les systèmes SGI/Irix6 et IBM/AIX5L. EPSILON se compose d'un noyau qui incorpore un ensemble de modules (*control manager, data manager, orb manager, ...*). Deux API symétriques permettent d'accéder aux fonctionnalités du noyau et des modules : une API *côté simulation* et une API *côté pilotage*. Ces deux API sont disponibles en C ou en Fortran.

Pour rendre une simulation pilotable, l'utilisateur annote le code source de la simulation afin d'initialiser EPSILON, et afin de spécifier les données accessibles et de placer *des points de contrôle*. Le noyau se présente comme un serveur CORBA, détaché de la simulation dans un thread, en attente de requêtes provenant des clients de pilotage.

L'utilisateur intègre un client de pilotage dans une application de visualisation en utilisant la seconde API de manière symétrique. Cette API permet de dialoguer avec le code de simulation distant : contrôle du déroulement de la simulation, consultation ou modification des données pour construire une image de cette simulation. A terme, on intégrera en standard EPSILON dans certains outils de visualisation tels que AVS/Express, TGS/Amira ou Paraview. D'autres contributions enrichiront la plate-forme avec notamment l'utilisation d'interfaces graphiques pour faciliter l'intégration d'un code de simulation, la configuration et le déploiement de la plate-forme.

6. Résultats nouveaux

6.1. Schémas et algorithmique pour la mécanique des fluides

Participants : Rémi Abgrall, Christophe Berthon, Dimitri Lecas, Mohamed Mezine, Boniface Nkonga, Mikaël Papin, François Pellegrini, Pierre Ramet, Jean Roman.

Mots clés : *schémas distributifs compacts, écoulements multimatériaux et multiphasiques, aéroacoustique.*

6.1.1. Schémas distributifs compacts

Nous avons complété l'analyse que nous avons présentée l'année précédente afin de construire des schémas multidimensionnels compacts pour les problèmes stationnaires. Au lieu d'hybrider deux schémas, nous partons d'un seul schéma d'ordre un auquel nous rajoutons une perturbation afin de le rendre précis à l'ordre deux sans pour autant modifier la molécule de calcul. Cette méthode, présentée dans [39], présente deux avantages par rapport à celle de [44] : un seul schéma (au lieu de deux) doit être considéré, et n'importe quel schéma d'ordre un peut *a priori* être considéré. Cependant, dans [39], on n'a étudié que le cas du schéma N.

Cette analyse a été étendue au cas instationnaire dans [11][20]. L'originalité par rapport à des approches classiques est qu'on ne peut pas procéder à un *splitting* espace-temps, sous peine de perdre la précision recherchée. Ceci a pour conséquence que le schéma est nécessairement implicite. On a pu construire des schémas d'ordre deux en espace et en temps, inconditionnellement stables et non oscillants sur des maillages non structurés.

6.1.2. Schémas distribuant le résidu d'ordre très élevé

Ce travail a été réalisé avec P.L. Roe, de l'université du Michigan. Nous avons présenté dans [3] une méthode systématique de construction de schémas compacts d'ordre supérieur à deux pour des problèmes scalaires hyperboliques. Ceci constitue une première étape vers des schémas vraiment d'ordre élevé pour les systèmes hyperboliques symétrisables.

6.1.3. Schémas distribuant le résidu sur maillage structuré

Au travers d'un contrat de recherche pour le CEA/CESTA, nous avons adapté et implémenté des schémas distributifs d'ordre un et deux dans le code Ares du CEA/CESTA. Ceci a fait l'objet d'un stage de DEA.

6.1.4. Schémas pour les écoulements diphasiques

Dans [41], nous présentons une méthode de construction de schémas pour les écoulements à interface et/ou diphasiques compressibles en une dimension d'espace. La méthode repose sur une interprétation purement discrète de la dérivation des modèles diphasiques présenté par Drew et Passmann [55]. Ceci a l'avantage de donner une approximation correcte des produits non conservatifs intervenant dans ces problèmes. Ces travaux ont été présentés à l'International Congress of Mathematicians 2002 (Conférence satellite de X'ian, conférence invitée) [40]. L'extension et la validation de cette approche pour des problèmes visqueux multidimensionnels en utilisant des maillages non structurés est l'objet de la thèse de M. Papin, ainsi que d'un contrat avec le CEA/CESTA.

Afin d'améliorer la qualité des résultats numériques, nous avons développé un nouveau modèle : *le modèle multipression*. L'un des principaux atouts de ce modèle réside dans la possibilité d'ajointre des phénomènes physiques complexes tels que la turbulence. Cependant, ce modèle soulève les mêmes difficultés que les modèles de turbulence monophasique : le système d'EDP qui les gouverne n'admet pas de formulation complètement conservative. L'existence de produits non conservatifs, s'opposant à toute formulation faible classique, soulève une difficulté fondamentale puisque les schémas numériques qui pourront lui être associés ne satisferont jamais les hypothèses du Théorème de Lax-Wendroff (résultat de convergence des solutions numériques). De précédents travaux montrent que les erreurs commises par les méthodes numériques usuelles s'opposent à une approximation adéquate, en particulier des solutions onde de choc, et proposent l'introduction d'une opération de projection non-linéaire qui satisfait les conditions de stabilité et conduit à une solution discrète en accord avec la solution exacte, résultat inaccessible pour les méthodes usuellement adoptées.

Une fois ce modèle multi-fluides turbulent compressible établi, nous avons étendu les schémas numériques de type projection nonlinéaire au cadre du système d'EDP gouvernant notre modèle. L'implémentation a été réalisée dans la version bidimensionnelle du code de calcul FLUIDBOX. Des simulations numériques sur des

écoulements à bulle ont été réalisées. Dans le cadre des interactions entre une onde de choc et une bulle de gaz, des comparaisons entre les résultats expérimentaux et numériques mettent en évidence le bien fondé de notre approche.

Les recherches et développements en cours visent à intégrer dans ces modèles des phénomènes physiques importants dans le contexte multi-fluides : tensions de surface, réactions chimiques. Notons que la simulation numérique de la combustion en régime d'écoulement turbulent s'inscrit dans le cadre du projet de recherche MUPPETT proposé par le CEA. L'écoulement compressible qui nous motive est alors constitué de $N \geq 2$ espèces chimiques réactives. Il est gouverné par le modèle (k, ϵ, g) et doit, en outre, permettre la simulation numérique des écoulements autour d'un corps lors d'une rentrée en atmosphère planétaire.

6.1.5. Problèmes de suivis de fronts

Cette étude est réalisée pour et avec la SNPE de Saint-Médard-en-Jalles. Afin de simuler avec précision la localisation des fronts de flammes dans des moteurs à propergol solide, nous avons développé et validé des schémas numériques pour des équations d'Hamilton Jacobi du premier ordre. Nous avons aussi été amené à considérer diverses conditions aux limites [43]. Cependant, ces schémas sont soit d'ordre un, ce qui est notoirement insuffisant en trois dimensions d'espace, soit difficile d'emploi [48]. Nous avons essayé une nouvelle technique d'hybridation entre un schéma d'ordre un et un schéma d'ordre deux, qui a été l'objet du stage de fin d'étude de D. Pucheu [37]. Le schéma résultant est très simple, les résultats sont encourageants. Cette étude sera poursuivie en 2003.

6.1.6. Aéroacoustique

Nous avons obtenu un financement du Ministère de la Recherche pour valider des schémas distributifs instationnaires en aéroacoustique numérique, ainsi que pour conduire des recherches pour améliorer ceux-ci. Ces travaux sont réalisés en coordination avec Dassault Aviation (M. Ravachol), et en relation avec l'ONERA (DSNA ETRI, P. Sagaut) et l'Ecole Centrale de Lyon (Pr. D. Juvé). S. Marret, stagiaire MatMéca, a débuté un travail de transfert du savoir-faire acquis au cours de la thèse de M. Mezine. Il a actuellement écrit un code tridimensionnel employant le schéma LDA instationnaire et est en train de le valider.

6.2. Schémas et algorithmique pour la chimie moléculaire

Participants : Rémi Abgrall, Damien Baudry, Olivier Coulaud, Pierre Fortin, Gérald Monard, Jean-Claude Okon, François Pellegrini, Jean Roman.

Mots clés : *chimie quantique, décomposition de domaines, méthodes rapides, fast multipole.*

Cette année l'accent a été mis sur la compréhension de méthodes existantes comme la méthode « *divide and conquer* », et la méthode des multipôles rapides pour comprendre leur limitation sur les gros systèmes moléculaires et les problèmes de performances liés au parallélisme.

Pour diminuer la complexité algorithmique de la méthode SCF (« *Self Consistent Field* ») pour résoudre les équations de Hartree-Fock, il est nécessaire de « creuser » la matrice de Fock. Pour faire cela, la méthode « *divide and conquer* » découpe la molécule en sous molécules. Il apparaît deux difficultés : premièrement, comment bien découper une molécule ; deuxièmement, comment reconstruire la solution globale. Cette année, nous avons implémenté la méthode « *divide and conquer* » au sein du code QC++, afin de pouvoir tester nos idées. Un partitionneur 3D basé sur la bibliothèque SCOTCH a été développé, et différentes stratégies de partitionnement de molécules sont en cours de test. Une analyse mathématique de la méthode est en cours pour trouver de nouveaux critères de partitionnement, et améliorer la méthode de reconstruction de la solution globale.

Le deuxième axe concerne le calcul rapide des interactions électrostatiques ; c'est un problème à N-corps. Pour cela, nous avons étudié les méthodes rapides pour les calculer en l'absence de conditions aux limites périodiques. Jusqu'à présent, l'algorithme de Barnes et Hut reste très répandu dans les simulations astrophysiques où de faibles précisions sont requises et où la distribution des corps est hautement non uniforme

dans l'espace, alors que c'est la FMM qui est plutôt retenue dans les simulations en chimie moléculaire du fait de la haute précision souhaitée et des distributions uniformes utilisées.

Ces deux algorithmes ayant été constamment améliorés et étendus depuis leur apparition, on leur trouve désormais des applications dans des domaines aussi variés que la dynamique des fluides (méthode du « vortex »), la radiosité [77] ou encore les solveurs d'équations intégrales dont le noyau est de la forme $\frac{1}{|x-y|}$ en électrostatique, ou de la forme $\frac{e^{ik|x-y|}}{|x-y|}$ en électromagnétisme [52].

On constate dernièrement l'apparition de méthodes dites « hybrides » cherchant à combiner les avantages de ces deux méthodes [80][81][53]. Nous avons conçu une structure de données, étendant l'octree sous-jacent à toutes ces méthodes, de façon à optimiser l'accès, pour un groupe de particules donné, à tous les groupes pour lesquels une approximation pourra être utilisée en vue du calcul des interactions. Cette structure de données particulièrement performante pour des distributions uniformes devrait aussi faciliter la parallélisation de l'algorithme.

Après la réalisation d'un code pour des distributions uniformes en deux dimensions qui a mis en évidence l'apport de telles méthodes, nos efforts portent désormais vers les méthodes hybrides et l'amélioration de la FMM pour des distributions non uniformes. L'étape finale reste la parallélisation de ces méthodes dont la structure algorithmique, constituée d'une remontée-descente de l'octree, et les schémas de communications associés entre les différents nœuds rendent difficile.

6.3. Schémas et algorithmique pour la dynamique des populations

Participants : Sébastien Gaucel, Guillaume Latu, Michel Langlais, Jean Roman.

Mots clés : *matrices creuses, simulateur déterministe, simulateur stochastique.*

Concernant le système hôte-microparasite (renard-rage), l'utilisation de méthodes numériques adaptées aux matrices creuses a permis dans un premier temps d'agrandir considérablement la taille du domaine d'étude. Ceci a aussi sécurisé le calcul de paramètres intrinsèques à la dynamique de population comme le taux de croissance malthusien qui se trouve être la valeur propre dominante d'une matrice délicate à calculer en tant que produit elle-même d'un grand nombre de matrices heureusement creuses. Des calculs de stabilité numérique deviennent aussi possibles.

Concernant maintenant le système hôte-macroparasite (bar-Diplectanum), un simulateur séquentiel avait été réalisé entre 1993 et 1997, mais ses temps d'exécution pour certaines simulations pouvaient durer plus d'un mois sur station de travail. En cette fin d'année 2002, et suite à la fin du travail de thèse de G. Latu, une version parallèle d'un simulateur déterministe a été complètement élaborée. Nous avons eu l'occasion d'évaluer sa qualité et sa scalabilité sur un nombre important de processeurs (448 processeurs sur un SP3) disponibles au CINES à Montpellier. Les plus longues simulations (100 et jusqu'à 1500 TeraFlops double précision) ont alors été réduites à douze minutes et à une heure quarante cinq respectivement avec plus de 70 % d'efficacité.

Ce simulateur a autorisé des calculs plus précis permettant d'obtenir des dynamiques de populations que l'on n'avait pu obtenir avec le simulateur séquentiel qui utilisait trop d'approximations. Le modèle biomathématique qui sous-tend le simulateur contenait donc potentiellement ces nouvelles dynamiques de populations, et la simulation parallèle a permis de les mettre en évidence. Nous avons maintenant un véritable outil pour réaliser une analyse de sensibilité des paramètres d'entrée, améliorer le modèle biomathématique et finalement reproduire avec un bon réalisme des situations biologiques observées sur le terrain.

D'autre part, un simulateur stochastique parallèle individu-centré basé sur le même modèle a été développé. Il utilise 3 niveaux de parallélisme et est mis en œuvre en utilisant une programmation hybride OpenMP + MPI permettant d'exploiter au mieux les caractéristiques des réseaux de nœuds SMP. Nous allons maintenant pouvoir comparer et analyser les résultats complémentaires produits par les deux simulateurs. En 2003, toutes les techniques conçues et développées dans ces travaux vont être appliquées à des études concernant la parasitologie de la vigne par l'odïum (Collaboration se mettant en place avec l'INRA à Bordeaux).

6.4. Algorithmique et solveurs hautes performances

Participants : Rémi Abgrall, Patrick Amestoy, Olivier Beaumont, Olivier Coulaud, Pascal Hénon, Dimitri Lecas, Boniface Nkonga, François Pellegrini, Pierre Ramet, Jean Roman.

Mots clés : *renumérotation de matrices creuses, graphes et maillages irréguliers, solveurs directs et hybrides parallèles.*

6.4.1. Décomposition de domaines et renumérotation de matrices creuses

Dans le cadre du projet SCOTCH (voir section 5.4), on s'est intéressé au développement d'algorithmes spécifiques pour le partitionnement et la renumérotation de maillages. En effet, l'un des goulots d'étranglements identifiés lors de l'utilisation de la chaîne PASTIX (voir section 5.3) pour résoudre de grands problèmes 3D est que la taille du graphe d'adjacence, qui est linéaire par rapport au nombre d'éléments mais surtout quadratique par rapport au nombre de nœuds de chacun des éléments (ceux-ci étant considérés comme des cliques), explose du point de vue de l'occupation mémoire. Disposer d'une structure de maillage et non de graphe permet de rendre la taille des structures de données uniquement linéaire par rapport au nombre de nœuds des éléments, mais nécessite un travail sur les algorithmes manipulant ces structures afin que le gain de complexité en espace ne provoque pas une perte conséquente de complexité en temps. Ces développements sont en cours d'intégration dans la nouvelle version 4.0 de la distribution logicielle SCOTCH, qui doit être rendue disponible à la communauté au cours du premier trimestre 2003. Des travaux sur le couplage des renumérotations des nœuds dans le cadre de l'algèbre linéaire creuse parallèle seront aussi menés.

6.4.2. Solveurs directs hautes performances multi plates-formes

Les problèmes numériques et les applications complexes qui sont considérés dans SCALAPPLIX vont déboucher sur la résolution de systèmes linéaires qui auront une taille de plus en plus grande ; nous visons en effet des tailles de *plusieurs millions ou dizaines de millions* d'inconnues pour de vrais problèmes 3D. Il est donc indispensable d'améliorer encore la performance des solveurs parallèles actuels (coûts en temps et en mémoire, précision numérique) pour améliorer la qualité de la simulation de ces applications.

Les travaux de cette année ont permis d'augmenter encore la qualité de nos solveurs parallèles utilisant des méthodes directes. Ainsi, le solveur PASTIX (voir section 5.3) a résolu avec succès des systèmes 3D de plus d'un million d'inconnues et des systèmes ayant jusqu'à 25 millions d'inconnues pour des problèmes $2\frac{1}{2}$ D tous issus d'applications industrielles du CEA/CESTA. Ces exécutions ont atteint sur un grand nombre de processeurs (256 processeurs sur le SP3 du CINES et jusqu'à 768 processeurs sur la machine TERA de la DAM) près de 50 % de la puissance de crête des calculateurs. Des améliorations importantes ont aussi été réalisées pour le solveur MUMPS (voir section 5.2). Ces travaux ont concerné plus spécifiquement les domaines suivants [8][29][9][31][32].

- *La généralisation des techniques de distribution/régulation des calculs des solveurs parallèles aux architectures hétérogènes.* Toutes les techniques algorithmiques utilisées dans le solveur parallèle PASTIX, pour précalculer une distribution par blocs de la matrice ainsi qu'une bonne régulation équilibrée du graphe de tâches pour les calculs par blocs, étaient basées sur des modélisations fines des opérateurs de calcul (essentiellement les opérateurs de type BLAS3) et des réseaux de communication point à point (communication asynchrone avec recouvrement). En suivant la même logique, nous avons généralisé ces méthodes pour des architectures hétérogènes à comportement prédictible (principalement des grappes de nœuds SMP). Nous avons modélisé pour les accès aux données, le niveau mémoire partagée (intra nœud SMP) et le niveau réseau (extra nœud SMP).
- *La gestion optimisée de l'occupation mémoire.* Les méthodes directes sont intrinsèquement coûteuses en mémoire, et ce malgré le choix de renumérotations performantes permettant de bien conserver le creux des matrices au cours de la factorisation. Nos solveurs utilisent des stockages supplémentaires pour des raisons algorithmiques ou de performances (matrices frontales pour

MUMPS, agrégations de blocs de contributions pour PASTIX) et ceci nuit naturellement à leur *scalabilité mémoire*. Concernant le solveur PASTIX, nous avons développé d'une part des techniques d'agrégation partielle sous contrainte mémoire, et d'autre part une mise en place et la validation d'une bibliothèque de primitives d'entrées-sorties asynchrones qui nous permettra de mettre en œuvre une technique d'*out-of-core* distribuée. Le déclenchement par anticipation des accès *out-of-core* est calculé algorithmiquement et est intégré dans la régulation du solveur parallèle.

- *Le développement d'une version non symétrique pour le solveur PASTIX*. Nous avons étendu les fonctionnalités du solveur pour pouvoir traiter des matrices non symétriques mais à structure symétrique ; dans ce cas, nous nous autorisons à faire du pivotage numérique statique ce qui nécessite après résolution une phase de raffinement itératif. Cela sera utilisé à termes dans le code FLUIDBOX.

L'ensemble des travaux sur PASTIX fait l'objet d'un contrat avec le CEA/CESTA.

6.4.3. Méthodes hybrides de résolution de grands systèmes linéaires creux

Un autre objectif de ces recherches, et c'est l'étude et la contribution attendue la plus intéressante, consiste en la mise en place de nouveaux solveurs pour passer la limite en taille des solveurs parallèles précédents (on vise au moins les 100 millions d'inconnues pour des problèmes tridimensionnels).

Nous avons commencé à travailler sur des solveurs par blocs (pour profiter toujours de l'efficacité des primitives BLAS) *hybrides* basés sur un couplage fin entre méthodes directes et méthodes itératives [76]. À partir de numérotations de type dissections emboîtées, nous allons calculer en parallèle un préconditionneur de type Cholesky incomplet par blocs qui sera ensuite intégré dans des versions parallèles par blocs d'algorithmes de type gradient conjugué ou GMRES. Des premières études allant dans ce sens sont prometteuses [69][70].

L'originalité est dans le calcul du préconditionneur qui sera issu d'une *factorisation symbolique par bloc incomplète* dans laquelle on pourra *de manière adaptative* choisir le niveau de remplissage. L'objectif a priori sera de calculer le vrai remplissage dans tous les sous domaines (cela se traduira donc par l'application en parallèle d'une méthode directe dans ces sous domaines), puis de calculer un remplissage approché pour le reste de la matrice, zone où interviendra plus spécifiquement le processus itératif. Cette première étude est sur le point d'aboutir et fait l'objet d'un contrat avec le CEA/CESTA, ainsi que d'une action retenue dans le cadre du Programme MathSTIC du CNRS. L'ensemble de cette étude se fait aussi dans le cadre d'un Projet NSF/INRIA mettant en commun les compétences de spécialistes américains (Yousef Saad/Minneapolis, Randall Bramley/Indiana, Esmond Ng/Berkeley, Maria Sosenkina/Minneapolis, John Gilbert/Berkeley) et français qui sont parmi les membres participant à ce projet.

6.5. Algorithmique hétérogène

Participants : Cyril Banino, Olivier Beaumont, Frédéric Raoult, Pierre Ramet, Jean Roman, Corentin Travers.

Mots clés : *algorithmique hétérogène, paradigme maître-esclaves, ordonnancement, grilles de calcul, tâches divisibles, recouvrement calcul/communication, macropipelines hétérogènes.*

Le rapport entre le coût des communications et des calculs sur des plates-formes de type « grilles », ainsi que le temps de déploiement sur de telles architectures, réduisent l'utilisation des grilles à des applications régulières de grande taille, pouvant se décomposer en un ensemble de tâches relativement indépendantes. Du point de vue de l'ordonnancement des graphes de tâches, on s'intéresse donc à des graphes de tâches présentant une régularité (c'est-à-dire pouvant être exprimés de manière compacte) et dont le nombre d'arêtes (donc de dépendances) est au plus de l'ordre du nombre de nœuds (c'est-à-dire de tâches de calcul).

L'exemple le plus simple de telles applications est le modèle maître-esclaves, dans lequel un processeur particulier, le maître, détient initialement un grand nombre de tâches indépendantes à distribuer à des esclaves. Ces travaux ont commencé en collaboration avec Larry Carter et Jeanne Ferrante de l'université de San Diego. Un algorithme asymptotiquement optimal (quand le nombre de tâches tend vers l'infini) a été proposé sur

un arbre de processeurs [5], ainsi qu'un algorithme optimal dans le cas d'un arbre à un seul niveau [24]. Ces résultats ont été étendus sur un graphe quelconque de processeurs dans le cadre du stage de DEA de Cyril Banino [4]. Nous avons également développé un algorithme asymptotiquement optimal pour la distribution d'un grand nombre de graphes de tâches (quelconques mais identiques) sur une plate-forme hétérogène quelconque [25]. Dans le cas des tâches divisibles, nous avons proposé de nouvelles techniques pour démontrer des résultats connus, et proposé de nouveaux résultats dans des cas particuliers. Nous avons également développé un algorithme asymptotiquement optimal dans le cas général. La plupart des algorithmes asymptotiquement optimaux s'appuient sur des formulations relâchées des problèmes du type mécanique des fluides. Par ailleurs, nous avons repris les travaux de Gerasoulis et Yang sur les techniques de « clustering », en essayant de les adapter au cas hétérogène en utilisant le logiciel de partitionnement de graphes SCOTCH développé par F. Pellegrini.

Les travaux menés ont démontré la puissance des techniques de relaxation pour concevoir des algorithmes d'ordonnancement asymptotiquement optimaux. Nous allons essayer de les mettre en œuvre dans le cadre d'applications de type « diviser pour régner », qui apparaissent en particulier dans les solveurs creux étudiés par ailleurs dans l'équipe, et qui présentent des caractéristiques raisonnables pour pouvoir être déployés sur des grilles de calcul. Par ailleurs, nous allons nous intéresser aux techniques de parallélisation des nids de boucles. En effet, les transformations de boucles peuvent permettre de faire apparaître de l'indépendance entre les itérations dans de grosses applications régulières et donc de générer un grand nombre de tâches indépendantes. On pourrait alors réutiliser les techniques de distribution des tâches indépendantes. La principale difficulté consiste à prendre en compte le placement des données partagées par les différentes tâches. Pour cela, nous comptons nous appuyer sur les résultats obtenus dans le cadre du placement des données pour des noyaux d'algèbre linéaire [13][14][15].

Dans le cadre de la problématique du recouvrement calcul/communication (on cherche le grain de calcul permettant de masquer les communications par des calculs), on a débuté aussi une étude de modélisation et la recherche des tailles de paquets qui minimisent le temps d'exécution pour un pipeline sur une plate-forme hétérogène.

Dans une architecture hétérogène ou hiérarchique (typiquement un cluster de SMP), on est amené à considérer le problème du recollement de pipelines présentant des grains de calcul différents. Des premiers résultats ont été obtenus dans le cadre du stage de DEA de Corentin Travers pour le problème particulier du pipeline sur une chaîne de nœuds SMP. La modélisation des pipelines hétérogènes est un problème difficile dans le cas général, et cette étude algorithmique ne constitue qu'une première étape. Un des objectifs est de valider expérimentalement ces résultats sur des applications cibles mettant en œuvre les techniques de pipeline.

Ces travaux sont développés en collaboration avec Frédéric Desprez du projet Remap de l'UR INRIA Rhône-Alpes.

6.6. Visualisation et pilotage de simulations numériques distribuées

Participants : Serge Chaumette, Olivier Coulaud, Michaël Dussère, Aurélien Esnard, Guillaume Latu, Boniface Nkonga, Jean Roman.

Mots clés : *couplage de codes, visualisation interactive, pilotage, CORBA.*

L'activité dans cette problématique a débuté cette année au titre du projet EPSN retenu dans l'ACI GRID. Nos travaux ont essentiellement porté sur les points suivants :

- un état de l'art sur les systèmes de pilotage d'application et de visualisation interactive ;
- la définition de l'architecture EPSN. Cette architecture sera construite au dessus de CORBA, et utilisera les outils développées au sein du projet PARIS (Objets CORBA parallèles) ;
- le développement d'un prototype, appelé EPSILON (voir section 5.8).

7. Contrats industriels

7.1. Contrat CEA d'expertise scientifique en calcul scientifique hautes performances

Participants : Olivier Coulaud, François Pellegrini, Pierre Ramet, Jean Roman.

Ce contrat a pour but de réaliser des missions d'expertise concernant le calcul scientifique hautes performances.

7.2. Contrats CEA de recherche et développement

Les sujets listés ci-dessous ont fait l'objet d'un certain nombre de contrats antérieurs à la création de SCALAPPLIX qui ont abouti durant cette année 2002 ou sont encore en cours.

- Schémas distributifs pour les maillages non structurés, problèmes stationnaires et instationnaires (Rémi Abgrall, Mohamed Mezine) ;
- Schémas distributifs pour les maillages structurés (Rémi Abgrall, Fabien Marpeau) ;
- Aéoracoustique numérique (Rémi Abgrall, Séverin Marret, Mohamed Mezine) ;
- Équations d'Hamilton Jacobi (Rémi Abgrall, Deborah Pucheu) ;
- Conception et optimisation d'une version parallèle d'un code de propagation laser dans une chaîne optique (MIRÓ) pour le Laser-Méga-Joule (P. Lecas, P. Ramet, J. Roman) ;
- Optimisation d'un code parallèle d'interaction laser/plasma (CALDER) (O. Coulaud, M. Dussère, P. Hénon, J. Roman) ;
- Conception et optimisation d'un code parallèle de dynamique des dislocations (CODDEX) (S. Christy, O. Coulaud, F. Pellegrini, J. Roman) ;
- Etude de faisabilité de nouveaux solveurs hybrides directs-itératifs (P. Hénon, D. Lecas, F. Pellegrini, P. Ramet, J. Roman).

8. Actions régionales, nationales et internationales

8.1. Actions nationales

Hormis la participation des membres de SCALAPPLIX à l'ACI GRID2 d'animation de la communauté scientifique autour du GRID (J. Roman y est responsable du thème Algorithmique et Applications Hautes Performances), nous travaillons en recherche plus spécifiquement dans 2 ACI qui ont démarré en 2002.

8.1.1. ACI GRID EPSN

Participants : Serge Chaumette, Olivier Coulaud, Michaël Dussère, Aurélien Esnard, Guillaume Latu, Boniface Nkonga, Jean Roman.

Mots clés : ACI GRID, pilotage, visualisation interactive, couplage.

EPSN est une ACI-GRID ayant pour objectif de développer un environnement pour le pilotage par la visualisation d'applications parallèles distribuées. Les applications visées sont dans le domaine de la chimie moléculaire, l'environnement et la mécanique des fluides. Cette proposition regroupe principalement des équipes d'algorithmique parallèle, de systèmes distribués, de réalité virtuelle, de mathématiques et de chimie moléculaire. Les partenaires sont l'équipe Image et Son du LaBRI, le laboratoire Génome, Populations, Interactions - LGPI, l'Institut Européen de Chimie et Biologie-IECB et le laboratoire de Structure et Réactivité des Systèmes Moléculaires Complexes à Nancy. L'ACI a été acceptée en 2002 pour 3 ans, avec un budget de 100 KEuros par an.

8.1.2. ACI GRID TLSE

Participants : Patrick Amestoy, Pascal Hénon, Dimitri Lecas, François Pellegrini, Pierre Ramet, Jean Roman.

Mots clés : *algèbre linéaire creuse parallèle, site d'expertise, Grid Computing.*

TLSE est une ACI-GRID ayant pour objectif de développer un site d'expertise en algèbre linéaire creuse utilisant la grille de calcul. Les travaux et développements qui y seront réalisés concernent la mise en place d'une infrastructure efficace pour le calcul sur la grille, la conception d'une interface Web évoluée pour accéder aux services, et la conception de scénarios pour permettre une expertise à des utilisateurs extérieurs sur des calculs mettant en œuvre des solveurs parallèles directs pour la résolution de grands systèmes linéaires creux. Les partenaires académiques de SCALAPPLIX sont le CERFACS, l'ENSEEIH - IRIT (porteur du projet), et le projet Remap ; les partenaires industriels sont le CEA, le CNES, EADS, EDF, et l'IFP. L'ACI a été acceptée fin 2002 pour 3 ans.

8.2. Actions internationales

8.2.1. Projet NSF - INRIA

Participants : Patrick Amestoy, Pascal Hénon, Dimitri Lecas, François Pellegrini, Pierre Ramet, Jean Roman.

Mots clés : *solveurs hybrides parallèles.*

L'ensemble des travaux sur les solveurs hybrides parallèles est réalisée dans le cadre d'un Projet NSF/INRIA mettant en commun les compétences de spécialistes américains (Yousef Saad/Minneapolis, Randall Bramley/Indiana, Esmond Ng/Berkeley, Maria Sosonkina/Minneapolis, John Gilbert/Berkeley) et français qui sont parmi les membres participant à SCALAPPLIX . Ce Projet NSF/INRIA a été accepté à compter du 1/4/2001 et pour une durée de trois ans.

10. Bibliographie

Bibliographie de référence

- [1] R. ABGRALL, T. BARTH. *Weighted Residual Distribution Schemes for Conservation Laws via Adaptive Quadrature.* in « Siam J. Sci. Comput. », 2002, à paraître.
- [2] R. ABGRALL, B. NKONGA, R. SAUREL. *Efficient Numerical approximation of Multi-material flow for unstructured meshes.* in « Computer and Fluids », 2002, à paraître.
- [3] R. ABGRALL, P. ROE. *High order fluctuation schemes on triangular meshes.* in « J. Sci. Comput », 2002, à paraître.
- [4] C. BANINO, O. BEAUMONT, A. LEGRAND, Y. ROBERT. *Scheduling strategies for master-slave tasking on heterogeneous processor grids.* in « PARA'02 : International Conference on Applied Parallel Computing », série LNCS 2367, Springer Verlag, pages 423-432, 2002.
- [5] O. BEAUMONT, L. CARTER, J. FERRANTE, A. LEGRAND, Y. ROBERT. *Bandwidth-centric allocation of independent tasks on heterogeneous platforms.* in « International Parallel and Distributed Processing Symposium IPDPS'2002 », IEEE Computer Society Press, 2002.
- [6] O. COULAUD, M. DUSSÈRE, P. HÉNON, J. ROMAN. *Optimization of a kinetic laser-plasma interaction code for massively parallel systems.* in « Proceedings of PMAA'2002, Neuchâtel, Suisse », novembre, 2002, <http://dept-info.labri.fr/~ramet/restricted/calder.ps.gz>.
- [7] S. GAUCEL, M. LANGLAIS. *Some mathematical problems arising in heterogeneous insular ecological models.* in « Rev. R. Acad. Cien. Serie A. Math. », 2002, à paraître.

- [8] P. HÉNON, P. RAMET, J. ROMAN. *PASTIX : A High-Performance Parallel Direct Solver for Sparse Symmetric Definite Systems*. in « Parallel Computing », numéro 2, volume 28, janvier, 2002, pages 301-321.
- [9] P. HÉNON, P. RAMET, J. ROMAN. *Parallel factorization of very large sparse SPD systems on a network of SMP nodes*. in « Proceedings of PMAA'2002, Neuchâtel, Suisse », novembre, 2002, <http://dept-info.labri.fr/~ramet/restricted/pmaa2002.ps.gz>.
- [10] M. LANGLAIS, G. LATU, J. ROMAN, P. SILAN. *Stochastic simulation of a marine host-parasite system using a hybrid OpenMP/MPI programming*. in « Europar'02 Parallel Processing », série Lecture Notes in Computer Science, volume 2400, LNCS 2400 - Springer Verlag, pages 436-446, 2002, Version longue soumise à Concurrency & Computation : Practice & Experience.

Articles et chapitres de livre

- [11] R. ABGRALL, M. MEZINE. *Construction of second order accurate monotone and stable residual distributive schemes for unsteady flow problems*. in « J. Comput. Phys. », 2002, à paraître.
- [12] P. R. AMESTOY, C. PUGLISI. *An unsymmetrized multifrontal LU factorization*. in « SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications », volume 24, December, 2002, pages 553-569.
- [13] O. BEAUMONT, V. BOUDET, A. LEGRAND, F. RASTELLO, Y. ROBERT. *Static Data Allocation and Load Balancing Techniques for Heterogeneous Systems*. éditeurs C. YUEN., in « Annual Review of Scalable Computing », volume 4, World Scientific, 2002, chapitre 1, pages 1-37.
- [14] O. BEAUMONT, V. BOUDET, F. RASTELLO, Y. ROBERT. *Partitioning a square into rectangles : NP-completeness and approximation algorithms*. in « Algorithmica », volume 34, 2002, pages 217-239.
- [15] O. BEAUMONT, A. LEGRAND, F. RASTELLO, Y. ROBERT. *Dense linear algebra kernels on heterogeneous platforms : Redistribution issues*. in « Parallel Computing », volume 28, 2002, pages 155-185.
- [16] C. BERTHON. *Schéma nonlinéaire pour l'approximation numérique d'un système hyperbolique non conservatif*. in « C. R. Acad. Sci. I, Math. », 2002, à paraître.
- [17] C. BERTHON, F. COQUEL, J. HÉRARD, M. UHLMANN. *An approximate solution of the Riemann problem for a realisable second-moment turbulent closure*. in « Shock Waves », numéro 6, volume 11, 2002, pages 245-269.
- [18] B. NKONGA, P. CHARRIER. *Generalized parcel method for dispersed spray and message passing strategy on unstructured meshes..* in « Parallel Computing », volume 28, 2002, pages 369-398.

Communications à des congrès, colloques, etc.

- [19] R. ABGRALL, K. MER, B. NKONGA. *A Lax-Wendroff type theorem for residual schemes*. in « Proceeding of a conference for P.L. Roe's 60th birthday », Wiley, éditeurs M. HAFEZ, J. CHATTOT., 2002.
- [20] R. ABGRALL, M. MEZINE. *A compact residual scheme for unsteady compressible flow problems*. in « Second International Conference in Computational Fluid Dynamics », série Lecture Notes in Physics, Springer verlag,

éditeurs S. SRINIVAS., 2002, à paraître.

- [21] O. BEAUMONT, V. BOUDET, F. DESPREZ, P. RAMET, J. ROMAN, C. TRAVERS. *Modélisation de pipelines hétérogènes*. in « GRID'2002, Aussois, France », décembre, 2002, <http://dept-info.labri.fr/~ramet/restricted/grid2002.ps.gz>.
- [22] O. BEAUMONT, V. BOUDET, Y. ROBERT. *A realistic model and an efficient heuristic for scheduling with heterogeneous processors*. in « HCW'2002, the 11th Heterogeneous Computing Workshop », IEEE Computer Society Press, 2002.
- [23] O. BEAUMONT, V. BOUDET, Y. ROBERT. *The iso-level scheduling heuristic for heterogeneous processors*. in « PDP'2002, 10th Euromicro Workshop on Parallel, Distributed and Network-based Processing », IEEE Computer Society Press, 2002.
- [24] O. BEAUMONT, A. LEGRAND, Y. ROBERT. *A polynomial time algorithm for allocating independent tasks on heterogeneous fork-graphs*. in « ISCIS'02, 17th International Symposium on Computer and Information Sciences », CRC Press, 2002.
- [25] O. BEAUMONT, A. LEGRAND, Y. ROBERT. *Scheduling strategies for mixed data and task parallelism on heterogeneous clusters and grids*. in « PDP'2003, 11th Euromicro Workshop on Parallel, Distributed and Network-based Processing », IEEE Computer Society Press, 2002, à paraître.
- [26] O. BEAUMONT, A. LEGRAND, Y. ROBERT. *Static scheduling strategies for heterogeneous systems*. in « ISCIS'02, 17th International Symposium On Computer and Information Sciences », CRC Press, 2002.
- [27] C. BERTHON, B. NKONGA. *Behavior of the finite volumes schemes in material and numerical interfaces..* in « Third International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications », Herbin, Kroner, 2002.
- [28] P. HÉNON, P. RAMET. *Optimisation de l'occupation mémoire pour un solveur parallèle creux direct hautes performances de type supernodal*. in « ACTES RenPar'2002, Hamamet, Tunisie », avril, 2002, <http://dept-info.labri.fr/~ramet/restricted/renpar02.ps.gz>.
- [29] P. HÉNON, P. RAMET, J. ROMAN. *A Parallel Direct Solver for Very Large Sparse SPD Systems*. in « Poster session, SuperComputing'2002, Baltimore, USA », novembre, 2002, http://dept-info.labri.fr/~ramet/restricted/poster_sc2002.ppt.gz.
- [30] G. LATU. *Simulation stochastique parallèle d'un système hôte-parasite par programmation hybride MPI+OpenMP.* in « RenPar'14, 14^{mes} Rencontres francophones du parallélisme, des architectures et des systèmes, Hammamet », pages 83-90, 2002.

Rapports de recherche et publications internes

- [31] P. R. AMESTOY, I. S. DUFF, J. KOSTER, J.-Y. L'EXCELLENT. *MUMPS : A Multifrontal Massively Parallel Solver (MUMPS Version 4.2 beta) Users' guide*. rapport technique, numéro RT/APO/02/2, ENSEEIHT-IRIT, Toulouse, France, décembre, 2002, Également rapport technique LIP TR2002-02.
- [32] P. R. AMESTOY, I. S. DUFF, C. VÖMEL. *Task scheduling in an asynchronous distributed memory multifrontal*

solver: rapport technique, numéro RT/APO/02/1, ENSEEIHT-IRIT, dec, 2002, Également rapport technique CERFACS TR/PA/02/105.

- [33] O. COULAUD, S. CHRISTY, F. PELLEGRINI, J. ROMAN. *Optimisation et Parallélisation du code CODDEX de dynamique des dislocations*. rapport technique, DPTA - CEA/DAM Ile-de-France, 2002.
- [34] O. COULAUD, M. DUSSÈRE, P. HÉNON, J. ROMAN. *Optimisation et Parallélisation du code CALDER d'inter-actions laser-plasma*. rapport technique, DPTA - CEA/DAM Ile-de-France, 2002.
- [35] P. HÉNON, P. RAMET, J. ROMAN. *Amélioration et Extension du Solveur Direct Parallèle pour Grandes Matrices Creuses du CESTA*. rapport technique, CEA/CESTA, 2002.
- [36] D. LECAS, P. RAMET, J. ROMAN. *Parallélisation du code MIRO de propagation d'un faisceau laser dans une chaîne de composants optiques de type laser MÉGA - JOULE*. rapport technique, CEA/CESTA, 2002.
- [37] D. PUCHEU. *Étude d'un schéma d'ordre élevé pour la simulation d'un front de flamme en milieu strié*. rapport technique, MatMéca, 2002.

Divers

- [38] R. ABGRALL. *Numerical discretisation of boundary conditions for first order Hamilton Jacobi equations*. 2002, En révision pour Siam J. Numer. Anal..
- [39] R. ABGRALL, M. MEZINE. *Construction of second order accurate monotone and stable residual distributive schemes : the steady case*. 2002, Soumis à J. Comput. Phys..
- [40] R. ABGRALL, M. PAPIN. *Numerical approximation of compressible multiphase flow*. 2002, Soumis à Trans. Amer. Proc..
- [41] R. ABGRALL, R. SAUREL. *Discrete equations for physical and numerical compressible multiphase mixtures*. 2002, En révision pour J. Comput. Phys..
- [42] M. BAUDIN, C. BERTHON, F. COQUEL, P. HOCHÉ, R. MASSON, Q. H. TRAN. *A relaxation method for two-phase flow models with hydrodynamic closure law*. 2002, Soumis à Numer. Math..

Bibliographie générale

- [43] R. ABGRALL. *Numerical discretisation of boundary conditions for first order Hamilton Jacobi equations*. in « Siam J. Numer. Anal. », en revision.
- [44] R. ABGRALL. *Toward the Ultimate Conservative Scheme : Following the Quest*. in « J. Comput. Phys. », numéro 2, volume 167, 2001, pages 277-315.
- [45] P. R. AMESTOY, I. S. DUFF, J. KOSTER, J.-Y. L'EXCELLENT. *MUMPS : A Multifrontal Massively Parallel Solver (MUMPS Version 4.2 beta) Users' guide*. rapport technique, numéro RT/APO/02/2, ENSEEIHT-IRIT, Toulouse, France, décembre, 2002, Également rapport technique LIP TR2002-02.

- [46] P. R. AMESTOY, I. S. DUFF, J.-Y. L'EXCELLENT. *Multifrontal parallel distributed symmetric and unsymmetric solvers*. in « *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* », 2000, pages 501-520.
- [47] P. R. AMESTOY, I. S. DUFF, J.-Y. L'EXCELLENT, J. KOSTER. *A Fully Asynchronous Multifrontal Solver Using Distributed Dynamic Scheduling*. in « *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications* », numéro 1, volume 23, 2001, pages 15-41.
- [48] S. AUGOULA, R. ABGRALL. *High order numerical discretization for Hamilton-Jacobi equations on triangular meshes*. in « *Journal of Scientific Computing* », numéro 2, volume 15, 2000, pages 197-229.
- [49] F. AVRAM, D. BERTSIMAS, M. RICARD. *Fluid models of sequencing problems in open queueing networks : An optimal control approach*. in « *IMA Volumes in Mathematics and its Applications* », 1995, pages 199-234.
- [50] J. BARNES, P. HUT. *A Hierarchical $O(N \log N)$ Force-Calculation Algorithm..* in « *Nature* », volume 324, décembre, 1986, pages 446-449.
- [51] V. BHARADWAJ, D. GHOSE, V. MANI, T. ROBERTAZZI. *Scheduling Divisible Loads in Parallel and Distributed Systems*. IEEE Computer Society Press, 1996.
- [52] E. DARVE. *Méthodes multipôles rapides : résolution des équations de Maxwell par formulations intégrales*. thèse de doctorat, Université Paris 6, 1999, (Référence non étudiée totalement, mais citée à titre indicatif.).
- [53] W. DEHNEN. *A Hierarchical $O(N)$ Force Calculation Algorithm*. in « *Journal of Computational Physics* », volume 179, 2002, pages 27-42.
- [54] éditeurs P. DEUFLHARD, J. HERMANS, B. LEIMKUEHLER, A. MARK, S. REICH, R. SKEEL., *Computational Molecular Dynamics : Challenges, Methods Ideas*. série Lecture Notes in Computational Science and Engineering, volume 4, Springer, 1997, Proceedings of the 2nd International Symposium on Algorithms for Macromolecular Modelling, Berlin, May 21-24,1997.
- [55] DREW, PASSMAN. *Theory of Multicomponent fluids*. in « *Applied Mathematical Sciences* », volume 135, 1998.
- [56] I. S. DUFF. *Sparse numerical linear algebra : direct methods and preconditioning*. rapport technique, numéro TR/PA/96/22, CERFACS, 1996.
- [57] A. GEORGE, J. W.-H. LIU. *Computer solution of large sparse positive definite systems*. Prentice Hall, 1981.
- [58] S. GOEDECKER. *linear Scaling Electronic structure methods*. in « *Reviews of Modern Physics* », numéro 4, volume 71, july, 1999, pages 1085-1123.
- [59] D. GOUDIN. *Mise en œuvre d'une Bibliothèque d'Outils pour la Résolution Parallèle Hautes Performances par Méthode Directe de Grands Systèmes Linéaires Creux et application à un Code de Mécanique des Structures*. thèse de doctorat, LaBRI, Université Bordeaux I, Talence, France, novembre, 2000, http://dept-info.labri.fr/~ramet/restricted/these_goudin.ps.gz.

- [60] D. GOUDIN, P. HÉNON, F. PELLEGRINI, P. RAMET, J. ROMAN, J.-J. PESQUÉ. *Parallel Sparse Linear Algebra and Application to Structural Mechanics*. in « Numerical Algorithms, Baltzer Science Publisher », volume 24, 2000, pages 371-391, <http://dept-info.labri.fr/~ramet/restricted/baltzer99.ps.gz>.
- [61] L. GREENGARD, V. ROKHLIN. *A Fast Algorithm for Particule Simulations..* in « Journal of Computational Physics », volume 73, 1987, pages 325-348.
- [62] L. GREENGARD, V. ROKHLIN. *On the Efficient Implementation of the Fast Multipole Algorithm..* Research Report, numéro YALEU/DCS/RR-602, Yale University, Departement of Computer Science, 51 Prospect Street, P.O. Box 2158 Yale Station, New Haven, Connecticut 06520, février, 1988.
- [63] P. HÉNON, P. RAMET, J. ROMAN. *PaStiX : A Parallel Sparse Direct Solver Based on a Static Scheduling for Mixed 1D/2D Block Distributions*. in « Proceedings of Irregular'2000, Cancun, Mexique », série Lecture Notes in Computer Science, numéro 1800, Springer Verlag, pages 519-525, mai, 2000.
- [64] P. HÉNON, P. RAMET, J. ROMAN. *PaStiX : A Parallel Direct Solver for Sparse SPD Matrices based on Efficient Static Scheduling and Memory Managment*. in « Tenth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Portsmouth, Virginie, USA », mars, 2001, <http://dept-info.labri.fr/~ramet/restricted/ppsc01.ps.gz>.
- [65] P. HÉNON, P. RAMET, J. ROMAN. *PaStiX : A High-Performance Parallel Direct Solver for Sparse Symmetric Definite Systems*. in « Parallel Computing », numéro 2, volume 28, janvier, 2002, pages 301-321.
- [66] P. HÉNON, P. RAMET, J. ROMAN. *Parallel factorization of very large sparse SPD systems on a network of SMP nodes*. in « Proceedings of PMAA'2002, Neuchâtel, Suisse », novembre, 2002, <http://dept-info.labri.fr/~ramet/restricted/pmaa2002.ps.gz>.
- [67] M. T. HEATH, E. G.-Y. NG, B. W. PEYTON. *Parallel algorithms for sparse linear systems*. in « SIAM Review », volume 33, 1991, pages 420-460.
- [68] D. HOCHBAUM. *Approximation Algorithms for NP-hard Problems*. PWS Publishing Company, 1997.
- [69] D. HYSOM, A. POTHEN. *Efficient parallel computation of ILU(k) preconditioners*. rapport technique, numéro 2000 - 23, NASA, may, 2000.
- [70] D. HYSOM, A. POTHEN. *Parallel ILU ordering and convergence relationships : numerical experiments*. rapport technique, numéro 2000 - 24, NASA, may, 2000.
- [71] F. JENSEN. *Introduction to computational chemistry*. Wiley, 1999.
- [72] G. MONARD, K. M. MERZ. *Combined Quantum Mechanical/Molecular Mechanical Methodologies Applied to Biomolecular systems*. in « Acc. Chem. Res. », numéro 32, 1999, pages 904-911.
- [73] F. PELLEGRINI, J. ROMAN, P. AMESTOY. *Hybridizing Nested Dissection and Halo Approximate Minimum Degree for Efficient Sparse Matrix Ordering*. in « Concurrency : Practice and Experience », volume 12, 2000, pages 69-84.

- [74] F. PELLEGRINI, J. ROMAN. *SCOTCH : A Software Package for Static Mapping by Dual Recursive Bipartitioning of Process and Architecture Graphs*. in « Proceedings of HPCN'96, Brussels, LNCS 1067 », pages 493-498, avril, 1996.
- [75] F. PELLEGRINI, J. ROMAN. *Sparse matrix ordering with SCOTCH*. in « Actes de HPCN'97, Vienne, LNCS 1225 », pages 370-378, avril, 1997.
- [76] Y. SAAD. *Iterative Methods For Sparse Linear Systems*. Ed. PWS publishing Compagny, 1996.
- [77] J. P. SINGH, C. HOLT, T. TOTSUKA, A. GUPTA, J. HENNESSY. *Load Balancing and Data Locality in Adaptive Hierarchical N-Body Methods : Barnes-Hut, Fast Multipole, and Radiosity*. in « Journal of Parallel and Distributed Computing », volume 27, 1995, pages 118-141.
- [78] J.-P. SINGH, C. HOLT, T. TOTSUKA, A. GUPTA, J. HENNESSY. *Load Balancing and Data Locality in Adaptive Hierarchical N-Body Methods : Barnes-Hut, Fast Multipole and Radiosity*. in « Journal of Parallel and Distributed Computing », volume 27, 1995, pages 118-141.
- [79] W. B. STREETT, R. TILDESLEY, G. SAVILLE. *Multiple time step methods in molecular dynamics*. in « Mol. Phys. », volume 35, 1978, pages 639-648.
- [80] M. S. WARREN, J. K. SALMON. *A portable parallel particle program*. in « Computer Physics Communications », volume 87, 1995.
- [81] J. A. BOARD JR., Z. S. HAKURA, W. D. ELLIOTT, W. T. RANKIN. *Scalable Variants of Multipole-Accelerated Algorithms for Molecular Dynamics Applications*. rapport technique, numéro 94-006, Duke University, Department of Electrical Engineering, 1994.