

Demande de cofinancement d'un équipement scientifique au Conseil Régional du Centre

Hors contrat de plan- Au titre de l'année 2006

L'ENSEMBLE DU DOSSIER EST À RETOURNER AVANT LE **4 NOVEMBRE 2005** :

- en **3 exemplaires** Au **SERVICE RECHERCHE** après signature du Directeur de la composante
- **1 exemplaire** à **chaque responsables du pôles de recherche** dont vous dépendez (voir annexe Responsables de pôles)

ATTENTION :

Pour les demandes émanant d'UMR associées à un grand organisme de recherche présent en Région, l'avis favorable de ce dernier devra également être communiqué à la Région.

Laboratoire demandeur :

Label et nom du laboratoire :

PPF Cascimodot

Plan Pluriformation CAIcul SCientifique et Modélisation à Orléans et Tours

Responsable de la demande :

Frédéric Loulergue

Coordonnées du demandeur :

Laboratoire d'Informatique Fondamentale d'Orléans (LIFO)

Faculté des Sciences, Bâtiment IIIA, Rue Léonard de Vinci – B.P. 6759

F-45067 ORLEANS Cedex 2, France

frederic.loulergue@univ-orleans.fr

Tel: 02 38 41 72 87

Fax: 02 38 41 71 37

Pôle de recherche régional auquel se rattache l'opération (*raier les mentions inutiles*) :

~~1- AGROSCIENCES~~

5- BIOLOGIE - SANTE / PHYSIQUE ET CHIMIE DU VIVANT

~~2- CIVILISATIONS ET RENAISSANCE~~

6 - SCIENCES DE LA TERRE, DE L'ENVIRONNEMENT ET DE L'UNIVERS

~~3- ENERGETIQUE~~

7- SCIENCES DE LA VILLE

~~4- MATERIAUX~~

8- ECONOMIE ET AUTRES DOMAINES DISCIPLINAIRES (MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE...)

Intitulé du projet de recherche :

Esmeralda, une grille pour le calcul intensif et la réalité virtuelle

Désignation et description de l'équipement à acquérir (*joindre un devis*)

L'équipement à acquérir est une grille de calcul et de visualisation, c'est-à-dire un ensemble de moyens de calcul et de visualisation répartis dans différents laboratoires, reliés entre eux par le réseau informatique de l'université permettant ainsi un partage des ressources de calcul. Cet ensemble sera composé de :

1. 8 nœuds de calcul et de visualisation biprocesseurs 64 bits (avec 2Go de RAM par nœud et cartes graphiques adaptées) au Laboratoire d'Informatique Fondamentale d'Orléans qui remplaceront 8 nœuds obsolètes, la grappe de calcul et de visualisation comprendra alors 16 nœuds biprocesseurs (25,2k€) ;
2. une grappe de calcul 8 nœuds biprocesseurs 64 bits de type Power PC (avec 2,5 Go de RAM par nœud) au Centre de Biophysique Moléculaire (18,1 k€) ;
3. 2 stations de calcul quadri-processeurs (avec 8Go de mémoire par machine) à l'Institut des Sciences de la Terre d'Orléans (16,7 k€).

Des devis pour cet ensemble sont joints en annexe. Il est à noter toutefois que ces devis sont valables à la date indiquée mais qu'au moment de l'achat des architectures intéressantes aujourd'hui, mais plus chères et insuffisamment testées, ou des architectures pas encore disponibles pourraient devenir accessibles dans le cadre de cet équipement.

Coût total de l'équipement en euros TTC

60 000 €

Plan de financement

SOURCES DE FINANCEMENT	MONTANT EN € TTC	%	NATURE ET DATE DES ENGAGEMENTS FINANCIERS
<i>Fonds propres</i>			
PPF Cascimodot	10 000 €	16,7 %	
Laboratoire d'Informatique Fondamentale d'Orléans	9 000 €	15,0 %	
Centre de Biophysique Moléculaire	6 000 €	10,0 %	
Institut des Sciences de la Terre d'Orléans	5 000 €	8,3 %	
Subvention demandée à la Région	30 000 €	50,0 %	-
TOTAUX	60 000 €	100 %	-

**(indiquer les noms des établissements ou organismes partenaires et leur degré d'engagement)*

Calendrier d'acquisition

Le matériel sera acquis en une seule fois dès la disponibilité des fonds.

Note d'une page en langage vulgarisé sur le projet de recherche nécessitant l'acquisition de l'équipement et l'intérêt de celui-ci par rapport aux objectifs du laboratoire

La recherche de pointe moderne, dans la plupart des disciplines, fait appel de plus en plus à des démarches de modélisation et de simulation numérique qui utilisent des outils souvent très sophistiqués et requièrent des compétences de plus en plus pointues et variées. Cette évolution s'explique, d'une part, par l'impossibilité ou le coût prohibitif de certaines expérimentations et, d'autre part, par une volonté d'avoir une meilleure compréhension quantitative des phénomènes et une analyse très fine des facteurs déterminants.

Chaque laboratoire est ainsi amené à rechercher voire à développer des compétences qui n'ont rien à voir avec son champ disciplinaire habituel. Bien entendu, ces besoins sont en perpétuelle évolution et il est difficile d'y faire face. Si on souhaite faire preuve d'une certaine efficacité, pour ne pas dire compétitivité, la nécessité d'une mise en commun des diverses compétences des laboratoires au niveau d'une université paraît aussi évidente que délicate à mettre en oeuvre ; elle pose des problèmes bien connus liés non seulement aux difficultés de communication entre les différentes disciplines, aux cultures scientifiques différentes mais aussi à la structuration actuelle de la recherche.

L'objectif du PPF Cascimodot est donc de faciliter la mise en place de recherches pluridisciplinaires dans le domaine du calcul scientifique et de la modélisation mais aussi d'encourager et d'accompagner les demandes de financements des matériels nécessaires à ces recherches.

Cet équipement est au centre des intérêts du PPF Cascimodot et des laboratoires concernés. La mise en place de ces éléments de calculs et de visualisation en tant que grille, c'est-à-dire d'éléments répartis géographiquement sur le campus d'Orléans mais connectés par réseau et utilisables de concert, répond à un double objectif d'efficacité en ayant des moyens de calcul dans les laboratoires utilisateurs, ce qui facilite leur administration et leur usage, mais aussi de coopération des différents laboratoires par la mise en place d'une surcouche logicielle qui permettra à chacun des membres du projet d'utiliser les ressources de calcul des laboratoires partenaires lorsque celles-ci sont libres.

D'un point de vue plus spécifique, cet équipement sera utilisé :

- ✓ au CBM pour les activités concernant la modélisation théorique et numérique des protéines à l'échelle atomique, notamment pour le développement et l'utilisation de codes pour la simulation moléculaire (MMTK) et leur analyse (nMOLDYN) ;
- ✓ à l'ISTO pour la modélisation du mécanisme permettant de reconsolider une pierre altérée en reformant un réseau de surface par dépôt de calcite dans la pierre, afin d'optimiser ce processus. Ceci nécessite l'élaboration et l'utilisation sur machines performantes de codes pour du calcul intensif ;
- ✓ au LIFO pour le développement et l'expérimentation de langages, de bibliothèques et d'intergiciels pour la réalité virtuelle (FlowVR) – qui peut être appliquée à la visualisation de données scientifiques – les bases de données massives (PDBML), la programmation parallèle et globalisée de haut-niveau (BSML, MSPML, DMML).

Rapport scientifique d'opportunité justifiant l'intérêt de l'acquisition de l'équipement par rapport aux objectifs du laboratoire

Au LIFO cet équipement sera utilisé par l'équipe «Vérification Parallélisme et Sécurité » pour les activités autour du parallélisme et de la réalité virtuelle.

Les environnements évolués de visualisation coordonnent plusieurs vidéo-projecteurs pour former un champ visuel de grande taille et de haute résolution affichant en temps-réel des images 3D stéréoscopiques. Ils nécessitent l'assistance de coûteuses machines parallèles pour répondre en temps-réel. Nous proposons une alternative qui consiste à recourir à une grappe de PC équipés de cartes graphiques standards mais pose des problèmes de parallélisation et de synchronisation. Nous avons développé un logiciel expérimental, NetJuggler basée sur le logiciel libre VRJuggler ainsi que des composants logiciels de swaplock, de genlock et de stéréoscopie active. Le composant genlock a nécessité un développement matériel avec le LESI (IPO, Université d'Orléans). NetJuggler est distribué sous GPL et intégré à Clic de Mandrake. A ce jour, notre site web comptabilise plus de 3000 visites et est utilisé dans des universités pour piloter des murs d'images tels que l'Argonne Futures Labs, USA, ou le VRlab, Suède. Nous avons travaillé avec le BRGM sur la Réalité Virtuelle appliquée aux géosciences, avec un Workbench sur le site d'Orléans et le projet RNTL GeoBench

Nous avons également élaboré des outils destinés à faciliter l'écriture et la validation des programmes parallèles, et d'autre part la mise en adéquation des programmes et des architectures. Par exemple les bibliothèques BSML et MSPML permettent d'exprimer des algorithmes extensibles par opérations purement fonctionnelles en Objective Caml. Nous avons développé des algorithmes d'optimisation des requêtes relationnelles dans les bases de données, qui sont les seuls de leur genre à être efficaces sur les grands systèmes parallèles. Ces travaux ont été adaptés au calcul GRID (notamment avec la bibliothèque DMML) dans le cadre du projet de l'ACI GRID Caraml, coordonnée par le LIFO avec l'INRIA et les Universités Paris 7 et Paris 12.

Pour l'équipe concernée au CBM, les activités principales concernent la modélisation théorique et numérique des protéines à l'échelle atomique. Dans ce contexte nous développons des codes pour la simulation moléculaire (MMTK) et leur analyse (nMOLDYN). La technique de simulation principalement utilisée est la simulation de dynamique moléculaire (Molecular Dynamics). Le contact avec des données expérimentales, provenant pour une grande partie de la diffusion de neutrons, jouent un rôle important pour notre travail. Depuis 2000 nous disposons d'une grappe de PC et de stations de travail (MPCB) de 20 biprocesseurs Pentium III et de 4 stations DEC alpha. La machine a été co-financée par le CNRS, la Région Centre, et trois laboratoires du campus orléanais (CBM, CRMD, MAPMO). Elle a été installée au Centre de Biophysique Moléculaire. Elle est arrivée en fin de vie et l'équipement demandé viendra combler en partie nos besoins en moyen de calcul.

L'ISTO, dont l'objectif est de comprendre les mécanismes d'altération observée sur les pierres mises en oeuvre dans les monuments historiques ou autres oeuvres d'art. Ces pierres sont des milieux poreux, soumis à des invasions diverses, d'eau et/ou de polluants. Parmi les agents qui interviennent dans ces processus d'altération, le rôle de l'eau est prépondérant : c'est à la fois un agent de l'érosion et un vecteur de composés agressifs, particulièrement en milieu urbain. De nombreuses études ont montré que cette altération résulte d'un ensemble de processus chimiques, physiques et aussi biologiques. Un premier objectif est de caractériser le milieu par analyse d'image tomographique. A partir des reconstructions

tridimensionnelles obtenues par cette technique, nous pourrions déterminer l'évolution texturale, morphologique et topologique entre une pierre saine et une pierre altérée. Pour cela il est nécessaire d'écrire un ensemble de codes de calculs permettant l'analyse tridimensionnelle pour notamment déterminer la porosité, la surface spécifique, le nombre d'Euler Poincaré, les fonctions d'autocorrélation de masse et de surface. Un second objectif est de modéliser et simuler les transferts de masse dans un milieu modèle (dans un premier temps) puis dans une pierre naturelle afin de mieux comprendre le rôle de ces transferts dans les processus de dégradation observés. D'autre part, il existe une technique expérimentale permettant de reconsolider une pierre altérée en reformant un réseau de surface par dépôt de calcite dans la pierre ; cette calcite étant d'origine biologique. L'objectif est ici de modéliser le mécanisme de déposition afin d'optimiser ce processus. Les moyens de calculs permettant d'arriver aux objectifs énoncés ci-dessus passent par l'élaboration et l'utilisation de codes portant sur : la caractérisation du milieu poreux sur des reconstructions 3D ; la simulation par gaz sur réseau du transport en milieu poreux désordonné et l'application au transfert de fluides dans les pierres. Le couplage avec des méthodes probabilistes pour l'altération et la redéposition de matière du réseau est envisagé. L'utilisation de ces codes nécessite bien sûr un équipement adéquat qui fait défaut actuellement.

Présentation du laboratoire

Statut (UMR, EA ...) et Nom du laboratoire :

Plan Pluriformation « Calcul scientifique et modélisation à Orléans et Tours » (PPF Cascimodot)

Effectifs globaux du laboratoire en précisant l'effectif :

Le PPF Cascimodot regroupe 10 laboratoires et fédérations (fondateurs) des universités d'Orléans et Tours. Pour l'Université de Tours les laboratoires sont :

- ✓ Laboratoire de Mathématiques et Physique Théorique (UMR 6083)
- ✓ Institut de Recherche sur la Biologie de l'Insecte (UMR 6035)
- ✓ Laboratoire Ultra-Sons, Signaux et Instrumentation (FRE 2448)
- ✓ Laboratoire d'Informatique (EA 2101)
- ✓ Laboratoire d'électrodynamique des matériaux avancés (UMR CNRS-CEA 6157)

Pour l'Université d'Orléans les laboratoires et fédérations sont :

- ✓ Centre de Biophysique Moléculaire (CBM, UPR 4301)
- ✓ Laboratoire d'Informatique Fondamentale d'Orléans (LIFO, FRE 2490)
- ✓ Mathématiques et applications, physique mathématique d'Orléans (MAPMO, UMR 6628)
- ✓ La fédération « Energétique, espace, environnement » (EPEE, FR 0776), laboratoires LCSR, Aérothermie, GREMI, LME et LEES.
- ✓ Institut de Chimie Organique et Analytique (ICOA, UMR 6005 et FR CNRS 2708 , Physique et chimie du vivant)

Au sein de ces laboratoires, les chercheurs et enseignants-chercheurs travaillant sur les thématiques du PPF Cascimodot sont environ quatre-vingt.

Effectif de l'équipe concernée par le nouvel équipement :

Ce nouvel équipement concerne trois laboratoires du campus d'Orléans :

1. le Laboratoire d'Informatique Fondamentale d'Orléans (LIFO)
2. le Centre de Biophysique Moléculaire (CBM)
3. l'Institut des Sciences de la Terre d'Orléans (ISTO)

Au sein de ces laboratoires l'équipement concerne au total 15 personnes : 1 directeur de recherche, 2 professeurs, 1 chargé de recherche, 6 maîtres de conférences et 5 doctorants.

Thématiques de recherche du laboratoire :

Le PPF Cascimodot a pour but de favoriser des rencontres et des collaborations entre les différents acteurs de la modélisation et de la simulation numérique jusqu'au calcul scientifique. Ces rencontres permettent des échanges d'expertise qui stimuleront l'émergence et le développement de recherches dans ces thématiques, et plus particulièrement via l'utilisation de méthodes numériques de pointe.

Liste des équipements existants :

Nous nous limitons ici aux équipements de calcul et de visualisation. Au LIFO une grappe de calcul et de visualisation de 8 nœuds est en service, 8 autres nœuds étant obsolètes. Pour la réalité virtuelle quatre vidéo-projecteurs et un mur de projection sont utilisés. Le CBM a participé au Cluster MPCB (Mathématique, Physique, Chimie, Biologie) aujourd'hui obsolète.

Liste des publications et communications majeures (toutes thématiques confondues) des trois dernières années (20 maximum) et liste des principales publications (10 maximum) en relation avec le projet de recherche (à joindre sur papier libre).

Principales publications relevant du PPF Cascimodot¹

1. J. Allard, V. Gouranton, E. Melin et B. Raffin, Parallelizing Pre rendering Computation on a NetJuggler PC Cluster, in Immersive Projection Technology Symposium, Orlando, US, March, 2002
2. J. Allard, V. Gouranton, L. Lecointre, E. Melin et B. Raffin, NetJuggler: Running VrJuggler with Multiple Displays on a Commodity Component Cluster, in IEEE Virtual reality, Orlando, US, March, 2002
3. Bletly, P.-L., C. Lathuillère, B. Emery, J. Liliensten, J. Fontanari, and D. Alcaydé, An extended TRANSCAR model including ionospheric convection: simulation of EISCAT observations using inputs from AMIE, *Ann. Geophys.*, 23, 419-431, 2005
4. Dagotto, E. Nanoscale phase separation and colossal magnetoresistance: The physics of manganites and related compounds; Springer: Berlin Heidelberg New York, 2003.
5. F. Gava and F. Loulergue. Semantics of a Functional Bulk Synchronous Parallel Language with Imperative Features. In G. Joubert, W. Nagel, F. Peters, and W. Walter, editors, *Parallel Computing: Software Technology, Algorithms, Architectures and Applications, Proceeding of the 10th ParCo Conference*, North Holland/Elsevier, pages 95-102, Dresden, 2004
6. F. Gava. Parallel I/O in Bulk Synchronous Parallel ML, In M. Bubak, D. van Albada, P. Sloot, and J. Dongarra, eds., *The International Conference on Computational Science (ICCS 2004)*, Part III, LNCS, pages 339-346, Springer Verlag, 2004
7. F. Gava and F. Loulergue. A Static Analysis for Bulk Synchronous Parallel ML to Avoid Parallel Nesting. *Future Generation Computer Systems*, 21(5):665-671, 2005
8. F. Loulergue, F. Gava, and D. Billiet, "Bulk Synchronous Parallel ML: Modular Implementation and Performance Prediction", In Vaidy S. Sunderam, G. Dick van Albada, Peter M. A. Sloot, and Jack Dongarra, eds., *International Conference on Computational Science*, Part II, LNCS 3515, pages 1046-1054, Springer, 2005
9. F. Loulergue. Optimizing Bulk Synchronous Parallel ML. In Chao Lu and Roger Lee, editors, *6th ACIS International Conference on Software Engineering, Artificial Intelligence, Networking, and Parallel/Distributed Computing (SNPD2005)*, pages 294-299. IEEE Computer Society, 2005
10. F. Loulergue. Parallel Juxtaposition for Bulk Synchronous Parallel ML. In H. Kosch, L. Boszorményi, and H. Hellwagner, editors, Euro-Par 2003, number 2790 in LNCS, pages 781-788. Springer Verlag, 2003
11. J. Puibasset, "Grand potential, Helmholtz free energy and entropy calculation in heterogeneous cylindrical pores by the Grand Canonical Monte Carlo simulation method", *J. Phys. Chem. B* 109, 480, 2005
12. J. Puibasset, "Phase coexistence in heterogeneous porous media: a new extension to Gibbs Ensemble Monte Carlo simulation method" *J. Chem. Phys.* 122, 134710, 2005
13. J. Puibasset, R.J.M. Pellenq, "Water adsorption in disordered mesoporous silica (Vycor) at 300 K and 650 K: a grand canonical Monte Carlo simulations study of hysteresis", *J. Chem. Phys.* 122, 094704, 2005
14. M. Bamha et G. Hains, An Efficient Equi-semi-join Algorithm for Distributed Architectures, in the *International Conference on Computational Science (ICCS'2005)*, LNCS 3515, pages 755-763, Springer-Verlag, 2005

¹ Sont mentionnées ici des publications des chercheurs qui participent au PPF Cascimodot et plus particulièrement ceux qui participent à l'élaboration de la demande de financement ANR, programme « Calcul intensif et grille de calcul » (voir section « Informations complémentaires jugées nécessaires »)

15. M. Bamha et M. Exbrayat, Pipelining a Skew-Insensitive Parallel Join Algorithm, *Parallel Processing Letters* journal, Vol.13, No.3, 2003
16. Merlin, A. et Hains, G, A generic cost model for concurrent and data-parallel meta-computing, in *Fourth International Workshop on Automated Verification of Critical Systems: (AVOCS'04)*, London, (UK), September, 2004
17. Olive E., Soret J.C., Giamarchi T. and Le Doussal P., Numerical simulation evidence of dynamical transverse Meissner effect and moving Bose glass phase, *Physical Review Letters* 91, 037005 (2003).
18. P. Brault, G. Moebis, "Molecular dynamics simulations of palladium cluster growth on flat and rough graphite surfaces", *Eur. Phys. J. AP* 28, 43–50, 2004
19. P. Porion, M. Al Mukhtar, A.M. Faugère et A. Delville, "23Na Nuclear Magnetic Resonance spectroscopy and 1H Pulsed Field Gradient Spin Echo detection of the critical concentration corresponding to the Isotrope/nematic transition within aqueous dispersions of charged anisotropic nano-particles", *J. Phys. Chem. B* 108, 10825, 2004
20. P. Porion, M. Al Mukhtar, A.M. Faugère, R.J.M. Pellenq, S. Meyer et A. Delville, "Water self-diffusion within nematic dispersions of nano-composites: a multi-scale analysis of 1H pulsed field gradient NMR measurements", *J. Phys.Chem. B* 107, 4012, 2003

Principales publications liées au projet

1. J. Allard, V. Gouranton, L. Lecointre, S. Limet, E. Melin, B. Raffin et S. Robert, FlowVR: a Middleware for Large Scale Virtual Reality Applications, in *Proceedings of Euro-par 2004*, Pisa, Italia, 2004
2. M. Bamha, An optimal and skew-insensitive join and multi-join algorithm for ditributed architectures, in *Proceedings of the International Conference on Database and Expert Systems Applications (DEXA'2005)*. 22-26 August, Copenhagen, Danemark, Vol.3588, Lecture Notes in Computer Science, pp.616-625, Springer-Verlag, 2005
3. F. Gava and F. Loulergue, "A Functional Language for Departmental Metacomputing", *Parallel Processing Letters*, 15(3):289-304, 2005
4. V. Gouranton, S. Madougou, E. Melin, et C. Nortet, Interactive Rendering of Massive Terrains Using PC Cluster., *EuroVis 2005: Eurographics/IEEE-VGTC Symposium on Visualization*, June, 2005
5. V. Gouranton, S. Limet, S. Madougou et E. Melin, A Scalable Cluster-based Parallel Simplification Framework for Height Fields, *Eurographics Symposium on Parallel Graphics and Visualization, EGPGV'04*, June, 2004
6. K. Hinsén, "High-Level Parallel Software Development with Python and BSP", *Parallel Processing Letters*, 13(3):461-472, 2003
7. G. Kneller and K. Hinsén. Fractional brownian dynamics in proteins. *J. Chem. Phys.*, 121(20):10278–10283, 2004
8. G. Kneller. Quasielastic neutron scattering and relaxation processes in proteins: Analytical and simulation-based models. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 7(13):2641 – 2655, 2005
9. F. Loulergue, F. Gava, M. Arapinis, and F. Dabrowski, "Semantics and Implementation of Minimally Synchronous Parallel ML", *International Journal of Computer and Information Science*, 5(3):182-199, 2004
10. T. Rog, K. Murzyn, K. Hinsén, and G. Kneller. nMoldyn : A Program Package for a Neutron Scattering Oriented Analysis of Molecular Dynamics Simulations. *J. Comp. Chem.*, 24(5):657–667, 2003. URL: <http://dirac.cnrs-orleans.fr/nMOLDYN>

Thèses soutenues au cours des 3 dernières années²

1. Aci Samia, « Etude par simulation de dynamique moléculaire de la variabilité conformationnelle du dimère de la séquence SL1 du génome de VIH-1. », Centre de Biophysique Moléculaire, Université d'Orléans, 2004
2. Aller Pierre, « Etude du domaine transmembranaire de récepteur tyrosine kinase dans un environnement membranaire. Aspects structuraux et mécanistiques explorés par dynamique moléculaire. » Centre de Biophysique Moléculaire, Université d'Orléans, 2004
3. Arsouze J., Une formalisation de la résolution des problèmes de satisfaction de contraintes. Application à la vision grammaticale de CLP, Thèse de Doctorat d'Université, Université d'Orléans, septembre, 2004.
4. Babazadeh A., Biostratigraphie et contrôles paléogéographiques de la zone de suture de l Iran oriental. Implications sur la fermeture Téthysienne, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2003
5. Be Mezeme E., Contribution de la géochronologie U-Th-Pb sur monazite à la compréhension de la fusion crustale dans la chaîne varisque française et implication géodynamique, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2005
6. Champallier R., Déformation Expérimentale à Haute Température et Haute Pression de Magmas Partiellement Cristallisés, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2005
7. Chautard Hélène, « Etude des protéines de la famille des PEBP chez la levure *Saccharomyces cerevisiae* : mise en évidence d'un nouvel activateur de la voie Ras-AMPC-PKA. », Centre de Biophysique Moléculaire, Université d'Orléans, 2004
8. Cleuziou G., Une méthode de classification non-supervisée pour l'apprentissage de règles et la recherche d'information, Thèse de Doctorat d'Université, Université d'Orléans, décembre, 2004.
9. Crola Da Silva Claire, « Lignées de cellules endothéliales humaines comme modèle de l'organo-spécificité : étude du rôle des chimiokines et applications à l'inflammation cutanée. », Centre de Biophysique Moléculaire, Université d'Orléans, 2004

² Toutes thématiques confondues au CBM, ISTO et LIFO.

10. Da Silva Pedro, « Etude structurale et dynamique par résonance magnétique nucléaire d'une protéine de transfert de lipides isolée dans le tabac. », Centre de Biophysique Moléculaire, Université d'Orléans, 2004
11. De Vuyst Guillaume, « La protéine MC1 d'archaeobactérie : reconnaissance de séquences particulières », Centre de Biophysique Moléculaire, Université d'Orléans, 2004
12. Duguet M., Evolution tectono-métamorphique des unités de type Thiviers-Payzac dans la chaîne hercynienne française (Massif Central et Vendée), Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2003
13. Hamon Véronique, « Influence de la pression sur la dynamique du lysozyme en solution, par simulation numérique et diffusion de neutrons. », Centre de Biophysique Moléculaire, Université d'Orléans, 2004
14. Holah N., Potentiel des nouveaux capteurs radar multi-polarisation et polarimétrie pour la caractérisation des états de surface en milieu agricole, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2005
15. Jacob J., Enregistrement des variations palioenvironnementales depuis 20000 ans dans le Nord-Est du Brésil (Lac Cago) par les triterphènes et autres marqueurs organiques, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2003
16. Jozja N., Etude de matériaux argileux albanais. Caractérisation "multi-échelle" d'une bentonite magnésienne, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2003
17. Kieken Fabien, « Etude structurale par RMN des changements conformationnels de la séquence SL1 de l'ARN de l'isolat VIH-1 », Centre de Biophysique Moléculaire, Université d'Orléans, 2004
18. Lamerant-Fayel Nathalie, « Organo-spécificité de l'endothélium : mise en évidence et caractérisation d'une molécule régulatrice de l'adhésion, nommée ARM-1. », Centre de Biophysique Moléculaire, Université d'Orléans, 2004
19. Lantenois S., Interactions fer métal/smectites en milieu hydraté à 80°C, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2003
20. Lartia Rémy, « Synthèse et études de sondes oligonucléotidiques dont le signal fluorescent est modifié au cours de l'hybridation. », Centre de Biophysique Moléculaire, Université d'Orléans, 2004
21. Legtchenko A., Apprentissage de solveurs de contraintes sur les domaines finis, Thèse de Doctorat d'Université, Université d'Orléans, septembre, 2005.
22. Lesaint W., Explications de retraits de valeurs en programmation par contraintes et application au diagnostic déclaratif, Thèse de Doctorat d'Université, Université d'Orléans, novembre, 2003.
23. Marchand C., Origine et devenir de la matière organique des sédiments de mangrove de Guyane française, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2003
24. Markey N., Logiques temporelles pour la vérification: expressivité, complexité, algorithmes, Thèse de Doctorat d'Université, Université d'Orléans, avril, 2003.
25. Merlin A., Modèles opérationnels communicants, performances et algèbres de chemins, Thèse de Doctorat d'Université, Université d'Orléans, décembre, 2004.
26. Mort A., Mécanismes de formation et évolution des pyrobitumes dans les réservoirs pétroliers: cas naturels et approches expérimentales, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2004
27. Muller F., Mémoire Habilitation à Diriger des Recherches, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2004
28. Nzoussi P., Le cémalo-turonien de l'Atlantique Nord (Bassin du Sénégal) environnement de dépôt et évolution diagénétique. Implications pétrolières, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2003
29. Poussineau S., Dynamique des magmas andésitiques : approche expérimentale et pétrostructurale ; application à la Soufrière de Guadeloupe et à la Montagne Pelée, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2005
30. Salleb Ansaf, Recherche de motifs fréquents pour l'extraction de règles d'association et de caractérisation, Thèse de Doctorat d'Université, Université d'Orléans, décembre, 2003.
31. Talbot J.-Y., Apport des études ASM et gravimétriques des plutons cévenols à la caractérisation structurale de l'évolution tardi-hercynienne du Massif Central, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2003
32. Tuduri J., Processus de formation et relations spatio-temporelles des minéralisations à or et argent en contexte volcanique Précambrien (Jbel Saghro, Anti-Atlas, Maroc). Implications sur les relations déformation-magmatisme-volcanisme-hydrothermalisme, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2005
33. Turmeaux T., Contraintes et fouille de données, Thèse de Doctorat d'Université, Université d'Orléans, avril, 2004.
34. Vanherpe J-M., Vers une décomposition modulaire des graphes bipartis, Habilitation à diriger des recherches. LIFO, Université d'Orléans, décembre, 2003
35. Vieu Erwann, « Dissection du mécanisme de terminaison/antiterminaison au niveau du terminateur TR1 du phage lambda : application à l'étude des complexes ARN-protéine in vivo », Centre de Biophysique Moléculaire, Université d'Orléans, 2004
36. Volland-Tuduri N., Nature et mode d'assemblage des constituants minéraux et organiques dans des Ferralsols de la région des Cerrados (Brésil). Evolution après mise en culture, Institut des Sciences de la Terre d'Orléans, Université d'Orléans, 2005
37. Vuotto J., Langages d'arbres réguliers et algébriques pour la réécriture et la vérification, Thèse de Doctorat d'Université, Université d'Orléans, décembre, 2004.

Collaborations nationales et internationales du laboratoire

- ✓ Projet ACI Sécurité SATIN « Analyse de la Sécurité pour des Protocoles et Infrastructures de Confiance » (2004-2007), coordinateur LORIA, participants : LIFO, LORIA (Nancy), LIFC (Lille), IRISA (Rennes), CEA-DAM, France Telecom R&D
- ✓ Projet ACI Jeunes Chercheurs « Programmation parallèle certifiée » (2004-2007), coordinateur Frédéric Louergue (LIFO)
- ✓ Projet ACI Masses de données BIOTIM « Exploitation de Gisements Texte-Image en Biodiversité » (2003-2006), coordinateur , participants : LIFO, INRIA, INRA, CNAM, IRD
- ✓ Projet RNTL Geobench (2002-2003), coordinateur BRMG, participants: LIFO, INRIA Grenoble, CEA et TGS Europe
- ✓ Projet ACI Grid Caraml (2002-2004), coordinateur LIFO, participants : LIFO, INRIA, PPS (Paris 7), et LACL (Paris 12)


Informations complémentaires jugées nécessaires

Cette demande d'équipement se fait dans l'optique d'une demande de financement en réponse au second appel d'offre de l'Agence Nationale de la Recherche sur le programme « Calcul intensif et grille de calcul ». Le projet en préparation s'intitule « : Calcul Haute Performance et Modélisation à Orléans-Tours » (CHaMOT).

La recherche de pointe moderne, dans la plupart des disciplines, fait appel à des démarches de modélisation et de simulation numérique qui utilisent des outils souvent très sophistiqués et requièrent des compétences de plus en plus pointues et variées (informatique, mathématiques appliquées, connaissance des domaines d'applications).

Dans le prolongement des actions menées depuis 2000 à Orléans-Tours (notamment le PPF Calcul scientifique et modélisation des universités d'Orléans et de Tours), le projet CHaMOT vise ainsi à réunir un ensemble de 10 laboratoires d'Orléans et Tours et à leur donner les moyens humains et des compléments d'équipement pour mener des recherches pluridisciplinaires dans les thèmes suivants : milieux poreux et processus d'ablation et de déposition, dépôt par procédé plasma, simulation moléculaire, astrophysique, chromatographie, dynamique dans les milieux désordonnés. Les aspects informatiques abordés, constituant une contribution transversale, comprendront : l'amélioration et l'extension de nos bibliothèques portables et extensibles de haut-niveau, le développement de bibliothèques applicatives, la tolérance aux pannes et l'ordonnancement de travaux dans les grilles de calcul.

Dans le cadre de ce projet, nous prévoyons que l'équipement de la présente demande soit interconnecté avec d'autres moyens de calcul sur les campus d'Orléans et Tours, formant à terme une grille de calcul de taille conséquente en Région Centre.

<p>Fait à Orléans, le 3 octobre 2005</p> <p>Signature du demandeur :</p>  <p>Frédéric LOULERGUE</p>	<p>Fait à Orléans, le</p> <p>Responsable du laboratoire :</p> <p>Stéphane CORDIER</p>
--	---

<p>Fait à Orléans, le</p> <p>Signature du Directeur de la composante</p> <p>René ERRE</p>	<p>Fait à Orléans, le</p> <p>Le Président de l'Université d'Orléans</p> <p>Gérald GUILLAUMET</p>
---	--



Nom: Frederic Loulergue N° de Devis: BR2180-3446234
 Nom de l'entreprise: Université d'Orléans Votre contact chez Dell: _____
 Votre numéro de téléphone: 02 54 41 72 87 Numéro de compte: _____
 Date: 11/3/2005
 Adresse:
 Adresse de facturation:

Type de produit	Quantité	Prix unitaire	Coût Total
PowerEdge™ 2800	8	2559,00 EUR	20472,00 EUR

Caractéristiques communes

Supporte les derniers Bi-Processeur Intel® Xeon™ avec 2Mo de cache L2 avec la technologie Hyper-Threading et Intel® EM64T
 Chipset Intel® E7520 haute performance - 800MHz front side bus
 Jusqu'à 12 Go de Mémoire SDRAM ECC DDR2 à 400Mhz.
 Contrôleur intégré Ultra 320 SCSI (LSI logic 53C1020)
 Contrôleur Gigabit NIC (Intel 82541)
 7 slots au total : 2x hot-pluggable PCI Express slots (1 x4 et 1 x8) - 4x PCI-X 64 bit/133MHz , 1x32 bit/33MHz PCI (5V)
 Contrôleur SCSI (LSI logic 53C1030) Ultra 320 LVD
 Capacité de stockage : jusqu'à 8 disques durs SCSI hot-plug Ultra320
 Alimentation Hot Plug redondante en option
 Contrôleur RAID CERC SATA en option
 Accès sécurisé et facilité du châssis
 Support "Getting Started" de 30 jours pour les nouvelles installations
 Commandez votre système d'exploitation chez DELL et il sera installé gratuitement à l'usine
 Service Dell OpenManage permettant une installation automatique et rapide du système d'exploitation et administration complète du réseau avec l'assistant IT

Extensions de garantie

BRONZE 3 ans J+1 intervention sur site (-EUR - 981,00 EUR)

Choix du châssis

Châssis Tour

Kit de mise en rack

Aucun

Bezel

Châssis Tour

Alimentation Hot Plug

Option châssis non redondant

Processeur

Bi-processeur Intel® Xeon™ à 3.0 GHz avec 2Mo de cache L2 (+ EUR 400,00 EUR)

Mémoire

2 Go DDR2 SDRAM à 400 Mhz (2x1Go) (+ EUR 460,00 EUR)

Protection avancée de la mémoire

Lecteur de disquettes

Aucun
Lecteurs CD et DVD
Lecteur CD-ROM 24x
Emplacement pour disques durs
Backplane avec capacité de 1x 8 disques durs
Prise externe USB
1er Disque Dur
Disque dur 73Go (10 000 tpm) SCSI U320 - 80 broches
2ème Disque Dur
Aucun
3ème Disque Dur
Aucun
4ème Disque Dur
Aucun
5ème Disque Dur
Aucun
6ème Disque Dur
Aucun
7ème Disque Dur
aucun
8ème Disque Dur
aucun
Disque dur interne supplémentaire (Media Bay)
aucun
Contrôleur Raid ou SCSI
Aucun
2nd Contrôleur Raid ou SCSI
aucun
Configuration du disque dur
Connectivité Raid IDE Complex
C8 RAID 0 pour disque interne, RAID 1 disque dur Media Bay, contrôleur intégré
Système d'exploitation
Aucun
Système d'exploitation non installé
Aucun
Licences supplémentaires pour Microsoft® Windows®
Aucun
Microsoft SLQ Server
Aucun

Microsoft Operations Manager
Aucun
Unité de sauvegarde PowerVault (TBU)
Aucun *
Cartouches pour les unités de sauvegarde PowerVault
Aucun
Logiciel de sauvegarde
Aucun
Logiciel de sauvegarde (CommonVault) *
Aucun
Carte réseau supplémentaire
Aucune
Carte riser HBA
Aucune
Modem
Aucun
Administration à distance
Option sans solution d'administration à distance
Souscription au Service OpenManage
Pas de Souscription
Moniteur *
Aucun
Souris
Aucune
Clavier
Aucun
Commutateurs PowerConnect™ *
Aucun
Onduleur *
Aucun
Documentations
Documentation papier non incluse (Version électronique sur le CD de DELL) *
Services d'installation
Aucun
Option de service d'installation
Option de service d'installation (hors des heures ouvrées)
Pack de résolutions logicielles supplémentaires
Aucun

Commentaires	Informations sur la livraison	
	Prix HT	632,00 EUR
	Taux de TVA	19.6%
	Prix TTC	755,87 EUR
	Votre panier	
	Total HT Transport inclus	21104,00 EUR
Total TTC, Transport inclus	25240,38 EUR	

Vos commentaires:

Signature:

Devis réalisé aux conditions de vente Dell. Devis valide pendant 30 jours

France Systèmes

L'équilibre informatique

France Systèmes
154 avenue du Général de Gaulle
92140 Clamart
Tel. 02 99 83 05 70
Fax. 02 99 83 05 71
SAV. 01 46 01 73 75
<http://www.francesystemes.com>

- . Internet / intranet
- . Bureautique & PAO
- . Réseaux & Communications
- . Gestion & Comptabilité
- . Fournitures & Consommables
- . Audit de parc
- . Délégation de personnel
- . Location
- . SAV & Maintenance



Apple Center

Centre de Services Agréé

Solution Expert Education

UNIVERSITE D'ORLEANS

M. LOULERGUE FREDERIC
RUE LEONARD DE VINCI
45067 ORLEANS CEDEX

Le Plessis Robinson, le 3 novembre 2005

Nous vous prions de trouver ci-joint votre devis n° : 2511122

Téléphone :

Télécopie :

N° client France Systèmes : 1155

Offre valable 30 jours.

02 38 41 72 87

0238417137

Code	Désignation	Qté	P.U. Brut	-%	P.U. Net	Montant HT
M9590F/A	PM G5 dual 2,0 Ghz/512Mo/160Go/SD 16x/GeForce 6600LE 128Mo Livré avec Mac OS X v10.4 et iLife '05 Livré avec un clavier Apple KeyBoard USB et une souris Apple USB mighty mouse.	8	1.738,29	9	1.581,84	12.654,75 EU
S/AP-G5DDR2/ 2GB	Kit 2 Go DDR2 non ECC PC2-4200 533 Mhz 128bits pour PM G5 Soit 2,5 Go de Ram au total, installation gratuite dans les PM G5 avant expédition.	8	326,00	32	221,68	1.773,44 EU
849010	Livraison : Franco de port Disponible sous 1 semaine	1				

Mode de Règlement:

Virement bancaire.

Pour toute commande, nous vous demandons de joindre un R.I.B et votre n° SIRET et APE.

Restant à votre disposition pour tout complément d'information.

Je vous prie de croire, en mes respectueuses salutations.

Merci d'indiquer le numéro de ce devis sur votre bon de commande

Escompte :

Total H.T. : 14.428,19 EU

T.V.A 19,60 : 2.827,93 EU

Total T.T.C. : 17.256,12 EU

Soit en Francs : 113.192,73 FF

Hervé Mainguet ingénieur commercial
mainguet.h@francesystemes.fr

France Systèmes
Votre partenaire informatique

SA à directoire au capital de 419 234 € RCS Nanterre B384 474 151 - TVA FR 24 384 474 151 APE 518 G



Devis valable 1 mois sous réserve de modifications tarifaires et de disponibilité du produit. Minimum de commande 50 Euros HT

Inmac
ZI Paris Nord II,
125, avenue du bois de la Pie,
95921,
Roissy en France Cedex,

Tél : 0826 109 101
email : ventes@inmac.fr
FR388055493

Proposition Commerciale

A:

Utilisateur non inscrit

-
-
-
-
-
-

Référence Inmac : : **NTQ117890**
Date de création : **4 Novembre 2005**
Valable jusqu'au : **9 Novembre 2005**

Réf.	Désignation	P.U. HT	Qté	Total
E476646	N # 3COM SWITCH BASELINE 2824 24*10/100/1000BT	690,00 €	1	690,00 €
Total:				690,00 €
Port				20,00 €
TVA				139,16 €
Total TTC:				849,16 €

Inmac - 125 av du bois de la pie - 95921 - Roissy CDG



Nom: Frederic Loulergue N° de Devis: BR2172-3447646
 Nom de l'entreprise: Votre contact chez Dell: _____
 Votre numéro de téléphone: 02 38 41 72 87 Numéro de compte: _____
 Date: 11/4/2005
 Adresse:
 Adresse de facturation:

Type de produit	Quantité	Prix unitaire	Cout Total
PowerEdge™ 2800	2	6939,00 EUR	13878,00 EUR

Caractéristiques communes

Supporte les derniers Bi-Processeur Intel® Xeon™ avec 2Mo de cache L2 avec la technologie Hyper-Threading et Intel® EM64T
 Chipset Intel® E7520 haute performance - 800MHz front side bus
 Jusqu'à 12 Go de Mémoire SDRAM ECC DDR2 à 400Mhz.
 Contrôleur intégré Ultra 320 SCSI (LSI logic 53C1020)
 Contrôleur Gigabit NIC (Intel 82541)
 7 slots au total : 2x hot-pluggable PCI Express slots (1 x4 et 1 x8) - 4x PCI-X 64 bit/133MHz , 1x32 bit/33MHz PCI (5V)
 Contrôleur SCSI (LSI logic 53C1030) Ultra 320 LVD
 Capacité de stockage : jusqu'à 8 disques durs SCSI hot-plug Ultra320
 Alimentation Hot Plug redondante en option
 Contrôleur RAID CERC SATA en option
 Accès sécurisé et facilité du châssis
 Support "Getting Started" de 30 jours pour les nouvelles installations
 Commandez votre système d'exploitation chez DELL et il sera installé gratuitement à l'usine
 Service Dell OpenManage permettant une installation automatique et rapide du système d'exploitation et administration complète du réseau avec l'assistant IT

Extensions de garantie

BRONZE 3 ans J+1 intervention sur site (-EUR - 981,00 EUR)

Choix du châssis

Châssis Tour

Kit de mise en rack

Aucun

Bezel

Châssis Tour

Alimentation Hot Plug

Option châssis non redondant

Processeur

Nouveau Dual Core bi - processeurs Dual-Core Intel® Xeon™ à 2.8GHz avec 2x2Mo L2 cache Recommandé par DELL (+ EUR 2300,00 EUR)

Mémoire

8 Go DDR2 SDRAM à 400 Mhz (4x2Go) Double rangée (+ EUR 2230,00 EUR)

Protection avancée de la mémoire

Lecteur de disquettes

Aucun

Lecteurs CD et DVD

Lecteur DVD-ROM 8x IDE (+ EUR 80,00 EUR)
Emplacement pour disques durs
Backplane avec capacité de 1x 8 disques durs
Prise externe USB
1er Disque Dur
Disque dur 146Go (10 000 tpm) SCSI U320 - 80 broches Recommandé par DELL (+ EUR 210,00 EUR)
2ème Disque Dur
Disque dur 146Go (10 000 tpm) SCSI U320 - 80 broches Recommandé par DELL (+ EUR 420,00 EUR)
3ème Disque Dur
Aucun
4ème Disque Dur
Aucun
5ème Disque Dur
Aucun
6ème Disque Dur
Aucun
7ème Disque Dur
aucun
8ème Disque Dur
aucun
Disque dur interne supplémentaire (Media Bay)
aucun
Contrôleur Raid ou SCSI
Aucun
2nd Contrôleur Raid ou SCSI
aucun
Configuration du disque dur
C3 RAID 1 utilisant un contrôleur intégré - min 2 disques durs identiques
Connectivité Raid IDE Complex
C8 RAID 0 pour disque interne, RAID 1 disque dur Media Bay, contrôleur intégré
Système d'exploitation
Aucun
Système d'exploitation non installé
Aucun
Licences supplémentaires pour Microsoft® Windows®
Aucun
Microsoft SLQ Server
Aucun
Microsoft Operations Manager
Aucun
Unité de sauvegarde PowerVault (TBU)
Aucun *

Cartouches pour les unités de sauvegarde PowerVault
Aucun
Logiciel de sauvegarde
Aucun
Logiciel de sauvegarde (CommonVault) *
Aucun
Carte réseau supplémentaire
Aucune
Carte riser HBA
Aucune
Modem
Aucun
Administration à distance
Option sans solution d'administration à distance
Souscription au Service OpenManage
Pas de Souscription
Moniteur *
Aucun
Souris
Aucune
Clavier
Aucun
Commutateurs PowerConnect™ *
Aucun
Onduleur *
Aucun
Documentations
Documentation papier non incluse (Version électronique sur le CD de DELL) *
Services d'installation
Aucun
Option de service d'installation
Option de service d'installation (hors des heures ouvrées)
Pack de résolutions logicielles supplémentaires
Aucun

Commentaires	Informations sur la livraison	
	Prix HT	158,00 EUR
	Taux de TVA	19.6%
	Prix TTC	188,97 EUR
	Votre panier	
	Total HT Transport inclus	14036,00 EUR
Total TTC, Transport inclus	16787,06 EUR	

Vos commentaires:

--

Signature:

--

Devis réalisé aux conditions de vente Dell. Devis valide pendant 15 jours
