

# Le projet CaSciModOT

## Calcul Scientifique Modélisation Orléans-Tours

Yann Jullian (CaSciModOT, Tours), Sten Madec (LMPT,  
Tours), Romain Yvinec (INRA, Tours)

25 avril 2017



## Calcul Scientifique et Modélisation Orléans-Tours

### Constat :

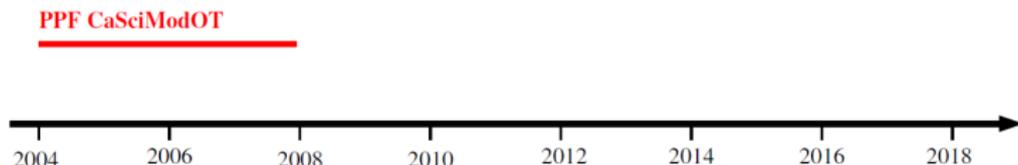
- ▶ Les modélisateurs et simulateurs sont souvent isolés dans leur laboratoire ;

### But :

- ▶ Créer un **lieu d'échanges et de partage** pour les acteurs de la modélisation et du calcul scientifique en région Centre Val de Loire ;
- ▶ Aider au montage de **projets pluridisciplinaires** ;
- ▶ Contribuer à la **formation** et l'auto-formation ;
- ▶ **Mutualiser** les outils de calcul scientifique (Centre de calcul) ;

# Historique

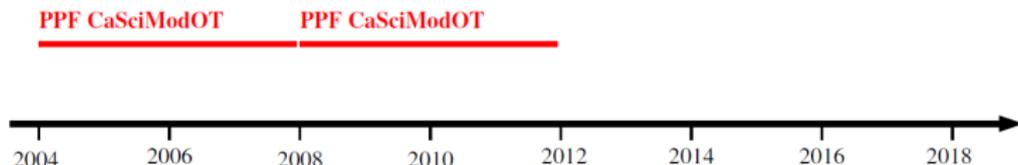
Un projet fédérateur qui s'inscrit dans la durée :



- ▶ **10** Laboratoires (U. Tours et Orléans)
- ▶ Resp.
  - ▶ S. Cordier (MAPMO, Orléans)
  - ▶ G. Barles (LMPT, Tours)

# Historique

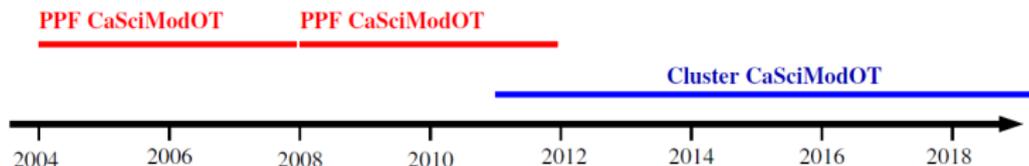
Un projet fédérateur qui s'inscrit dans la durée :



- ▶ **19** Laboratoires (U. Tours et Orléans, INRA, BRGM)
- ▶ Resp.
  - ▶ J.-L. Rouet (ISTO, Orléans)
  - ▶ P. Martineau (LI, Tours)

# Historique

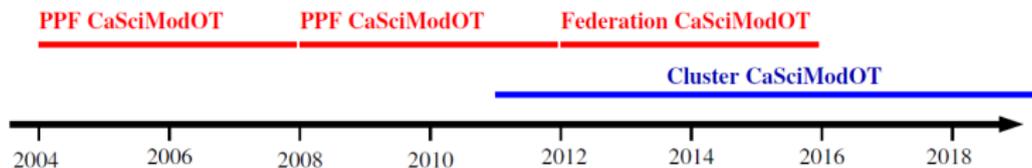
Un projet fédérateur qui s'inscrit dans la durée :



- ▶ Soutenue par la Région centre-Val de Loire
- ▶ Resp.
  - ▶ J.-L. Rouet (ISTO, Orléans)
- ▶ Administrateur
  - ▶ L. Catherine (Osuc, Orléans)

# Historique

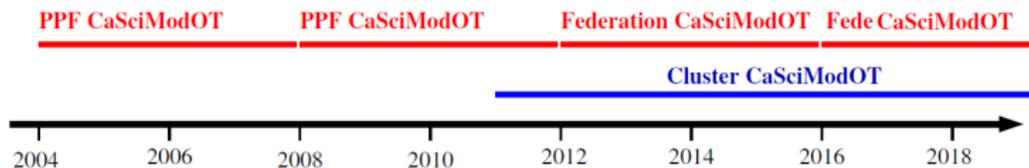
Un projet fédérateur qui s'inscrit dans la durée :



- ▶ **28** Laboratoires (U. Tours et Orléans, INRA, BRGM, CNRS, CEA)
- ▶ Resp.
  - ▶ J.-L. Rouet (ISTO, Orléans)
  - ▶ P. Martineau (LI, Tours)
- ▶ **Maison Interdisciplinaire des Systèmes Complexes (MISC)**
- ▶ **2 Postes d'ingénieur d'étude :**
  - ▶ Y. Jullian (CaSciModOT, Tours)
  - ▶ G. Chevrot (MISC, Orléans)

# Historique

Un projet fédérateur qui s'inscrit dans la durée :



- ▶ Resp.
  - ▶ J.-L. Rouet (ISTO, Orléans)
  - ▶ R. Yvinec (INRA, Tours)
- ▶ 3 pôles :
  - ▶ **Maison de la modélisation** : S. Robert (LIFO, Orléans) et S. Madec (LMPT, Tours)
  - ▶ **Centre de Calcul Scientifique (CCSC)** : J.-L. Rouet (ISTO, Orléans) et Y. Jullian (CaSciModOT, Tours)
  - ▶ Cellule **valorisation** : S. Cordier (Mapmo, Orléans)



# Pilotage

- ▶ Un bureau exécutif (Resp. + animateurs de pôles + invités);
- ▶ Un comité de pilotage;
  - ▶ Anne Duittoz (INRA et U. Tours);
  - ▶ Guy Barles (LMPT, U. Tours);
  - ▶ Fabrice Dupros (BRGM);
  - ▶ Léopold Sanchez (INRA);
  - ▶ Jean-Louis Rouet (ISTO, U. Orléans);
  - ▶ Gerald Kneller (BRGM, U. Orléans);
  - ▶ Marc Massiot (CNRS, Cemthi);
  - ▶ Pascal Brault (CNRS, Gremi);
  - ▶ Patrick Martineau (LI, U. Tours);
  - ▶ Philippe Simonetti (CEA, le Ripault);
  - ▶ Sophie Robert (LIFO, U. Orléans);
  - ▶ Gilles Theureau (Nancay, CNRS).
- ▶ Un comité scientifique;
  - ▶ Le comité de pilotage
  - ▶ Laurent Desbat (Univ. J. Fourier);
  - ▶ Jacques Laskar (Obs. Paris);
  - ▶ Jean-Philippe Nominé (CEA).

# Animation Scientifique

- ▶ Journées **scientifiques** bi-annuelles ;
  - ▶ 25 journées ont eu lieu
  - ▶ fréquentation 50-80 personnes
  - ▶ Prochaine journée : Jeudi 22 Juin sur le thème "Données de terrain et modèles : une interaction à double sens".

# Animation Scientifique

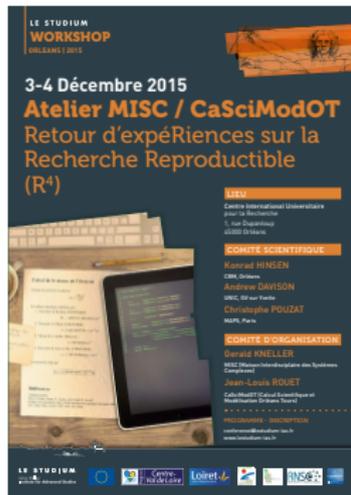
- ▶ Journées **scientifiques** bi-annuelles ;
- ▶ Dynamique créée autour de **projets pluridisciplinaires**
  - ▶ TempoGnRH (Neuroscience)
  - ▶ MODINGRE (modélisation des aliments dans l'intestin grêle)
  - ▶ PROTDYN (repliements de protéines)
  - ▶ VITAMINES (Econométrie Spatiale)
  - ▶ DIASEMIE (Sciences du langage)
  - ▶ FullSwift (Equations de Saint-Venan)
  - ▶ ...

# Animation Scientifique

- ▶ Journées **scientifiques** bi-annuelles ;
- ▶ Dynamique créée autour de **projets pluridisciplinaires**
- ▶ Aide au **calcul scientifique**, écriture de **code** (Y. Jullian)
  - ▶ HYDRO / T-NET (température de cours d'eaux)
  - ▶ Eutrophisation (biogéochimie des cours d'eaux)
  - ▶ Surplus (rejet d'azote)
  - ▶ HYPE (Réactions biochimiques)
  - ▶ DOCK (Assemblage de protéines)
  - ▶ INLM (Imagerie)
  - ▶ Dynamique moléculaire
  - ▶ ...

# Animation Scientifique

- ▶ Journées **scientifiques** bi-annuelles ;
- ▶ Dynamique créée autour de **projets pluridisciplinaires**
- ▶ Aide au **calcul scientifique**, écriture de **code**



- ▶ Réflexion et Retours d'expéRience sur la **Recherche Reproductible** ;

# Formation et Communication

- ▶ Module de l'école **doctorale** Énergie - Matériaux - Sciences de la Terre et de l'Univers (EMSTU) ;
- ▶ Ateliers **développeurs**
- ▶ **Initiation** aux langages R et Python, à la programmation des cartes graphique.
- ▶ Séances de **formation** à l'utilisation du CCSC
- ▶ **Exposition** "Modéliser et Simuler" à destination des scolaires.

# Renforcer la dynamique de réseaux

- ▶ projet région MISC
- ▶ adhésion au Rencontres Nationales des Systèmes Complexes (RNSC) ;
- ▶ correspondant Agence-Maths-Entreprises (AMIES) ;
- ▶ adhésion à equip@meso.
- ▶ Valorisation, relations avec des entreprises (Neodym, IBM, GeoHyd, Thelem, Nouma...)

# Centre de Calcul Scientifique en région Centre (CCSC)



# Centre de Calcul Scientifique en région Centre (CCSC)

## ▶ Objectifs

- ▶ mettre à la disposition de la communauté des numériciens de la région Centre–Val de Loire des **moyens de calcul mutualisés**
  - ▶ hautes performances → tremplin vers les centres nationaux, voire européens ;
  - ▶ facilement adaptables et utilisables ;
- ▶ aider à la **formation des utilisateurs** :
  - ▶ atelier-développeurs ;
  - ▶ formations à l'utilisation du centre de calcul (3 en 2015) ;
  - ▶ formations (Maison de la Simulation, <http://formation-calcul.fr/>) ;

## CENTRE DE CALCUL SCIENTIFIQUE EN RÉGION CENTRE (CCSC)

L'infrastructure et les moyens de calcul mutualisés du CCSC sont financés par :



Le CCSC est cofinancé par l'Union européenne, l'État et l'engagement de la Région Centre avec le Fonds européen de développement régional.



Labex CAPRI/SSES  
Centre National de la Recherche Scientifique  
pour l'Analyse et l'Optimisation des Programmes (ANAO) et le CNRS



## Logiciels, compilateurs ...

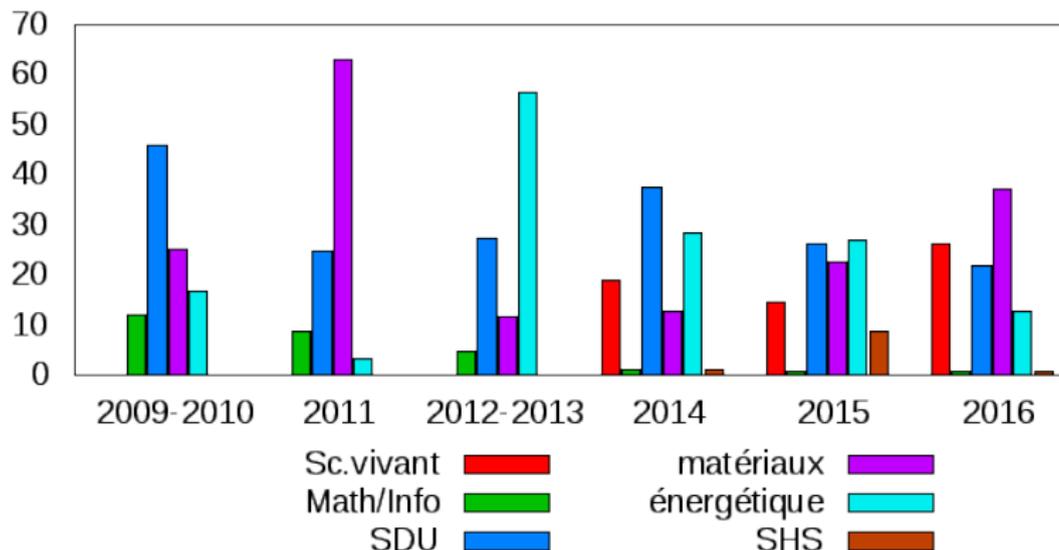
- ▶ Suite Intel ;
- ▶ Fluent (Icare, Prisme) ;
- ▶ Openfoam (Icare) ;
- ▶ Comsol (Prisme, ICMN) ;
- ▶ Abaqus (Prisme) ;
- ▶ Vasp (Cemhti) ;
- ▶ CASTEP (Cemhti) ;
- ▶ Quantum Espresso (Cemhti) ;
- ▶ Amber (ICOA) ;
- ▶ Runtime Matlab ;
- ▶ R (version R MPI) ;

# Utilisation du CCSC : CPU

Pour 2016

- ▶ 200 000 jobs ;
- ▶ 7 millions d'heures CPU ;
- ▶ 17 laboratoires et 133 comptes ;
- ▶ taux d'utilisation de la machine : 70%

## Utilisation du CCSC : par champs disciplinaire/labos

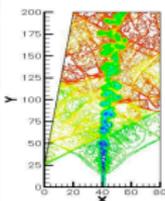
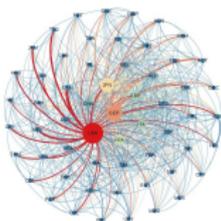
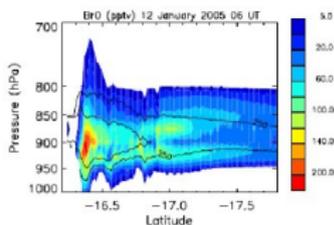


- ▶ Science du vivant : CBM, ICOA, BBV
- ▶ Math/Info : MAPMO, LIFO, LMPT, LI
- ▶ matériaux : CEMHTI, ICMN, GREMAN

- ▶ SDU : ISTO, LPCEE
- ▶ fluide : ICARE, PRISME
- ▶ SHS : LÉO

# Utilisation du CCSC : exemples

- ▶ LPCEE : impact des émissions volcaniques avec CCATT-BRAMS... ;
- ▶ LÉO : sélection d'une matrice d'interaction en économie spatiale, application à des modèles de croissance ;
- ▶ BBV : Exploiting *Catharanthus roseus* transcriptome resources to elucidate the biosynthesis of monoterpene indole alkaloids ;
- ▶ ICARE : Code WENO pour l'étude des jets turbulents compressible ;
- ▶ GREMAN : organisation de cristaux liquides et simulation Monte Carlo ;
- ▶ MAPMO/INRA : modélisation du ruissellement sur un champ à l'écoulement dans une rivière ;



## Bilan du CCSC : production scientifique

années	comptes	articles	présentations	posters	labos
2007-2009	40	5	7	–	>7
2010-2011	68	6	10	3	10
2012-2013	110	23	40	7	15
2014	58	6	17	7	12
2015	102	14	23	12	12
2016	133	15	30	29	17

# Éléments du budget

Dotation annuelle de l'université de Tours :  
10 k€

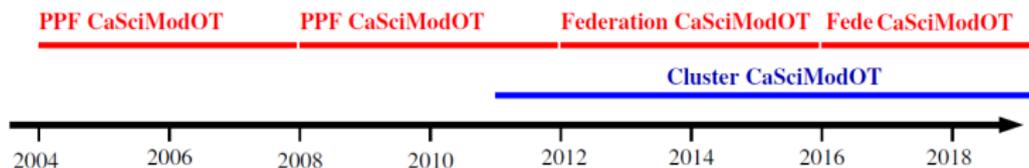
- ▶ Animation scientifique
- ▶ Stages
- ▶ Mission, Déplacements
- ▶ Aide au CCSC

Dotation annuelle de  
l'université d'Orléans :  
15 k€

budget (fonctionnement)  
du Cluster (sur 3  
1/2ans) : 110 k€

# A ce Jour

Un projet fédérateur qui s'inscrit dans la durée :



- ▶ fédération des universités d'Orléans et de Tours à laquelle sont associés le CNRS, l'INRA, le BRGM, le CEA ;
- ▶ 34 partenaires (labos, fédérations, équipes . . . ) ;
- ▶ Mailing liste de plus de 400 abonnés.



## Pérenniser la fédération CaSciModOT et le CCSC :

- ▶ *Poursuivre la dynamique de réseaux* : au niveau régional (RTR, ARITT, Studium, Centre Science), national (RNSC, Equip@meso) et international (Complex system Digital Campus)
- ▶ *Poursuivre la mutualisation des moyens de calcul haute performance* : indispensables aux recherches menées en région Centre-Val de Loire.
- ▶ *Développer un programme d'actions auprès des PME*

## Les actions :

- ▶ *Maison de la modélisation* : (S. Robert (LIFO, Orléans) et S. Madec (LMPT, Tours))
  - ▶ l'animation scientifique (journées, colloques, workshops, groupes de travail...)
  - ▶ la coordination des formations (continue, doctorale, master...)
  - ▶ un hôtel à projets (incubateurs de projets ANR ou ERC, collaboration industrielle)
  - ▶ création d'un poste d'IR au service des projets issus des labo membres de CaSciModOT.

## Les actions :

- ▶ *Maison de la modélisation* :
- ▶ *Centre de Calcul Scientifique CCSC* : (J.-L. Rouet (ISTO, Orléans) et Y. Jullian (CaSciModOT, Tours))
  - ▶ mutualisation des ressources de calcul
  - ▶ formation au calcul HP
  - ▶ renouvellement des machines (nécessaire en 2019, financement encore non assuré)
  - ▶ Création de poste d'IE.

## Les actions :

- ▶ *Maison de la modélisation* :
- ▶ *Centre de Calcul Scientifique CCSC* :
- ▶ *Valorisation* ( S. Cordier (Mapmo, Orléans))
  - ▶ relation avec le tissu des entreprises : nouer des contacts avec les entreprises dans les domaines de la modélisation, la simulation numérique, la gestion des grands volumes de données.

**Budget prévisionnel** : (hors renouvellement des machines principales du CCSC)

Budget	25 k€
Matériel CCSC	3 k€
Maintenance CCSC (logiciel et infrastructure)	7 k€
Participation aux réseaux (RNSC, equip@meso), déplacements	2 k€
Soutiens aux stages	6 k€
Formation / Consulting / Ecoles	3 k€
Journées scientifiques bi-annuelles	2 k€
Participation à l'organisation de conférence	2 k€

Merci de votre attention

