

Sans cesse à calculer

La simulation sur ordinateur est devenue un outil indispensable de la science moderne. Sur la ferme de calcul Ipazia, dont l'extension est en cours, les chercheurs de l'Empa simulent par exemple comment se propage le bruit provoqué par les trains ou ce qui se passe exactement dans une pile à combustible.

TEXTE: Beatrice Huber

La ferme de calcul Ipazia offre la puissance nécessaire pour les simulations de nombreux projets et est très demandée. (Photo: Ruedi Keller)

C'est dans une cave fermée par deux portes que se trouve Ipazia, la collaboratrice certainement la plus zélée de l'Empa. Cette ferme de calcul ne fait pas de pause, ne prend jamais de vacances et travaille jour et nuit avec fiabilité. Mais ce n'est pas uniquement sa fiabilité qui rend Ipazia aussi appréciée auprès de ses collègues humains de l'Empa; grâce à elle ils acquièrent sans cesse de nouvelles connaissances.

A côté de la théorie et de l'expérience, la science moderne s'appuie de plus en plus souvent aussi sur les simulations. Celles-ci sont souvent moins coûteuses que les expériences de laboratoire et elles permettent aux chercheurs de manier les systèmes mêmes les plus complexes tels que le système climatique ou des écosystèmes entiers. L'expérience et la simulation et les théories que l'on en tire permettent de représenter et d'expliquer avec toujours davantage de précision les phénomènes de la nature. Ces connaissances peuvent ensuite servir à développer par exemple de nouveaux nano-composants électroniques ou opto-électroniques ou pour la prédiction de la propagation des polluants dans l'atmosphère.

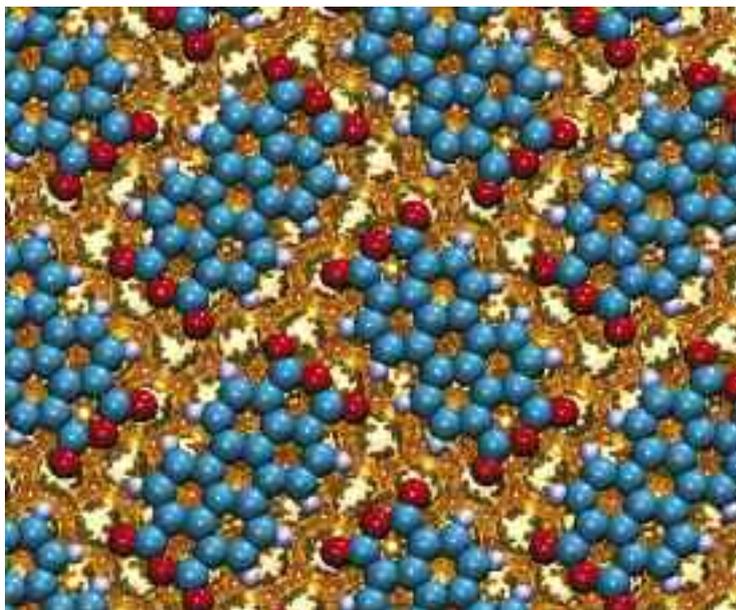
Les ordinateurs de grande puissance maîtrisent la complexité

Mais pour cela, un ordinateur doit posséder une bonne dose de puissance de calcul. Lorsqu'une simulation comporte d'innombrables paramètres ou si elle doit couvrir une très longue période, le volume des données croît de manière considérable. Les ordinateurs usuels tels que les ordinateurs de bureau ou les serveurs simples ne sont pas en mesure de maîtriser un tel flux de données, une seule simulation leur demanderait des semaines, voire des mois.

Les ordinateurs de grande puissance sont eux par contre précisément conçus pour de telles tâches. Ce que l'on dénomme les superordinateurs en constituent l'élite. Pour la «Ligue des champions» des ordinateurs les plus puissants et les plus rapides, il existe même un classement mondial qui est actualisé tous les six mois. Le «Monte Rosa», le meilleur superordinateur suisse en exploitation depuis le mois de juillet 2009 dans le Centre suisse de calcul scientifique CSCS à Manno près de Lugano, occupe par exemple actuellement le 21^e rang dans ce classement.

A l'Empa, un grand nombre de projets en cours sont trop complexes pour un ordinateur standard tout en étant trop «petits» pour un superordinateur. C'est pourquoi l'Empa a construit la ferme de calcul Ipazia dont la puissance de calcul est précisément adaptée à ce genre de projets «moyens», cela en collaboration avec l'institut de recherche sur les eaux Eawag qui y participe pour 15 pour-cent.

Le calcul haute performance – comme l'a attesté le Conseil fédéral dans un plan stratégique – est une technologie clé pour la recherche de pointe et renforce ainsi la compétitivité de la Suisse. «Ipazia n'est ainsi pas isolée mais vient s'intégrer dans un concept global suisse de calcul haute performance» explique Daniele Passerone qui dirige le groupe «Atomistic Simulation» à l'Empa et qui gère la ferme de calcul avec les informaticiens de l'Empa. Chaque projet doit pouvoir être confié au système d'ordinateur le mieux approprié.



Exemple d'une simulation – réseau moléculaire sur une surface métallique. (Photo: Empa)

Les fermes de calcul: un bon rapport prix performances

C'est il y a environ trois ans que l'Empa a commencé à construire sa ferme de calcul Linux Ipazia. Les fermes de calcul sont de plus en plus appréciées depuis quelques années. «Elles présentent un excellent rapport prix/performance; leurs composants sont en majeure partie des éléments standards – mais ayant d'excellentes performances – et sont ainsi relativement bon marché», comme le déclare Passerone pour expliquer ce succès des fermes de calcul.

Une ferme de calcul se compose de plusieurs serveurs, appelés nœuds. L'astuce: la ferme de calcul peut traiter simultanément plusieurs tâches; suivant sa taille, une tâche est distribuée sur un ou sur plusieurs nœuds, mais jamais sur toute la ferme de calcul. Ainsi les différentes tâches sont traitées rapidement et une grosse tâche ne bloque pas le système entier. Les différentes tâches sont coordonnées par un logiciel spécial de sorte que la ferme de calcul peut fonctionner jour et nuit sans intervention humaine. Des liaisons rapides entre les nœuds assurent de plus un échange rapide des données, ce qui est nécessaire pour les simulations complexes qui occupent plusieurs nœuds et demandent un échange de données volumineux. Ipazia est le plus souvent gérée à distance, il est rare que quelqu'un doive se rendre dans la cave qui l'abrite. Cette exploitation «commode» a aussi été un argument en faveur d'une ferme de calcul.

Extension en cours

Actuellement Ipazia comporte 46 nœuds. «Mais nous procédons à son extension», explique Passerone. Actuellement déjà 16 de ses 46 nœuds sont reliés entre eux à travers le réseau rapide Infiniband. De plus, quatre fois 16 nœuds supplémentaires (soit 64 au total) ont été commandés, avec le soutien financier du Fonds national suisse (FNS) dans le cadre du programme R'Equip (Research Equipment). Ipazia va donc bientôt comporter 110 nœuds. «Grâce à cette extension nous pourrions à l'avenir calculer tous les projets de taille moyenne de l'Empa et de l'Eawag», commente Passerone. De plus, la capacité de mémoire va être augmentée de 50 terabits. Tout cela demande un refroidissement, qui s'effectue avec de l'eau qui est ensuite encore utilisée pour le chauffage du bâtiment.

Les projets qui utilisent Ipazia sont aussi variés que les activités de l'Empa elle-même. Ils vont du calcul du bruit des trains en passant par la simulation du transport des polluants dans l'atmosphère et jusqu'à la simulation au niveau atomique des piles à combustible ou de la nanostructure des surfaces. Actuellement 15 laboratoires de l'Empa et de l'Eawag utilisent cette ferme de calcul. L'utilisation de ses capacités atteint 75 pour-cent, ce qui signifie en d'autres termes que tous ses nœuds «travaillent» en moyenne plus de 6500 heures par année. //

Hypatia – une scientifique de l'antiquité

Avec le nom de Ipazia – traduction italienne du nom grec Hypatia – l'Empa honore une des rares scientifiques de l'Antiquité. Hypatia, fille du philosophe et mathématicien Théon d'Alexandrie, a vécu en Egypte au 4^e siècle après J.-C. Mathématicienne, astronome et philosophe, elle enseignait au Museion d'Alexandrie auquel était aussi rattachée la célèbre bibliothèque. Elle est l'auteur de nombreux ouvrages et commentaires scientifiques. Elle aurait aussi inventé quelques instruments astronomiques. Les sources de l'époque la décrivent comme une personne ouverte qui jouissait d'une grande estime.

Le film «Agora» sur la vie de Hypatia sortira sur les écrans suisses en été 2010: www.agora-derfilm.de



Portrait de la scientifique Hypatia tiré du livre «Little Journeys to the Homes of Great Teachers» du philosophe américain Elbert Hubbard (v.23 #4, East Aurora, New York: The Roycrofters, 1908)