

# Demande de CLUSTER «recherche» de la



## Partenaires :



# Ca Sci Mod O T

## Calcul Scientifique et Modélisation Orléans-Tours

Responsable Scientifique : Stéphane CORDIER,

Email : [cordier@math.cnrs.fr](mailto:cordier@math.cnrs.fr)

Tel +33 2 38 41 70 09

<http://www.univ-orleans.fr/mapmo/membres/cordier/>

## **Objet: Lettre d'intention pour un CLUSTER CaSciModOT (Calcul Scientifique et Modélisation – Orléans -Tours)**

Partenaires : Universités d'Orléans et de Tours, INRA d'Orléans et de Tours, BRGM, 5 fédérations CNRS, Observatoire de Paris, GeoHyd (voir annexe A1)

Les simulations numériques sont un élément toujours plus essentiel de la recherche et de l'innovation, et sont souvent présentées comme le troisième pilier, entre théorie et expérience<sup>(5)</sup>. L'importance à la fois stratégique, sociétale ou économique de ce domaine et notre retard ont été soulignés, depuis 2004, dans de nombreux rapports, tant au niveau national<sup>(1)(3)(4)</sup>, qu'européen<sup>(2)</sup>. Des mesures ont été prises récemment au niveau national pour donner les moyens de relever ces défis (avis du HCST<sup>(6)</sup>, création du GENCI, du CSCI, multiplication par 25 des moyens de calcul nationaux en 2008<sup>(8)</sup>).

L'utilisation de simulations numériques est par nature pluridisciplinaire. La complexité croissante tant des applications visées que des architectures des moyens de calcul, nécessite une étroite collaboration entre trois acteurs : mathématiciens, informaticiens et experts du domaine d'application. Actuellement, les chercheurs utilisant les simulations numériques ont rarement les deux autres acteurs dans leur laboratoire et une structure transverse d'échange et d'information est donc très utile.

Il est communément admis qu'entre les ressources disponibles dans les laboratoires et les grands centres nationaux, il est indispensable de disposer de «mésocentres» pour préparer le passage à l'échelle. Nous renvoyons à l'argumentaire du dossier de Centre de Calcul Scientifique de la région Centre (CCSC, 2007, cf <http://www.fdpoisson.org/cascimodot/doc/archive/CCSC.pdf> une enquête nationale comparant les différents mésocentres régionaux (fév. 2007)<sup>(7)</sup>. Au delà des machines de calcul et de visualisation performantes et régulièrement mises à jour pour rester compétitifs, il est indispensable de mettre en place des structures d'échanges et de formations, pour s'adapter aux nouvelles technologies et faire émerger des équipes capables de répondre aux défis scientifiques.

Le projet CaSciModOT, créé en 2004 sous forme d'un double « PPF » (plan pluri formation) des universités d'Orléans et de Tours, est une structure ouverte et souple dont l'objectif est précisément de développer les actions autour du calcul scientifique et de la modélisation notamment par l'organisation de rencontres scientifiques (2 fois par an, alternativement à Orléans et Tours, attirant en moyenne 40 participants, voir <http://www.fdpoisson.org/cascimodot/journees.php> pour les programmes détaillés) et par le soutien à des projets pluridisciplinaires sous forme de réduction de service d'enseignement.

L'ambition de CaSciModOT est de fédérer l'ensemble des équipes utilisant des simulations numériques en région centre. Ces équipes sont porteuses de nombreux projets scientifiques dont plusieurs sont en partie issus des contacts au sein de CaSciModOT financés notamment par l'ANR et l'Europe. Ces projets illustrent tant la qualité des recherches et leur reconnaissance nationale voire internationale que la diversité des domaines scientifiques concernés (voir liste en Annexe). CaSciModOT a également été régulièrement soutenu par la région Centre, par exemple :

- le projet Esmeralda (2006) qui a permis d'équiper en machine de calcul et de visualisation : le LIFO, le CBM et l'ISTO ;
- le CCSC (2007) qui repose sur 6 projets scientifiques autour de l'environnement au sens large et dont le financement a été doublé par le projet ERC d'Alain Burgisser;
- plusieurs thèses récentes ou en cours (voir liste en annexe)

Le détail de ces projets est disponible à <http://www.fdpoisson.org/cascimodot/archives.php>

Le projet CaSciModOT a été évalué positivement et renouvelé en 2008 dans le cadre des contrats quadriennaux des universités. Ses missions, son fonctionnement et ses objectifs correspondent, nous semble-t-il, à ce que la région attend des futurs CLUSTERS. Notons que ce terme est ambigu dans le contexte « numérique » car il signifie également «grappe d'ordinateurs» mais nous l'employons ici dans le sens proposé par la région dans la lettre du 19 décembre 2008.

**Nous demandons la transformation du projet CaSciModOT en CLUSTER.** Elle permettrait de donner une réelle dimension régionale en y associant de façon plus concrète, plus forte et plus visible l'ensemble des acteurs des simulations numériques de la région et d'adosser le centre de calcul régional (CCSC) à une structure scientifique dynamique, ouverte et réactive.

Les partenaires envisagés sont : les deux universités de la région, les centres INRA d'Orléans et de Tours, le BRGM, le CNRS au travers de 5 fédérations de recherche, l'observatoire de Paris (Nancay) et GeoHyd (Voir liste en annexe). La plupart des partenaires sont déjà impliqués dans le CCSC. La demande est pour 3 ans, renouvelable et le CLUSTER sera géré par le PRES Orléans-Tours dont la structure juridique sera connue en juin 2009, en attendant la présente demande est présentée par l'université d'Orléans.

L'évolution du projet CaSciModOT en tant que CLUSTER permettrait d'amplifier les actions prévues dans le cadre du projet actuel (journées scientifiques, création d'un annuaire des compétences régionales à destination interne mais également pour les faire connaître auprès des entreprises, échanges d'information...) et d'en lancer de nouvelles: lettre d'information régulière, collection d'articles en ligne, rencontres thématiques (par exemple: réunion des centres de calcul régionaux, sur les «nouvelles» architectures, massivement parallèle, avec le monde industriel...), groupe de travail «technique» réunissant, chaque mois, les développeurs, formations (en lien avec certains masters, les écoles doctorales et la formation continue des partenaires), préparation demandes de financements (de doctorats, de post-docs, de jouvence de matériel), financement de CDD pour chercheurs invités (notamment dans le cadre des formations, l'aide au développement de logiciels ou au montage de projets ANR, ERC, ...). Par ailleurs, l'OSUC (UMS 3116) abrite la machine CCSC et assure la gestion des moyens humains et matériels (fluides, bâtiment) utiles au fonctionnement du centre.

Citons quelques domaines de recherche dans lesquelles les équipes de CaSciModOT sont en pointe :

- Prévisions et prévention des risques naturels (Volcanologie, Inondations...):ISTO, BRGM,INRA,Geohyd,
- Mise au point de matériaux innovants : CEMTHI, GREMI,
- Climatologie, astrophysique et physique théorique : LPC2E, LMPT, Nancay,
- Vivant : dynamique des protéines, drug design, nutrition : CBM, ICOA , INRA Tours,

Cette liste est volontairement non exhaustive puisque toutes les équipes utilisant les simulations numériques ont leur place dans le projet CaSciModOT (voir Annexe A1).

Le budget du projet actuel, par les 2 universités, est de 30 Keuros/an. Il pourrait être complété par les autres partenaires pour un total d'environ 70 Keuros/an. Un soutien équivalent est demandé à la région pour réaliser les actions présentées ci-dessus. Le CLUSTER, dirigé par le responsable scientifique, s'appuierait sur un comité exécutif constitué d'un représentant de chaque partenaire (voir liste en annexe). Ce comité exécutif sera chargé de l'affectation des crédits du CLUSTER et de l'attribution du label «CLUSTER CaSciModOT» pour les demandes ultérieures. Un conseil scientifique constitué de membres extérieurs choisi pour moitié par la région et pour moitié par le comité exécutif serait mis en place et se réunirait une fois par an pour donner un avis. Un rapport annuel détaillant les actions menées et les résultats obtenus sera transmis au conseil scientifique pour avis, puis à l'ensemble des partenaires et la région centre et sera rendu public. Ce rapport contiendra naturellement des indicateurs de l'activité du CLUSTER (nombre de publications, projets, personnes, jours de formations dispensés...).

S'agissant d'une lettre d'intention et compte tenu des délais et du nombre important de partenaires, les propositions esquissées ici devront naturellement être précisées dans la phase d'évaluation des demandes des CLUSTERS.

#### **Annexes :**

- A1- Liste des partenaires et de leur correspondant
- A2- Liste de (quelques) projets scientifiques intéressés par les simulations numériques
- A3- Liste des (principaux) acteurs du CLUSTER
- A4- Liste des thèses (récentes ou en cours, co-financées par la région)
- A5- CV du responsable scientifique

## Bibliographie (par ordre chronologique)

La plupart des rapports cités sont disponibles sur <http://www.irisa.fr/ORAP> dans la rubrique publications

(1) Rapport ORAP 1994-2004

(2) Rapport ESFRI Large scale computing facilities and research network infrastructures (janvier 2005)

(3) Rapport «Héon-Sartorius» : La politique française dans le domaine du calcul scientifique (mars 2005)

(4) Rapport du groupe Simulation de l'Académie des technologies : Enquête sur les frontières de la simulation numérique (mai 2005)

(5) Rapport PITAC : « Science: Ensuring America's Competitiveness » (juin 2005)

(6) Rapport du HCST « avis sur le calcul intensif » (janvier 2008) <http://www.hcst.fr/articles.php?pg=278>

(7) Enquête sur les mésocentres (février 2008) <http://calcul.math.cnrs.fr/spip.php?article14>

et notamment et notamment <http://calcul.math.cnrs.fr/Documents/Mesocentres/Rapports/fev2008/mesocentres.pdf> et notamment et notamment et notamment

(8) Communiqué du ministère (juin 2008) <http://www.enseignementsup-recherche.gouv.fr/cid21395/acquisition-d-un-nouveau-supercalculateur-au-service-de-la-recherche-academique.html>

## A1- Liste des 12 partenaires et de leur correspondant

Université d'Orléans	Frédéric Louergue
Université de Tours	Patrick Martineau
BRGM	Jacques Vairon
INRA Orléans	Frédéric Darboux
INRA Tours	Anne Duittoz
Observatoire de Paris	Gilles Theureau
Geo-Hyd	Daniel Pierre
Fédération Denis Poisson	Guy Barles
UMS OSUC	Jean-Louis Rouet
Fédération Physique et Chimie du Vivant	Gérald Kneller
Fédération RMN	Dominique Massiot
Fédération EPEE	Pascal Brault

Ces partenaires regroupent des équipes appartenant aux **28 laboratoires** ou structures suivantes :

BRGM Service Aménagement et risques naturels (ARN)

BRGM Service Systèmes et technologies de l'information (STI)

EA 4022 Laboratoire d'Informatique Fondamentale d'Orléans (LIFO),

EA 2100 Laboratoire de Géologie des environnements Aquatiques Continentaux (GéEAC),

EA 2101 Laboratoire d'Informatique (LI)

EA 2640 Laboratoire de Mécanique et de Rhéologie (LMR)

EA 3246 Laboratoire de Micro-électronique de Puissance (LMP)

EA 3853 Immuno-Pharmaco-Génétique des Anticorps thérapeutiques (IPGA)

EA 4229 PRISME : fusion de : LVR, LME, LESI, LEES, LMSP (PRISME)

FR 3079 Conditions extrêmes et matériaux : hautes températures et irradiation (CEMTHI)

FRE 2448 Laboratoire UltraSons, Signaux et Instrumentation (LUSSI),

GeoHyd Société d'études et de services en Environnement (GeoHyd)

Observatoire de Nançay - Equipe Pulsar (ON)

UMR 6005 Institut de Chimie Organique et Analytique (ICOA)

UMR 6035 Institut de Recherche sur la Biologie de l'Insecte (IRBI)  
UMR 6083 Laboratoire de mathématiques et physique théorique (LMPT)  
UMR 6113 Institut des Sciences de la Terre d'Orléans (ISTO)  
UMR 6115 Laboratoire de Physique et Chimie de l'Environnement et l'Espace (LPC2E)  
UMR 6157 Laboratoire d'Electrodynamique des Matériaux Avancés (LEMA)  
UMR 6175 Physiologie de la Reproduction et des Comportements (PRC)  
UMR 6606 Groupe de recherches sur l'énergétique des milieux ionisés (GREMI)  
UMR 6619 Centre de recherche sur la matière divisée (CRMD)  
UMR 6628 Laboratoire de mathématiques, applications et physique math. d'Orléans (MAPMO)  
UMS 1835 Maison des Sciences de l'Homme "Villes et Territoires" (MSHVT)  
UPR 3021 Institut de combustion aérothermique réactivité et énergétique (ICARE)  
UPR 4301 Centre de biophysique moléculaire (CBM)  
UR INRA Unité de Recherche Sciences du Sol (URSSol)  
UR INRA Unité de Recherches Avicoles (URA)

**Notons que cette liste n'est figée puisque le projet CaSciModOT est ouvert à toutes les équipes utilisant les simulations numériques en région centre et elle est donc susceptible d'évoluer. Rappelons par exemple que la demande de PPF en 2004 comptait 10 laboratoires, celle de 2008 en regroupait 19 (voir <http://www.fdpoisson.org/cascimodot/archives.php> ).**

Citons également les structures avec lesquelles nous souhaitons nous associer pour certains aspects :

- Le Studium et le centre de mobilité pour l'invitation de chercheurs,
- La Cellule Europe et les différents services de valorisation des universités et des organismes pour les contacts avec les entreprises et le montage de projet (européen, ANR)...
- Centre Sciences pour la vulgarisation

## **A2- Liste de (quelques) projets scientifiques intéressés par les simulations numériques**

Il s'agit d'une liste non exhaustive pour montrer la diversité des domaines abordés et des financements (déjà) obtenus : une dizaine de projets ANR sont impliqués, financements propres des partenaires, de la région, de l'Europe...

Les 6 projets de la demande « CCSC »: (type financement, titre, thème, porteur) :

- ANR - METHODE - ruissellement sur sols agricoles - S. Cordier (MAPMO)
- ERC starting Grant - DEMONS - Volcanologie - A. Burgisser (ISTO)
- Région centre- PASTIS - Pierre de Tuffeau - M. Bergounioux (MAPMO)
- CNRS- Climatologie - V. Marechal (LPC2E)
- GeoHyd- Modèle numérique de terrains – D. Pierre
- BRGM : risques naturels – J. Vairon (BRGM)

*-LIFO:*

- ANR CIS - "FVnano » laboratoire virtuel pour modéliser les systèmes moléculaires nanoscopiques en biologie et dans les matériaux" M. Baaden (LBT) et S. Robert (LIFO)
- ANR MDCA (Masse de données Connaissances ambiantes)
- ANR DALIA : Transfert de données pour les applications interactives de grande taille- E. Melin (LIFO)

- Projet ANR SPACLiK de l'appel défi sécurité de l'ANR 2008-2010
- Accord cadre sur la sécurité des clusters et des grilles CEA, 2008-2010
- Financement de l'ARITT, Projet SPIDware, incubation d'une SPIN-OFF spécialisée en sécurité informatique 2008.
- ACI Security Analysis of Trusted Infrastructure and Networks, 2003-2007

#### *LPC2E:*

- Mouvement relativiste des étoiles capturés par les trous noirs pour le Projet ESA-NASA. Financement demandé à la Région Centre ( proposition TOP-G , porteur LMPT). Coopération ENS Paris, Univ. Florida.
- Emissions de composés halogénés par les volcans et impact sur la chimie atmosphérique (Projet HEVA financement OSUC/STUDIUM + financement INSU, 2009-2011, porteur V. Marécal LPC2E)
- Stratospheric ozone : (projet SHIVA financé par l'Europe dans le cadre du 7ème PCRD 2009-2011, porteur K Pfeilsticker Université d'Heidelberg)

*CEMTHI* : Calculs ab-initio de données spectroscopiques (IR, RAMAN, RMN...) et propriétés radiatives des milieux hétérogènes : projets ANR RMNSOLIDE-HR-HC, GaBiPhoCe, RAMIRIS, THERMASOFC

*CBM*: ANR CIS - Dynamique des protéines - G. Kneller

#### *ICOA*

- RASTA; projet région " Rd'ASélectifs du récepteur de l'hormone folliculo-stimulante (FSH)" en collaboration avec l'INRA de Tours et le CBM
- FLEXIDOCK: projet région " Docking de ligands sur un récepteur flexible" en collaboration avec le CBM

*Equipe INRA* : PRC (Physiologie de la reproduction et des comportements) UMR6175

- Projet "TempoGnRH" A. Duittoz avec C. Georgelin du LMPT .

*Equipe INRA* : URA (Unité de recherche avicole)

- Projet MODINGRE financé par un PEPS CNRS INRA. Une demande de bourse de thèse en cours .

*LMPT*: Demande Projet ANR - cordes et noeuds en théorie des jauges - A. Niémi

*Nancay* : équipe Pulsar grand radiotélescope décimétrique, « GPU » et « temps différé » , mise à disposition des données du radiotélescope de Nancay (NRT) à travers le Portail Observatoire-Virtuel et futur Centre de Données de l'Observatoire de Paris

*GeoHyd* : (SIG hydrologie basé sur grappe de PC)

#### *INRA Orléans* :

- Modélisation prédictive de l'expansion du nématode du pin en France et en Europe, financé par le ministère de l'agriculture et de la pêche sur 12 mois
- Projet PRATIQUE financé par l'Union Européenne (pour modéliser notamment l'aire de distribution potentielle de la processionnaire du pin).
- Projet URTICLIM : Anticipation des effets du changement climatique sur l'impact écologique, sanitaire et social d'insectes forestiers urticants, financé par l'ANR
- Projet Aveyron : Prévision de l'expansion de la processionnaire du pin dans le Nord-Aveyron avec le réchauffement climatique et définition de moyens de lutte adaptés, financé par le Conseil Général de l'Aveyron
- Analyse des données du projet RMQS, financement GISSOL.

### **A3- Liste des (principaux) acteurs du CLUSTER**

Ci dessous une liste d'environ 50 collègues fortement impliqués dans les projets ou les équipes associées à cette demande. Un CLUSTER ayant vocation à une certaine pérennité, nous n'indiquons que des personnels permanents, rémunérés par les partenaires. Les équipes porteuses de la demandes contiennent également des doctorants et post-doctorants.

S. Aupetit (MC, LI)  
G. Barles (PR, LMPT)  
A. Batti (GeoHyd)  
M. Bergounioux (PR, MAPMO)  
D. Bormann (PR, CEMTHI)  
S. Bourg (IE, CBM)  
P. Brault (DR, GREMI)  
T. Brouard (MC, LI)  
A. Burgisser (CR, ISTO)  
I. Cognard (CR, LPC2E)  
S. Cordier (PR, MAPMO)  
F. Darboux (CR, INRA d'O)  
D. Davidenko (CR, ICARE)  
F. Dupros (I, BRGM)  
A. Duittoz (PR, INRA)  
V. Essayan (GeoHyd)  
I. Fedioun (MC, ICARE)  
N. Garnier (MC, CBM)  
A. Gasser (PR, PRISME)  
D. Genest( DR, CBM)  
M. Genest (DR, CNRS)  
C. Georgelin (MC, LMPT)  
T. Haberkorn (MC, MAPMO)  
K. Hinsén (CR, CBM)  
B. Izrar (PR, ICARE)  
F. James (PR, MAPMO)  
G. Kneller (PR, CBM)  
C. Laguerre (IE, MAPMO)  
P. Lescoat (I, INRA)  
J.R. Licoit (MC, LMPT)  
E. Le Trong (I, ISTO)  
F. Loulergue (PR, LIFO)  
S. Mancini (MC, MAPMO)  
C. Marot (MC, ICOA)  
N. Monmarché (MC, LI)  
L. Morin-Allory (PR, ICOA)  
C. Maetz (GeoHyd)  
V. Marecal (CR, LPC2E)  
M. Martin (I, INRA)  
P. Martineau (PR, LI)  
D. Massiot (DR, CEMTHI)  
A. Niémi (DR, LMPT)  
D. Pierre (GeoHyd)  
M. Pirre (PR émérite, LPC2E)  
JL Rouet (PR, ISTO)  
B. Rousseau (CR, CEMHTI)  
P. Sochala (I, BRGM)  
A. Spallicci (LPC2E)  
D. Soulat (MC PRISME)  
G. Theureau (AA OP, LPC2E)  
X. Thomas (Geohyd)  
E. Trélat (PR, MAPMO)  
C. Toinard (PR, LIFO)  
J. Vairon (I, BRGM)

#### **A4- Liste de quelques thèses (récentes ou en cours, co-financées par la région)**

- Dmitry Davidenko - propulsion hypersonique - LCSR/ICARE- 2005
- Mathieu Blanc – Sécurité Cluster - CEA DAM-LIFO -2006
- Jérémy Briffaut – Sécurité informatique –LIFO- 2007
- Olivier Delestre - Modélisation du ruissellement - MAPMO/INRA – 2009
- Gregory Desvignes – Astrophysique - 2009
- Jonathan Rouzard-Cornabas -sécurité des systèmes d'exploitation- LIFO- 2010
- Louis Forestier-Coste : Volcanologie : MAPMO/ISTO - 2011
- Dalal Ait Allal – PRISME/Polytech – 2011
- Julie Dubois – Bio-informatique ICOA - 2011

#### **A5- Bref CV du responsable scientifique**

Stéphane Cordier, né en 1970, marié, 2 enfants

- docteur de l'ENS Cachan en mathématiques appliquées - 1994
- maître de conférence à l'université Pierre et Marie Curie de 1995 à 2000
- professeur à l'université d'Orléans depuis 2000

Quelques responsabilités :

- responsable du PPF Cascimodot de 2004 à 2008 <http://fdpoisson.org/cascimodot/>
- directeur de la Fédération Denis Poisson 2006-2008 <http://fdpoisson.org/>
- directeur du MAPMO depuis 2008 <http://www.univ-orleans.fr/mapmo/>
- porteur projet ANR Blanc pluridisciplinaire METHODE <http://www.univ-orleans.fr/mapmo/methode/>
- chargé de mission "calcul scientifique" au CNRS (département SPM) de 2003 à 2006
- directeur d'ORAP de 2003 à 2007 <http://www.irisa.fr/orap/>
- expert "calcul scientifique" auprès de la conférence des présidents d'universités (CPU) depuis 2006
- conseil scientifique du colloque "penser le pétaflop" organisé par le CEA et le CNRS en 2008
- président de l'association française des docteurs ANDES 2002-2003 <http://www.andes.asso.fr/>

Email : [cordier@math.cnrs.fr](mailto:cordier@math.cnrs.fr)

tel +33 2 38 41 7009

<http://www.univ-orleans.fr/mapmo/membres/cordier/>