



Arnaud RENARD

arnaud.renard@univ-reims.fr





University of Reims

Université de Reims Champagne-Ardenne (URCA)



Multidisciplinary university

- more than 23 000 students
- a wide initial undergraduate studies program
- graduate studies and PhD program in link with research labs



2013



Simuler



Visualiser



Restructuration des plateaux techniques de l'URCA

Automne 2013 : Regroupement en 6 plateformes technologiques

- Plateforme PLANET (structure de la matière, RMN, accélérateur d'électron)
- Plateforme Santé (imagerie cellulaire/tissulaire, du petit animal, ressources Bio., cytométrie)
- Plateforme CERFE (?)
- Plateforme NanoMat' (élaboration et caractérisation)
- Plateforme NUM3D (ingénierie numérique collaborative, numérisation 3D, ingénierie mécanique)
- Maison de la Simulation (modélisation, simulation, visualisation)
 - Centre de Calcul de Champagne-Ardenne - *ROMEIO*
 - Centre Image - *CI*
 - Plateau de Modélisation Moléculaire Multi-échelle - *P3M*



Gouvernance



- CPU = Comité Plateformes URCA
Politique scientifique, besoins financiers, besoins personnels,
- COFIL = Comité Pilotage MaSCA
Réponses AO, animation, formation, communication.
Programme d'activités, stratégie scientifique, budget des CoS
- CoS = Comité des Utilisateurs du plateau
Gestion des ressources et projets
Valorisation, développement
Règles d'utilisation, prestations





Maison de la Modélisation
de la Simulation de Champagne-Ardenne
de la Visualisation

Modéliser



Plateau de
Modélisation
Moléculaire
Multi-échelle

Centre de
Calcul
ROMEIO

Simuler



Centre Image

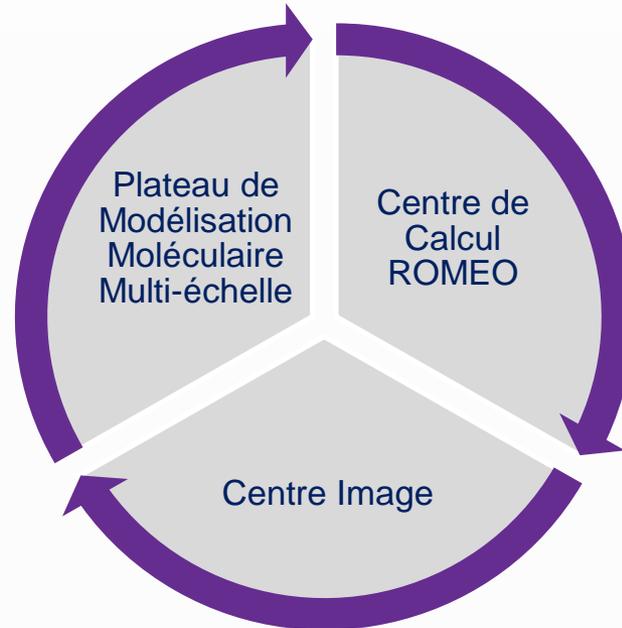
Visualiser

CENTRE
IMAGE



Thématiques

modélisation
moléculaire



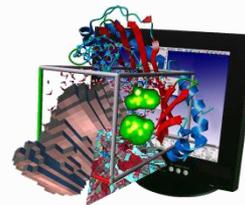
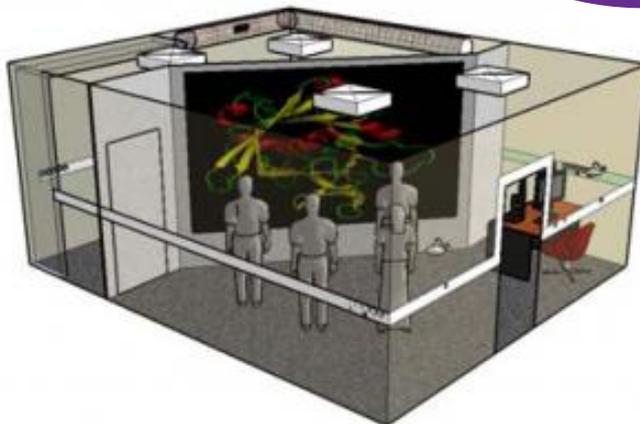
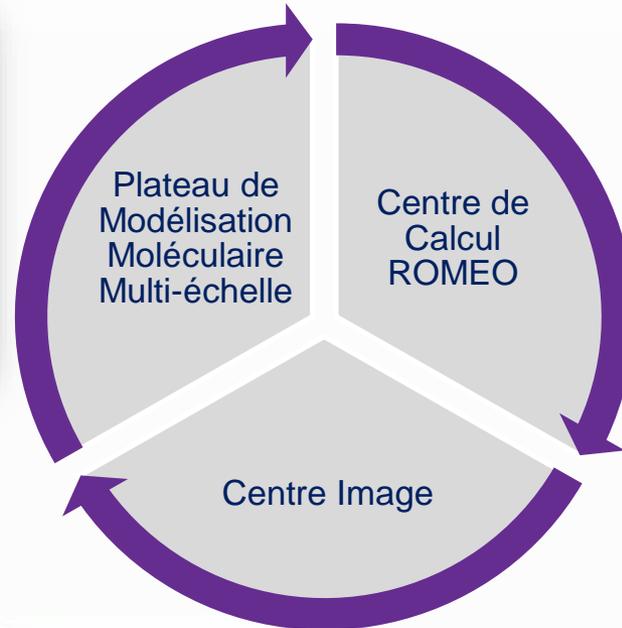
mésocentre

imagerie numérique

- Fédérer une communauté
- Recherche
- Pédagogie
- Industrie
- Animation



Equipements



Réseaux

PIA ANR INFRA Santé




INSTITUT FRANÇAIS DE BIOINFORMATIQUE

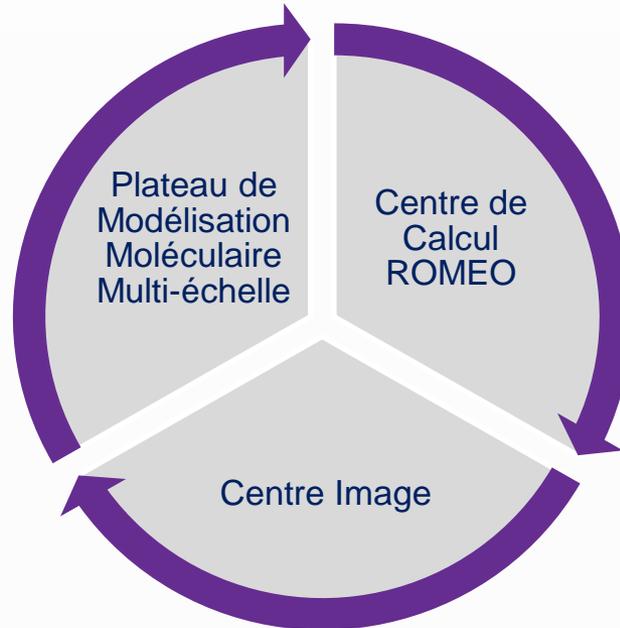


IFB-NE UMS
gère les 23 plateaux
De bio-info

ELASTIN European Laboratories
Association in STructural
INvestigations

SOLIANCE
Naturally innovative

IBISA
INFRASTRUCTURES
BIOLOGIE SANTÉ
ET AGRICULTURE
Santé / Agro



PIA FSN RECOVER3D

FUI16 ICOS

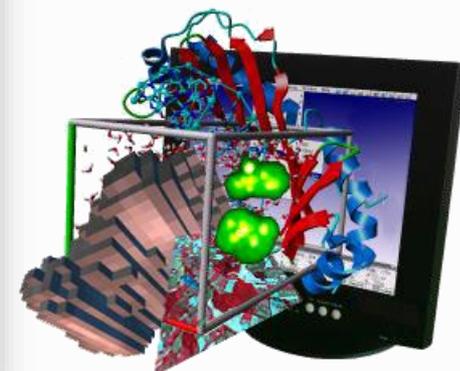
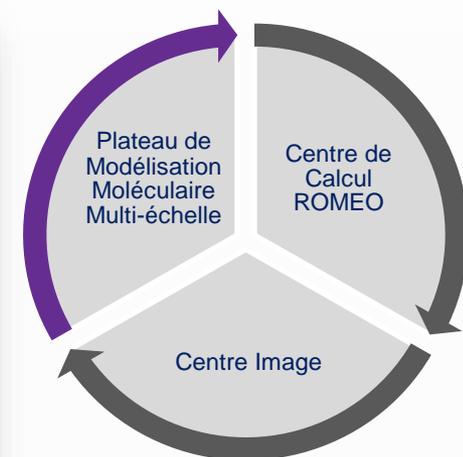
ANR V-MONITOR

INNOVATION Nutristic

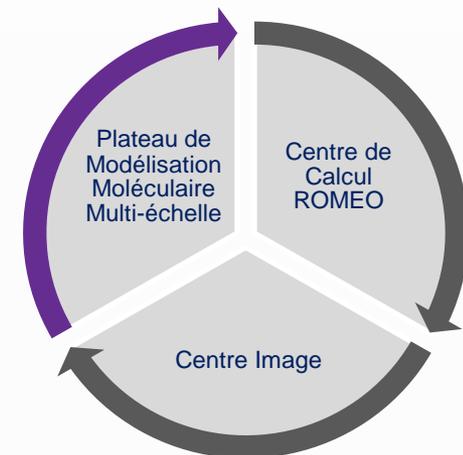
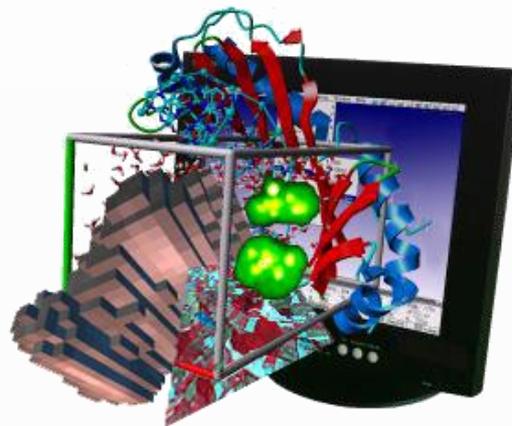
Emergence DURABIN



modélisation moléculaire multi-échelles



modélisation moléculaire multi-échelles



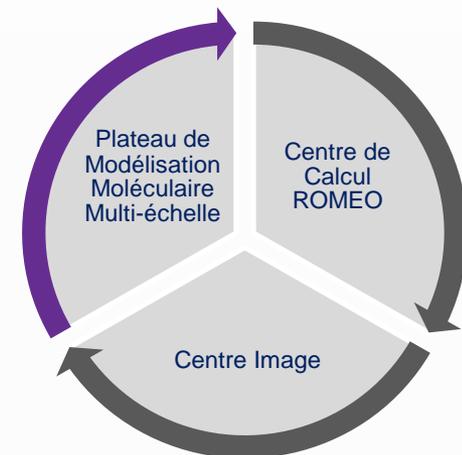
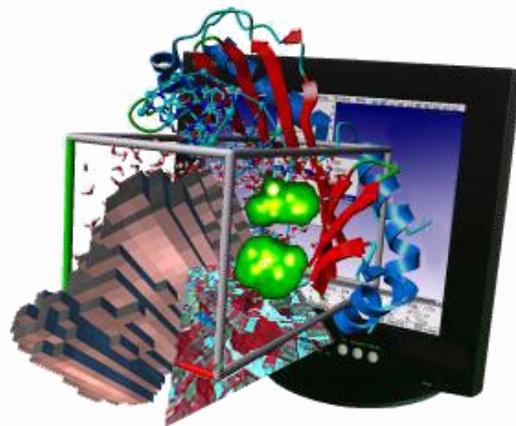
Modélisation moléculaire multi-échelles : de l'échelle de l'atome jusqu'à celle de l'organe dans le domaine du vivant.

Comprendre puis de prédire des comportements de systèmes complexes.
Lien avec les activités expérimentales des différents domaines

Structures tridimensionnelles + leurs dynamiques
⇒ caractéristiques + relations de type structures/fonctions.



modélisation moléculaire multi-échelles



santé

prédire le comportement de nouvelles molécules thérapeutiques avec leur cible et d'accélérer ainsi le développement expérimental de nouveaux médicaments.

physique moléculaire

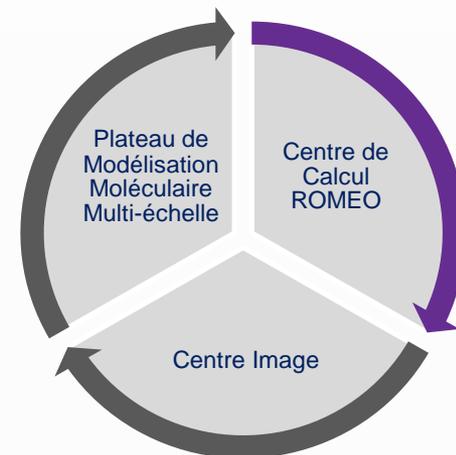
absorption du gaz carbonique dans le champagne avec l'étude de la structure cristallière de matériaux et de leurs défauts, pour des usages dans l'électronique.



Centre de calcul ROMEO

The ROMEO HPC Center is a platform hosted by URCA since 2012

- Funded by European Community, French government, Champagne-Ardenne Council and the city of Reims
- high performance computing resources
- for both industrial and academic researchers in the region
- an in-depth expertise in different engineering fields: HPC, applied mathematics, physics, biophysics and chemistry.
- first *Cuda Research Center* in France



Romeo HPC Tesla Cluster

Computing

Displaying



5th 3131 MFLOPS/W
Bull Cool Cabinet Door



151th 254.9 Tflops
Linpack

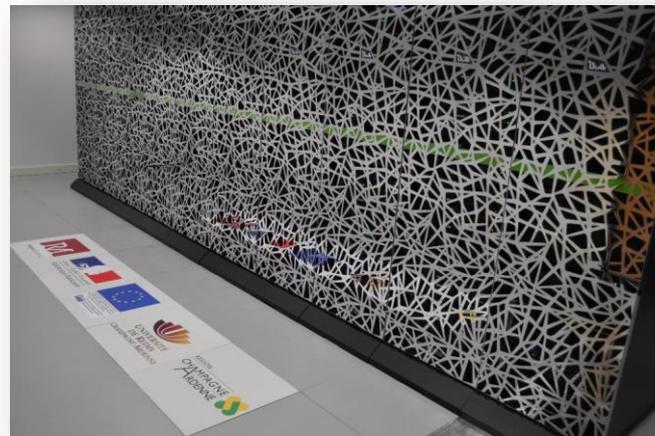


260 NVIDIA Tesla
K20X accelerators



130 Bull servers
bullx R421 E3 – Bull AE & MPI

260 INTEL Ivy Bridge E5-2650 v2
Processor, non-blocking **Mellanox**
Infiniband, Slurm, 88 To Lustre
(NetApp), 57 To home, 100 To Storage



Big Data, on-demand and remote

VirtualGL technology servers
Quadro 6000 & Maxwell

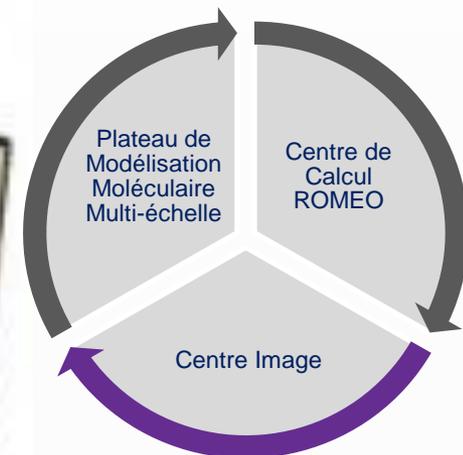
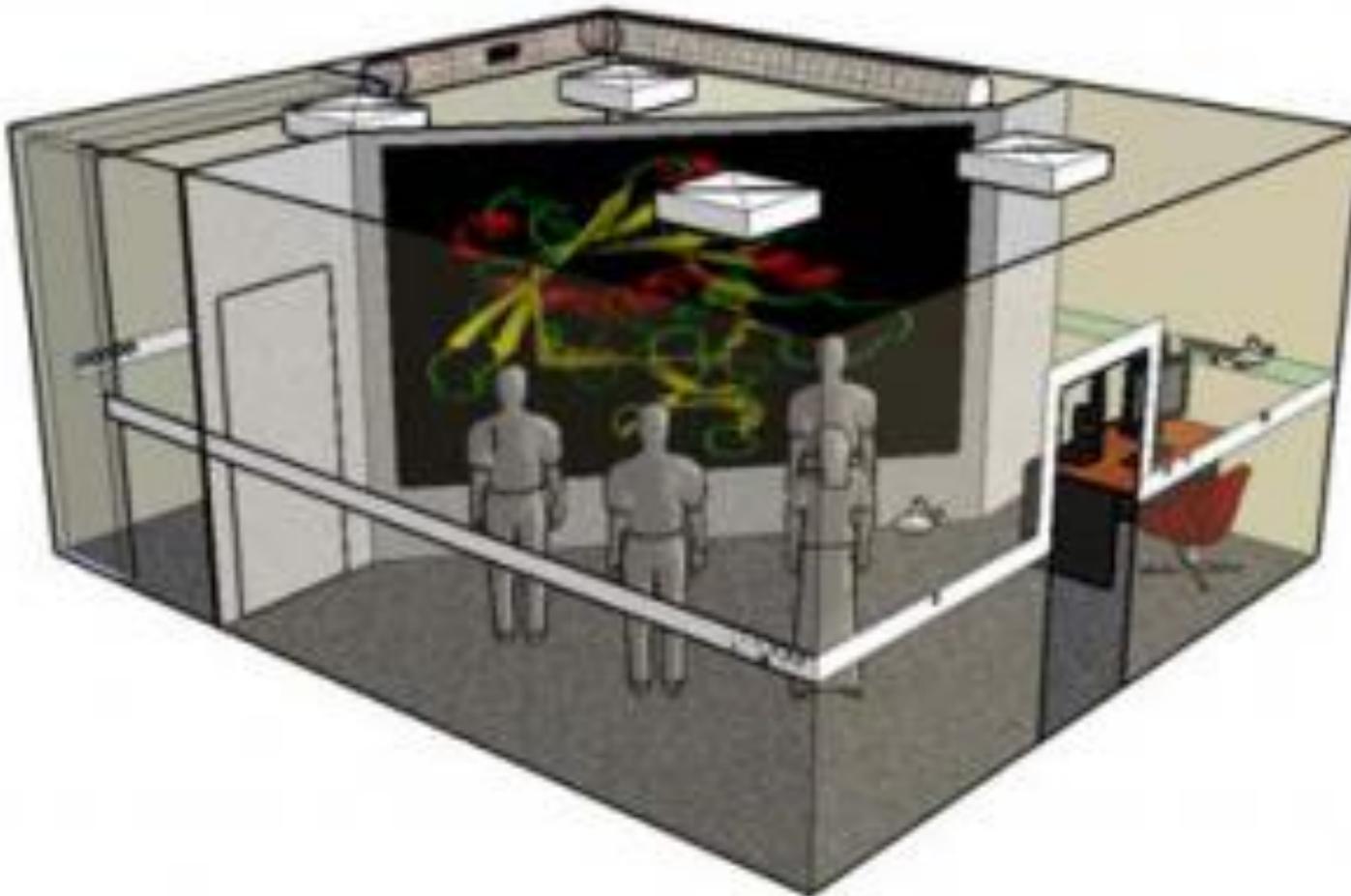
NVIDIA GRID + vGPU Virtualisation
NVIDIA VGX K2

Scalable Graphics 3D cloud solution
NVIDIA K6000



imagerie numérique

Raccorder les chercheurs à leurs modèles



imagerie numérique

Projecteur Full HD en stéréo active.

Ecran 3m90 x 2m20

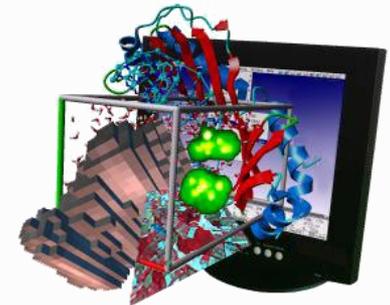
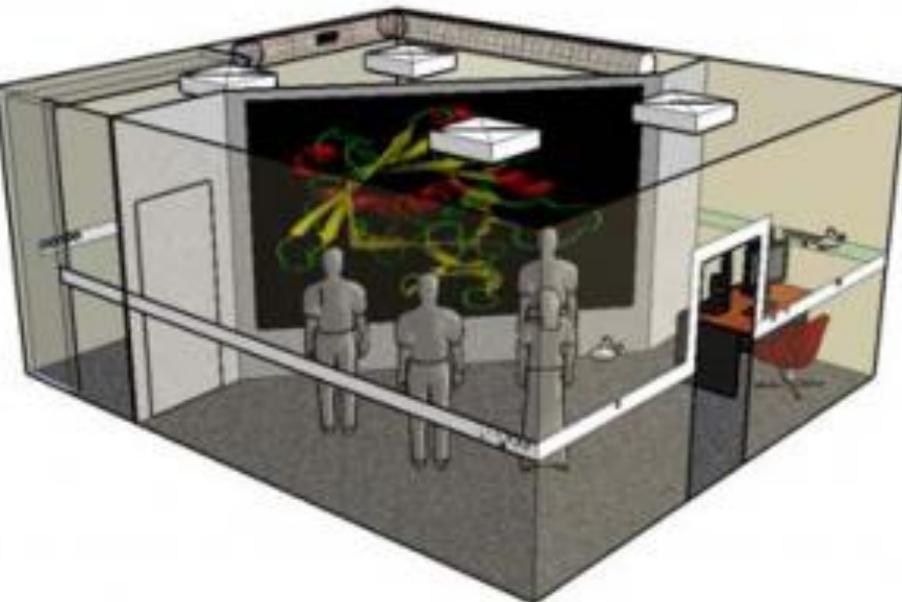
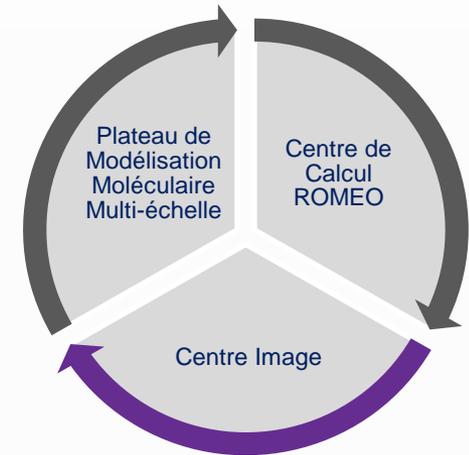
Visu déporté stéréo depuis ROMEO (Quadro6000)

Suivi/tracking (TrackdSDK et 3 caméras infra-rouges).

Système à retour d'effort PHANTOM OMNI.

Microsoft® Kinect et ASUS XTion®.

Écrans autostéréoscopiques



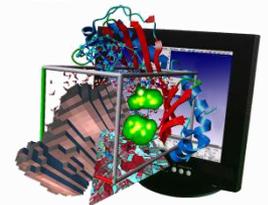
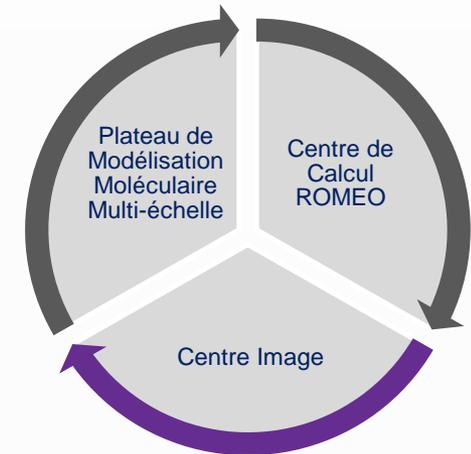
imagerie numérique

Médical :

- Imagerie biomédicale dynamique
 - CHU de Reims ou à l'Institut Jean Godinot (cancer)
 - suivi spatio-temporel de structures hautement déformables
- La visualisation et interaction 3D relief
- Visualisation immersive et ses applications à la microscopie fonctionnelle du vivant,
- **Analyse de masses de données en imagerie médicale, (ROME0)**
- Simulation dynamique du comportement structural de macromolécules biologiques en interactions,

Et autre :

- Evaluation de la dégradation des états de surfaces des sols,
- Numérisation 3D et ingénierie virtuelle,
- Gestion de connaissances spatiotemporelles imparfaites dans les systèmes d'information géographique.
- Valorisation du patrimoine archéologique
- Prototypage virtuel 3D et packaging



P3M + ROMEO

AMIDE : "Automatic Molecular Inverse Docking Engine"

Développement d'une méthode de distribution de calculs de docking moléculaire pour le criblage inverse de protéines à haut débit.

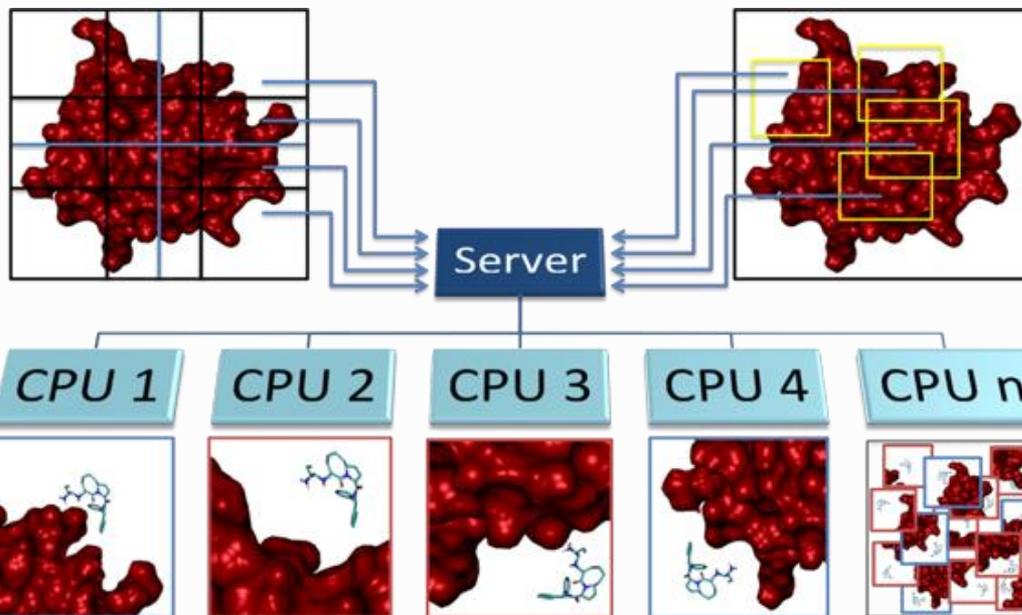
MEDyC (UMR CNRS 7369 Reims)

Calcul pour 1 ligand :

10 000 protéines (dans BD)

* 15 docking sur 15 sites (moy)

* 1 heure



ROMEO :

- Distribution des calculs
- Docking GPU



P3M + CI

Nouveau mode de représentation des structures secondaires des protéines.

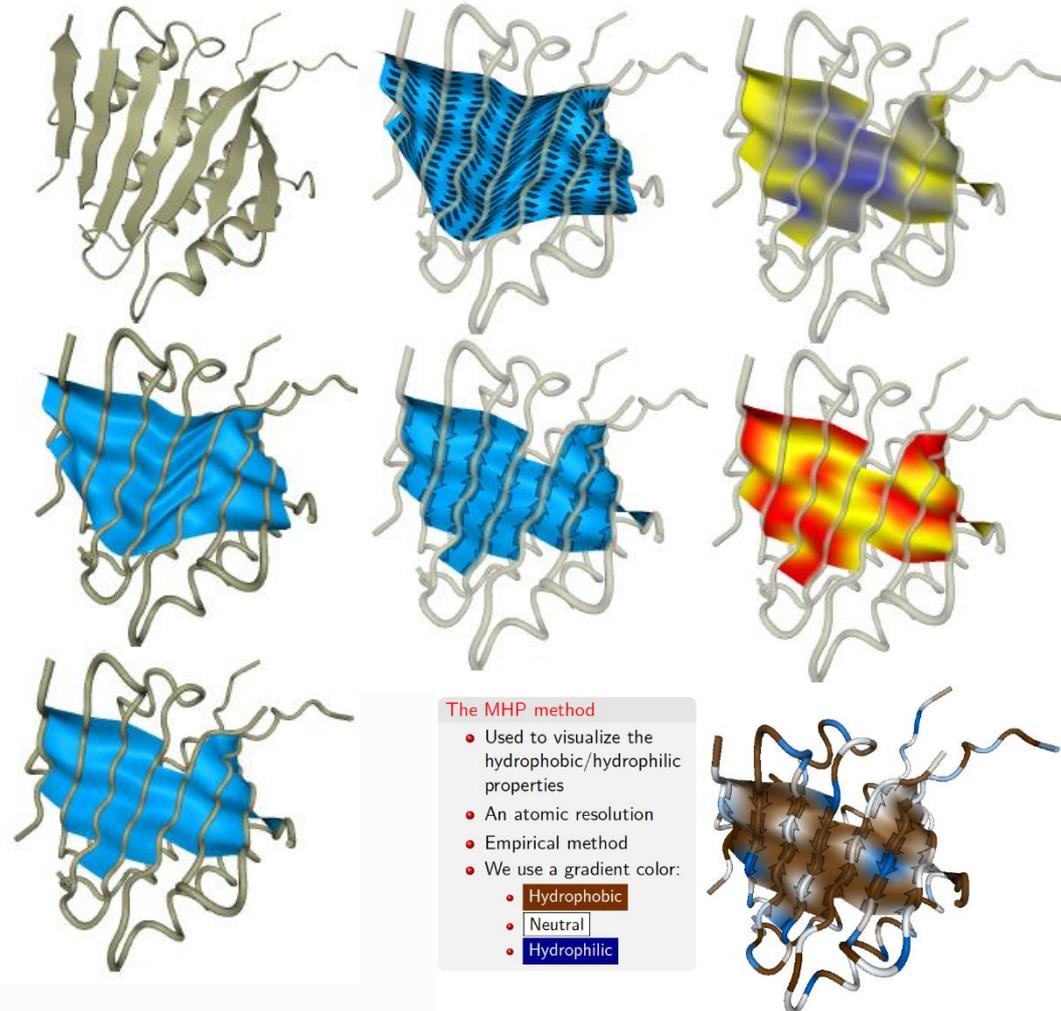
- brins -> tissus/tapis
- couleurs = propriétés physico-chimiques (tailles des acides aminés)

SheHeRASADe

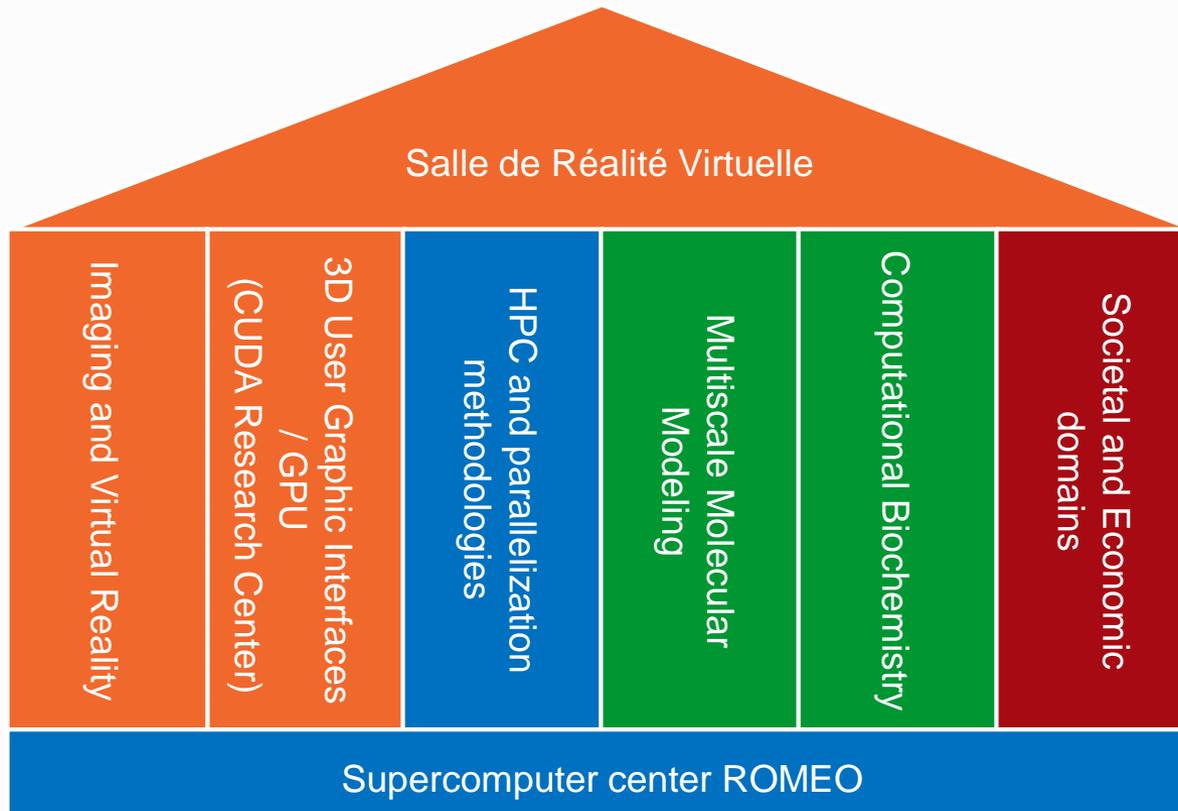


(Image: Éditions Albert-René/Gosciny-Uderzo)

Sheets Helper for RepresentAtion of SurfAce Descriptors



Slide de mars 2000 retrouvée





Arnaud RENARD

arnaud.renard@univ-reims.fr

