

## MESOCENTRE DE CALCUL DE FRANCHE-COMTE

### Bilan de l'année 2014

Laurent PHILIPPE

Directeur du mésocentre de calcul de Franche-Comté  
Université de Franche-Comté  
25030 Besançon cedex  
[mail :laurent.philippe@univ-fcomte.fr](mailto:laurent.philippe@univ-fcomte.fr)

Le mésocentre de calcul de Franche-Comté a été créé en 2009 par l'Université de Franche-Comté, en collaboration avec l'Université Technologique de Belfort-Montbéliard et l'École Nationale Supérieure de Mécanique et des Micro-techniques et avec le soutien financier de la Région de Franche-Comté. Il a pour objectif de mettre à disposition des trois établissements des moyens de calcul haute performance (HPC) et de diffuser regionalement la culture du HPC. Il répond aux besoins de l'enseignement et de la recherche pour la simulation numérique, le calcul ou l'optimisation de systèmes de grande taille.

Ce document dresse un bilan synthétique de l'activité du mésocentre de calcul pour l'année écoulée.

### **1. Résultats scientifiques :**

Nous avons choisi de commencer ce bilan par quelques résultats scientifiques marquants obtenus grâce au support du mésocentre, tant à travers la mise à disposition de ressources qu'à travers son expertise du calcul haute-performance. Ces résultats démontrent l'intérêt scientifique d'un service tel que le mésocentre de calcul et l'importance grandissante de la simulation numérique dans la recherche.

#### ***1. Utilisation de la dynamique moléculaire dans le domaine bio-médical :***

Dans cette étude, plusieurs types de molécules PEG (Polyéthylène Glycol) ont été étudiés par dynamique moléculaire. L'objectif était de comprendre le fonctionnement d'insertion d'une molécule dans une nanocapsule afin d'ouvrir la voie à des nouvelles méthodes de transfert de molécules thérapeutiques dans le corps humain. Les molécules PEG peuvent diffuser dans une capsule lorsque leur poids moléculaire est plus faible que 1000M jusqu'à une taille du nanopore de

4nm. Dans une situation différente, elle s'accroche aux parois externes du nanopore et refuse l'entrée, comme le montre, sur la figure suivante, la simulation de diffusion du PEG 3000 dans un pore de 4nm.

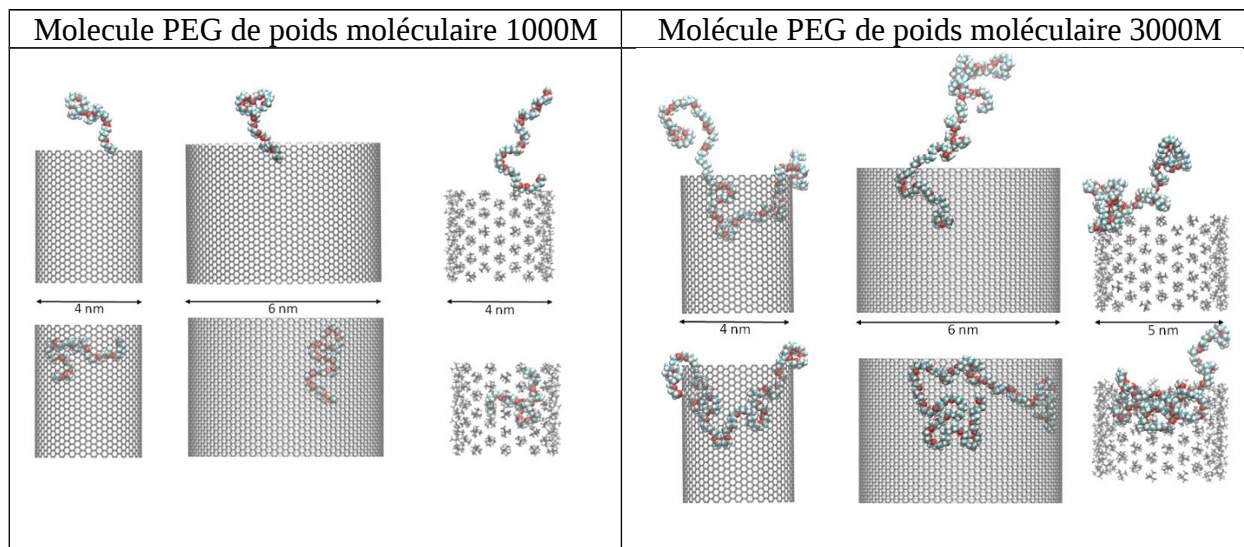


Fig. 1 Simulations par dynamique moléculaire de la diffusion de molécules de Polyéthylène Glycol (PEG) au sein d'un nanopore hydrophobe de différents diamètres (ou propriétés physiques).

Expérimentalement, la diffusion de ces particules n'a pu être observée, pour des raisons techniques, qu'à la condition qu'elle soit chargée. Mais les conclusions de l'étude étaient similaires à celle de la simulation. La simulation prend donc ici toute son importance puisqu'elle intervient maintenant en amont de l'expérience pour prédire les conditions idéales d'insertion. Tout est à présent réuni pour avancer le projet vers l'application médicale.

Ce travail est publié dans le journal international : **Physical Chemistry Chemical Physics**  
 « *Experimental and simulation studies of unusual current blockade induced by translocation of small oxidized PEG through a single nanopore* », S. Cabello-Aguilar, A. Abou Chaaya, F. Picaud M. Bechelany, C. Pochat-Bohatier, S. Yesylevskyy, S. Kraszewski, M. C. Bechelany F. Rossignol, E. Balanzat, JM. Janot, P.Miele, P. Dejardin and S. Balme, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2014,16, 17883-17892, DOI: 10.1039/C4CP01954G

## 2. Apport des graphes paysagers pour améliorer la connectivité d'un réseau :

Parmi les priorités du Grenelle de l'environnement, figure la préservation de la connectivité paysagère par la mise en place de réseaux écologiques intégrés dans les documents de planification (Trame Verte et Bleue). Pour réduire la fragmentation et la vulnérabilité des habitats naturels et des populations animales, l'une des actions possibles est la création de nouveaux habitats pour renforcer le réseau. La question qui se pose aux aménageurs est « où créer ces nouvelles taches d'habitat pour maximiser la connectivité ? ».

Nous avons mis en place un protocole systématique et cumulatif pour ajouter de nouvelles taches d'habitat à un réseau de mares dans le cadre de la conservation d'amphibiens. La modélisation par les graphes paysagers permet d'inclure la connectivité à l'échelle régionale comme un critère à

maximiser. La méthode consiste à appliquer sur un graphe une grille d'échantillonnage d'une résolution donnée et à calculer le taux de variation d'une métrique de connectivité après l'ajout de chaque tache. Après le test de toutes les cellules, celle qui entraîne la plus forte augmentation de la métrique est validée. L'opération est répétée jusqu'au nombre souhaité de nouvelles taches d'habitat à créer. Les résultats fournissent des informations sur les zones stratégiques pour améliorer la connectivité d'un réseau et sur le nombre minimum de nouvelles taches d'habitat à créer pour atteindre un seuil donné d'amélioration. L'utilisation du mésocentre a permis de tester la sensibilité des résultats issus du calcul d'ajout de taches en fonction de plusieurs paramètres de la modélisation : taille de la grille d'échantillonnage, seuillage du graphe et métrique de connectivité utilisée.

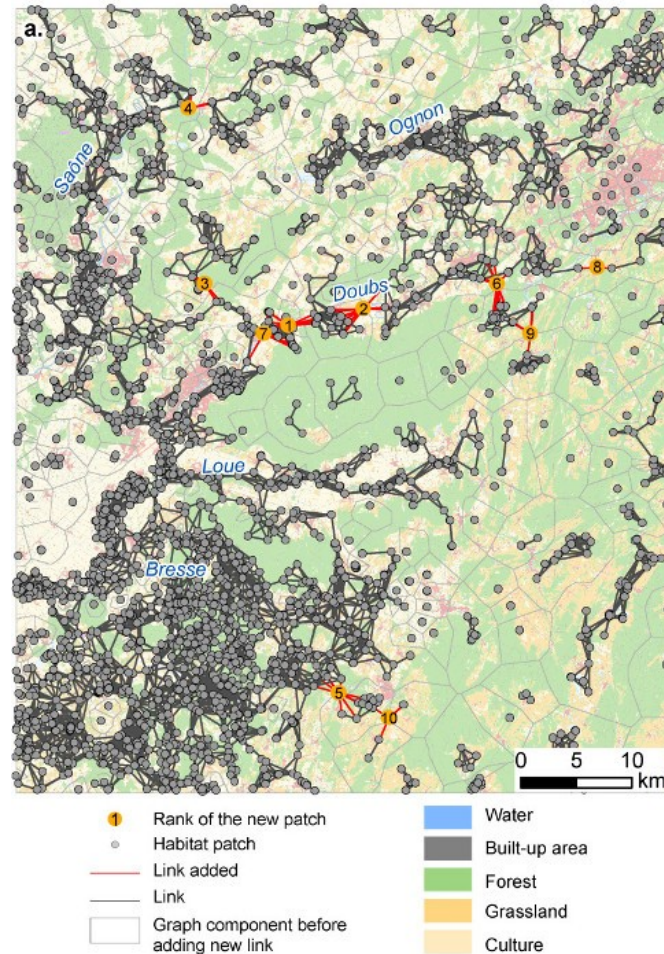


Fig 2. grille d'échantillonnage pour la région de Besançon

Ce travail a été publié dans le journal international : **Journal for Nature Conservation** « *Integrating Regional-Scale Connectivity in Habitat Restoration: An Application for Amphibian Conservation in Eastern France.* », C. Clauzel, C. Bannwarth, and J.-C. Foltete, Journal for Nature Conservation. [doi:10.1016/j.jnc.2014.07.001](https://doi.org/10.1016/j.jnc.2014.07.001)

### **3. Investigation des meilleures techniques de prédiction de séquences codantes et de leur clustering sous forme de gènes**

Entre 1997 et 2009, 250 patients de l'hôpital de Besançon ont été infectés par une souche épidémique de la bactérie *Pseudomonas aeruginosa*, responsable d'infections nosocomiales . Cette

bactérie est l'une des plus difficiles à traiter cliniquement et engendre un taux de mortalité élevé (50% chez les patients vulnérables). La variabilité phénotypique du gène a conduit à l'hypothèse d'une modification du génome pendant l'épidémie. Cette variabilité lui confère une grande faculté d'adaptation donc une certaine résistance. La validation de cette hypothèse requière le séquençage de vingt souches et la conception de nouveaux outils bio-informatiques pour identifier ces mutations génomiques.

Tout d'abord le projet s'est attaché à évaluer les meilleurs outils de prédiction de séquences codantes. L'intérêt de cette évaluation est que la méthode a pu ensuite être réutilisée dans d'autres contextes. Les méthodes de clustering sont ensuite appliquées à 100000 séquences biologiques afin d'identifier les 6000 à 12000 gènes constituant ces génomes. Dans le cas de la bactérie *Pseudomonas aeruginosa*, nous avons montré que les vingt génomes partageaient 6462 gènes, le core-génome. L'identification de ce core-génome va permettre aux bactériologistes de lutter plus efficacement contre la bactérie, indépendamment de ses mutations.

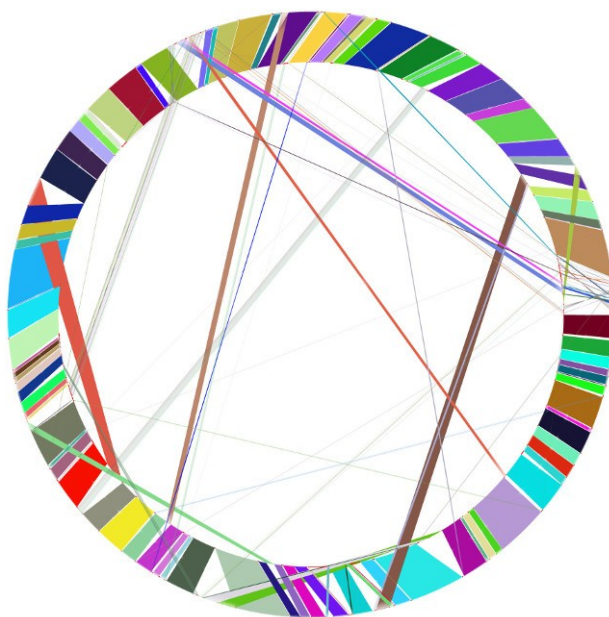


Fig. 3. Comparaison entre deux souches de la bactérie *Pseudomonas aeruginosa*

Cette recherche a été publiée dans le journal international : **Plos One** « Population structure of clinical *Pseudomonas aeruginosa* from West and Central African countries », P. Cholley, R. Ka, C. Gueyeux, M. Thouverez, N. Guessennnd, B. Ghebremedhin, T. Frank, X. Bertrand, and D. Hocquet.. Plos One, 9(9), e107008, 2014. DOI: 10.1371/journal.pone.0107008

#### 4. Diffusion d'une molécule anti-cancéreuse

Cette étude, purement théorique, vise à comprendre le chemin de diffusion énergétique que doit emprunter une molécule anticancéreuse pour atteindre le centre d'une nanocapsule fait d'atomes de Bore et d'Azote. Dans ces calculs, très lourds, toutes les contributions énergétiques sont prises en compte via la résolution du problème de Schrödinger en différents points du système d'intérêt.

Nous montrons, grâce à la simulation, que l'insertion de cette molécule est obtenue via le franchissement d'une très faible barrière d'énergie à proximité de l'entrée de cette nanocapsule. Une fois franchie, la molécule est fortement stabilisée au centre de la nanocapsule et n'en ressortira

que très longtemps après son intégration (en moyenne 4000H d'attente pour le relargage de celle-ci, la molécule est donc bien prête à atteindre sa cible).

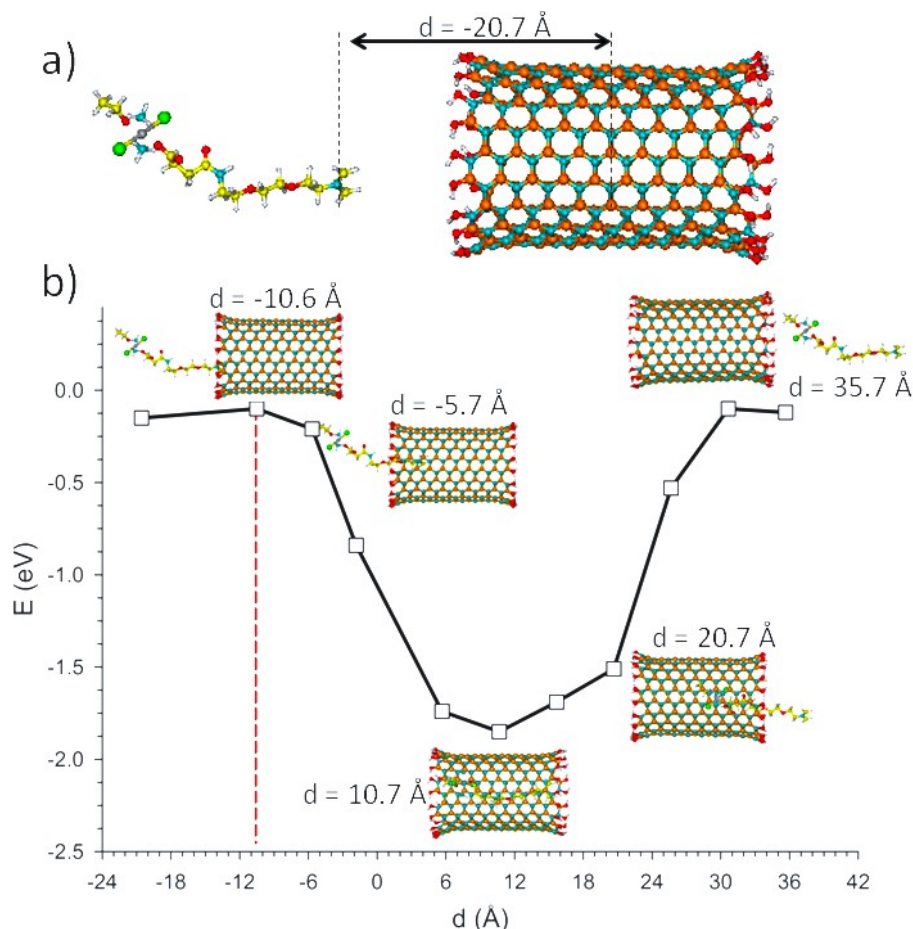


Fig. 4. Études théoriques de la vectorisation d'un nanotube de nitrure de bore avec un agent anticancéreux

Ce travail est publié dans le journal international : **Physical Chemistry Chemical Physics** « *Quantum study of boron nitride nanotubes functionalized with anticancer molecules* », E. Duverger, T. Gharbi, E. Delabrousse, F. Picaud, Phys. Chem. Chem. Phys., 2014,16, 18425-18432 (2014), DOI: 10.1039/C4CP01660B

Plus généralement 36 publications (source google scholar) citent le mésocentre de calcul comme un support pour le travail de recherche présenté. Ce nombre est stable par rapport à l'année 2013. Il reste cependant difficile de tracer correctement la production scientifique liée à l'utilisation du mésocentre dans la mesure où les utilisateurs ne nous font pas systématiquement suivre l'information. Nous réfléchissons actuellement à la mise en place d'une nouvelle procédure de renouvellement des comptes qui palliera à ce manque d'information.

## 2. Support aux utilisateurs et diffusion de la culture HPC :

Le mésocentre a pour mission de faciliter l'accès des chercheurs aux ressources HPC et de diffuser la culture HPC. Son équipe fournit un support aux utilisateurs dans leur utilisation des matériels mis à disposition et une aide à l'optimisation ou à la parallélisation des codes de calcul.

Au cours de l'année 2014 un certain nombre d'actions ont été entreprises pour animer la communauté des utilisateurs et former les étudiants :

- la campagne « Grands Challenges » a été renouvelée. Le comité scientifique a retenu les deux projets candidats : « Simulation par dynamique moléculaire tout-atomes de membranes » et « Investigation de phylogénie des plantes ». Comme les années précédentes ces grands challenges permettront à la fois de réaliser des simulations de grande taille et de valoriser les services du mésocentre.
- des demi-journées de formation à l'utilisation du mésocentre ont été dispensées aux nouveaux utilisateurs. L'objectif de ces formations est de permettre une familiarisation avec l'environnement applicatif des clusters et savoir soumettre un job dans les files d'attente.
- un cours sur l'optimisation et la parallélisation des programmes a été donné dans le cadre de l'école doctorale SPIM.
- le cluster a été utilisé dans le cadre de formations initiales de l'UFC et l'UTBM et dans le cadre de stages et de projets.
- le mésocentre a participé à l'atelier SMAShpc pour présenter les méthodes de parallélisation des systèmes multi-agents, les plates-formes support et l'utilisation d'un cluster de calcul pour des systèmes multi-agents

Dans le cadre de l'aide aux utilisateurs pour l'optimisation et/ou la parallélisation de codes de calcul, de nombreux projets ont été menés qui ont impliqués un travail commun entre les chercheurs et l'équipe du mésocentre. Dans chacun des projets l'objectif est de permettre une exécution plus efficace des applications sur les moyens de calcul du mésocentre :

- automatisation de la soumission de traitements et de la récupération de résultats auprès du service Web Dogma, permettant d'identifier les gènes d'une séquence brute d'ARN. Cette procédure facilite la préparation de grandes quantités de données (ARN) sans avoir à utiliser manuellement une procédure répétitive de formulaires de soumission.
- développement d'un nouvel outil de simulation du dépliage de protéines de manière à déterminer la plus petite portion de la molécule qui ne puisse pas être dépliée par rotation d'une de ses parties.
- parallélisation avec MPI, en mémoire distribuée, d'un algorithme génétique réalisant la génération et d'évaluation d'arbres phylogénétiques. La parallélisation permet de générer une grande variété d'arbres pertinents à même d'être comparés à partir de permutations initiales aléatoires.
- développement d'une API Python de stockage et de manipulation des arbres phylogénétiques en base de données. Cette interface vise à compléter la bibliothèque BioPython existante, qui permet de son côté le stockage d'informatiques génétiques brutes ou déjà traitées sans notion de parenté.
- parallélisation de traitements Python utilisés pour la recherche dans des graphes.
- test et validation sur les plates-formes Xeon Phi et GPU Kepler du logiciel *REBOUND* de simulation astronomique. Ces tests ont donné lieu à la remontée de plusieurs contributions auprès du projet officiel pour ajouter le support de l'architecture Xeon Phi et permettre l'obtention de meilleures performances sur les deux solutions.

Pour les calculs de très grande envergure, des moyens de calcul importants sont mis à disposition des chercheurs par les instances nationales du ministère de la recherche (CINES), du CNRS (IDRIS) et du CEA (TGCC). Les demandes de moyens nécessitent le dépôt d'une demande DARI

(Demande d'Attribution de Ressources Informatiques). L'attribution de ces moyens est généralement réservée aux projets sachant exploiter le parallélisme à grande échelle. Dans ce contexte, le mésocentre sert de garant, voire d'incitateur, dans les dépôts des demandes. Cette année le mésocentre est venu en soutien à deux demandes d'obtention de ressources pour poursuivre et approfondir les recherches déjà engagées localement.

### 3. Moyens de calcul :

Le mésocentre de calcul met à disposition des utilisateurs des ressources de calcul et de stockage.

La puissance de calcul totale mise à disposition des utilisateurs repose sur 136 nœuds et 1524 cœurs. Elle atteint 32 Tflops<sup>1</sup>, soit une augmentation de 6 Tflops par rapport à 2013. A noter que cette augmentation est due à l'achat de nouveaux nœuds de type GPU qui ne conviennent que pour certains types d'applications et que la puissance de calcul généraliste, utilisée par le plus grand nombre des utilisateurs, n'a pas augmenté. Comme nous l'avons souligné l'année passée, ces moyens de calcul généralistes sont vieillissants, et donc fragiles. En particulier le cluster *Mésocomté* a dépassé la durée d'exploitation habituelle. Il n'est plus sous contrat de maintenance et nécessite donc régulièrement des interventions pour remplacer des composants.

L'espace de stockage disponible est de 60 To. Les investissements de 2014 ont été consacrés à la mise en place d'une solution de stockage haute-performance, qui permettra des accès plus rapides aux données depuis les nœuds de calcul et qui participera donc à améliorer l'efficacité du système.

Enfin de diversifier l'offre du mésocentre, et afin d'être capable de traiter des problématiques liées au Big-Data, en relation avec le calcul haute performance, nous avons installé un serveur de base de données haute performance. Ce serveur est accessible directement depuis le réseau d'interconnexion haute vitesse des deux clusters et permet à la fois le stockage d'importants volumes de données et le traitement efficace de très nombreuses requêtes. Utilisant une technologie de stockage de type SSD, il permet de minimiser au maximum les délais de réponse et donc le blocage des calculs en attente de données. Nous avons déployé sur ce serveur un choix de services optimisés, mis à la disposition des chercheurs de manière transparente, pour répondre aux besoins de type Big-Data.

Les ressources dont nous disposons sont :

- le cluster *Mésocomté* acheté en 2009. Ce cluster est plus particulièrement dédié au calcul parallèle distribué. Il est composé de 85 nœuds de calcul, soit 760 cœurs, interconnectés par un réseau InfiniBand à 20 Gbits/s. Sa puissance de calcul est de 7,4 Tflops.
- le cluster *Lumière* acheté en 2012. Ce cluster est mixte pour le calcul parallèle et séquentiel. Il est composé de 51 nœuds de calcul, soit 764 cœurs, interconnectés par un réseau InfiniBand à 20 Gbits/s, avec une puissance totale de 12 Tflops.
- trois nœuds GPU et un nœud Xeon Phi, pour une puissance cumulée de 12,3 Tflops. L'utilisation de ces nœuds est limitée à des applications spécifiques.
- un nœud interactif à grand nombre de cœurs (32) et 64 Go de mémoire sur lequel il est possible d'exécuter des logiciels possédant une interface graphique.

Une des problématiques reconnues des mésocentres est l'augmentation de leur puissance de calcul. D'une part parce que le nombre de leurs utilisateurs augmente, le recours à la simulation étant de plus en plus courant, et parce que la taille des modèles simulés croît continuellement. Le facteur de croissance généralement admis, et validé par les études statistiques telles que celles du site

---

1 1 Tflops : 1 Tera Flops = 10<sup>12</sup> opérations flottantes par seconde

TOP500<sup>2</sup>, est une multiplication de la puissance brute d'un facteur 10 tous les 4 ans. Depuis l'installation du cluster *Mésocomté*, notre puissance est passée de 5 Tflops en 2010 à 32 Tflops fin 2014, soit un facteur 6 en 5 ans.



Fig. 5 - Carte des mésocentres en France

Par rapport au niveau national, le mésocentre de calcul de Franche-Comté se situe plutôt dans la seconde moitié en termes de performance brute, comme le montre la carte de la figure 1. Les données 2013 montraient déjà un recul du positionnement au niveau national. L'arrivée de nouveaux clusters, financés dans le cadre du projet [Equip@Meso](#)<sup>3</sup>, a accentué cette différence. Nous

2 <http://www.top500.org> référence les 500 plus gros systèmes de calcul mondiaux et donne des statistiques sur la progression de ces moyens.

3 Le projet Equipex [Equip@Meso](#) a financé l'équipement de 9 mésocentres en région. Des systèmes avec une puissance entre 30 et 40 Tflops ont été installés au cours de l'année 2013 conduisant à une progression significative de la puissance moyenne des mésocentres français au cours de l'année 2014.



serons de plus confrontés sur l'année 2015 à l'obsolescence du cluster *Mésocomté* qui a plus 5 ans. Les risques liés sont à la fois une puissance de calcul en diminution si certains des nœuds tombent définitivement en panne et l'augmentation des coûts de maintenance qui limitent notre capacité à investir dans du nouveau matériel.

#### 4. Locaux :

Nos ressources sont installées dans les salles 301C et 307C de l'UFR Sciences et Techniques. Les contraintes de poids au sol et de climatisation ne permettent pas pour le moment d'envisager de déploiement de nouvelles ressources. Le cluster *Lumière*, qui représente une part importante de nos moyens est installé dans la salle 301C, partagée avec le CRI. Cette salle est insuffisamment climatisée ce qui a obligé l'arrêt de la moitié des machines du cluster pendant les périodes chaudes de l'année pour éviter d'endommager les matériels du CRI.

Plusieurs solutions ont été étudiées au cours de l'année 2014 pour accueillir le cluster *Lumière* et les nouveaux investissements. Une étude d'implantation a été réalisée sur le bâtiment G et sur les sous-sols du bâtiment DF. Les deux solutions conviennent à l'accueil des baies de calcul mais nécessitent des aménagements. Il conviendrait de réaliser rapidement les travaux pour éviter de nouveaux arrêts dès le printemps.

#### 5. Bilan d'utilisation :

Pour la seconde année consécutive la consommation d'heures de calcul a diminué. Elle est de 3,7 millions d'heures en 2014, alors qu'elle était de 5,3 millions en 2012 et de 4,3 millions en 2013. Deux raisons principales justifient cette baisse :

- en début d'année l'incertitude sur les modalités de règlement du ticket modérateur a incité les chercheurs à limiter leur utilisation des moyens de calcul. Cette limitation est clairement visible sur la figure 2 où on peut noter la différence d'utilisation entre les mois des premiers semestres 2013 et 2014 par rapport au premier semestre 2014.
- l'arrêt pendant plus de quatre mois d'un tiers des machines du cluster *Lumière*, du fait d'une capacité de climatisation trop faible, a également pénalisé l'utilisation.

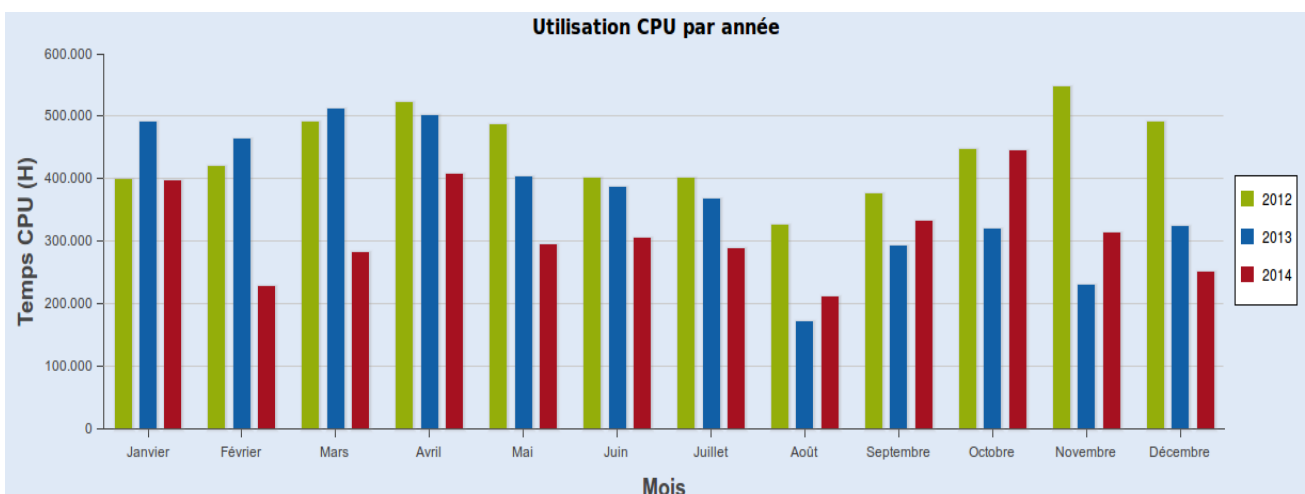


Fig. 2 – Nombre d'heures réalisées par mois

Cette année 79 utilisateurs ont exécuté des calculs sur les ressources du mésocentre, ce qui est comparable à l'année passée (76). La figure 3 donne le nombre d'utilisateurs des ressources du mésocentre par mois. La moyenne, 32 utilisateurs par mois, est stable par rapport à l'année passée (31,8). La baisse de consommation semble donc plus due à une rationalisation des calculs exécutés plutôt qu'à des utilisateurs qui se seraient détournés du service suite à l'instauration du ticket modérateur. D'après les données collectées, la moitié des utilisateurs accède aux clusters moins de 4 mois par an, ce qui justifie pleinement la mutualisation des moyens de calcul, et un cinquième l'utilise tout au long de l'année, soit plus de dix mois par an.

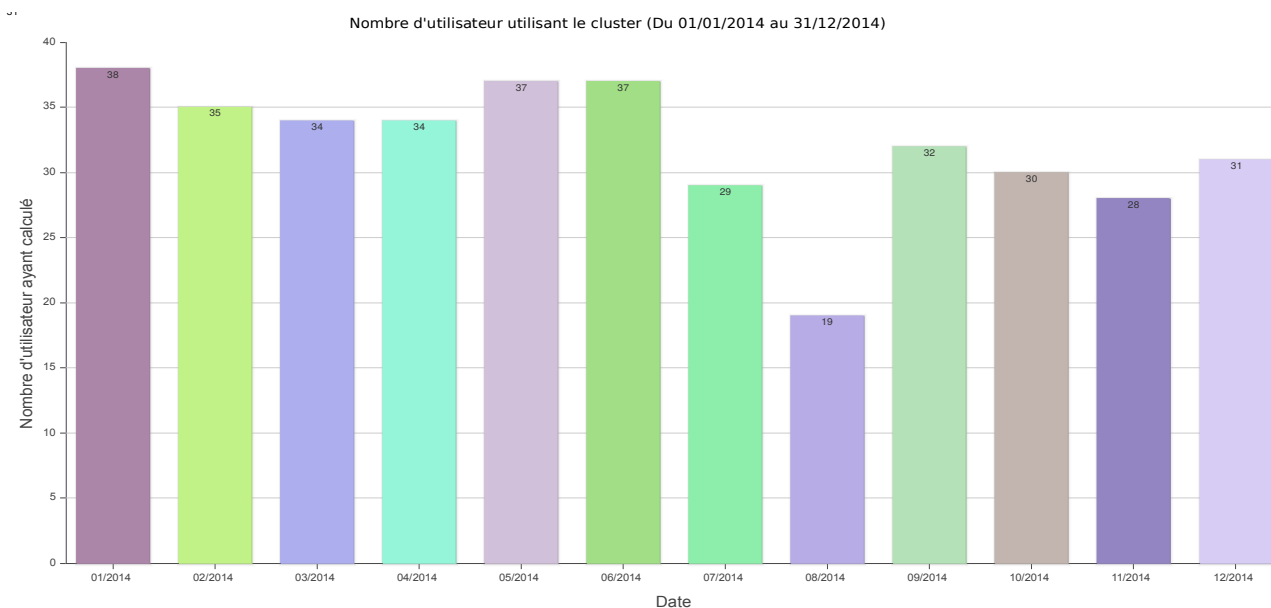


Fig. 3 – Nombre d'utilisateurs par mois

Les principaux laboratoires qui utilisent le mésocentre sont l'Institut FEMTO-ST (34 personnes), le laboratoire Chrono-Environnement (13 personnes), le laboratoire de Nano-Médecine (7 personnes), le laboratoire THEMA (6 personnes) et l'Institut UTINAM (5 personnes). Le mésocentre est également utilisé par le Laboratoire LMB (Laboratoire de Mathématiques de Besançon), le Laboratoire LERMPS (Etude et sur les Matériaux, les Procédés et les Surfaces, UTBM), le laboratoire M3M (Mécatronique, Méthodes, Modèles et Métiers, UTBM) et l'UMR 1098 de l'INSERM.

## 6. Gouvernance :

Depuis le mois de septembre 2014 le mésocentre de calcul est intégré au Centre de Ressources Informatiques de l'UFC ce qui renforce son statut de service commun de l'Université. Il conserve néanmoins son autonomie au sein de ce service pour répondre à la spécificité de sa mission.

Le mésocentre est piloté par deux comités : le comité de pilotage et le comité scientifique des utilisateurs.

- Le comité de pilotage donne les grandes orientations par rapport aux établissements et aux financements. Il est composé des représentants des établissements et de personnes extérieures. Sa composition en 2014 a été la suivante : D. Chamagne (VP Numérique, UFC), S. Chauveau (directeur de la recherche, UTBM), B. Cretin (Directeur ENSMM), J. Dat

(Directeur du service recherche, Région Franche-Comté), L. Philippe (Directeur mésocentre, UFC), O. Politano (Directeur mésocentre, UB), L. Boubakar (VP recherche, UFC).

- Le comité scientifique a pour but de donner les directions de travail privilégiées, de valider les choix d'investissement et faire le lien avec les utilisateurs. Il est constitué de représentants des établissements partenaires et des laboratoires utilisant le mésocentre et du directeur du mésocentre. Il est composé de : R. Couturier (FEMTO-ST), S. Damy (Chrono-Environnement), M. Devel (ENSMM), E. Duverger (FEMTO-ST), K. Mazouzi (Mésocentre), J.-M. Petit (Utinam), L. Philippe (Mésocentre), F. Picaud (Nano-Medecine), J.Y. Rolland (LMB), S. Roth (UTBM), G. Vuilard (THEMA).

## 7. Relations extérieures :

Depuis plusieurs années le CCUB (Centre de Calcul de l'Université de Bourgogne) et le mésocentre de calcul de Franche-Comté ont établi une relation de coopération avec des échanges fréquents entre les sites et une collaboration technique. Les systèmes installés sur les deux sites sont cohérents (Machines DELL, réseau InfiniBand, système CentOS, gestionnaire de batch SGE). Le directeur du CCUB est membre du comité de pilotage et le directeur du mésocentre de calcul de Franche-Comté participe au Comité d'Orientation Stratégique du Système d'Information (COSSI) de l'université de Bourgogne, ce qui permet de se tenir informer mutuellement des évolutions. En vue de la préparation de la COMUE entre l'UB et l'UFC, l'année 2014 a été l'occasion d'explorer les possibilités de mutualisation entre les deux mésocentres. A la demande des VP Numériques des deux établissements un document préparatoire a été rédigé. Des réunions régulières sont prévues entre les deux centres pour renforcer les collaborations et la place de la simulation numérique au sein des établissements.

La représentativité du mésocentre est régionale mais il est important qu'il soit vu au niveau national. A l'heure actuelle il est référencé dans la liste des mésocentres nationaux et nous maintenons à jour sa description qui peut-être trouvée sur <http://calcul.math.cnrs.fr/spip.php?rubrique44> et nous avons participé, comme chaque année, aux rencontres annuelles des mésocentres de calcul qui s'est déroulée à Paris le 7 octobre.

Dans le cadre du projet [EQUIP@MESO](#) dont nous sommes membre adhérent depuis le début de l'année 2013, nous suivons les travaux de différents groupes de travail (suivi des installations, formations, HPC-PME). Dans le cadre d'une journée scientifique du projet autour des méthodes Ab-initio, E. Duverger a présenté son travail réalisé dans le cadre des grands challenges 2013 et intitulé : « Traitement par DFT des systèmes moléculaires de très grandes taille sans approximation ». Dans le cadre de la journée Mésochallenges 2014, nous avons présenté le travail réalisé par C. Guyeux (FEMTO-ST) dans le cadre des grands challenges 2013 et intitulé : « Investigation des meilleures techniques de prédiction de séquences codantes et de leur clustering sous forme de gènes »

## 8. Finances :

Du point de vue financier le fait marquant de l'année 2014 est l'instauration du ticket modérateur et de la participation financière des projets. Pour entériner la décision deux textes ont été adoptés par le CA de l'université établissant le montant du ticket modérateur et le coût horaire de calcul. Pour le calcul de ce dernier une aide significative a été apporté par le service de pilotage et suivi de gestion de l'UFC.

Le budget du mésocentre s'est élevé cette année à 82 k€, hors salaires. Les ressources du mésocentre de calcul proviennent pour 40 k€ de l'UFC pour le projet d'envergure DECA-HP, pour 30 k€ des conventions passées avec l'UTBM et l'ENSMM et pour 12 k€ du versement du ticket

modérateur par les laboratoires. Sur ce budget 45 k€ ont été investis pour l'amélioration de l'infrastructure, 20 k€ ont été provisionnés en vue de la création d'une nouvelle salle machine, 11 k€ ont été dépensés en frais de logiciels et 5 k€ ont été dépensés en frais de maintenance.

Suite à l'instauration d'un ticket modérateur pour les laboratoires qui utilisent le mésocentre de calcul, une part du versement des sommes a été réalisée directement en investissement matériel. Le mésocentre a ainsi pu acquérir, une machine équipée d'une carte GPU de type Kepler K20, une machine équipée de deux cartes GPU de type Kepler K40 et une machine équipée d'une carte many-cores de type Xeon Phi. La mise en place du ticket modérateur a donc permis des investissements à hauteur de 35 k€.

## 9. Conclusion :

L'année 2014 a été une année d'attente pour le mésocentre. D'une part l'instauration du ticket modérateur en début d'année a généré un certain attentisme de la part les utilisateurs qui ont attendu d'avoir l'assurance que leur laboratoire réglerait les sommes concernées, comme le montre les données d'utilisation. D'autre part la salle machine dans laquelle a été installé le cluster *Lumière* n'a pas permis une exploitation complète de ses ressources de calcul. Si l'écueil du ticket modérateur semble résolu pour 2015, le problème de la salle machine, même si nous avons avancé sur la question, n'est pas encore totalement résolu. Ceci rend, de plus, difficile un engagement pour le renouvellement du cluster *Mésocomté* qui arrive en fin de vie, puisque nous n'avons pas de place pour installer de nouvelles machines.

**Deux chantiers doivent donc impérativement être abordés au cours de l'année 2015 : la création d'une nouvelle salle machine pour l'accueil de nouveaux matériels et le renouvellement du cluster *Mésocomté*.**