



Arnaud RENARD

[arnaud.renard@univ-reims.fr](mailto: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,
- COPIL = 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

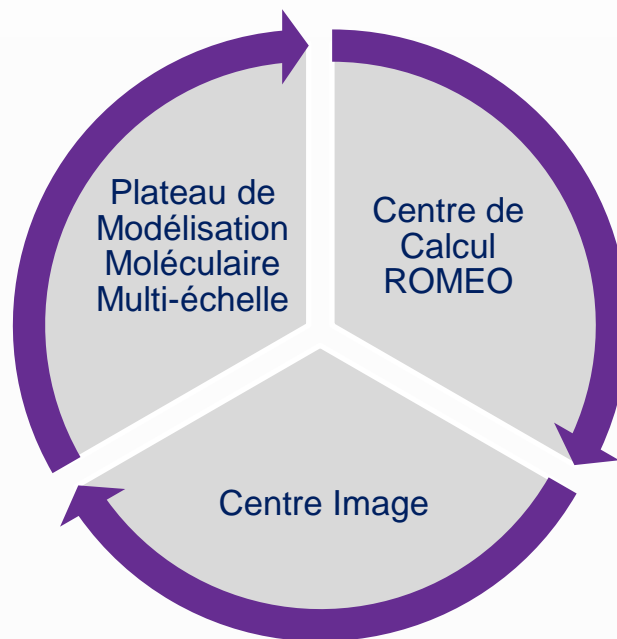
CENTRE  
IMAGE





# Thématiques

modélisation  
moléculaire



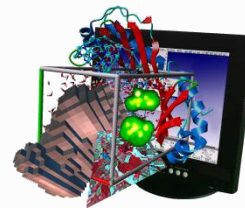
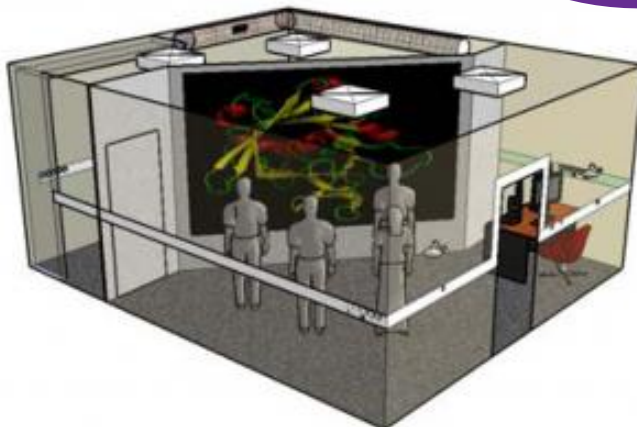
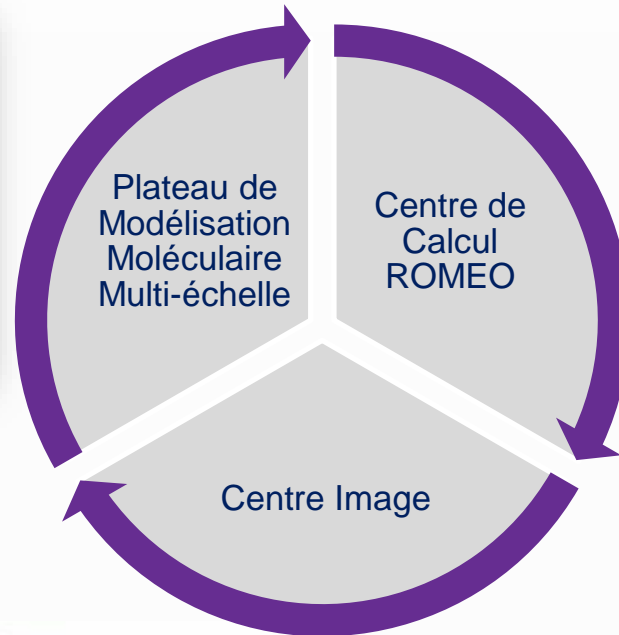
mésocentre

imagerie numérique

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





# Equipements



# Réseaux

PIA ANR INFRA Santé

ReNaBi

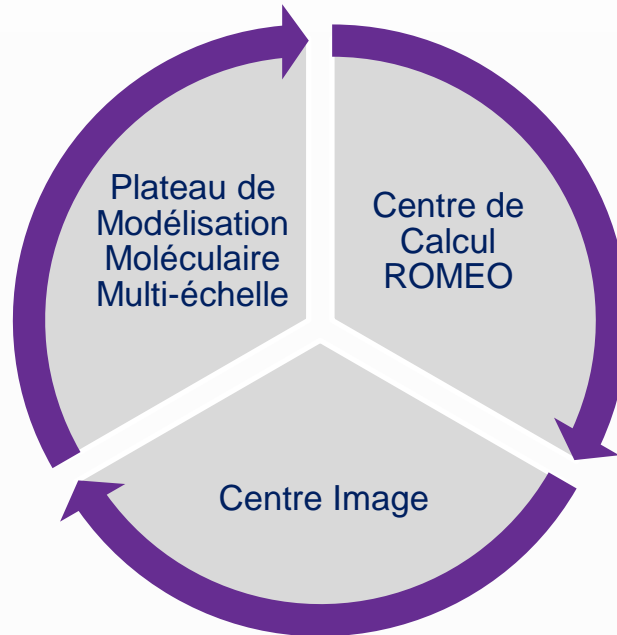
IFB-NE UMS  
gère les 23 plateaux  
De bio-info



**ELASTIN** European Laboratories  
Association in STructural  
INvestigations

**SOLIANCE**  
Naturally innovative

**IBiSA**  
INFRASTRUCTURES  
BIOLOGIE SANTÉ  
ET AGRICULTURE  
Santé / Agro



PIA FSN RECOVER3D

FUI16 ICOS 

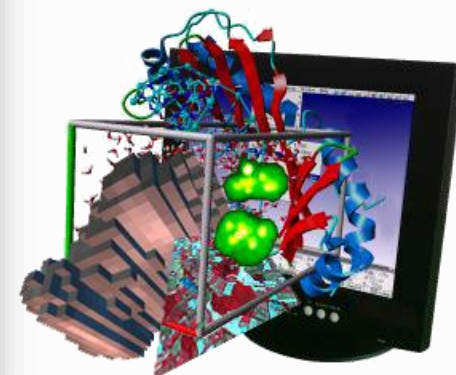
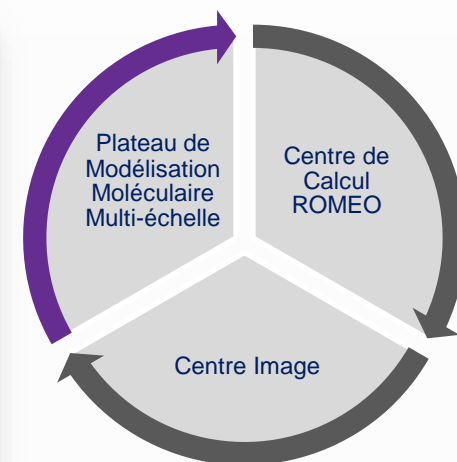
ANR V-MONITOR

INNOVATION Nutristic

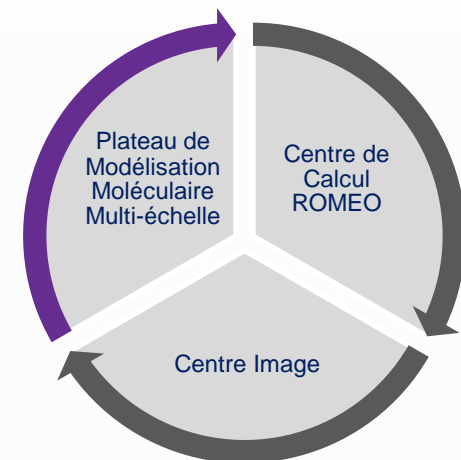
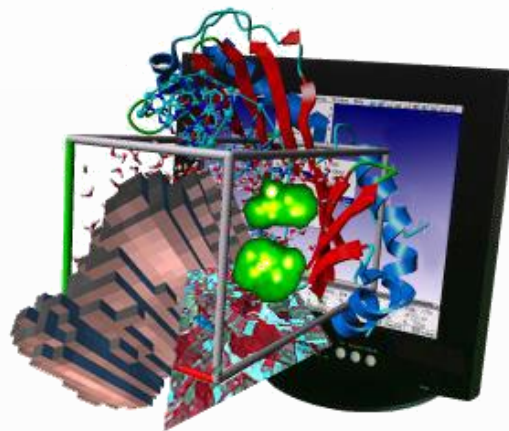
Emergence DURABIN



# modélisation moléculaire multi-échelles



# modélisation moléculaire multi-échelles



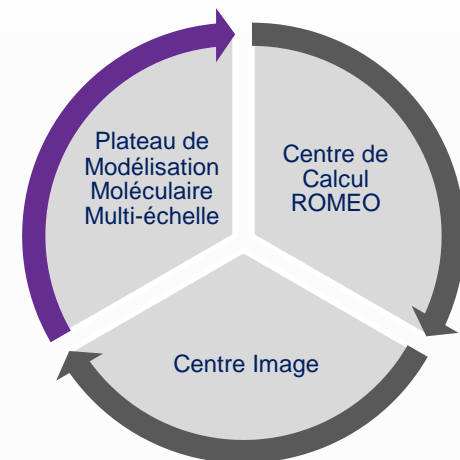
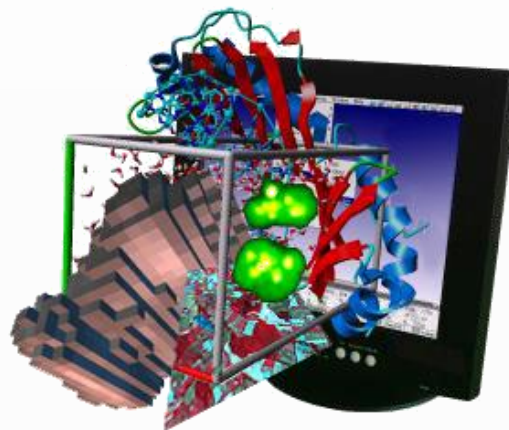
Modélisation moléculaire multi-échelles : de l'échelle de l'atome jusqu'à celle de l'organe dans le domaine du vivant.

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

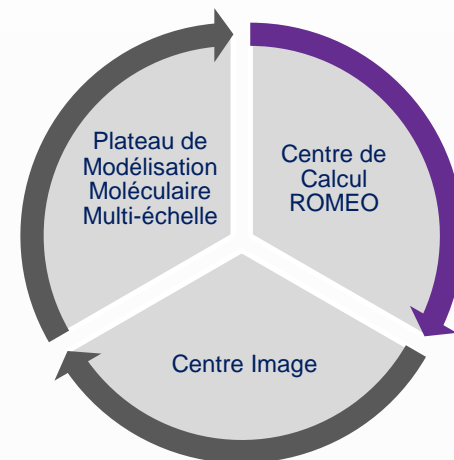
absorption du gaz carbonique dans le champagne avec l'étude de la structure cristallière de matériaux et de leurs défauts, pour des usages dans l'électronique.



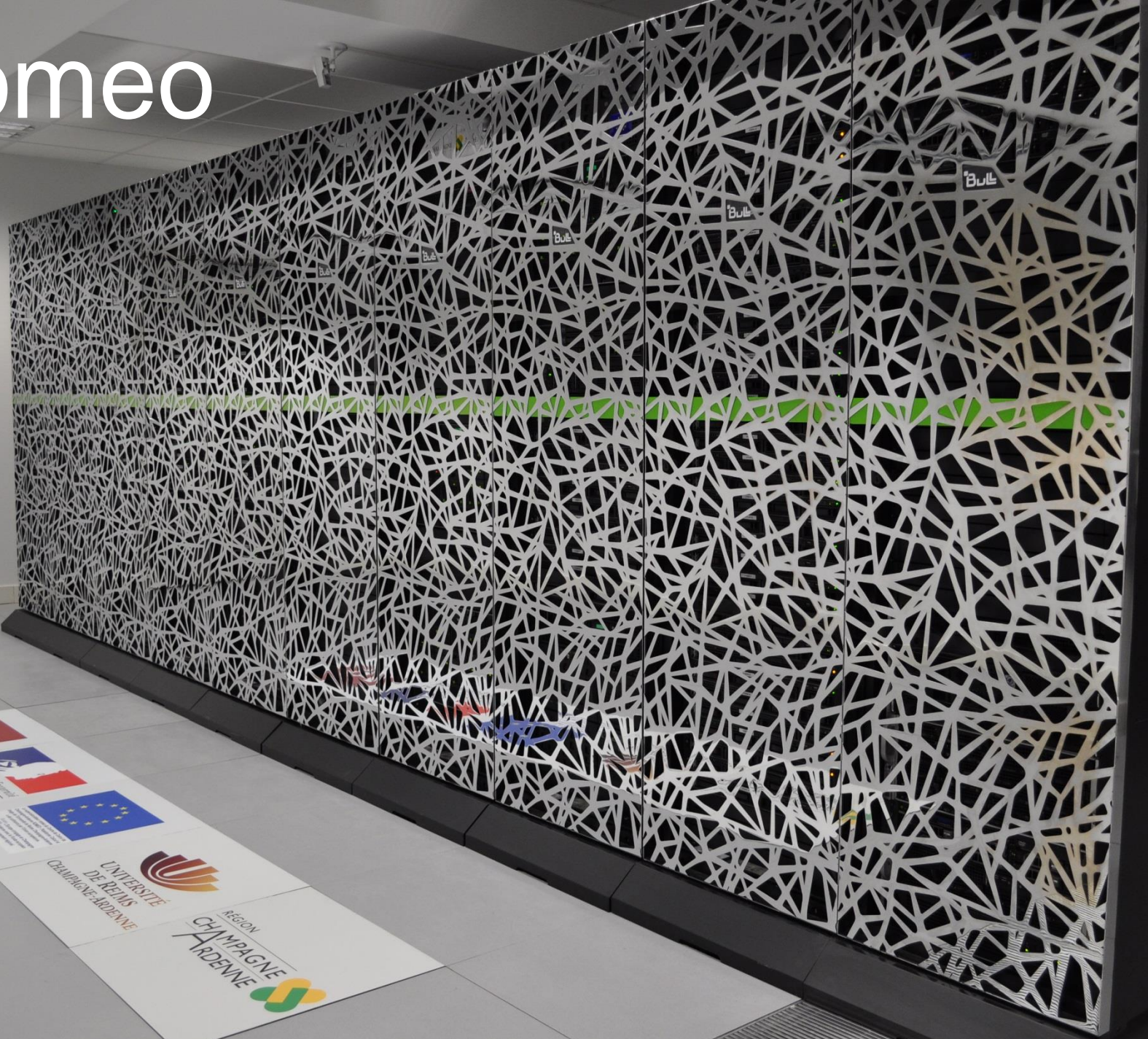
# Centre de calcul ROMEO

## 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





# Romeo HPC Tesla Cluster

## Computing

## Displaying



**5<sup>th</sup>** 3131 MFLOPS/W  
Bull Cool Cabinet Door



**151<sup>th</sup>** 254.9 Tflops  
Linpack

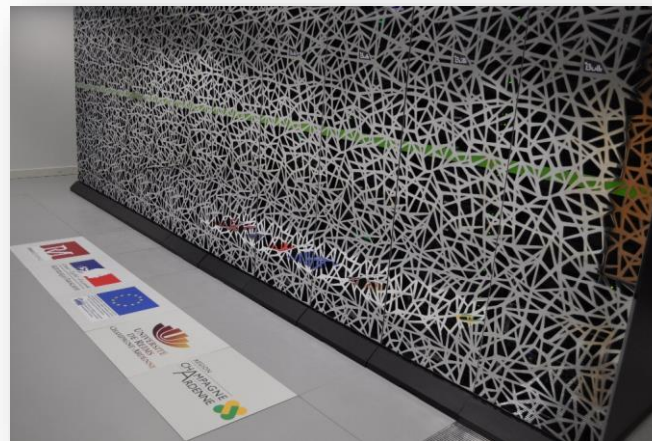


260 NVIDIA Tesla  
**K20X** accelerators



**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

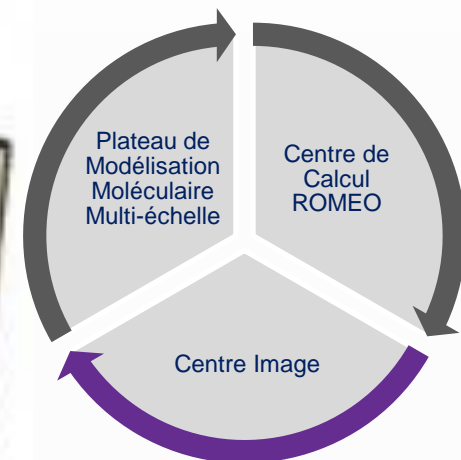
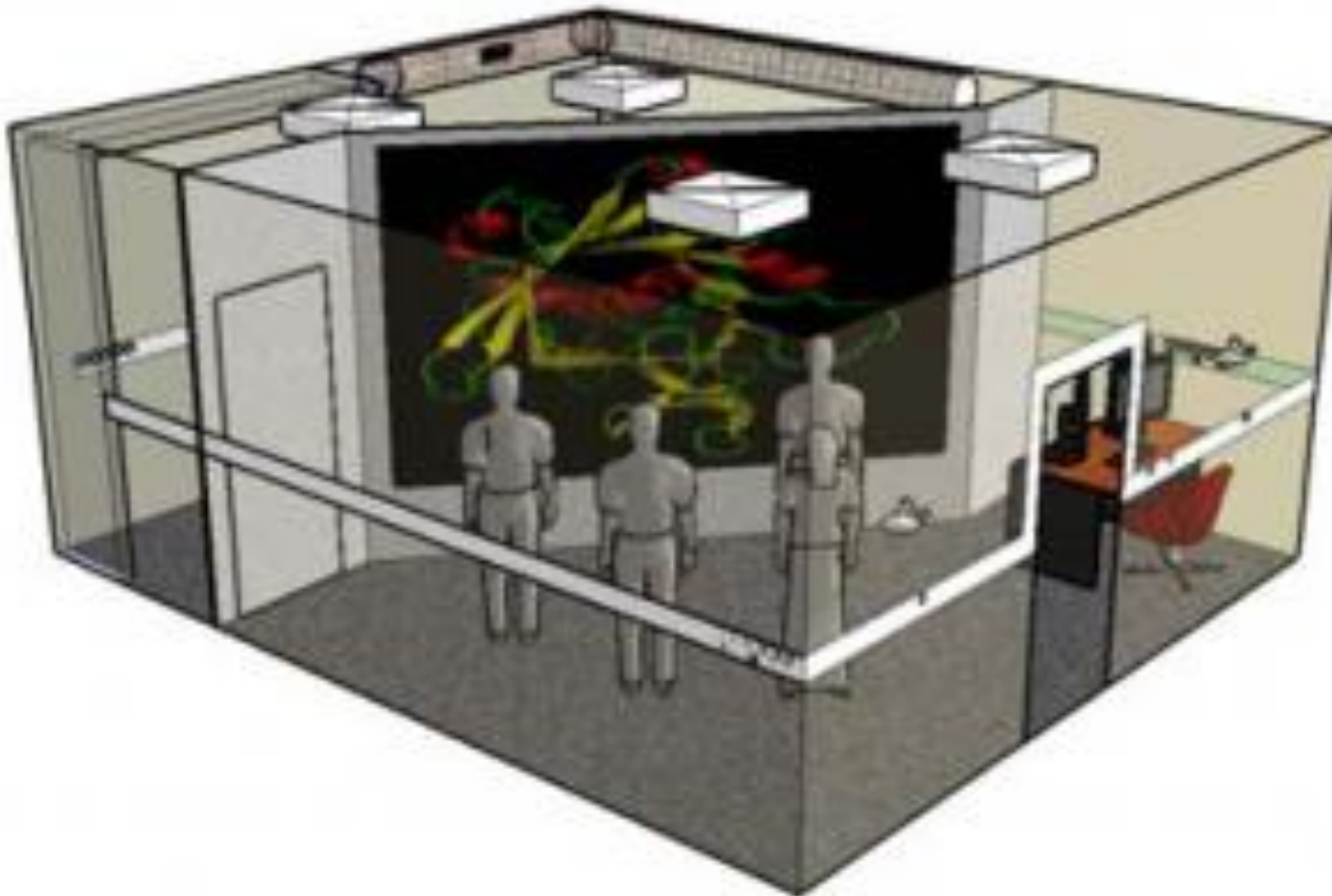
**NVIDIA GRID + vGPU** Virtualisation  
**NVIDIA VGX K2**

**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

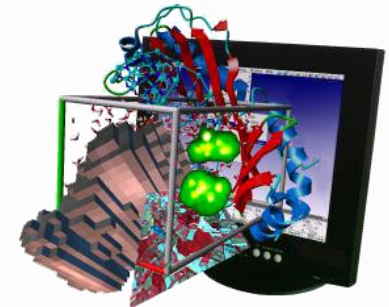
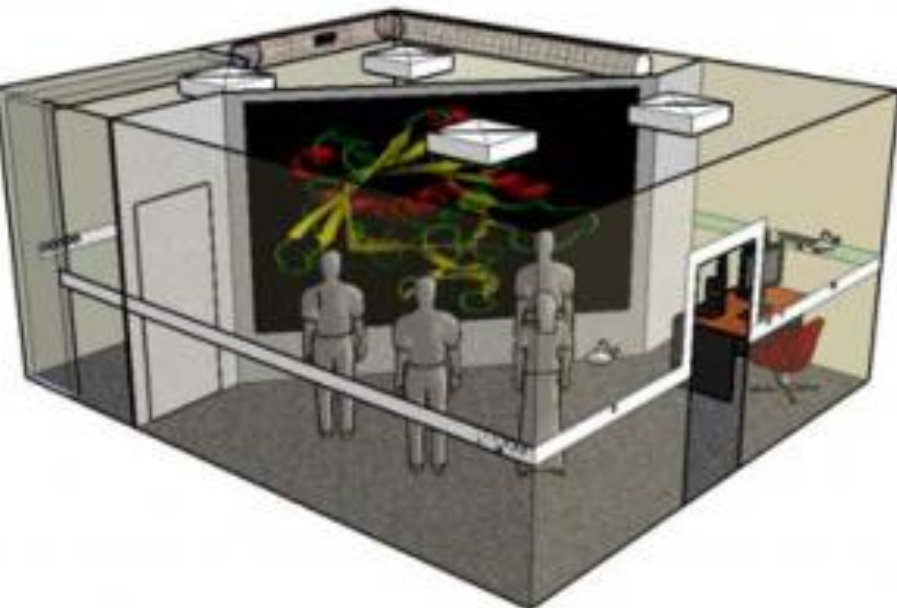
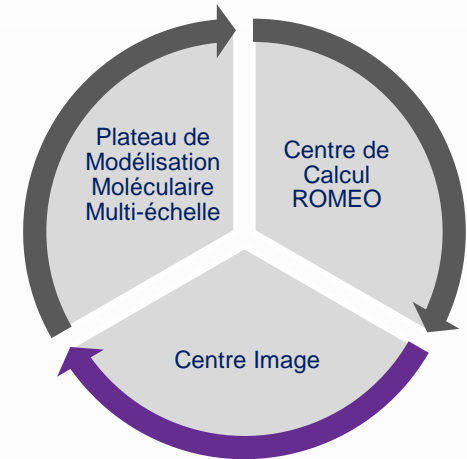
Visu déporté stéréo depuis ROMEO (Quadro6000)

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

Système à retour d'effort PHANTOM OMNI.

Microsoft® Kinect et ASUS XTion®.

Écrans autostéréoscopiques



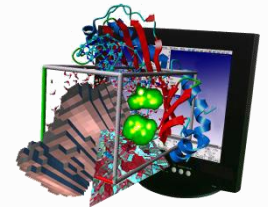
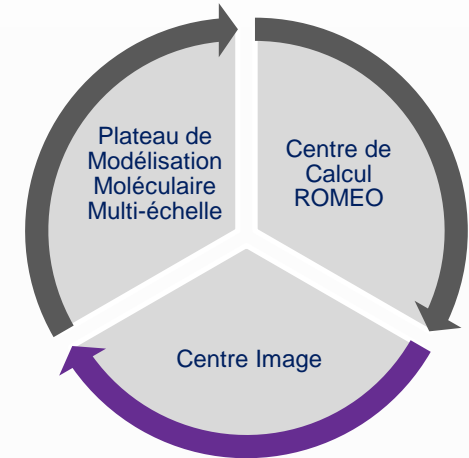
# imagerie numérique

## 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.

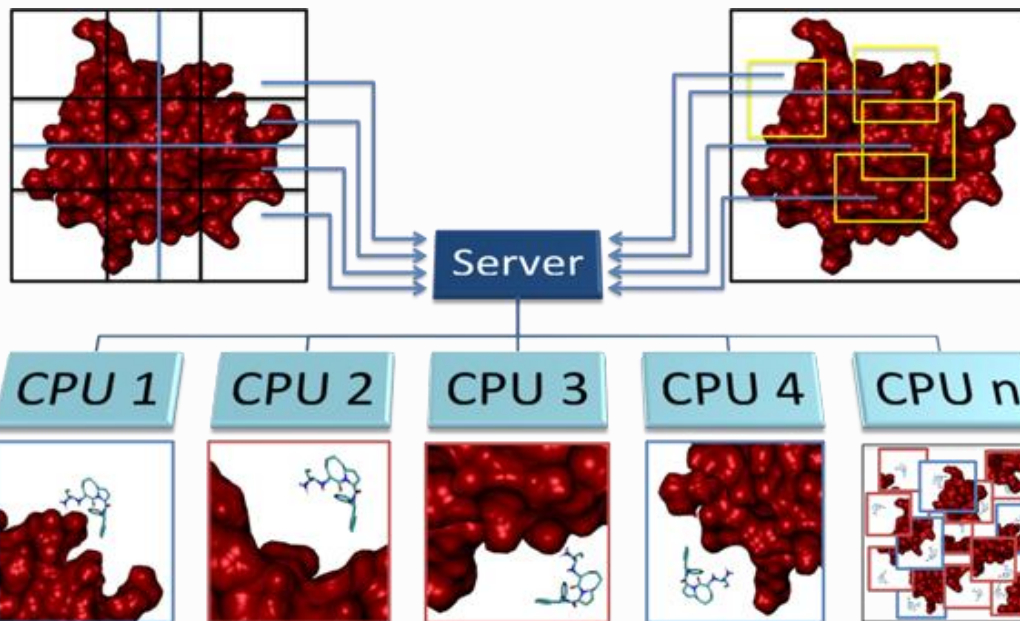
MEDyC (UMR CNRS 7369 Reims)

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.

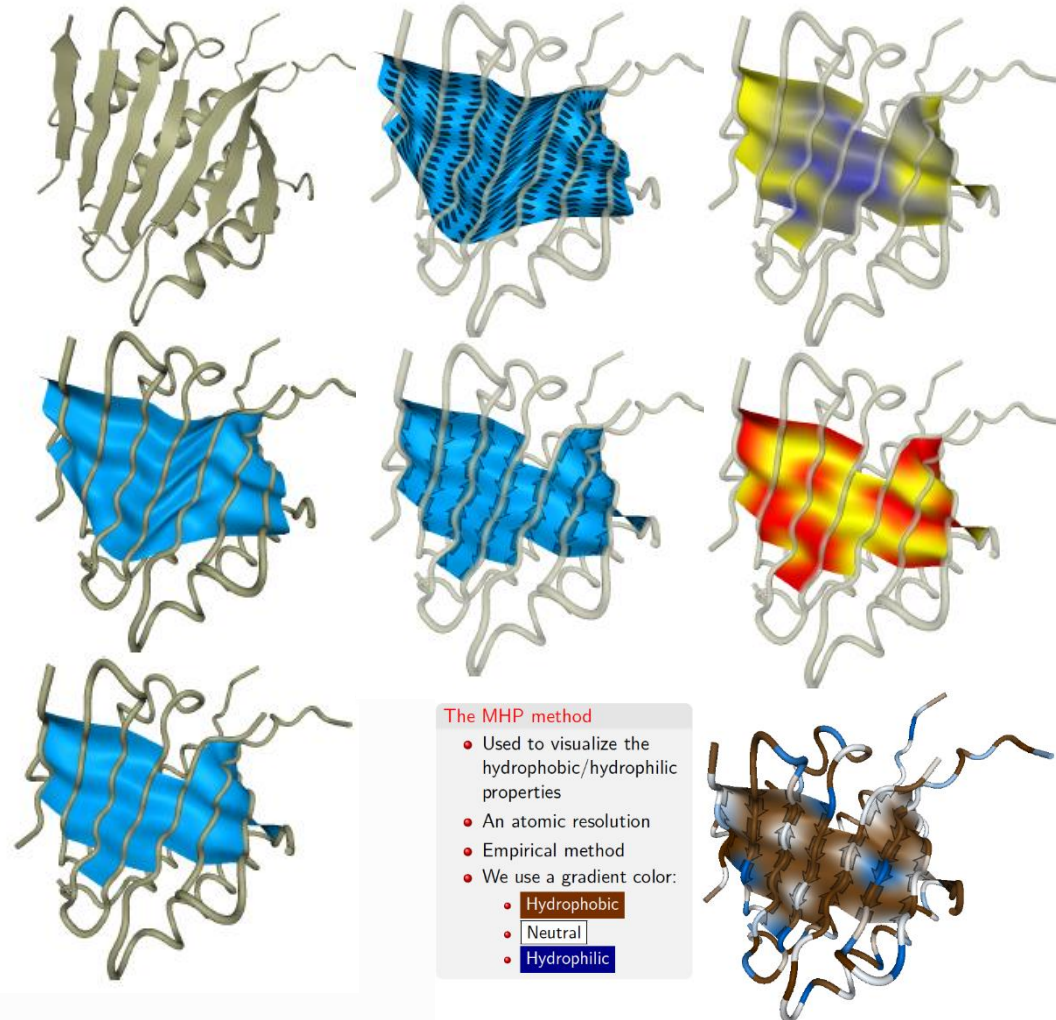
- brins -> tissus/tapis
- couleurs = propriétés physico-chimiques (tailles des acides aminés)

SheHeRASADe

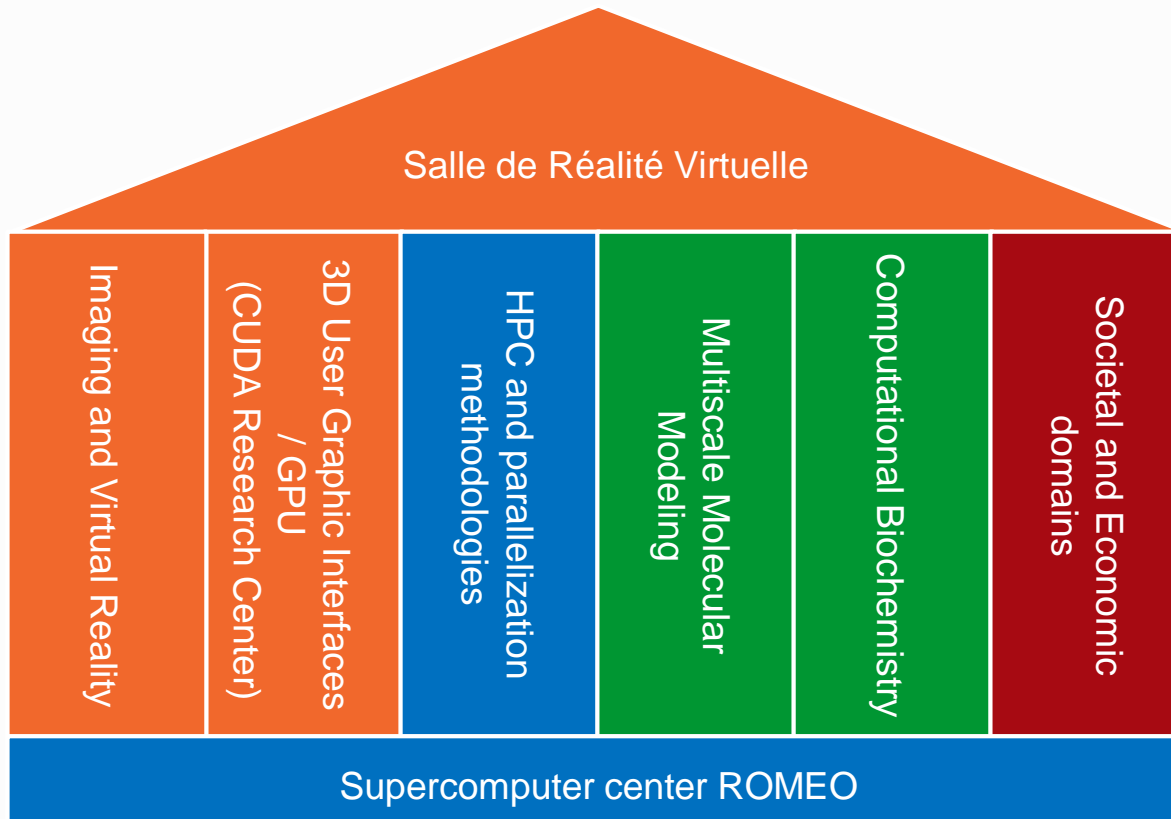


(Image: Éditions Albert-René/Gosciny-Uderzo)

Sheets Helper for RepresentAtion of SurfAce Descriptors



# Slide de mars 2000 retrouvée





Arnaud RENARD

[arnaud.renard@univ-reims.fr](mailto:arnaud.renard@univ-reims.fr)

