

MESOCENTRE DE CALCUL DE FRANCHE-COMTE

Bilan de l'année 2015

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 est un service commun de l'Université de Franche-Comté. Il bénéficie d'une convention de mutualisation avec l'Université Technologique de Belfort-Montbéliard et l'École Nationale Supérieure de Mécanique et des Micro-techniques. Il a pour objectif de mettre à disposition des trois établissements des moyens de calcul haute performance (HPC) et d'apporter régionalement un soutien au développement du calcul haute performance aussi bien pour l'enseignement que pour la recherche. 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'une plateforme de recherche telle que le mésocentre de calcul, regroupant des moyens technologiques et des compétences en calcul, et l'importance grandissante de la simulation numérique dans la recherche.

1. Un capteur de température compact et très sensible basé sur la Fano résonance (Institut FEMTO-ST)

En physique la Fano résonance est caractérisée par une forme asymétrique des spectres de réflexion et de transmission. Cette résonance constitue une très bonne base pour concevoir des dispositifs entrant dans la fabrication par exemple de capteurs, de miroirs ou de filtres. Du fait de sa compatibilité avec la technologie CMOS, de tels dispositifs se multiplient dans les matériaux à base de silicium ou de nitrure de silicium. En la combinant avec le lithium niobate, un matériau diélectrique possédant des coefficients pyro-électriques et électro-optiques élevés, il est possible de concevoir des dispositifs actifs avec plusieurs fonctionnalités.

L'étude explore les propriétés de la Fano résonance pour des cristaux photonique SPL (Suzuki Phase Lattice) fabriqués à partir des couches minces de lithium niobate en analysant sa réflectivité sous une incidence normale. Elle a permis d'obtenir des résultats théoriques et expérimentaux. L'effet pyro-électrique qui est dominant, combiné avec une déformation élastique due à la dilatation thermique et l'écart entre les coefficients thermiques entre le silicium et la couche de lithium niobate qui induit une tension entre les matériaux, est utilisé pour ajuster la position de la longueur d'onde de la Fano résonance.

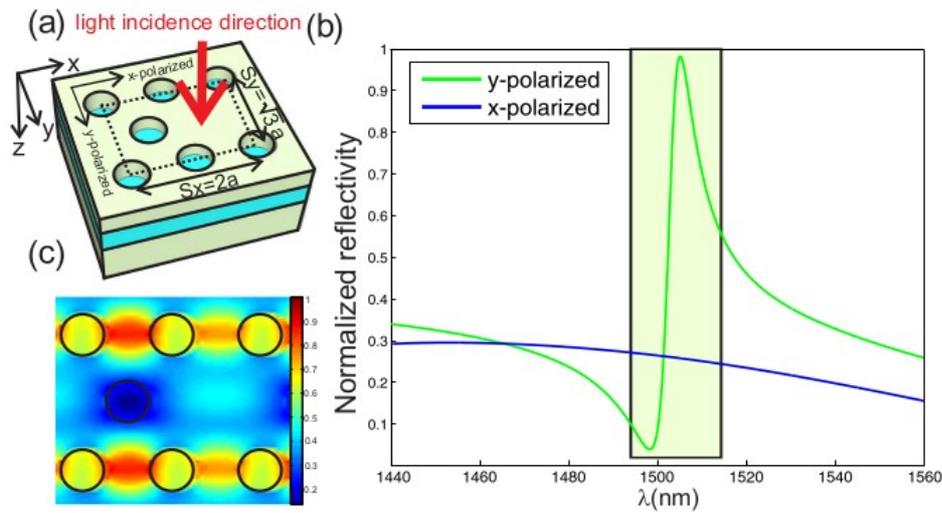


Fig. 1 (a) Schéma d'un crystal photonique SPL sur une couche mince de lithium niobate (b) Simulation par FDTD de la réflectivité d'un crystal infini (c) Représentation xOy de la distribution d'amplitude du champ électrique

Ce travail est publié dans le journal international : **Optics letters**

« Fano resonance based highly sensitive, compact temperature sensor on thin film lithium niobate », W. Qiu, A. Dao, V. Calera Vila, R. Salut, N. Courjal, F. Baida, M.-P. Bernal, Optics letters, 2016, to be published.

2. Simulations en dynamique moléculaire des interactions entre des molécules d'eau et des agrégats de molécules d'acide acétique ou propionique (Institut Utinam)

Les aérosols carbonés constituent un important sous-groupe des aérosols atmosphériques. Ils jouent un rôle important dans le processus du climat à travers des effets directs ou indirects. Les effets directs viennent de leur capacité à disperser et absorber les radiations solaires et terrestres alors que les effets indirects viennent de leur capacité à agir en tant que noyau de condensation dans les nuages ou dans la formation de la glace. Ces aérosols peuvent être directement émis ou ils peuvent se former dans l'atmosphère, par exemple par l'oxydation de précurseurs organiques gazeux. Cependant, à cause de la complexité de leur nature chimique, leur importance dans les processus atmosphériques physiques et chimiques est encore mal comprise.

L'étude, par simulation numérique de physique moléculaire, de l'absorption de l'eau au voisinage de petits agrégats d'acide acétique et d'acide propionique a été réalisée pour des températures entre 100 et 256K en fonction de la teneur en eau. Ces calculs ont montré que les deux acides se comportent de manière identique et qu'à la fois la température et la teneur en eau ont une influence forte sur le comportement de ces systèmes. Deux situations ont été mises en évidence pour les agrégats eau-acide qui correspondent, soit à l'absorption d'eau par des grains d'acide à des températures très basses, soit à la formation de gouttelettes constituées de molécules d'acide absorbées à la surface d'agrégats d'eau à des températures et des teneurs en eau élevées. Lorsque la teneur en eau est faible et que la température est élevée un mélange partiel a été observé.

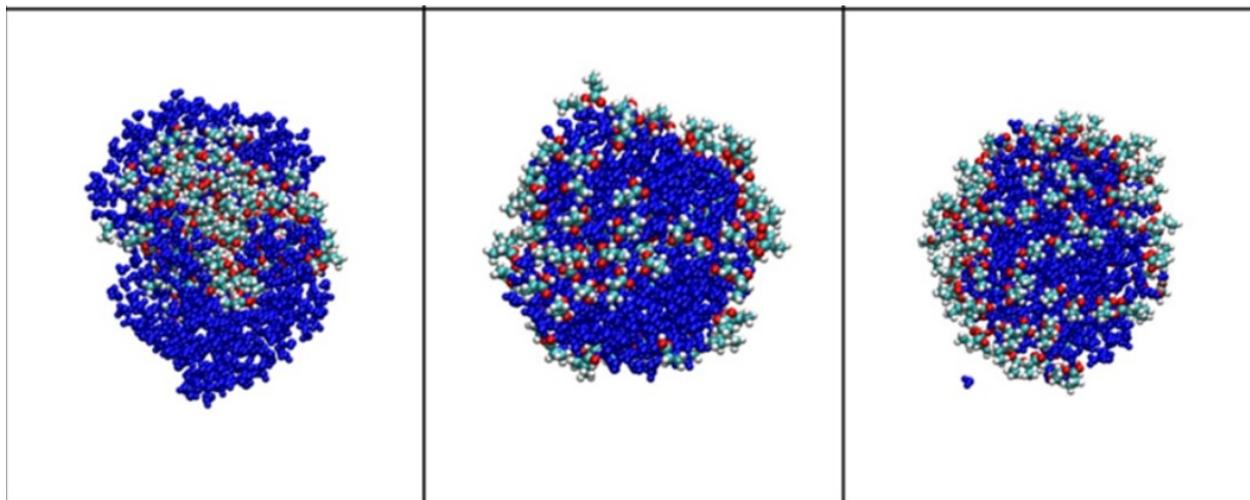


Fig 2. grille d'échantillonnage pour la région de Besançon

Cette recherche a été publiée dans le journal international : **The journal of physical chemistry B** « Molecular Dynamics Simulations of the Interaction between Water *Molecules and Aggregates of Acetic or Propionic Acid Molecules* », B. Radola, S. Picaud, D. Vardanega, P. Jedlovszky. The journal of physical chemistry B, 2015 Dec 24;119(51):15662-74

3. Étude par dynamique moléculaire des interactions entre les fullerènes et des membranes lipidiques courbes et asymétriques (Laboratoire ChronoEnvironnement)

La découverte des fullerènes en 1985 a ouvert la voie à la recherche sur les nano-matériaux à base de carbone qui a révolutionné la science des matériaux et la recherche biomédicale. Bien que d'autres formes de carbone, comme les nano-tubes ou les graphènes, soient annoncées comme plus prometteuses en termes d'applications pratiques, les fullerènes C_{60} restent les nano-particules à base de carbone les plus étudiées. Grâce à leur taille nanométrique et leur propriétés physiques et chimiques ils sont en effet adaptés à de nombreuses applications biomédicales. La modification de leur chimie de surface les rend utilisables dans les traitements anti-HIV, anti-tumoraux et comme agents antibiotiques ou anti-oxydants. La nature hydrophobique des fullerènes et leur forte affinité avec les membranes lipidiques en fait des vecteurs de médicaments, capables de transporter dans les cellules des composants polaires ou chargés. Les mécanismes exacts de l'activité biologique ou de la toxicité des fullerènes C_{60} font cependant encore débat, ce qui motive de nombreuses études sur leurs interactions avec des membranes biologiques et des macro-molécules.

Malgré un intérêt évident, à nos jours aucune étude ne se concentre sur l'interaction entre les fullerènes avec des modèles réalistes de membranes de cellules eucaryotes. Nous avons donc étudié l'interaction entre des fullerènes et des membranes lipidiques courbes et asymétriques de bicelles DOPC/DOPS à l'aide de simulations de dynamique moléculaire à gros grain, réalisées sur le mésocentre de calcul. Les effets de la composition asymétrique des lipides d'une partie de la membrane et de la courbe de la membrane ont été analysés. Ils montrent que les agrégats de fullerènes préfèrent pénétrer dans la membrane aux endroits de courbure modérément positive alors qu'ils évitent les régions de courbure positive ou négative extrêmes lorsqu'ils pénètrent le cœur hydrophobique de la membrane. Ainsi ces résultats montrent qu'il est nécessaire de tenir compte du degré de courbure de la membrane dans les études concernant la perméabilité des membranes au fullerènes dans les vecteurs de médicaments basés sur des fullerènes.

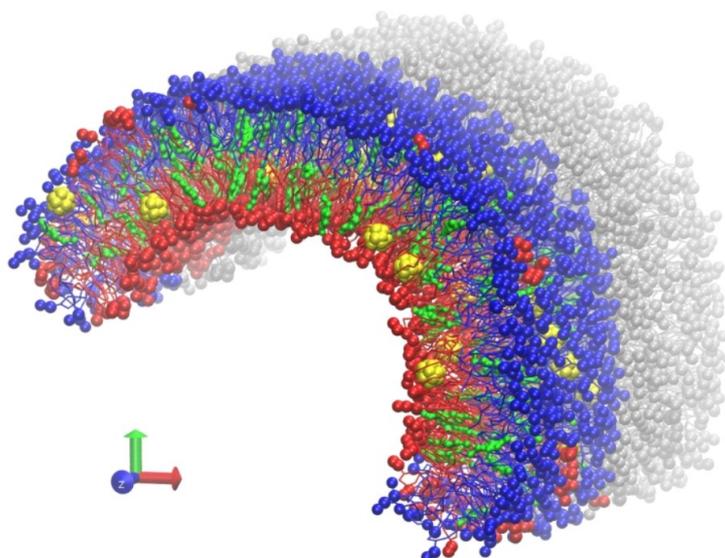


Fig. 3. Bicelles DOPC/DOPS équilibré asymétrique

Ce travail est publié dans le journal international : **Physical Chemistry Chemical Physics**
« *Interaction of C₆₀ fullerenes with asymmetric and curved lipid membranes: the molecular dynamics study* », Y. K. Cherniavskiy, C. Ramseyer, S.O. Yesylevskyy, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2016, 18(1), 278-284

4. Le ciblage du cancer (Laboratoire de NanoMédecine)

La molécule de cisplatine est utilisée couramment dans les traitements de nombreux cancers. Son action est principalement dédiée au blocage de la réplication de l'ADN des cellules. Malheureusement, en plus d'interférer avec l'ADN des cellules cancéreuses, le cisplatine peut nuire à certaines cellules normales. Son action peut causer un grand nombre d'effets secondaires indésirables et, pour les limiter un maximum, la délivrance ciblée de ce médicament toxique doit être envisagée puisque son action sur la cellule est indéniablement connue. Nos premiers travaux ont montré que l'on pouvait encapsuler des molécules de Cisplatine dans un nanotube de carbone de géométrie appropriée. Mieux, alors que le largage de ces molécules était observé au bout de quelques dizaines de nanosecondes en solvant aqueux, la présence de la membrane cellulaire accélère grandement ce largage en le divisant en moyenne d'un facteur 4. Dès lors, ces premières études ouvrent la voie au premier vecteur ciblant spécifiquement les cellules.

Les essais in vitro du nouveau nano-vecteur de médicaments ont montré des résultats très prometteurs sur plusieurs lignées cellulaires cancéreuses. La mort cellulaire a été multipliée jusqu'à un facteur 20 par rapport aux tests envisagés jusque là. La compréhension de cet effet n'a pu être définitivement mise en avant que par l'apport de la simulation par dynamique moléculaire effectuée sur le Mésocentre de Franche-Comté. Nous avons notamment montré que la protéine utilisée s'agrégeait sur le nano-vecteur et arrivait en masse sur la cellule cancéreuse pour mieux la détruire. De plus les propriétés particulières du nano-vecteur ont permis à ces protéines de se présenter exactement dans la bonne configuration.

Ce travail est publié dans le journal international : **Physical Chemistry Chemical Physics**
« *Theoretical Q1 demonstration of the potentiality of boron nitride nanotubes to Q2 encapsulate anticancer molecule* », E. Duverger, T. Gharbi, H. Boulhadour, F. Picaud, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2015, 17, 604-611

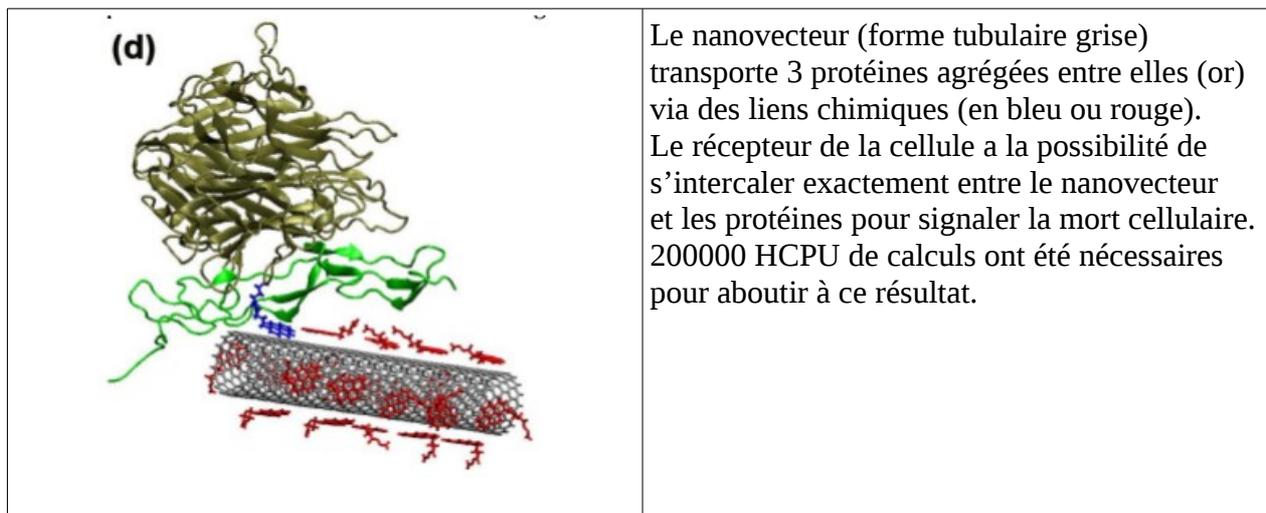


Fig. 4. Études théoriques de la vectorisation d'un nanotube de nitrure de bore avec un agent anticancéreux

Plus généralement 38 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 2014. Nous réfléchissons actuellement à la mise en place d'une nouvelle procédure de renouvellement des comptes qui permettra de tracer correctement la production scientifique liée à l'utilisation du mésocentre. Cette nouvelle procédure sera mise en service en 2016.

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 2015 un certain nombre d'actions ont été entreprises pour animer la communauté des utilisateurs et former les étudiants :

- 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.

A noter qu'en raison de contraintes techniques engendrées par le déplacement des machines dans la nouvelle salle, la campagne « Grands Challenges » que nous conduisons chaque année depuis 2011 pendant la dernière quinzaine de décembre n'a pas pu avoir lieu cette année.

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. Kamel Mazouzi, ingénieur de recherches au mésocentre, a ainsi participé à plusieurs publications avec des membres de

laboratoires. Voici quelques exemples de travaux réalisés en soutien aux chercheurs au cours de l'année :

- Aide à la parallélisation et l'exécution d'un code Matlab sur le mésocentre: analyse de l'activité cérébrale de patients dans le coma au moyen de l'électroencéphalographie (projet Cometique) (CHRU)
- Portage d'un code Matlab à un code C++ optimisant ainsi les performances globales de l'application d'un facteur 50 (Femto-ST)
- Développement d'un code MPI pour un algorithme génétique pour l'analyse de génomes (Femto-ST)
- Étude des performances d'une application scientifique sur les cartes XeonPhi (Femto-ST)
- Aide à la conception d'une plate-forme de simulation multi-agents parallèle (Femto-ST)

Le mésocentre met également à disposition de ses utilisateurs une documentation technique de qualité, guidant les utilisateurs novices, détaillant les applications et la soumission de jobs sur le mésocentre à travers un Wiki (mesowiki.univ-fcomte.fr).

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) auprès de GENCI (Grand Équipement Nationaux de Calcul Intensif). L'attribution de ces moyens est généralement réservée aux projets sachant exploiter le parallélisme à grande échelle. Dans ce contexte, le mésocentre sert de conseiller et aide au dépôt des demandes. Nous incitons également fortement nos gros utilisateurs à réaliser ces demandes pour limiter la charge sur le mésocentre. Cette année le mésocentre est venu en soutien à deux demandes d'obtention de ressources pour poursuivre et approfondir les recherches déjà engagées localement. Une aide est également apportées dans l'accès aux ressources de GENCI.

3. Ressources techniques :

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 à la fin de l'année 2015 repose sur 87 nœuds et 1292 cœurs. Elle atteint 31 Tflops¹ de puissance de calcul conventionnelle (CPU) et 11 Tflops de puissance de calcul sur accélérateurs (GPU et Xeon Phi). L'année 2015 a marqué le début de la refonte complète de l'organisation des ressources de calcul. D'un point de vue pratique cela se traduit par l'arrêt imminent du cluster *Mésocomté* devenu trop vieux. La partie des nœuds la plus récente sera reprise et intégrée dans le cluster *Lumière* tandis que les plus vieux seront définitivement arrêtés car obsolètes. Leur recyclage est à l'étude. Les financements des laboratoires et le projet DecaHP ont permis le remplacement d'une première tranche de l'ancien cluster *Mésocomté*. Cinq nouveaux châssis ont ainsi été ajoutés au cluster *Lumière* à l'automne. Les moyens de calcul du mésocentre sont cependant passés de 136 nœuds et 1524 cœurs à 87 nœuds et 1292 cœurs. La puissance des processeurs plus récents des nouveaux nœuds compense en partie la perte en nombre de machines, il est sera cependant nécessaire de trouver en 2016 les moyens de combler la différence. Des projets ont été déposés dans ce sens et une contribution a été demandée aux établissements de tutelle.

L'espace de stockage disponible est de 100 To. Une solution de stockage haute-performance, qui permet des accès plus rapides aux données depuis les nœuds de calcul et qui participe donc à améliorer l'efficacité du système, a été mise en service en début d'année. L'intérêt de cette solution

1 1 Tflops : 1 Tera Flops = 10¹² opérations flottantes par seconde

est sa cohérente avec la nouvelle configuration centrée sur le cluster *Lumière*.

En dehors des des clusters *MésoComté* et *Lumière*, les ressources mises à disposition des utilisateurs sont :

- un nœud GPU embraquant quatre cartes Kepler K40, pour une puissance totale de 8,2 Tflops, et un nœud Xeon Phi, embarquant quatre cartes Xeon Phi, pour une puissance totale de 3,5 Tflops. A noter que 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 (Matlab, COMSOL, etc.)
- Un nœud serveur de base de données, utilisant une technologie de stockage de type SSD, pour traiter des problématiques liées au Big-Data et en relation avec le calcul haute performance. Il permet à la fois le stockage d'importants volumes de données et le traitement efficace de très nombreuses requêtes., il permet de minimiser au maximum les délais de réponse et donc le blocage des calculs en attente de données.

Une des problématiques reconnues des mésocentres est l'augmentation de leur puissance de calcul. D'une part parce que le nombre de leurs d'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 TOP500², 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 34 Tflops fin 2015, soit un facteur 7 en 6 ans ce qui est bien en dessous de moyenne. Par rapport au niveau national, le mésocentre de calcul de Franche-Comté se situe dans la seconde moitié en termes de performance brute depuis l'année 2013, date à laquelle ont été installés les systèmes du projet *Equi@Meso*. Les données des années précédentes montraient déjà un recul du positionnement au niveau national ce recul se confirme³.

4. Locaux :

L'année 2015 a permis de concrétiser la mise en service d'une nouvelle salle informatique pour le mésocentre, grâce au soutien de l'UFC. La nouvelle salle se situe dans le sous-sol du bâtiment DF. Nous disposons d'une surface suffisante qui nous permettra à terme d'exploiter jusqu'à 7 racks. Cette salle a été conçue de manière à optimiser les problématiques de refroidissement en définissant une zone froide, en façade de machines, et une zone chaude, en arrière : l'air chaud produit par les machines est redirigé directement sur les climatisations pour optimiser les flux d'air. Deux blocs de climatisation d'une puissance totale de 60 kW assurent le refroidissement de la salle. Le problème récurrent de manque de climatisation auquel nous étions confronté dans notre ancienne salle, et qui nous obligeait à arrêter un nombre conséquent de nœuds pendant l'été, est donc maintenant résolu.

Pour ce qui est de l'alimentation électrique, la nouvelle salle offre un niveau de service bien supérieur à ce dont nous disposions. Un onduleur permet de supprimer les risques de micro-coupures auxquels nous étions confrontés de manière récurrente dans nos précédents locaux. Il nous permet de supporter des coupures d'une durée de quelques minutes et permet un arrêt propre des serveurs au delà.

Une première partie de nos ressources, le cluster *Lumière*, a été installé dans cette salle et l'exploitation en est très satisfaisante. Le déplacement d'une partie du cluster *MésoComté* est prévu

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 Contrairement aux années précédentes, nous ne disposons pas, à l'heure où a été rédigé ce rapport, d'une synthèse nationale pour 2015.

pour le début de l'année 2016.

5. Bilan d'utilisation :

L'année 2015 marque une forte augmentation de l'utilisation des ressources du mésocentre, tant du point de vue de la puissance de calcul consommée que du nombre d'utilisateurs. Après deux années de baisse de la consommation, probablement due à l'incertitude induite par la mise en place du ticket modérateur et à l'arrêt d'une partie des machines en période chaude pour éviter la surchauffe dans une salle non adaptée, la consommation annuelle est repassée au dessus des 5 millions d'heures pour 90 000 jobs. Elle était de 3,7 millions d'heures pour 38 000 jobs en 2014 et de 4,3 millions pour 13 000 jobs en 2013, comme le montre la figure 2.

Cette augmentation est principalement due à une plus grande consommation des utilisateurs habitués du mésocentre puisque cette année 80 utilisateurs ont utilisé les ressources du mésocentre, ce qui est identique à l'année passée. Sur la figure 3 qui donne le nombre d'utilisateurs des ressources du mésocentre par mois, nous pouvons constater que les utilisateurs ont utilisé la mésocentre plus fréquemment cette année puisque la moyenne des accès mensuels passe de 32 sur l'année 2014 à 39 en 2015.

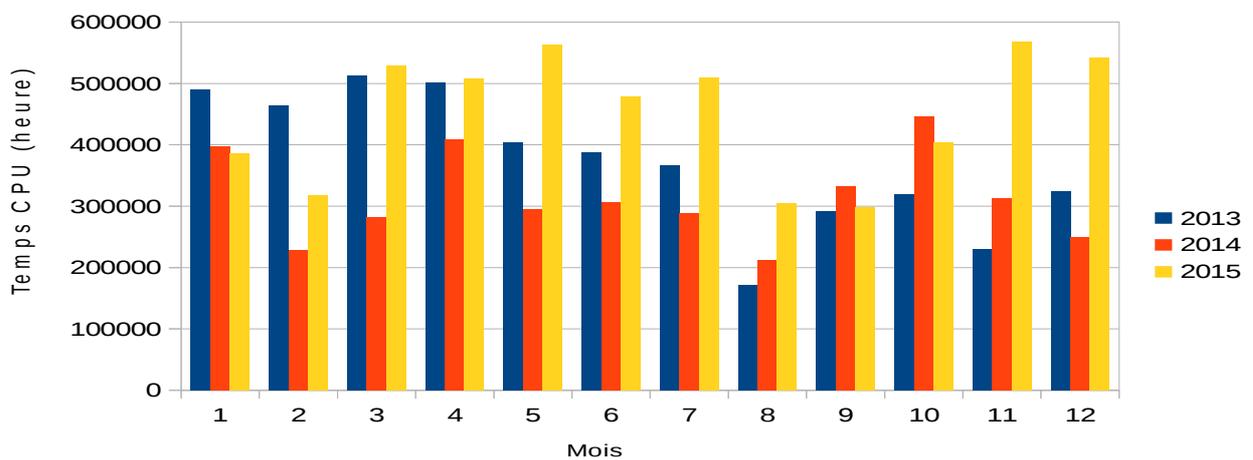


Fig. 2 – Nombre d'heures réalisées par mois

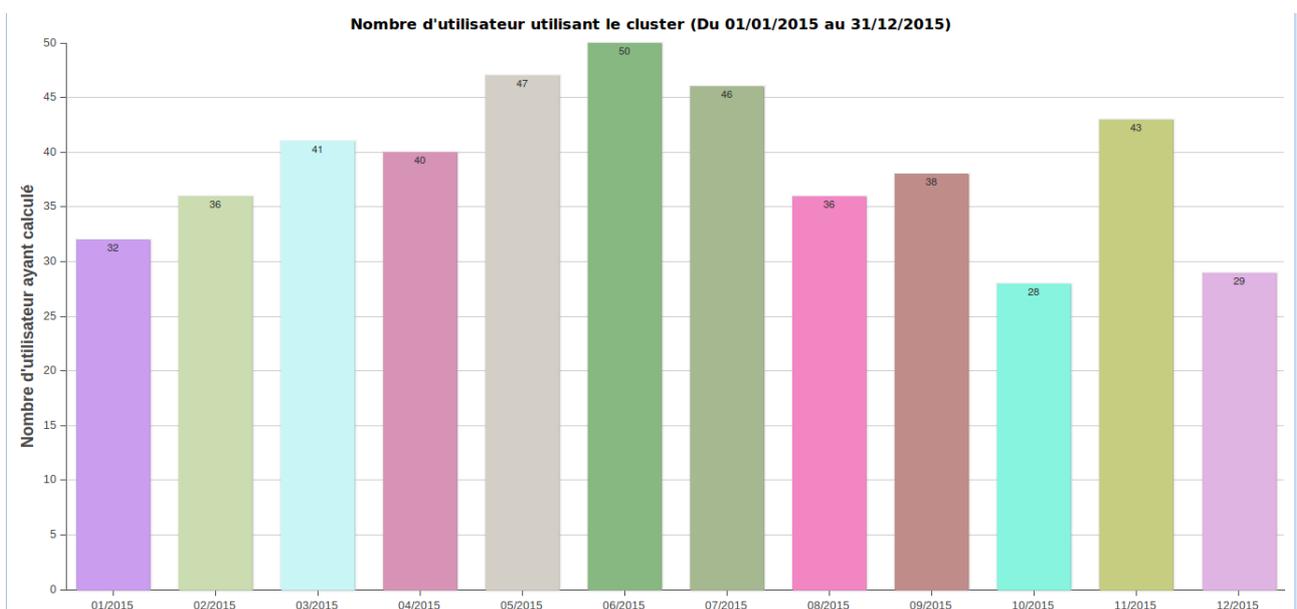


Fig. 3 – Nombre d'utilisateurs par mois

Comme nous l'avons constaté les années précédentes, plus de la moitié des utilisateurs n'accèdent au mésocentre que sur une partie de l'année. Ainsi, comme cela est montré sur la figure 4, la moitié des utilisateurs accède aux clusters de 1 à 3 mois par an et un quart ne les utilise que 2 mois. La mise en regard des figures 3 et 4 permet de constater que la mutualisation des moyens fonctionne bien puisque l'utilisation, bien qu'irrégulière, montre que les utilisateurs qui n'accèdent pas régulièrement au mésocentre se répartissent sur l'année. Pour finir nous pouvons noter qu'un quart des utilisateurs accèdent régulièrement aux ressources, plus de 10 mois par an.

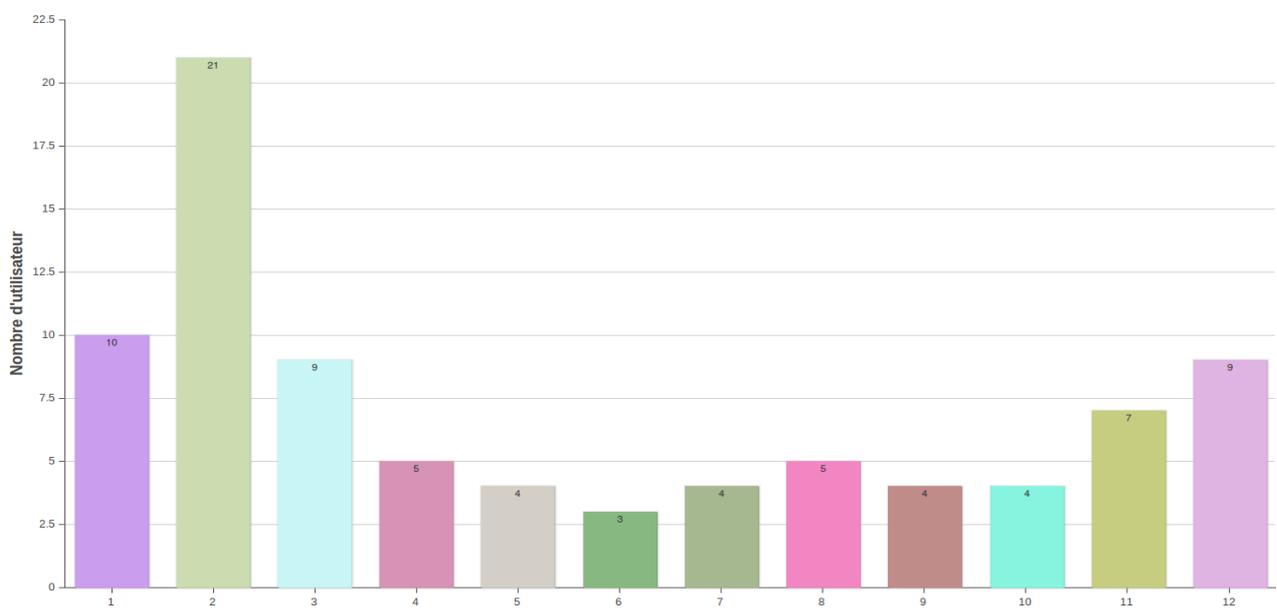


Fig. 4 – Nombre d'utilisateurs par nombre de mois d'utilisation

Les principaux laboratoires qui utilisent le mésocentre sont l'Institut FEMTO-ST, le laboratoire Chrono-Environnement et le laboratoire de Nano-Médecine. Chacun de ces trois laboratoires a réalisé plus d'un million d'heures de calcul au cours de l'année 2015. Par ailleurs le mésocentre est également utilisé par le laboratoire THEMA, l'Institut UTINAM. Laboratoire LMB (Laboratoire de Mathématiques de Besançon) et les laboratoires de l'IRTES de l'UTBM : le LERMPS et le laboratoire M3M. Les domaines abordés font que l'Institut FEMTO-ST est de loin celui qui exécute le plus d'applications sur nos machines. Nous pouvons également noter la part croissante du laboratoire Chrono-Environnement.

6. Gouvernance :

En tant que service commun de l'Université, le mésocentre de calcul est intégré au Centre de Ressources Informatiques de l'UFC. Sous la direction de son responsable scientifique, il conserve néanmoins son autonomie au sein de ce service pour répondre à la spécificité de sa mission, plus orientée vers la recherche.

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

- Le comité de pilotage a pour fonction de donner les grandes orientations par rapport aux établissements et aux financements. Il est composé des représentants des établissements et de personnes extérieures. Sa composition en 2015 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), C. Ramseyer (Chrono-Environnement), M. Devel (ENSMM), E. Duverger (FEMTO-ST), K. Mazouzi (Mésocentre), J.-M. Petit (Utinam), L. Philippe (Mésocentre), F. Picaud (Nano-Médecine), J.Y. Rolland (LMB), S. Roth (UTBM), G. Vuillemet (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 (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 informé mutuellement des évolutions. En vue de la préparation de la COMUE entre l'UB et l'UFC, l'année 2015 a été l'occasion d'explorer les possibilités de mutualisation entre les deux mésocentres. Un travail préparatoire à la mise en place d'une formation autour du Big-Data, permettant de valoriser les compétences des deux équipes, a été réalisé. La mise en œuvre pourrait se faire sous la forme d'un DU inter-universités.

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 6 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). Notre implication se traduit par la participation aux réunions du projet. Cette participation nous permet de nous tenir au courant des évolutions, des contraintes techniques rencontrées dans des centres de plus grosse taille et des pratiques des différents mésocentres.

8. Finances :

Pour l'année 2015, le budget du mésocentre s'est élevé à 79 k€, hors salaires. Les ressources du mésocentre 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 9 k€ du versement du ticket modérateur par les laboratoires. A ce budget est venu s'ajouter 30 k€ d'investissement matériel réalisé par l'Institut Femto-ST dans le cadre de sa participation aux investissements du mésocentre. Les investissements sont allés prioritairement à l'installation de la nouvelle salle machine (27 k€) et à l'adaptation de l'infrastructure réseau (11 k€). Le reste du budget (67 k€) a été consacré à l'achat de cinq nouveaux châssis de quatre nœuds de calcul pour réaliser la première tranche de renouvellement du cluster

MésoComté.

Les conventions avec deux de nos tutelles (UTBM, ENSMM) arrivaient à expiration en 2015. Elles ont été renouvelées pour trois ans.

9. Personnel :

L'équipe du mésocentre est constituée d'un ingénieur de recherches, d'un ingénieur d'études et d'un assistant ingénieur. Guillaume Laville, ingénieur d'étude au mésocentre depuis septembre 2009 a obtenu un poste au rectorat de Dijon et a quitté le mésocentre à la fin du mois d'octobre. Nous avons recruté de CDD sur le poste Kévin Ladier au 16 novembre.

10. Projet de renouvellement du cluster MésoComté :

Comme nous l'avons souligné précédemment, il est urgent de renouveler notre premier cluster qui a maintenant plus de 6 ans. Nous avons donc travaillé en 2015 pour préparer le budget de ce renouvellement. Le projet total a un coût de 282 k€.

Les financements déjà acquis s'élèvent 130 k€ (80 k€ investis en 2015 et 50 k€ en 2016), qui se composent comme suit :

- Institut Femto-ST : 30 k€, financement de machines de calcul sur projet Région
- UFC : 80 k€, projet DecaHPC
- Laboratoires : 12 k€, ticket modérateur
- Mésocentre : 8 k€, budget propre

L'objectif pour 2016 est donc de financer 202 k€. Dans ce sens plusieurs pistes ont été étudiées.

Dans un premier temps nous avons travaillé avec le SAIC pour évaluer la faisabilité du montage d'un projet FEDER. Le programme opérationnel du FEDER Franche-Comté pour 2014-2020 inclut en effet dans ses axes prioritaires un soutien à l'innovation et la recherche. En particulier, l'objectif stratégique OS 1.1 vise à augmenter les activités de Recherche, Développement et Innovation à travers le renforcement des capacités des centres de recherche (moyens humains, équipement, plates-formes). L'objectif annoncé est de renforcer la recherche, le développement technologique et la compétitivité des PME. Un premier travail de contact a donc été réalisé dans le but de rédiger une réponse à cet appel à manifestation d'intérêt, alors que la définition des contraintes du programme n'était pas encore finalisé. Il s'est avéré par la suite que le projet devait être porté par une entreprise, or les contacts que nous avons établis ne souhaitaient pas porter le projet. Étant donné l'urgence du renouvellement, la poursuite de ce projet a été ajournée pour nous consacrer à d'autres appels à projet. La piste du FEDER sera poursuivie plus tard. Le point positif est que nous avons établi un premier contact qui s'avère positif avec une PME et une startup.

Le projet de renouvellement actuel s'appuie sur une réponse à l'appel d'offre recherche de la région et une sollicitation des tutelles. Le tableau suivant détaille la répartition des financements demandés et acquis :

Financier	Objet	Année	Montant	État
Institut Femto-ST	1 ^{ère} tranche nœuds de calcul	2015	30 k€	Acquis
UFC (Projet DecaHPC)	1 ^{ère} tranche nœuds de calcul	2015	40 k€	Acquis
Laboratoires (Ticket modérateur)	1 ^{ère} tranche nœuds de calcul	2015	6 k€	Acquis
Mésocentre	1 ^{ère} tranche nœuds de calcul	2015	4 k€	Acquis

Total 2015			80 k€	
Région	2 ^{ème} tranche nœuds de calcul	2016	100 k€	Demandé
UFC (Projet DecaHPC)	2 ^{ème} tranche nœuds de calcul	2016	40 k€	Acquis
UFC	2 ^{ème} tranche nœuds de calcul	2016	18 k€	Demandé
UTBM	2 ^{ème} tranche nœuds de calcul	2016	15 k€	Demandé
ENSMM	2 ^{ème} tranche nœuds de calcul	2016	15 k€	Acquis
Laboratoires (Ticket modérateur)	2 ^{ème} tranche nœuds de calcul	2016	10 k€	Acquis
Mésocentre	2 ^{ème} tranche nœuds de calcul	2016	4 k€	Acquis
Total 2016			202 k€	
Total Projet			282 k€	

11. Conclusion :

L'année 2015 a été une année de changement pour le mésocentre, avec la création de la nouvelle salle machine et la restructuration de l'organisation des ressources matérielles. Il faut noter que ces changements ont été possibles grâce à un fort investissement du personnel qui n'a pas ménagé son temps et son implication. La difficulté technologique était en effet de taille de par la complexité du système : la précédente installation de cette taille avait été réalisée par la société Bull, spécialiste du domaine reconnue mondialement. La réussite du projet n'a donc été possible que grâce à une forte montée en compétence et une implication forte du personnel.

Au milieu de tout ces changements la progression tant de l'utilisation que du nombre d'utilisateurs montre que le mésocentre continue de prendre une place croissante dans le paysage franc-comtois des plates-formes de recherche et qu'il accompagne les chercheurs dans leur recourt croissant à la simulation numérique quelque soit le domaine de recherche.

La conclusion du bilan 2014 insistait sur deux chantiers urgents : la création d'une salle machine adaptée et le renouvellement du cluster Mésocomté. Le premier chantier été rapidement conduit par l'UFC et le problème de l'accueil des nouvelles machines est résolu de manière très satisfaisante. Le second chantier a débuté avec l'achat de cinq châssis, soit un investissement de 80 k€ sur un montant attendu de 280 k€. **Le chantier de l'année 2016 sera donc de finaliser le financement nécessaire au renouvellement du cluster Mésocomté.**