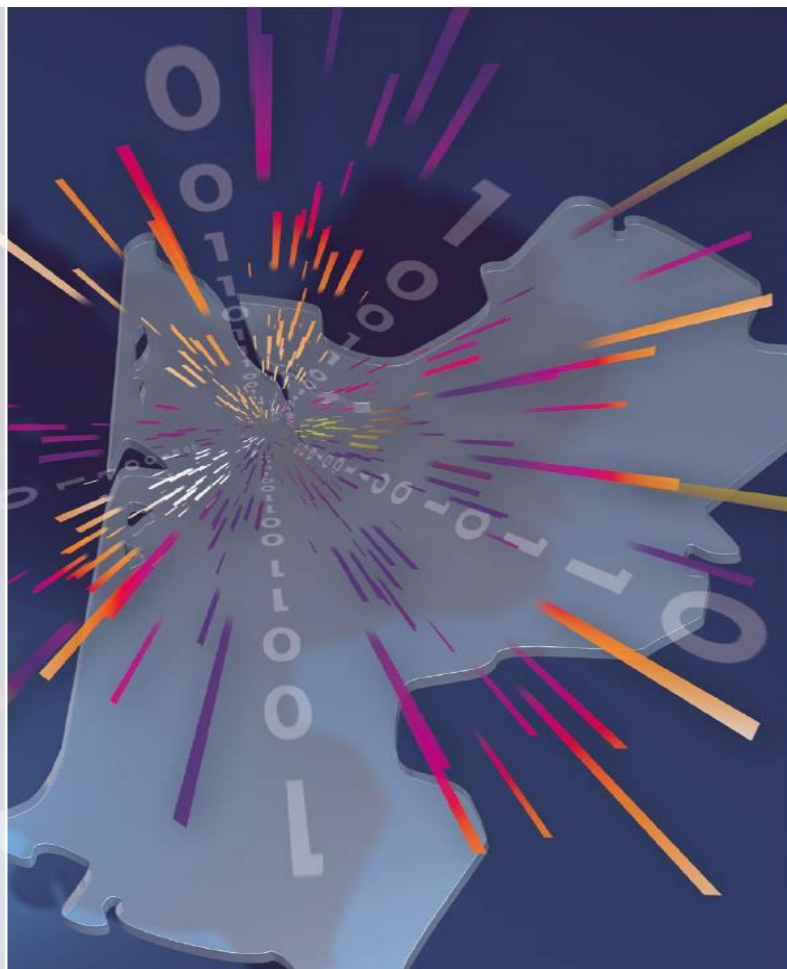


Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain

Rapport d'activités

2011 - 2014



Rapport d'activités du Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain, plateforme commune de l'Université de Bordeaux, de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour et des organismes de recherche associés.

**Bordeaux
Novembre 2014**

Préambule

Le Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain (MCIA) est un centre de ressources commun créé à l'origine par le Pôle de Recherche et d'Enseignement Supérieur (PRES) Université de Bordeaux, l'Université de Pau et des Pays de l'Adour (UPPA), l'Institut Polytechnique de Bordeaux (IPB) et plusieurs organismes de recherche associés (INRIA, CNRS). Cette plateforme a pour objectif de mettre à disposition des chercheurs des laboratoires et des entreprises d'Aquitaine un plateau technique de qualité et un lieu d'échange d'expériences et de compétences dans le domaine du calcul intensif.

Le MCIA entend répondre aux besoins croissants d'une communauté scientifique toujours plus large et a pris en 2010 la suite du Pôle M3PEC (Modélisation Microscopique et Mésoscopique en Physique, en Environnement et en Chimie). Ce projet est soutenu financièrement par le Conseil Régional d'Aquitaine (volet plate-forme de l'appel à projet 2010), l'Europe via les fonds Feder, des établissements Bordelais et l'Université de Pau et des Pays de l'Adour.

Parmi les points forts de ce projet, on peut citer l'acquisition d'un supercalculateur (inauguré et mis en service en novembre 2011) et tout un environnement technique et humain mobilisé pour une gestion optimale des ressources et le développement des activités associées au calcul intensif en Aquitaine.

Ce rapport détaille les divers aspects du projet MCIA et montre la diversité des activités menées à l'aide des moyens techniques et humains sur la période 2011-2014. Il décrit ainsi l'organisation du Mésocentre, les conditions d'utilisation des matériels, des exemples de l'impact du projet sur les activités de recherche et de développement des acteurs académiques et socio-économiques Aquitains.

Jean-Christophe Soetens
Responsable Scientifique du MCIA

Contacts :

Jean-Christophe Soetens
Institut des Sciences Moléculaires
Université de Bordeaux
Jean-christophe.soetens@u-bordeaux.fr

Pierre Gay
Responsable technique du projet MCIA
Université de Bordeaux, DSI - Bureau de Calcul
pierre.gay@u-bordeaux.fr



Le MCIA est cofinancé par l'Union Européenne. L'Europe s'engage en Aquitaine avec le Fonds Européen de développement régional.



Sommaire

1	Présentation du Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain	4
1.1	Introduction et historique	4
1.2	Objectif du projet	5
1.3	Budget et partenaires du projet	5
1.4	Moyens matériels et logiciels	6
1.4.1	Infrastructure	6
1.4.2	Equipements informatiques.....	6
1.4.2.1	Cluster HPC « Avakas »	7
1.4.2.2	Clusters grille EGI	7
1.4.3	Logiciels.....	8
1.5	Positionnement Régional et National du Mésocentre	8
1.6	Partenariat	9
1.7	Equipe technique	9
1.8	Organisation	10
1.9	Dates importantes du projet.....	11
2	Activités	12
2.1	Indicateurs d'utilisation des moyens de calcul	12
2.1.1	Cluster HPC Avakas	12
2.1.2	Cluster grille EGI.....	15
2.1.3	Utilisation des les centres nationaux	16
2.2	Animation scientifique	17
2.2.1	Liste des manifestations organisées	17
2.2.2	Mésochallenges 2014.....	18
2.3	Assistance à des projets de recherche	19
2.3.1	Exemples de collaborations	19
2.3.2	Projet PEPS CNRS-Idex de Bordeaux : métamorphose de <i>Xenopus laevis</i>	20
2.4	Actions vers les PMI-PME.....	21
3	Projets de recherche.....	23
3.1	Chimie et Biologie des Membranes et des Nanoobjets	23
3.2	Centre Lasers Intenses et Applications	28
3.3	Apprentissage des agents et politiques macroéconomiques	31
3.4	Institut de Mécanique et d'Ingénierie de Bordeaux	33
3.5	Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux.....	44

3.6	INRA.....	48
3.7	INSERM	50
3.8	Institut des Sciences Analytiques et de Physico-chimie pour l'Environnement et les Matériaux	53
3.9	Institut des Sciences Moléculaires	58
3.10	Laboratoire des Composites ThermoStructuraux.....	69
3.11	Laboratoire des Fluides Complexes et leurs Réservoirs.....	72
3.12	Laboratoire de mathématiques et de leurs applications	77
3.13	Laboratoire Ondes et Matière d'Aquitaine	80
3.14	Domaine Mathématique – Informatique	83
3.14.1	Projets LaBRI / CBiB	83
3.14.2	Projets LaBRI / INRIA.....	84
3.14.3	Projets IMB / INRIA.....	84
3.14.4	Projets UPPA / INRIA.....	85
3.14.5	Moyens de calcul.....	85
3.14.6	Principales contributions scientifiques	86
3.15	Observatoire Aquitain des Sciences de l'Univers.....	93
3.15.1	UMR 5805 EPOC CNRS/Université de Bordeaux	95
3.15.2	UMR 5804 LAB CNRS/Université de Bordeaux.....	97
3.16	Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur Appliquées à la Mécanique et au génie Electrique	101

1 Présentation du Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain

1.1 Introduction et historique

La simulation numérique a connu un très fort développement à l'Université de Bordeaux depuis une vingtaine d'années. Dès 1993 apparaît la nécessité de regrouper les moyens de calcul de plusieurs laboratoires dans un centre de calcul. Le *Pôle MNI* (Modélisation Numérique Intensive) dirigé par Pierre Charrier remplira cette fonction, jusqu'en 1998, pour plusieurs laboratoires de Chimie, de Physique et de Mathématiques Appliquées. Ce centre de calcul avait au moment de sa création des calculateurs Cray J916 et T3E. L'élargissement des acteurs du calcul intensif et le besoin d'une plateforme viable de niveau intermédiaire, i.e. entre les centres nationaux (IDRIS, CINES) et les laboratoires, conduira ensuite à la création du *Pôle M3PEC* (Modélisation Microscopique et Mésoscopique en Physique, en Environnement et en Chimie) animé par Samir Matar.

En 2002 un supercalculateur *IBM p690* (32 processeurs et 64 Go de mémoire) a été acquis, ce qui a permis de consolider la communauté scientifique du campus Bordeaux 1. Forts de cette nouvelle dynamique, l'Action Concertée Incitative du MRNT pour la création de Mésocentres Régionaux et un cofinancement assuré en grande partie par la Région Aquitaine ont assuré la poursuite du développement du centre de calcul. Sur le plan de l'ouverture ceci impliquait la satisfaction de besoins croissants avec les nouvelles structures (IECB, CELIA, LaBRI) et surtout une ouverture très forte au-delà du campus de Bordeaux 1 en intégrant les partenaires naturels en Aquitaine que sont les autres universités Bordelaises, en particulier l'Université Bordeaux 2 et l'Université de Pau et des Pays de l'Adour. Les Ecoles d'Ingénieurs bordelaises qui intègrent un enseignement au calcul parallèle ont alors la possibilité d'accéder aux machines du Pôle dans le cadre d'un cursus bien défini.

Le supercalculateur installé en 2006 était un *IBM p575* offrant pour les applicatifs en interactif 1 noeud de 16 processeurs cadencés à 1.9 GHz et 64 Go de mémoire ; les calculs impliqués servant essentiellement de validation aux travaux en traitement par lots. Ces derniers disposant de 14 noeuds de 16 processeurs chacun, cadencés à 1.5 GHz et avec 32 Go de mémoire, soit un total de 224 processeurs délivrant une puissance de crête globale de 1.34 Tflops et pouvant accéder à 448 Go de mémoire distribuée.

En 2010, pour répondre aux besoins croissants d'une communauté scientifique toujours plus large, le Pôle M3PEC devient le MCIA (Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain) et diversifie ses services et moyens de calcul (Grille et cluster). Porté par l'ensemble des établissements Aquitains, ce projet a l'ambition de donner une véritable dimension régionale au Mésocentre. Ainsi, il ne se limite pas à la simple mise à disposition d'équipements mais vise :

- La mise en place d'actions impliquant l'ensemble des acteurs pour favoriser le développement de la recherche dans l'ensemble des domaines concernés par la simulation numérique.
- L'aide aux transformations que doivent opérer de petites ou moyennes entreprises d'Aquitaine confrontées à des problématiques de plus en plus complexes.
- La stimulation des échanges et transferts de compétences au sein d'une vaste communauté par l'organisation d'événements favorisant les échanges.

Ce projet, porté par Franck Rubi, de l'Université Bordeaux 1 pour le PRES Université de Bordeaux prévoyait notamment l'acquisition d'un supercalculateur et c'est la solution proposée par les sociétés *Clustervision/DELL* qui a été sélectionnée en avril 2011. Ce nouveau supercalculateur de 3168 cœurs fournissant 39 Tflops de puissance de calcul a été inauguré et mis en service lors d'une journée scientifique qui s'est tenue à Bordeaux le 25 novembre 2011.

1.2 Objectif du projet

L'objectif est de fournir aux chercheurs des différents établissements partenaires un environnement de calcul puissant et diversifié leur permettant de produire des résultats et au besoin de calibrer leurs problèmes en vue de l'utilisation des très grands outils des centres nationaux ou européens (IDRIS, CINES, PRACE). Il y a par ailleurs une volonté d'ouvrir encore plus le Mésocentre aux formations spécialisées, tant Master qu'Ecoles d'Ingénieurs, mais également aux entreprises régionales (PME, bureaux d'études, StartUp,...),

Les aspects importants de ce projet sont listés ci-dessous :

- Acquisition d'un supercalculateur avec une configuration type Mésocentre de calcul, c'est-à-dire avec des nœuds en mémoire partagée de grande puissance reliés par un réseau très haut débit et faible latence.
- Mise en place d'équipements sur Bordeaux et sur l'UPPA pour une grille dite de «production» intégrée à l'Institut des Grilles et à la grille européenne EGI.
- Renforcement des liens avec les formations Master et Ecole d'Ingénieurs, avec la mise à disposition ponctuelle de moyens de calcul importants.
- Réseau très haut débit reliant les différents centres de Calcul Intensif : LaBRI, IMB, INRIA, DI, CBIB (BX2) et UPPA. Etude de la liaison Bordeaux – Pau par les équipes de RENATER.
- Ouverture du calcul intensif aux entreprises (PME, StartUp,...) d'Aquitaine :
 - par des propositions groupant temps de calcul et compétences à travers des stages Master 2, Ecoles d'Ingénieurs ou thèses.
 - par une assistance technique aux entreprises, aide à l'analyse du projet, à la parallélisation,... (recrutement d'un ingénieur de recherche).
 - par la collaboration avec les programmes soutenus par les pôles de compétitivité.
- Animation scientifique autour du calcul intensif en Aquitaine afin de renforcer la communication et la collaboration entre les différentes communautés scientifiques et pour favoriser les travaux en liaison avec les entreprises d'Aquitaine.
- Assistance à la recherche par la mise à disposition de ressources humaines : aide à la parallélisation et à l'optimisation (recrutement d'un ingénieur de recherche).
- Achat de logiciels spécialisés sur proposition du comité scientifique.
- Equipements pour le post traitement (visualisation).
- Mise à niveau de l'infrastructure technique pour le stockage (minimum 50 To) et l'hébergement (climatisation, groupe eau froide, onduleur, groupe électrogène).

1.3 Budget et partenaires du projet

Le MCIA a obtenu le soutien financier des partenaires suivants :

- PRES Université de Bordeaux (3.3 %)
- Université Bordeaux 1 (7 %)
- Université Bordeaux 2 (2.3 %)
- Université de Pau et des Pays de l'Adour (3.3 %)
- Institut Polytechnique de Bordeaux (1.1 %)
- INRIA Centre de Recherche Bordeaux Sud-Ouest (1 %)
- L'Institut des Grilles CNRS (6.8 %)

- La Région Aquitaine via
 - l'appel à projet plateforme mutualisée (35 %)
 - les fonds FEDER axe 1 (40.2 %)

Budget associé (en k€ HT) :

Investissement	1442
Supercalculateur	165
Noeuds pour la grille régionale	44
Réseau inter-sites	44
Logiciels	96
Post traitement	48
Infrastructures	384
Total Investissement	2225
Fonctionnement	
Réseau inter-sites	11
Ingénieur (assistance aux entreprises)	121
Animation Scientifique	10
Ingénieur (assistance à la recherche)	121
Total fonctionnement	262
Total	2487

1.4 Moyens matériels et logiciels

1.4.1 Infrastructure

Les ressources et l'équipe technique du Mésocentre sont hébergées à la Direction Informatique de l'Université Bordeaux 1.

La salle machine de la Direction des Système d'Information abrite les serveurs du Mésocentre, ainsi que l'Alimentation Sans Interruption (ASI) qui fournit la puissance électrique sécurisée nécessaire aux équipements.

Un système de refroidissement supplémentaire a été rajouté dans le cadre du projet MCIA 2010, afin d'absorber la chaleur dégagée par les équipements du Mésocentre. Ce système est composé d'armoires avec portes arrière équipées d'un circuit d'eau et d'un groupe froid installé sur le toit du bâtiment de la DSI. Ce système permet le fonctionnement des ressources informatiques du Mésocentre dans une salle dont la climatisation ne pourrait pas absorber une telle chaleur.

1.4.2 Equipements informatiques

Le Mésocentre dispose de deux types de ressources de calcul. L'un est destiné au Calcul Haute Performance (*HPC = High Performance Computing*), tandis que l'autre s'inscrit dans le contexte de Calcul Haut Débit (*HTC = High Throughput Computing*) de la grille européenne EGI.

1.4.2.1 Cluster HPC « Avakas »

Le Cluster HPC Avakas a fait l'objet de l'appel d'offres avec dialogue compétitif 2010-055. La procédure de consultation a été conduite par un groupe technique rassemblant 14 personnes issues de la communauté et animée par Jacques Bernard et Pierre Gay, ingénieurs à la DI. Intégré par la société ClusterVision, le matériel de marque DELL a les caractéristiques suivantes:

- 264 serveurs de calcul biprocesseurs
Intel® Xeon® x5675 @ 3.06 GHz
 - 3168 cœurs
 - 4 Go RAM/cœur
 - Puissance de crête: 38,8 Tflop/s
- 4 serveurs quadri-processeur
- Intel® Xeon® E7-4870 @ 2.4GHz
 - 160 cœurs
 - 12 Go RAM/cœur
 - 4*4 disques SAS 10krpm
- Interconnexion Infiniband QDR – switch
Qlogic® 324 ports
- Filesystem parallèle : Fraunhofer FhGFS
 - 120 TB utiles
 - 4 Go/s bande passante agrégée
- 4 serveurs de visualisation déportée bi-
processeur Intel® Xeon® E5-2660 @
2.2GHz
 - 64 cœurs
 - 8 Go RAM/cœur (128 Go RAM /
serveur)
 - 4*2 cartes graphiques NVidia® Tesla®
M2070Q
 - acquisition 2013



1.4.2.2 Clusters grille EGI

Ces deux clusters, intégrés à l'infrastructure de production de la grille EGI sont composés de matériels DELL acquis dans le cadre du marché « Groupement Recherche ». Un serveur supplémentaire est intégré à l'infrastructure iRODS France Grilles (collaboration nationale: <http://www.france-grilles.fr/IMG/pdf/iRODSv2-2.pdf>).

- Cluster DSI Université de Bordeaux
 - 1 Computing Element : 592 cœurs
 - 1 Storage Element + 2 Disk Servers : 80To
 - Interconnectés par Ethernet 1Gb/s
- Cluster INRA Villenave d'Ornon
 - 1 Computing Element : 288 cœurs
 - 1 Storage Element : 20To
 - Interconnectés par Ethernet 1Gb/s
- Serveur FG-iRODS
 - 40 To
 - acquisition 2013

1.4.3 Logiciels

De nombreux logiciels ou librairies libres et utiles à la communauté sont installés sur le cluster: au total, plus de 90 versions sont mises à disposition des utilisateurs. Leur installation est réalisée soit par l'équipe technique, soit par des utilisateurs experts volontaires de la communauté. Les domaines couverts par l'ensemble des logiciels comprennent notamment la programmation (langages, librairies, utilitaires) mais aussi la bio-informatique, la chimie, la mécanique des solides, ainsi que la mécanique des fluides.

Le budget prévu pour l'achat de logiciels a fait l'objet d'un appel d'offre au sein de la communauté. Les besoins exprimés ont été examinés au cas par cas par le comité scientifique qui a décidé des acquisitions suivantes :

- *CLC Assembly Cell* : assembleur de séquence d'un génome (4530 € HT).
- *COMSOL* : simulation multiphysique (25186 € HT).
- *Crystal* : calculs de structures électroniques pour systèmes périodiques (5800 € HT).
- *Gaussian09 + linda* : calculs de chimie quantique et version parallèle (10709 € HT).
- *Matlab* : calculs formels et numériques (licences en cours de définition).

1.5 Positionnement Régional et National du Mésocentre

Un Mésocentre tel que le MCIA a un rôle essentiel car il offre à chaque chercheur, indépendamment de sa localisation géographique ou d'affectation, la possibilité de développer ses activités dans le domaine du calcul intensif : écriture et tests de codes de calcul, utilisation des logiciels, réalisation de certains types de simulations ou encore pré ou post-traitement des données. La constitution d'une communauté liée par un Mésocentre permet par ailleurs le rapprochement et les échanges d'expériences entre chercheurs de disciplines très diverses.

Certaines communautés ont néanmoins des besoins spécifiques incompatibles ou complémentaires au Mésocentre. Quelques laboratoires disposent ainsi de moyens informatiques de proximité et de ressources humaines associées en accompagnement de la recherche :

- Plate-forme de calcul intensif des laboratoires de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour (AAP 2010 du CRA, convention n° 10002469).
- Pôle Modélisation de l'Institut des Sciences Moléculaires (UMR 5255 CNRS – Université Bordeaux ; AAP 2011 du CRA, dossier 2011604002PFM).

Les autres plateformes ou équipements significatifs participant à la dynamique du Mésocentre sont les suivants :

- PLAFRIM, plateforme expérimentale de quatre composantes (IMB, INRIA, LaBRI, LMA)
- Départements DuMAS et TREFLE de l'Institut de Mécanique et d'Ingénierie de Bordeaux. Ce dernier a obtenu sur le projet Région Aquitaine CIME (Calcul Intensif pour les Matériaux et l'Environnement) de renouveler son matériel courant 2013.

Par ailleurs, le MCIA s'est inscrit dans la dynamique/politique nationale de développement de la simulation et du calcul intensif soutenue par le **GENCI** (Grand équipement national de Calcul Intensif) en **adhérant en mars 2013** au **projet Equipex Equip@meso** (Equipement d'excellence de calcul intensif de Mésocentres coordonnés). Porté par le GENCI, ce projet anime et coordonne les échanges entre douze Mésocentres universitaires français dont une vision géographique est donnée ci-dessous.



L'ensemble de ces ressources et les échanges d'expertises sont les garants d'une utilisation optimale des moyens du Mésocentre et du portage éventuel des applications vers les niveaux supérieurs que constituent les centres nationaux (Genci : Idris et Cines) et européens (projet Prace). L'usage de ces moyens est quantifiée dans le paragraphe « 2.1.3 Utilisation des centres nationaux ».

1.6 Partenariat

Un partenariat a été institué entre le MCIA et les principaux fournisseurs du projet, soient les sociétés Clustervision, Dell et Intel. Cet engagement, qui n'est pas contractuel, a pour objectif de faire profiter à l'ensemble des partenaires des capacités et expériences de chacun. Un contact continu est entretenu à l'aide d'une liste de diffusion et des réunions se tiennent à Bordeaux sur un rythme semestriel entre des représentants des sociétés et le bureau du MCIA. Les échanges d'informations et retours d'expériences se font également lors des journées scientifiques et de formations parfois organisées conjointement.

La veille technologique est également facilitée par nos partenaires via l'accès ou le prêt de matériels intégrant les dernières avancées technologiques.

1.7 Equipe technique

L'équipe technique chargée de la mise en œuvre des ressources du Mésocentre est intégrée à la Direction informatique de l'Université Bordeaux 1. Elle est composée de deux personnels de l'Université (Pierre Gay et Nguyen Nguyen-Ky) et de deux agents non titulaires recrutés sur des contrats prévus dans le projet MCIA au titre de l'assistance à la recherche (Redouane Bouchouirbat) et l'activité de soutien aux PME (Benoît Hiroux).

Les missions confiées à cette équipe comprennent :

- Gestion du budget MCIA pour la durée du projet
- Gestion et opération des matériels du Mésocentre
- Formation et assistance à l'utilisation de ces matériels
- Conseil et expertise sur le Calcul Scientifique en direction des utilisateurs du Mésocentre

1.8 Organisation

Pour mener à bien ces différentes missions, le Mésocentre s'est organisé autour :

- D'un comité scientifique
- D'un comité des utilisateurs
- D'une direction informatique

Le comité scientifique, animé par le responsable scientifique du Mésocentre, est composé de correspondants des laboratoires des établissements partenaires. Il se réunit aussi souvent que nécessaire et a comme missions principales de :

- s'assurer de la bonne utilisation des ressources
- évaluer l'activité scientifique du Mésocentre et de produire un rapport annuel
- stimuler l'animation autour des activités de la communauté d'utilisateurs du Mésocentre
- organiser la communication interne et externe du Mésocentre

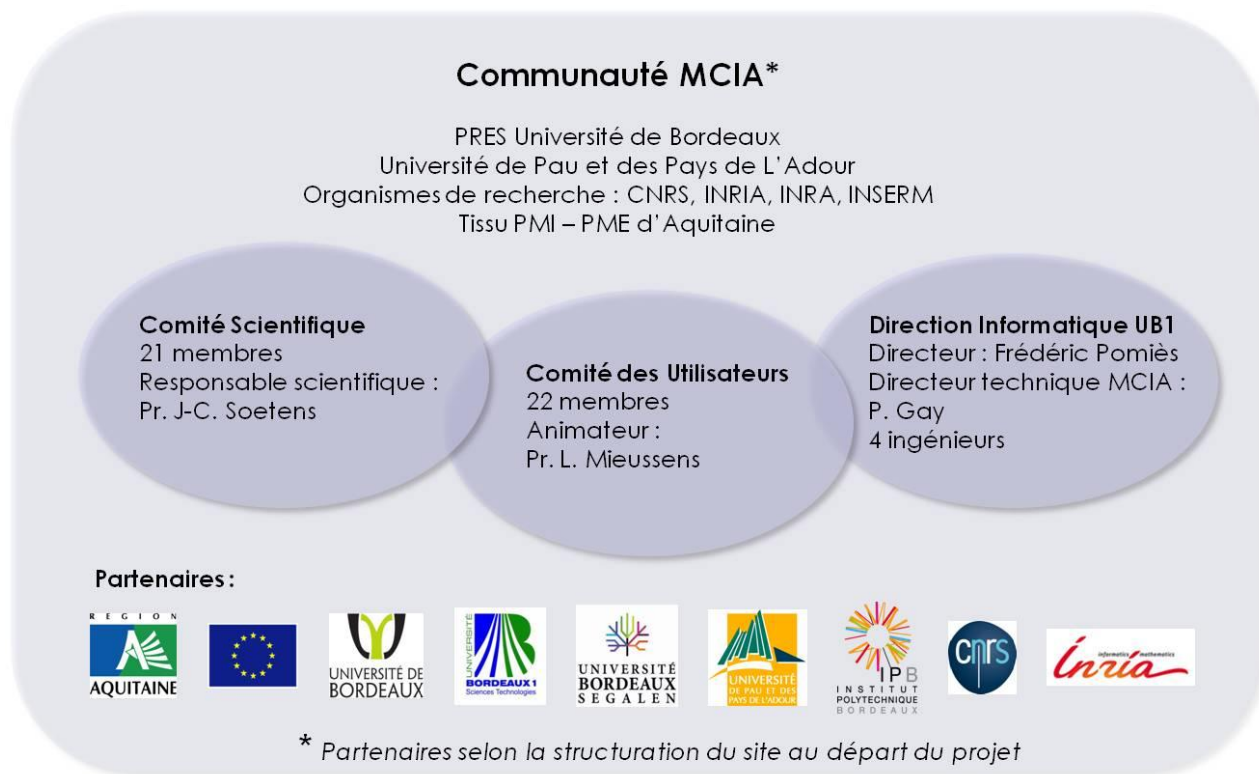
Le comité des utilisateurs est composé des personnels de la Direction Informatique (DI) administrant les matériels et de représentants scientifiques et techniques des différents partenaires et laboratoires membres. Ce comité se réunit aussi souvent que nécessaire et a comme missions principales de :

- faciliter les échanges et l'expression des besoins de la communauté du Mésocentre
- s'assurer du bon fonctionnement des différents équipements mis en place
- proposer au comité scientifique toute évolution technique judicieuse
- promouvoir et faciliter l'accès aux très grands équipements nationaux et européens
- produire annuellement des indicateurs d'usage
- faciliter la production et la diffusion auprès des utilisateurs des documents techniques utiles à l'utilisation des moyens de calcul

La Direction Informatique de l'Université de Bordeaux héberge les ressources du Mésocentre, notamment le supercalculateur, ainsi que les personnels qui en assurent le bon fonctionnement. Elle œuvre afin d'en améliorer la disponibilité et est garante de la sécurité des matériels.

Les compositions du comité scientifique et du comité des utilisateurs sont flexibles. Leurs objectifs étant d'être des lieux d'échange et de partage, toute structure ou tout groupe d'individus désirant s'impliquer peut s'y faire représenter. Les compositions de ces comités sont données en annexe.

Organigramme



1.9 Dates importantes du projet

Année 2010

Janvier	démarrage du projet de Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain
Février	constitution du comité scientifique du MCIA
Mars – Avril	enquête sur les besoins informatiques et logiciels dans la communauté du calcul intensif.
Mai-Juin	création d'un groupe technique animé par Jacques Bernard et Pierre Gay (Ingénieurs de la Direction Informatique de l'Université Bordeaux 1) et élaboration du cahier des charges du nouveau supercalculateur.
Juillet – Décembre	Publication de l'appel à candidatures et conduite du dialogue compétitif par le groupe technique.

Année 2011

Mars – Avril	Remise des offres des constructeurs, analyse des propositions et notification du marché au constructeur 'Clustervision'.
--------------	--

Juin	Recrutement de l'Ingénieur « Assistance aux entreprises » (Benoit Hiroux).
Juillet	Constitution du comité des utilisateurs du MCIA.
Juin – Décembre	Modifications des infrastructures (électricité, groupe froid) de la salle informatique de la Direction Informatique de l'Université Bordeaux 1. Installation du nouveau supercalculateur, vérification d'aptitude puis vérification de service régulier. Participation du comité des utilisateurs aux phases de tests.
Novembre	Recrutement de l'ingénieur « Assistance aux utilisateurs » (Redouane Bouchouirbat).
Novembre	1 ^{er} journée scientifique du MCIA et inauguration du supercalculateur.
Année 2012	appel à projet logiciels auprès de la communauté. (dotation de 75 k€ HT).
	Publication du premier rapport d'activités du MCIA.
Année 2013	
Avril	Adhésion du MCIA au projet Equip@Meso (Equipement d'excellence de calcul intensif de Mésocentres coordonnés) piloté par le GENCI (Grand équipement national de Calcul Intensif). Ce projet anime et coordonne les échanges entre douze Mésocentres universitaires français.
Année 2014	
Juin	Bilans du projet auprès du Conseil Régional Aquitaine en relation avec les subventions Région et Feder.

2 Activités

2.1 Indicateurs d'utilisation des moyens de calcul

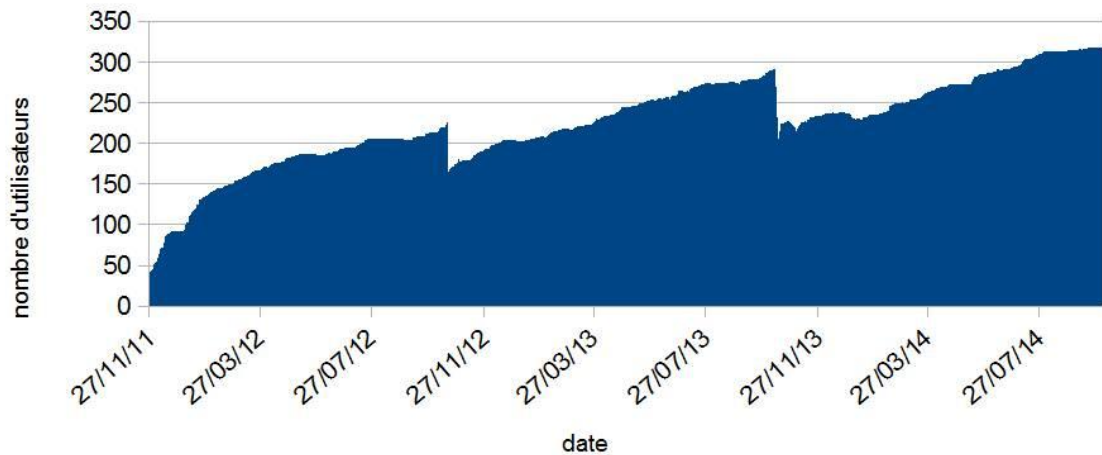
2.1.1 Cluster HPC Avakas

La communauté du Mésocentre souhaite garantir une utilisation optimale des ressources disponibles sur le cluster. Le comité des utilisateurs a ainsi défini une politique d'allocation des ressources autorisant une grande flexibilité et visant à en garantir l'accès et l'utilisation équitables et efficaces par une communauté aux pratiques et besoins pourtant très divers.

Les utilisateurs des établissements partenaires du Mésocentre sont inscrits sur demande pour une période allant jusqu'à un an. Le renouvellement de tous les comptes a lieu dans le courant du mois d'octobre.

Utilisateurs inscrits sur Avakas

du 25/11/2011 au 06/10/2014



Le nombre d'utilisateurs inscrits sur Avakas est monté jusqu'à 320. Au moment de chaque renouvellement, le nombre d'inscrits chute car certains comptes sont fermés. Les réinscriptions et les nouveaux utilisateurs font remonter le nombre dans le cours de l'année qui suit.

Les indicateurs de temps de calcul présentés ici correspondent à un nombre d'heures sur un processeur allouées à un utilisateur. Il s'agit en cela de comptabiliser le temps réservé à un chercheur, à l'exclusion des autres membres de la communauté.

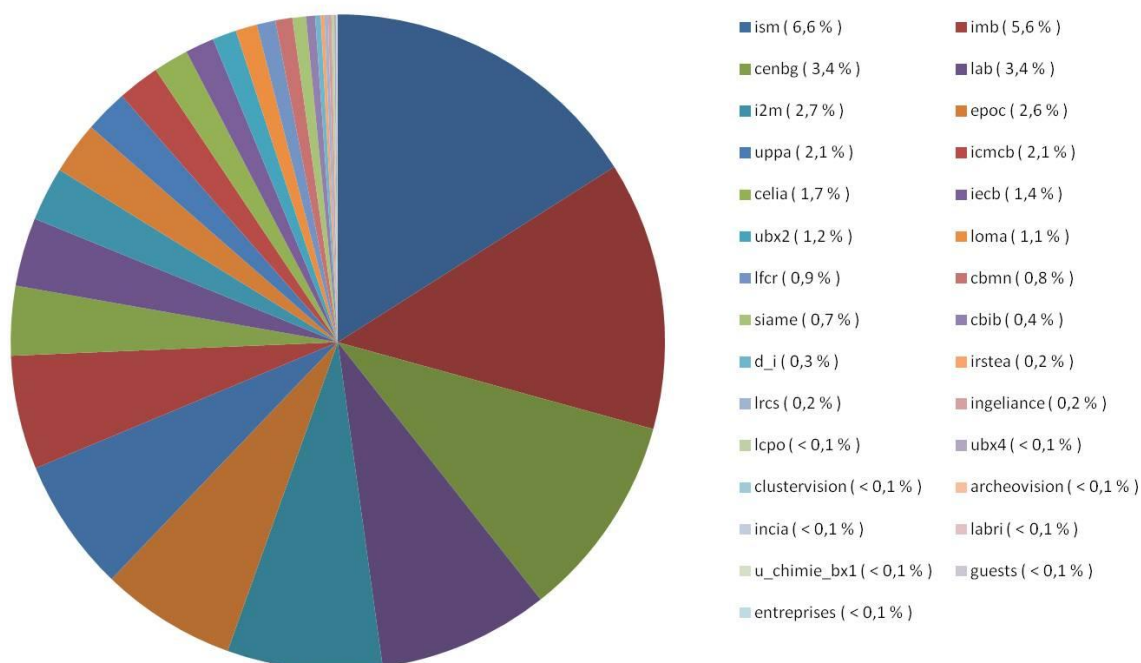
- Durant la première année d'exploitation (du 25/11/2011 au 25/11/2012) ont été consommées **19,5 millions d'heures** sur les **29,2 millions** possibles. Cela représente un taux de charge de **66 %**. L'utilisateur le plus important a consommé 3,9 millions d'heures.
- Durant la deuxième année d'exploitation (du 26/11/2012 au 25/11/2013) ont été consommées **20,1 millions d'heures** sur les **29,2 millions** possibles. Cela représente un taux de charge de **69 %**. L'utilisateur le plus important a consommé 2,5 millions d'heures.
- Durant la troisième année d'exploitation (du 26/11/2013 au 30/09/2014) ont été consommées **19,7 millions d'heures** sur les **24,6 millions** possibles. Cela représente un taux de charge de **80 %**. L'utilisateur le plus important a consommé 2,8 millions d'heures.

En tout, ce sont **59,4 millions d'heures** qui ont été produites sur **83,1 possibles**, pour un taux de charge de **71%**. Sur une si longue période, c'est un indicateur très positif pour une machine de calcul HPC.

Le graphique suivant présente la répartition de la consommation entre les différents groupes d'utilisateurs. Il faut noter que la répartition de ces heures de calcul entre les différents laboratoires partenaires est difficile à évaluer, notamment à cause des multiples tutelles et des tailles différentes des laboratoires ou établissements. C'est la raison pour laquelle les utilisateurs sont organisés en groupes correspondant vaguement à un laboratoire, un institut ou un groupe de laboratoires. Même ainsi, la lecture de ce graphique doit être faite avec précaution : ainsi, de nombreux utilisateurs du groupe INRIA (dont les heures sont comptabilisées dans ce groupe) sont aussi membres des laboratoires LaBRI ou IMB (ce qui n'apparaît pas dans la répartition).

Répartition des heures de calcul sur Avakas par groupes d'utilisateurs

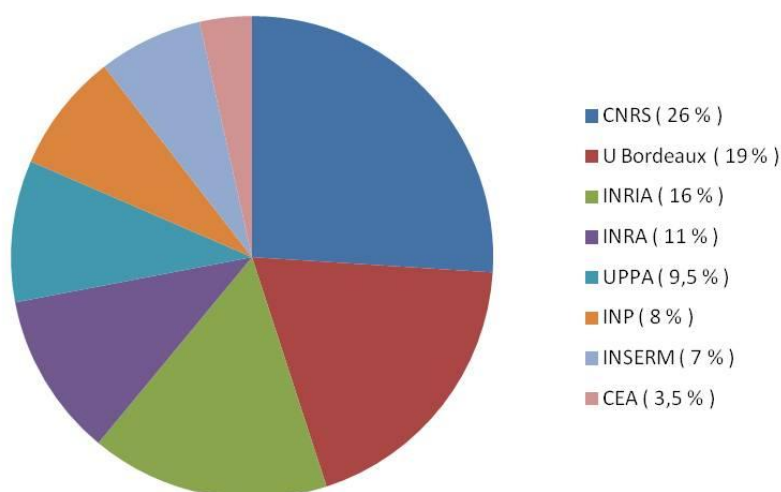
période du 25/11/2011 au 01/10/2014



Le graphique ci-dessous présente la projection à parts égales de ces taux d'utilisation de groupes d'utilisateurs selon leurs tutelles d'appartenance.

Projection des heures de calcul sur Avakas par organismes de tutelle

période du 25/11/2011 au 01/10/2014

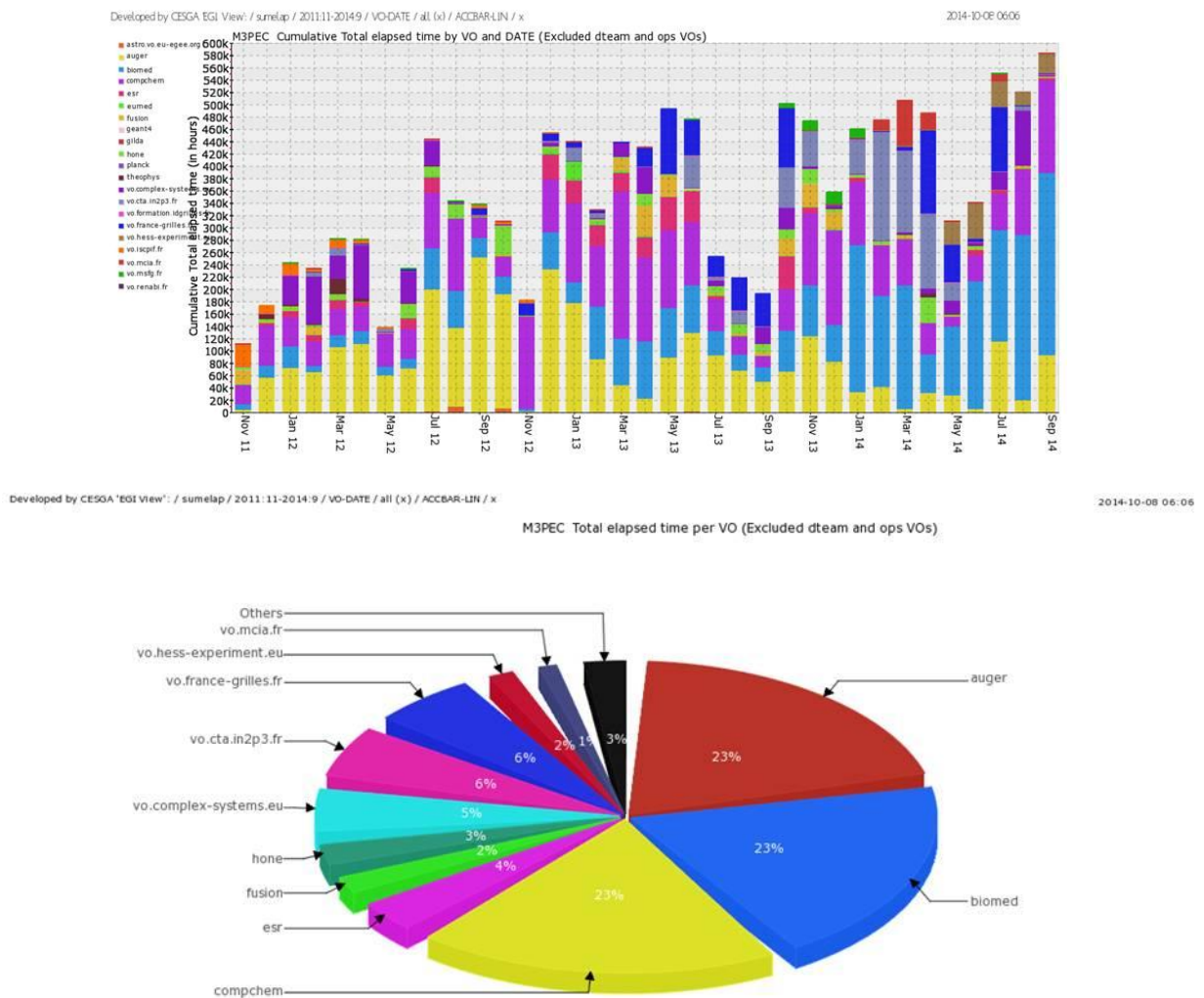


2.1.2 Cluster grille EGI

Le cluster grille opéré par le Mésocentre est intégré à l'infrastructure de production européenne EGI (<http://www.egi.eu>). Il est largement ouvert aux communautés scientifiques internationales qui utilisent cette infrastructure : 24 Organisations Virtuelles (VO : Virtual Organization) ont la possibilité de faire des calculs et de déposer des données sur nos serveurs.

Sur la période allant de décembre 2011 à septembre 2014, **12,6 millions d'heures** ont été consommées. Il est difficile de calculer un taux de charge pour la période entière à cause de la fluctuation dans le temps de la quantité de ressources mises à disposition (mise en service du cluster à l'NRA, extension du cluster DSI).

Le graphique qui suit présente l'exploitation mensuelle sur la période considérée. Le suivant est la répartition globale des heures de calcul par VO.



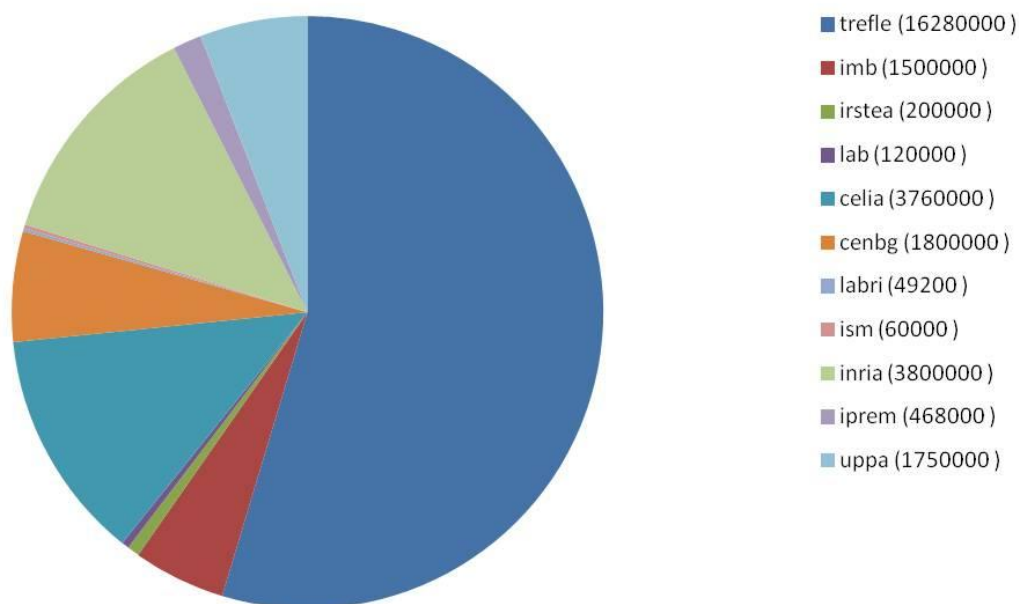
L'évolution des nombres d'heures calculées met en évidence l'augmentation des ressources mises à disposition. On voit aussi des chutes temporaires dans la production, correspondant à des périodes de maintenance (principalement dues à des mises à jour du middleware grille). A titre indicatif, les derniers mois d'exploitation présentent des taux de charge de l'ordre de 90 %.

2.1.3 Utilisation des les centres nationaux

Les ressources du Mésocentre s'intègrent dans la structuration des moyens de calcul en France du niveau régional aux niveaux national et européen. Le Mésocentre permet de répondre à une partie des besoins des utilisateurs et sert de tremplin pour accéder aux moyens de calcul nationaux (prototypage des calculs et démonstration de la faisabilité dans les dossiers de demandes d'heures de calcul).

Les statistiques fournies par le Grand Equipement National de Calcul Intensif (GENCI) montrent qu'en 2014, un total de **29,7 millions d'heures** de calcul ont été allouées sur les diverses machines nationales (Yoda, Jade, Turing, Curie). Ce volume équivaut à la capacité de production annuelle du cluster Avakas et le taux d'acceptation des projets de demandes d'heures de calcul est d'environ 50 %.

Heures de calcul accordées sur les ressources nationales Campagne DARI / GENCI 2014



En 2015, ces utilisateurs ont demandé **30,2 millions d'heures** (contre 55,4 en 2014) et les résultats de cet appel d'offre ne sont pas encore connus.

Il est plus difficile d'évaluer l'utilisation des ressources grille par les utilisateurs du Mésocentre. En effet, ces ressources réparties dans le monde entier (même si nos utilisateurs accèdent plus facilement aux ressources françaises) et peuvent être utilisées par différents moyens pour lesquels il est difficile d'obtenir des statistiques. Cependant, on peut exploiter certaines statistiques fournies par l'infrastructure française DIRAC-FranceGrilles (<http://www.france-grilles.fr/Pour-les-Vos>). Selon celles-ci, les utilisateurs aquitain ont consommé en 2014 75000 heures de calcul. C'est assez peu, mais on peut le comparer aux 3000 heures consommées en 2013. L'utilisation de la Grille par les utilisateurs aquitains est donc encore très faible. Il faudra accentuer les efforts de communication, de formation et d'accompagnement dans ce domaine.

2.2 Animation scientifique

Le Mésocentre MCIA encourage une animation scientifique autour du calcul intensif via plusieurs types d'actions :

- Des journées de formation.
- Une mutualisation des séminaires de calcul.
- L'organisation de journées scientifiques.
- Une formation continue aux grandes familles génériques d'algorithmes.
- La participation à des manifestations nationales ou internationales.

2.2.1 Liste des manifestations organisées

Année 2010

3 juin Présentation de la grille de calcul et retours d'expériences (Bordeaux).

Année 2010

19 au 21 avril Formation à l'utilisation des Grilles de calcul (Bordeaux).
 25 novembre Inauguration du nouveau supercalculateur du MCIA.
 14 septembre Journée de sensibilisation au calcul intensif en biologie sur la grille de production EGEE (INRA Bordeaux, Grande Ferrade).
 15 octobre Formation à l'utilisation des moyens de calcul du MCIA (Pau).

Année 2012

13 janvier Formation à l'utilisation des moyens de calcul du MCIA (Bordeaux).
 23 janvier Formation à l'utilisation des moyens de calcul du MCIA (Pau).
 11 avril Formation à l'utilisation des moyens de calcul du MCIA (Bordeaux).
 29 mai Demi-journée de conférences interdisciplinaires couplées MCIA/Plafrim.
 13-14 juin Formation à l'utilisation du logiciel grille DIRAC (Bordeaux).
 15 novembre Formation à l'utilisation des moyens de calcul du MCIA (Bordeaux).

Année 2013

1^{er} février Journée Scientifique du MCIA (LaBRI).
 22 février Formation à l'utilisation des moyens de calcul du MCIA (Bordeaux).
 24 octobre Formation administrateurs Cloud Stratuslab (Bordeaux).

Année 2014

10 février Journée Scientifique MCIA/Plafrim organisée à l'Université de Pau et des Pays de l'Adour.
 8 février Présentation des résultats de deux équipes de recherche du MCIA lors de la « Journée Nationale Mésochallenges » organisée à Paris par le GENCI (un exemple de projet est présenté en section 2.2.2).
 23 juin Formation à l'utilisation des moyens de calcul du MCIA (Bordeaux).

2.2.2 Mésochallenges 2014

Mesochallenge sur la simulation du déferlement des vagues (P. Lubin, S. Glockner, I2M)

Travaux présentés à la journée « Mésochallenges » organisée par le Genci qui s'est déroulée le 8 octobre 2014 à l'Institut Henri Poincaré à Paris (<http://www.genci.fr/fr/mesochallenges-2014-reussis>)

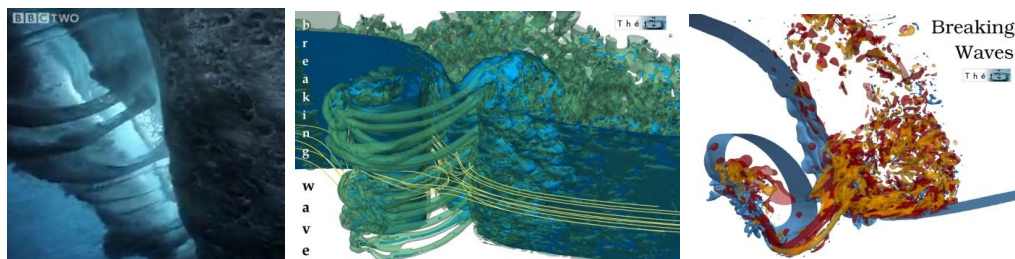
Le déferlement des vagues est un phénomène fascinant et complexe qui joue un rôle de première importance dans la zone littorale, dans les estuaires ou à la surface des océans. Durant ce processus, différentes structures tourbillonnaires vont apparaître. Jusqu'à présent, deux grandes catégories ont été identifiées : les structures ayant un axe de rotation horizontal, parallèle au rivage, et celles ayant un axe de rotation oblique (pointant de la surface vers le fond). Ceux de la première catégorie génèrent beaucoup de turbulence et se composent d'une grande quantité d'air. Ils forment les grands rouleaux d'écume que l'on voit se propager dans la zone de déferlement. Les structures obliques, intenses et turbulentes, sont celles qui sont le plus susceptibles d'atteindre le fond et de mettre du sédiment en suspension. Le 6 mai 2009, BBC Worldwide a mis en ligne une vidéo en haute résolution d'une magnifique vague déferlante révélant pour la première fois de sublimes structures tridimensionnelles ayant la forme de tornades. Plus récemment, ces fines structures typiques des déferlements plongeants ont été mises en évidence lors de simulations numériques 3D des équations de Navier-Stokes réalisées à l'Institut de Mécanique et d'Ingénierie de Bordeaux, grâce à l'outil de simulation massivement parallèle Thétis et les moyens informatiques combinés MCIA/GENCI/PRACE. Ces structures sont des filaments de vorticit , comme ceux qui apparaissent lors de la vidange d'un  vier ou d'une baignoire. Elles apparaissent au point d'impact de la l vre sur la face avant de la vague et sont  tir es lorsque l'une de leurs extr mit s suit le splash-up qui se d veloppe vers l'avant, l'autre extr mit  du filament s'enroulant autour du rouleau d'air pi g  lors du d ferlement.

Le calcul parall le a permis d'acc der   une meilleure description de l'interface et donc du comportement turbulent, de l'entra nement et de la remont e des structures a r es. Des besoins cons quents en stockage et visualisation en d coulent, le volume de donn es d'une simulation repr sentant plusieurs To   stocker, transf rer et post-traiter en parall le gr ce   Paraview, avec pour partie de la visualisation exploratoire afin d'identifier et de comprendre ses structures non  tudi es jusqu'ici. Des simulations, men es il y a 10 ans sur des maillages 4 fois plus grossiers par direction de l'espace, et qui duraient 3 mois en s quentiel, ne permettaient pas de capter de si fines  chelles. Elles ont  t  ramen es   24h sur 1024 c urs au m socentre, avec donc une description bien meilleures.

Cette approche o  l'I2M aborde la m canique des fluides par le biais de la simulation num rique intensive permet maintenant d'envisager la r alisation de r elles exp rimentations num riques. On peut d s lors esp rer travailler dans la d cennie   venir sur des probl matiques r elles, o  la simulation num rique permettrait d'apporter des informations inaccessibles pour les techniques exp rimentales actuelles. Il n'est pas question de remplacer l'approche exp rimentale, mais bien de compl ter les travaux actuels, voire de d passer des limitations.

[1] BBC 2009 South pacific, episode 1: Ocean of islands. DVD, executive Producer: Fiona Pitcher, Series Producer: Huw Cordey, BBC/Discovery Channel co-production. BBC Worldwide via Youtube: <http://www.youtube.com/watch?v=7BOhDajH0m4>. Retrieved 2009-05-08.

[2] P. Lubin, S. Glockner, Numerical simulations of three-dimensional plunging breaking waves: generation and evolution of aerated vortex filaments, Journal of Fluid Mechanics, under correction.



Filaments de vortex sous la surface libre. La vague se propage de la gauche vers la droite. Image extraite du film de la BBC : isosurface entre l'air et l'eau (bleu) avec isocontour du crit re Q (vert) et trajectoires autour d'un filament ; visualisation d'une tranche de l' coulement et du rotationnel.

2.3 Assistance à des projets de recherche

L'équipe technique du Mésocentre est composée d'ingénieurs de calcul scientifique et HPC. En son sein, Redouane Bouchouirbat a eu pour mission principale de son contrat de soutenir les projets de recherche des utilisateurs du Mésocentre

Les différents types d'assistance aux utilisateurs commencent par l'animation du site collaboratif Redmine (<http://redmine.mcia.univ-bordeaux.fr/>). Cela consiste en fournir une documentation en ligne des ressources matérielles et logicielles ainsi que les procédures nécessaires à leur utilisation. Le site dispose aussi d'un outil de suivi de demandes qui constitue le moyen privilégié pour gérer les pannes et les erreurs qui interviennent sur les clusters. Les formations dispensées pour se familiariser avec les moyens de calcul du Mésocentre

Pour aller plus loin dans cette assistance de base et la transformer en un vrai accompagnement, l'équipe technique met en œuvre ses compétences dans le domaine. Cet accompagnement commence par une prise de contact pour guider les chercheurs vers les bonnes solutions HPC, mais selon les besoins, peut se traduire en une collaboration où les ingénieurs du Mésocentre participent au projet scientifique lui-même. Ils peuvent alors paralléliser un code, ou procéder à son optimisation, ou encore le porter sur la grille.

2.3.1 Exemples de collaborations

- *Institut de Santé Publique d'Épidémiologie et de Développement (ISPED)*
 - Parallélisation d'un code de biostatistique. Pour l'estimation de paramètres.
 - Le besoin d'augmenter le nombre de paramètres à estimer fait exploser le temps de calcul. Comme les calculs sont indépendants paramètre par paramètre, la parallélisation des calculs dans un modèle de mémoire distribuée (MPI) a permis de réduire le temps de restitution d'un facteur proche du nombre de processeurs investi dans le calcul.
 - La partie du code ainsi parallélisée est une des briques sur lesquelles s'appuient de nombreuses études de l'équipe de Biostatistique. C'est ainsi toute une équipe de recherche qui bénéficie de ces travaux.
- *Groupe de recherche en économie Théorique (GreTha) de l'université bordeaux 4*
 - Environnement de programmation pour la programmation multi-agents.
 - Nous avons aidé l'équipe à choisir et mettre en place l'environnement OpenMOLE adapté aux besoins de l'équipe (compatibilité au langage Netlogo) ayant la capacité de soumettre des travaux sur la Grille. Mise à disposition d'une machine virtuelle pour l'exécution de l'environnement.
- *Centre Lasers Intenses et Application (CELIA)*
 - Amélioration de l'algorithme de résolution d'un code de calcul de l'équation de Schrödinger.
 - L'installation de la librairie OpenBLAS permet le calcul en parallèle (multithread) de primitives d'algèbre linéaire sur les grandes matrices bandes du programme.
- *Institut de Neurosciences Cognitives et Intégratives d'Aquitaine (INCIA)*
 - Reconstruction de volumes à partir d'images acquises en microscopie confocale (système nerveux de *Xenopus Laevis*).

- L'environnement de visualisation 3D à distance sur les serveurs spécialisés du cluster Avakas, ainsi que l'installation et la mise au point de logiciels adaptés permet aux équipes de l'INCIA de visualiser et traiter des lots d'images qu'elles ne pourraient envisager sur des stations de travail normalement à leur disposition.
- *Centre d'Etudes Nucléaires de Bordeaux Gradignan*
 - Calcul de sections efficaces pour les collisions proton/eau et proton/nucléotide (ADN)
 - Afin d'alimenter des bases de données destinées à des calculs Monte Carlo d'interactions rayonnement/matière, le précalcul des sections efficaces des différentes interactions sont extrêmement coûteux. Nous avons participé à l'optimisation de ce programme. Les campagnes de calcul sont ainsi réduites de plusieurs mois à quelques jours.
 - L'utilisation de la Grille permet en outre d'exécuter ces campagnes sur un plus grand nombre de processeurs simultanés, mettant ces études à un niveau de routine, là où on ne pouvait pas en envisager plus de quelques unes par an.

2.3.2 Projet PEPS CNRS-Idex de Bordeaux : métamorphose de *Xenopus laevis*

Titre du projet : Plasticité développementale du système postural pendant la métamorphose de *Xenopus laevis*

Gilles Courtant et Didier Le Ray

Institut de Neurosciences Cognitives et Intégratives d'Aquitaine (INCIA, UMR 5287)

Nguyen Nguyen Ky, Pierre Gay

MCIA

Le but de ce projet est de poser les premières bases d'une étude plus globale concernant l'adaptation anatomique et physiologique, au cours du développement, du schéma organisationnel des réseaux moteurs centraux. Dans une étude récente, nous avons émis l'hypothèse que, pendant la métamorphose de l'anoure, la construction du réseau posturo-locomoteur adulte pouvait dépendre de l'environnement sensoriel de ce réseau lors de son assemblage. Précisément, des motoneurones posturaux impliqués dans l'orientation du corps semblent être fonctionnellement exclus du réseau adulte au cours de la nage. Ce sont les mécanismes développementaux de cette exclusion que nous cherchons à définir, tout d'abord sur une approche morphologique de ces neurones identifiés. Ainsi, nous cherchons à caractériser des modifications de leur arborisation dendritique, lieu privilégié d'interaction neuronale, qui permettraient d'expliquer pourquoi ces motoneurones ne reçoivent plus les commandes issues du générateur spinal de la nage. Pour cela, nous développons en collaboration avec le Mésocentre de Calculs Intensifs Aquitain (MCIA) et le Laboratoire Bordelais de Recherche en Informatique (LaBRI) des outils logiciels complexes de traitement et d'analyse d'images acquises en microscopie confocale sur de grands volumes de systèmes nerveux central dans lesquels nous aurons préalablement marqué les motoneurones posturaux de manière rétrograde par des traceurs fluorescents. Nous abordons donc le problème de l'adaptation développementale des interactions neuronales selon un angle global, au niveau de la population des neurones concernés.

Les acquisitions en microscopie confocale, qui se font au Bordeaux Imaging Center (BIC) sur un microscope LEICA SP8, génèrent des fichiers de très grandes tailles. L'acquisition d'un

volume important de système nerveux (typiquement 1-1,5 mm³ dans nos expériences) est permise par le système confocal qui déplace le plan focal du microscope dans l'épaisseur du tissu selon un pas constant (celui-ci, défini par l'utilisateur, étant généralement inférieur à la coupe optique de l'objectif, de façon à ne pas perdre de signal lors des acquisitions successives des différents plans focaux). Il en résulte une très grande quantité d'images dans une pile pour chaque position. Puisque plusieurs positions successives sont nécessaires pour acquérir l'ensemble de la zone d'intérêt, nous avons à la fin d'une acquisition plusieurs piles d'images et un fichier global de plusieurs dizaines de gigabits. Ce type de fichier ne peut être géré par les ordinateurs conventionnels (classiquement utilisés dans les laboratoires) car ils requièrent une puissance de calcul. D'autre part, s'agissant d'images, il est nécessaire de pouvoir visualiser chaque étape du traitement afin d'en ajuster au mieux les paramètres pour chaque pile d'images. Ce problème a été abordé en collaboration avec le MCIA qui offre à la communauté bordelaise un support technologique très appréciable en termes de ressources informatiques. Un système de visualisation déportée a été mis en place au sein du MCIA et nous (Gilles Courtant et Didier Le Ray, INCIA) participons aussi à son développement pour ce qui concerne le traitement d'image, en confrontant nos besoins aux connaissances théoriques des ingénieurs (principalement, Nguyen Nguyen Ky, MCIA). Ce système déporté offre en effet la possibilité de travailler à distance sur les gros serveurs Avakass du MCIA via n'importe quelle poste connecté à internet (et enregistré dans la base de données du MCIA). Ainsi, il est à présent possible d'utiliser différents logiciels d'analyse d'images et de faire faire les calculs très lourds (notamment ceux nécessaires à la reconstruction de structures en 3D) par les serveurs dédiés du MCIA. Nous avons notamment mis en place sur ce système le logiciel gratuit Image J, largement utilisé par la communauté scientifique, auquel nous travaillons à l'addition de plusieurs plugins afin d'en enrichir les possibilités (reconstruction, déconvolution, alignement d'images, etc). De plus, un plugin dédié à la reconstruction surfacique automatique des structures 3D développé dans le cadre de ce projet (en collaboration avec le Laboratoire Bordelais de Recherches en Informatique, LaBRI, UMR 5800) sera aussi prochainement ajouté sur le serveur déporté.

2.4 Actions vers les PMI-PME

La mission vers le tissu industriel aquitain dont est chargé le Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain a pour objectif de stimuler l'activité des entreprises via le calcul scientifique. Les cibles prioritaires de cette mission, portée principalement par Benoît Hiroux lors de son contrat, sont les entreprises PME/TPE d'Aquitaine sans restriction sur le domaine d'activité. L'hypothèse de travail part du constat que certains verrous numériques peuvent être levés par le calcul scientifique et que les petites structures, bien que très à la pointe dans leur domaine, n'ont parfois pas les compétences sur ces problématiques particulières. Le MCIA fournit déjà des services équivalents au milieu académique aquitain. Nous avons des collaborations fructueuses avec des structures publiques qui nous confirment les bénéfices de cette assistance

Transposer cette assistance vers le secteur privé est délicat, le MCIA y ayant peu de visibilité. Pour augmenter notre visibilité, il était important de faire connaître notre action en nous appuyant sur les relais adéquats. Nous avons réalisé une plaquette de présentation du Mésocentre mettant en valeur le volet PMI-PME de notre action. Nous avons aussi approché 3 pôles de compétitivité (Aerospace Valley, Route des Lasers, Avenia). Enfin, nous sommes rapprochés d'une dizaine de structures d'accompagnement d'entreprises. En particulier, nous souhaitons souligner l'efficacité de notre collaboration avec Laurent Le Thuaut d'Aquitaine Développement Innovation (ADI). Ses relations de proximité avec les entreprises d'Aquitaine ont été propices à la réalisation de collaborations.

En pratique, nous avons participé à de nombreux événements à destination des entreprises (accompagnement de PME, ...).

Le Mésocentre est par ailleurs devenu un relais de l'initiative HPC-PME en Aquitaine. Cette initiative est un acteur national important de la promotion du calcul scientifique en

entreprise. L'initiative HPC-PME va organiser une journée de rencontres entre les acteurs du HPC et les entreprises aquitaines. Le Mésocentre sera bien entendu un acteur central de cet événement.

Grâce à ces actions de communication, nous avons pu ouvrir des contacts avec certaines des entreprises que nous avons approchées. Il nous est apparu que ces entreprises ont d'abord et surtout besoin d'informations et de conseil face à des problématiques émergentes de calcul (simulation ou analyse de données).

Ensuite, sous le couvert d'un accord de confidentialité, nous pouvons entrer dans les détails techniques des problèmes industriels de la PME. Nous avons parfois mené des collaborations fructueuses, parfois les discussions n'ont pas abouti à un résultat concret. Diverses raisons peuvent être invoquées pour ces échecs relatifs, comme par exemple un manque d'investissement de la part de la PME (ces travaux prospectifs sont chronophages).

Exemples de collaborations avec des sociétés :

- *Scilight*
 - <http://www.scilight.eu>
 - visualisation 3D et animations pour la communication scientifiques
 - Le besoin était de monter une ferme de rendu d'animation 3D sur le cluster Avakas. A cause de complications techniques dues au choix du logiciel propriétaire de rendu, il s'est avéré difficile de mettre en œuvre cette solution par manque de temps et d'expertise disponibles de la part de l'entreprise. Au bout d'un an de contacts réguliers, le projet a été abandonné.
- *Ingeliance*
 - <http://www.ingeliance.com>
 - Ingénierie, calcul scientifique
 - Cette société, possédant une forte culture du calcul scientifique, devait mener une étude de mécanique des fluides dont la taille lui interdisait de l'effectuer sur ses ressources de calcul propres (calculs Ansys Fluent(tm) sur 512 cœurs). La mise en œuvre de ce logiciel propriétaire soumis à la location de licences est délicat sur un grand cluster. Cependant, la société a pu effectuer sa campagne de calcul avec succès (95000 heures CPU). Elle n'aurait tout simplement pas pu le faire sans l'accès à un grand cluster comme Avakas.
- *Algo'Tech*
 - <http://www.algotech-informatique.com>
 - Editeur de logiciels techniques
 - Un logiciel produit par l'entreprise dispose d'un solveur linéaire. L'augmentation de la taille des problèmes soumis par les utilisateurs de ce logiciel dépassait les capacités de ce solveur. Il s'agissait alors de conseiller l'entreprise pour lui permettre d'intégrer un ou des solveurs capables de répondre à la demande. L'entreprise a parallèlement été sélectionnée pour un projet de l'initiative « HPC-PME », ce qui est parfait puisque le Mésocentre est l'un des partenaires de cette initiative et se tient prêt pour participer à une éventuelle mise en production.

En conclusion, la mission d'assistance aux PMI-PME s'est déroulée dans une période charnière qui a vu la structuration des acteurs impliqués dans ce domaine. Cette structuration a été hésitante, le temps que les contacts se nouent, avec dans l'intervalle, des initiatives redondantes qui ont rendu complexe la lisibilité de la part des publics concernés. Cependant, les rôles sont maintenant mieux répartis et devraient bénéficier à l'articulation plus rationnelle de l'offre. Dans ce contexte, le Mésocentre est désormais en capacité d'affirmer sa position de fournisseur de ressources et d'accompagnement technique aux entreprises qui le sollicitent au travers de structures comme l'initiative HPC-PME ou à d'autres acteurs régionaux.

3 Projets de recherche

3.1 Chimie et Biologie des Membranes et des Nanoobjets

UMR 5248 – Université Bordeaux de / CNRS / IPB

<http://www.cbm.n.u-bordeaux.fr/>

Correspondant : Juan Elezgaray (j.elezgaray@iecb.u-bordeaux.fr)

CBMN est un laboratoire à l'interface entre la chimie, la physique et la biologie. Sa mission est d'apporter une connaissance fondamentale de phénomènes biologiques complexes en les analysant à plusieurs échelles, allant de la molécule à la cellule et à l'organisme. A côté des aspects de recherche fondamentaux, l'UMR développe aussi des aspects très appliqués vers l'adhésion cellulaire, les nanopuces, la vectorisation des principes actifs, la valorisation des bactéries probiotiques, le diabète et les colloïdes alimentaires.

La modélisation moléculaire, les études de biologie structurale (RMN, Rayons X, microscopie électronique, spectroscopies optiques et vibrationnelles, spectrométrie de masse), la conception chimique ou physicochimique d'édifices biomimétiques vecteurs sont aussi importantes que la maîtrise de la biologie cellulaire et moléculaire, la production et le test de molécules actives par microbiologie. L'équipe de modélisation (dirigée par I. Bestelle) travaille majoritairement dans des sujets reliés à la modélisation moléculaire. D'autres activités de modélisation faisant appel au mésocentre sont réalisées dans l'équipe de Jean-Pierre Aimé (Sondes Nanotubes de Carbone et Biotechnologies): modélisation de systèmes optiques (SPR, plasmon de surface, SSPM, collaboration équipe F. Argoul, ENS Lyon) ou bien dans la formation de structures complexes d'ADN.

Dynamique moléculaire au niveau atomique

Il s'agit de décrire les aspects dynamiques d'assemblages moléculaires, avec un détail atomique. Les systèmes étudiés se concentrent autour de trois grands axes: assemblages lipidiques, protéines et protéines membranaires. On étudie aussi l'interaction de ces assemblages avec des petites molécules, aussi bien naturelles que synthétiques.

Assemblages lipidiques, processus d'agrégation

Il s'agit d'étudier les processus d'agrégation de complexes lipidiques. Ces derniers peuvent conduire à des structures aussi variées que des micelles, films de Langmuir ou des bicouches d'intérêt biologique. Ce travail est réalisé en collaboration avec plusieurs groupes expérimentaux (Reiko Oda à l'IECB, Bernard Desbat ou Erick Dufourc à CBMN, Shawn Wettig à l'Université de Waterloo, Ontario ou Kazushi Kinbara à Sendai).

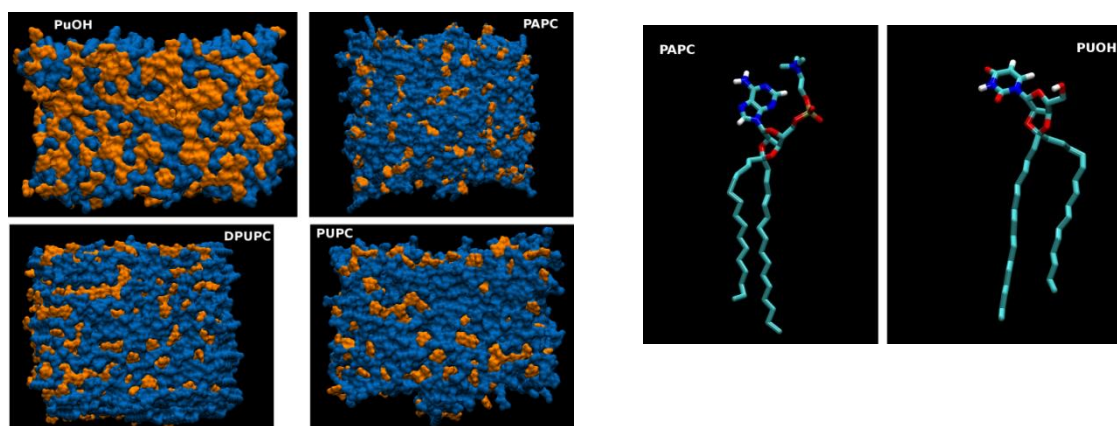
L'apport majeur de l'approche « drug-design » dans la découverte de nouveaux candidats médicaments nous a conduit à imaginer un concept similaire appliqué au domaine de la vectorisation. Il permettrait de concevoir par simulation de façon rationnelle de nouveaux vecteurs pour une délivrance améliorée d'acides nucléiques (siARN, miARN, oligonucléotides antisens)

Afin de démontrer l'intérêt de cette stratégie « vector-design », nous avons choisi de travailler sur les nucléosides amphiphiles. Ces molécules présentent en effet l'avantage de développer des interactions spécifiques de reconnaissance entre bases de type liaison

hydrogène ou π - π stacking avec les acides nucléiques à véhiculer. Nous cherchons à favoriser ces interactions en modifiant la structure des nucléosides amphiphiles ou les formulations utilisées.

Sur la base des résultats obtenus, il a été établi que les meilleurs candidats vecteurs pourraient être les nucléosides PUOH (dipalmityl uridine hydroxyl). Ainsi, nous nous sommes intéressés à l'étude par dynamique moléculaire du comportement d'oligonucléotides non modifiés face à une membrane de PUOH. Les résultats obtenus sont encourageants, ils montrent l'insertion de l'oligonucléotide à l'interface de la membrane et la présence d'interactions spécifiques de type liaison hydrogène. Ces études de simulations par dynamique moléculaire ont été entreprises pour plusieurs centaines de nanosecondes et réalisées en utilisant les machines Avakas.

Nous nous sommes également intéressés à explorer une approche mésoscopique des assemblages supramoléculaires des nucléosides amphiphiles étudiés. Un modèle gros grain des nucléosides a été établi et plusieurs tests de simulations ont été réalisés en utilisant quelques milliers d'heures de calcul sur les machines Avakas.



Vues de bicouches formées avec des nucléolipides. La surface du lipide est en bleu, et la surface de la base nucléique est en orange. La différence dans la structure des bicouches contenant PUOH est évidente. A droite, formule 3D générale des nucléolipides.

TAIB N., AHISSAN A., MOREAU L., CAMPLO M., HOUMIDI S., DESBAT B., LAGUERRE M., GRINSTAFF M. W., BESTEL I. & BARTHÉLÉMY P., *Supramolecular Systems Formation Directed via Nucleoside-lipid Recognition*, *J. of Colloid and Interface Science*, (2012) 337, 122-130.

N. TAIB, A. AIME, S. HOUMADI, S. CASTANO, P. BARTHELEMY, M. LAGUERRE & I. BESTEL., *Chemical details on nucleolipid supramolecular architecture: molecular modelling and physicochemical studies*. *Langmuir*, (2012) 28: 7452-7460.

Synthèse de produits pro-apoptotiques et anti-cancéreux

Ce travail est le fruit d'une collaboration avec J. Rosenbaum and Dr. P. Lestienne (Bordeaux II), dans la recherche d'inhibiteurs de la protéine Pontin. Pontin et Reptin sont reliées aux cancers lorsqu'elles sont surexprimées dans les cellules. La cible la plus simple est la poche catalytique de l'ATP, que nous avons reconstruit à partir de données X partielles, et à partir desquelles nous avons reconstruit un modèle complet de l'hélicase (figure ci contre).

Nous avons fait l'hypothèse que l'inhibition de l'activité ATPase de la Pontin arrêterait aussi l'activité de l'hélicase. Ce projet, a été mené par J. Elkaim (avec l'aide de D. Bennani) qui a parcouru deux banques de données chimiques commerciales. Le set expérimental de 20 parmi les 2000 molécules initiales a permis la découverte du premier inhibiteur de Pontin (publié dans *Biochem. J.*) Ce projet se poursuit après l'obtention d'un financement (4 ans)

INCA et l'étude par N. Taib de l'influence de ces inhibiteurs dans les interactions protéine-protéine entre Pontin et Reptin. D'autres collaborations sont en cours, notamment avec Pr. R. Kiss, Belgique, Pr. J.L. Kraus (inhibition de prolifération cellulaire) et Dr. V. Parissi and Dr. M.L. Andréola (Bordeaux Segalen) sur les inhibiteurs de l'intégrase.

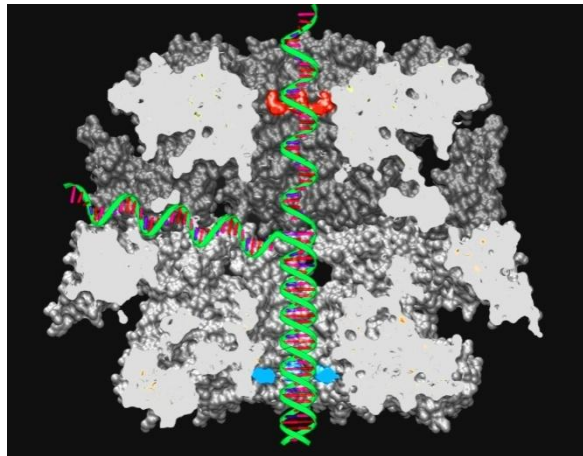
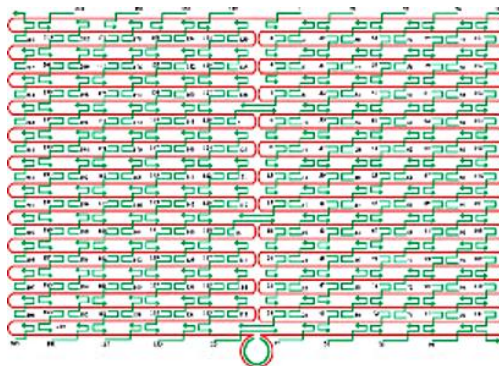


Schéma de la structure complète de l'hélicase avec 6 Pontins et 6 Reptins en surface moléculaire. Un plan de coupe placé au milieu de la structure montre en vert une molécule de dsDNA en train de se faire "dérouler" en 2 simples brins qui pourront ensuite être reproduits par la machinerie cellulaire.

J. ELKAIM, M. CASTROVIEJO, D. BENNANI, S. TAOUJI, N. ALLAIN, M. LAGUERRE, J. ROSENBAUM, J. DESSOLIN & P. LESTIENNE. , First identification of small molecule inhibitors of Pontin by combining virtual screening and enzymatic assay, *Biochemical Journal*, (2012) 443, 549-559.

Nanostructures à base d'ADN

Les origamis à base d'ADN sont formés par repliement d'un simple brin ADN (M13mp18), long de 7249 bases replié à l'aide de ~ 200 agrafes (séquences de 32 bases). Le recuit de cet ensemble permet l'obtention de structures de ~ 100nm (nm=10⁻⁹ m), dont les détails peuvent être définis à l'échelle du nanomètre. Ces structures sont à la base de beaucoup d'applications potentielles. Au delà des applications les plus immédiates (biosenseurs), beaucoup d'approches utilisent le comportement dynamique des origamis ADN pour la conception de nanomoteurs ou de nanorobots. Malgré ces avancées, le processus de formation de ces structures est largement inconnu.



Structure schématique d'un origami à base d'ADN. Le brin qui sert d'échafaudage est représenté en rouge, les agrafes qui maintiennent l'ensemble sont en vert.

Dans le cadre de la thèse de JM Arbona, nous avons modélisé le processus de formation de ces structures et montré que des effets collectifs sont à l'oeuvre dans leur formation. Contrairement aux structures habituelles de l'ADN, où les propriétés thermodynamiques sont déterminées uniquement par la séquence, les origamis ADN sont fortement influencés par la topologie du pliage. Nous avons ainsi montré que en jouant sur la distance entre deux agraffes, on peut déplacer de 20°C la température de fusion. La modélisation a aussi permis de montrer que la structure en nid d'abeille illustrée dans la figure ci-dessus est uniquement due à des interactions électrostatiques. Nous travaillons actuellement sur la modélisation de nanorobots permettant des calculs simples (portes logiques) en réponse à des stimuli extérieurs de nature chimique.

Arbona, Jean Michel; Aime, Jean-Pierre; Elezgaray, Juan, Modeling the mechanical properties of DNA nanostructures, *Phys. Rev. E* **86** (2012) 051912.

Song J., Arbona J.M. et al, Direct visualization of transient thermal response of a DNA origami, *J. Am. Chem. Soc.* (2012) **134**, 9844-9847.

Arbona, J.M., Elezgaray, J. and Aime, JP, Modelling the folding of DNA origami, *EPL* (2012) **100**, 28006.

Arbona, Jean-Michel; Aime, Jean-Pierre; Elezgaray, Juan, Cooperativity in the annealing of DNA origamis, *J. Chem. Phys.* (2013) **138**, 015105.

Arbona, Jean-Michel; Aime, Jean-Pierre; Elezgaray, Juan, Folding of DNA origamis, *Front. Life Sci.* (2012), **6**, 11-18.

Arbona, Jean-Michel; Aime, Jean-Pierre; Elezgaray, Juan, Folding of small origamis, *J. Chem. Phys.* (2012) **136**, 065102.

Microscopie plasmon: modélisation et problème inverse

Dans le cadre d'une collaboration avec le groupe de F. Argoul (ENS Lyon), nous avons développé un modèle de la formation d'images et du problème inverse d'un microscope à base de plasmons. Celui-ci utilise un faisceau d'éclairage très focalisé et mesure l'interférence entre le faisceau incident et le réfléchi à proximité d'une surface d'or de quelques nanomètres. Le microscope ainsi obtenu est très précis avec une faible profondeur de champ (éclairage évanescent) et une très bonne résolution latérale.

Elezgaray, J, Berguiga, L. et F. Argoul, Plasmon-based tomographic microscopy, *J. Opt. Soc. America A*, (2014) **31**, 155.

Berguiga, L. et al, [Guided wave microscopy: mastering the inverse problem](#), *Optics Letters* (2013) **38**, 4269.

Berguiga, L. et al, Sensing nanometer depth of focused optical fields with scanning surface plasmon microscopy, *Plasmonics* (2013) **8**, 715.

Boyer-Provera et al, Wavelet-based decomposition of high resolution surface microscopy V(z) curves at visible and near-infrared wavelengths, *Optics Express* (2013) **21**, 7456.

Argoul, F. et al, Uncovering phase maps from surface plasmon resonance images: towards a sub-wavelength resolution, *C. R. A. S. Physique* (2012) **13**, 800.

Contrats et projets

Financement européen

- FP7 – Marie Curie IAPP, "FOLDAPPI", 2009-2012, I. Huc (M. Laguerre & D. Bennani), avec un Post-Doc
- FP7 – COST, BioInspired COST Action TD1003, 2012-2015, J. Elezgaray & J.P. Aimé, un post-doc (A. Lad).
- International ANR - NSF, FRANCE/USA, "Hofmeistergemini", 2011-2014, R. Oda (M. Laguerre) avec un Post-Doc.

Financement national

- INCA, Rôles de la Reptine et de la Pontine dans la carcinogénèse hépatique, 2010-2013, J. Rosenbaum (M. Laguerre, J. Dessolin, J. Elkaïm)
- ANR, "ARYNAMICS", Mimes oligoamides aromatiques de l'ADN double brin, 2011-2015, F. Godde (M. Laguerre).
- Investissement d'Avenir, "VIBBNANO" Imaging of Biological and Bioinspired Nanosystems, 2011-2014, J. Elezgaray, JP. Aimé.
- INCA, SIRIC (Cancer Integrated Research Site) in collaboration with Bergonié Institute for 5 years starting 2012 (M. Laguerre).

Financement régional

- Aquitaine Regional Council (ARC)/CNRS, Cofinanced BDI grant, 2009-2012, J. Dessolin
- ARC, "FOLDAPPI", Thesis 2010-2012, M. Laguerre.
- Charity-funded projects.
- Cancer Research Association (CRA), La Reptine, une nouvelle cible thérapeutique en cancérologie. Rôle de l'activité ATPase et fonctions cytoplasmiques, 2010-2011, J. Rosenbaum (M. Laguerre, J. Dessolin).
- Contracts with the industry.
- SERVIER Industry, Post-Doc, 2011-2012, I. Huc (M. Laguerre, V. Leroux).

3.2 Centre Lasers Intenses et Applications

UMR5107 - Université de Bordeaux / CNRS / CEA

<http://www.celia.u-bordeaux1.fr/>

Correspondant : Loïc Baucher (baucher@celia.u-bordeaux1.fr)

Le CELIA est une unité mixte de recherche (UMR5107) en partenariat avec l'Université de Bordeaux, le CEA, et le CNRS. Il rassemble des compétences dans des domaines qui se situent aux frontières de la physique et des applications de haute technologie. Les thématiques développées au laboratoire sont :

- Lasers femtosecondes de haute cadence et haute intensité, études en optique des lasers intenses.
- Champs ultra-intenses, collisions ioniques et sources de rayonnement X par plasmas.
- Harmoniques XUV et applications à l'étude des processus ultra-brefs, impulsions attosecondes.
- Interaction laser plasma, physique des plasmas chauds et denses, fusion par confinement inertiel, astrophysique en laboratoire.

Situé sur le campus de Talence au Domaine du haut Carré, il représente actuellement un effectif de 95 personnes parmi lesquelles 43 chercheurs et enseignant/chercheurs, 37 doctorants et post-doctorants et 15 ingénieurs et techniciens.

Les chercheurs ayant besoin de ressources de calcul peuvent utiliser les serveurs de calcul du CELIA ainsi qu'un petit cluster de 256 cœurs. Pour des besoins plus importants, les moyens de calcul du MCIA sont utilisés, de même que ceux des centres nationaux (CINES, CRTT...)

TRAVAUX UTILISANT OU AYANT UTILISE LES RESSOURCES DU MESOCENTRE

Théorie de l'interaction laser intense-matière (H. Bachau et F. Catoire, CELIA)

Nous étudions une large gamme de processus résultant de l'interaction de champs intenses, de l'infrarouge (IR) moyen aux rayonnements X des lasers à électrons libres, avec des atomes, molécules et solides. Nous nous intéressons plus particulièrement aux propriétés des molécules en champ IR intense (ionisation dissociative ATI, calcul des spectres corrélés électrons / ions résiduels résolus en énergie et en angle), double ionisation des atomes en régime non-linéaire, effets non-dipolaires dans l'ionisation à deux photons de l'hydrogène atomique en régime X (keV).

L'approche théorique est basée sur la résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps (ESDT), qui permet de prendre en compte de façon non-perturbative l'effet du champ électromagnétique. Celui-ci est traité de façon semi-classique, le hamiltonien atomique ou moléculaire étant traité de façon quantique. La résolution de l'ESTD est un véritable challenge compte tenu de la lourdeur des calculs. Seul l'atome à un électron actif en champ IR fort a été traité complètement jusqu'à présent. Cependant, avec la puissance

croissante des calculateurs, et notamment l'exploitation "en parallèle" des progrès considérables ont été réalisés, notamment pour le cas moléculaire.

Dans le domaine X nous avons mis en évidence l'importance des effets de retard (ou effets non-dipolaires) dans le contexte de l'ionisation de l'hydrogène par effet Compton stimulé (absorption d'un photon X suivi de l'émission d'un deuxième photon X de plus faible énergie avec émission d'un électron). Nous avons en particulier montré que le dépôt d'énergie est, dans certaines configurations des faisceaux laser, maximal dans la zone de croisement des faisceaux [1]. Cet effet a un potentiel d'application important en médecine.

Pour les cibles moléculaires, nous avons développé une méthode basée sur la résolvente pour analyser la fonction issue de l'interaction d'une cible moléculaire avec un champ laser intense. Cette méthodologie a été appliquée à la dynamique nucléaire de la molécule He_2^{2+} , qui présente la caractéristique d'avoir des états vibrationnels auto-dissociants [2]. Par cette méthode, nous avons pu étudier l'effet tunnel associé à cette molécule.

Concernant l'ionisation dissociative de petites molécules, nous avons traité le cas de l'interaction d'un champ laser intense dont la fréquence est dans l'Infra-rouge moyen. La méthodologie développée nous permet, entre autre, de nous affranchir de l'approximation de Born Oppenheimer. Les effets de cette dernière ont pu être quantifiés et agissent essentiellement aux basses énergies totales là où les états de Rydberg jouent un rôle fondamental. De même les diagrammes de partage d'énergie nucléaire et électronique ont permis d'établir sans ambiguïté (contrairement au cas atomique) la transition entre régime multi-photonique et tunnel (DaSiva et al, Phys. Rev. Lett. 110 (2013) 113001, Catoire et al, Phys. Rev. A 89 (2014) 023415).

Dynamique non-adiabatique de systèmes atomiques et moléculaires en champ fort (B. Pons et B. Fabre, CELIA)

Au-delà des dynamiques inélastiques décrites précédemment, on s'intéresse aussi aux processus de réaction électronique et nucléaire induits par impact d'ions sur cibles atomiques et moléculaires. Ces processus, fortement non-adiabatiques, incluent la capture d'électrons par l'ion incident, l'excitation et l'ionisation de la cible, ainsi que l'excitation vibrationnelle et la dissociation dans le cas de cibles moléculaires. Tous ces mécanismes jouent un rôle important tant en astrophysique (chimie interstellaire) qu'en physique des plasmas de fusion par confinement magnétique (ITER).

Les approches théoriques utilisées pour décrire ces processus sont très semblables à celles utilisées dans le cas de dynamiques induites par une impulsion laser brève et intense : résolution de l'équation de Schrödinger [3], approches statistiques classiques basées sur l'emploi de trajectoires électroniques et/ou nucléaires [4]. Ces approches sont numériquement lourdes à mettre en œuvre, mais les codes numériques qui leur sont associés sont facilement parallélisables. D'où l'intérêt de l'utilisation de machines massivement parallèles, telles que celle du MCIA.

Collaborations internationales

Univ. Madrid, Univ. Cath. Louvain (Prof. Urbain et Piraux), Univ. Dublin (Prof. Nikolopoulos), Ohio State Univ. (Prof. Di Mauro), ISMO (Dr. Dowek), Lomonosov Moscou (Prof. Vasil'ev), Univ. Bucarest (Profs. Florescu et Dondera), Univ. Pierre et Marie Curie (Dr. Taïeb).

Références avec remerciements MCIA

- [1] H. Bachau, M. Dondera et V. Florescu, Phys. Rev. Lett. **112**, 073001 (2014)
- [2] F. Catoire and H. Bachau J. Phys. B (2014), accepté
- [3] A. Leredde, X. Fléhard, A. Cassimi, D. Hennecart et B. Pons, Phys. Rev. Lett. **111**, 133201 (2013)
- [4] J. Suarez, F. Guzman, B. Pons and L. F. Errea, J. Phys. B **46**, 095701 (2013)
- [5] C. Couratin, X. Fabian, B. Fabre, B. Pons *et al.*, Phys. Rev. A **88**, 041403(R) (2013)

Support réseaux européens

- Action COST CM1204 (2013-2017) XLIC (XUV/X-ray light and fast ions for ultrafast chemistry)
- Action COST CM0702 (2008-2012) CUSPFEL (Chemistry with Ultrashort Pulses and Free-Electron)
- Lasers: Looking for Control Strategies Through "Exact" Computations)

Thèses (avec le support du MCIA)

- *François Reynal (soutenue le 19 octobre 2012), Université Bordeaux1, France*
"Etude des processus non-linéaires dans les atomes complexes en interaction avec un champ XUV intense et bref"
- *François Cloux (en cours), Université Bordeaux1, France*
"Modélisation de spectroscopie attoseconde basée sur la génération d'harmoniques d'ordre élevé"

Support LabEx

Projet Laphia (2014-2015) ElectroDyn (Electronic Dynamics of Double Ionization in Strong and Short Fields)

3.3 Apprentissage des agents et politiques macroéconomiques

GREThA, UMR 5113 – Université Bordeaux IV / CNRS

<http://www.gretha.fr/>

Correspondant : Murat Yildizoglu (yildi@u-bordeaux4.fr)

Ce domaine de recherche en économie couvre plusieurs programmes de l'UMR CNRS GREThA et mobilise plusieurs chercheurs du laboratoire. Actuellement, des recherches autour de deux thématiques font appel aux ressources du cluster Avakas.

Apprentissage et dynamique macroéconomique :

Cette ligne de recherche développe un modèle macroéconomique multi-agents (agent based macroeconomic model) dans lequel l'efficacité des différents instruments de politique monétaire est étudiée quand les agents n'ont qu'une représentation approximative et adaptative du fonctionnement de l'économie. Sous ces hypothèses, la politique monétaire doit aussi chercher à orienter les activités économiques, même quand les comportements des agents ne sont pas nécessairement compatibles (situation de déséquilibre). Ces hypothèses, délibérément éloignées de celles habituellement adoptées dans la littérature, ont permis d'apporter des réponses nouvelles à la question de l'efficacité de la politique monétaire. Le projet a procédé par la création de plusieurs modèles et leur analyse par le biais des expériences computationnelles. Nous avons aussi développé un protocole d'expérimentation parcimonieux en vue de réduire le coût computationnel de ces expériences, qui reste élevé malgré l'apport d'Avakas (la plateforme de simulation que nous utilisons limite pour l'instant ne nous permet pas encore d'exploiter plus de cœurs que ceux contenus dans une unité bigmem). Les deux thèses ont pu être terminées et soutenues grâce à l'accélération apportée par le recours au cluster AVAKAS pour la réalisation des expériences de la dernière année de thèse. En parallèle plusieurs travaux collectifs ont pu être réalisés par l'équipe et des travaux individuels par les doctorants.

Innovation technologique, réseaux et développement économique :

Cette ligne de recherche s'organise autour de deux thèses de doctorat focalisées sur le rôle des innovations technologiques dans la dynamique économique. La première thèse se consacre à l'analyse empirique et à la modélisation du rôle des droits de propriétés intellectuelles dans le rattrapage technologique des pays du Nord par les pays du Sud. La seconde concerne l'analyse de la dynamique et du rôle des réseaux d'innovateurs dans la création de nouvelles technologies au sein d'une industrie. Les travaux des deux thématiques utilisent deux logiciels libres : R-project pour l'analyse statistique et économétrique et NetLogo pour la modélisation à base d'agents. Ces deux logiciels sont installés sur Avakas.

Articles

- Yildizoglu M., M.-A. SÉNÉGAS, I. Salle and M. Zumpe, Learning the optimal buffer-stock consumption rule of Carroll, *Macroeconomic Dynamics*, volume 18, issue 4, pp. 727-75, 2014.

- Salle, I., M. Yildizoglu, Efficient Sampling and Metamodeling for Computational Economic Models, forthcoming in Computational Economics, published on-line, November 2013.
- Salle I., Murat Yildizoglu, Marc-Alexandre S négas, Inflation targeting in a learning economy: an ABM perspective, Economic modelling, Volume 34, Pages 114–128, 2013.
- Salle, M. Zumpe, M. Yildizoglu and M.-A. S négas, Modelling Social Learning in an Agent-Based New Keynesian Macroeconomic Model, Cahiers du GREThA, 2012-20, r vis  pour Journal of Economic Dynamics and Control.

S minaires invit s et conf rences

- Salle, M. Zumpe, M. Yildizoglu and M.-A. S négas, Modelling Social Learning in an Agent-Based New Keynesian Macroeconomic Model, S minaire au CeNDeF, Universit  d'Amsterdam.
- Isabelle Salle, Martin Zumpe, Murat Yildizo lu, Marc-Alexandre S négas, Modelling Social Learning in an Agent-Based New Keynesian Macroeconomic Model, GREQAM, Aix Marseille University, September 21, 2012.

Pr sentations aux conf rences internationales

- J. Arifovic and Murat Yildizoglu, Adaptive learning with expectations to control an heterogeneous agents economy, Society for Computational Economics Conference, June 27-29, 2012, Prague.
- I. Salle, M. Yildizoglu and M.-A. S négas, Modeling Social Learning in an Agent-Based New Keynesian Macroeconomic Model, Society for Computational Economics Conference, June 27-29, 2012, Prague.
- I. Salle, M. Yildizoglu and M.-A. S négas, Inflation targeting in a learning economy : An ABM perspective, Society for Computational Economics Conference, June 27-29, 2012, Prague.
- Yildizoglu M., S négas M.-A., Salle I. et M. Zumpe, "Learning the optimal buffer-stock consumption rule of Carroll", Society for Computational Economics, June 29 - July 1, 2011, San Francisco.

Th ses soutenues sous la codirection de Marc-Alexandre S négas et de Murat Yildizoglu :
 Isabelle Salle's Ph.D. thesis on "Learning, Heterogeneity and Monetary Policy : an application to inflation targeting regimes", Universit  Bordeaux IV, 11 d cembre 2012.
 Martin Zumpe's Ph.D. thesis on "Stabilit  macro conomique, apprentissage et politique mon taire", Universit  Bordeaux IV, 14 Septembre 2012.

Th ses en cours sous la direction de Murat Yildizoglu

- Johannes van der Pol, "Social network of firms, innovation and industrial performance", co-supervision with Andreas Pyka, University of Hohenheim. Octobre 2012-.
- Anissa Saumtally, "Technical progress, intellectual property rights and economic catch-up". Octobre 2012-.

3.4 Institut de Mécanique et d'Ingénierie de Bordeaux

I2M - UMR 5295, CNRS, Université de Bordeaux, Institut Polytechnique de Bordeaux, Arts et Métiers ParisTech, INRA

<http://i2m.u-bordeaux.fr>

Correspondant : Stéphane Glockner (glockner@ipb.fr)

L'« Institut de Mécanique et d'Ingénierie de Bordeaux », I2M, recouvre l'ensemble de la palette de la Mécanique et de l'Ingénierie allant de la Mécanique des Solides à celles des Fluides et s'articule autour de six départements. Quatre d'entre eux ont été identifiés comme étant impliqués dans une activité HPC bénéficiant des moyens du MCI : Fluides et Transferts (TREFLE), Durabilité des Matériaux, des Assemblages et des Structures (DUMAS), Acoustique Physique (APY), Génie Civil et Environnement (GCE).

Au sein du département Fluides et Transferts (TREFLE), l'activité HPC est principalement regroupée autour de l'équipe de recherche Mécanique des Fluides Numérique (MFN). L'originalité de la démarche scientifique est d'aborder la Mécanique des Fluides exclusivement par la voie numérique. L'équipe de recherche regroupe des projets allant de l'algorithmique jusqu'à la simulation numérique. Trois thèmes équilibrés et interdépendants recouvrent les axes principaux de recherche : modélisation et simulations d'écoulements en présence d'interfaces, écoulements diphasiques turbulents, méthodes numériques de hautes performances pour la mécanique des fluides. Ces trois thèmes s'appuient sur le code de mécanique des fluides Thétis (<http://thetis.enscbp.fr>).

Le département DuMAS développe ses activités de recherche autour de l'étude du comportement et de la tenue en service des matériaux, des assemblages et des structures, sous des chargements complexes. Il s'agit, à partir de la compréhension fine des phénomènes physiques à l'échelle des microstructures, de proposer des modèles pour l'étude du comportement de matériaux, d'assemblages et de structures soumis à des sollicitations thermo-mécaniques et environnementales complexes. Le mésocentre est principalement utilisé pour l'axe transverse numérique, et plus particulièrement la plateforme GranOO (<http://www.granoo.org>), support de la modélisation DEM (Discrete Element Method). Cette plateforme permet de conduire de nouvelles simulations mécaniques DEM prenant en compte la multi-fissuration et la physique aux échelles micro. Les enjeux de l'approche DEM dans les travaux récents concernent la modélisation des comportements complexes pour lesquels les modèles issus de la mécanique des milieux continus font face à certaines difficultés.

Au sein du département APY le Mésocentre a été utilisé dans les thématiques suivantes, l'activité reposant d'un point de vue logiciel sur Comsol et PLAST3D :

- Propagation des ondes ultrasonores dans les matériaux ;
- Contrôle non destructif des matériaux composites de l'aéronautique ;
- Modélisation de sondes ultrasonores multi-éléments
- Imagerie ultrasonore de composites
- Acoustique non linéaire.

Au sein du département GCE, le domaine d'application est celui de la construction et de l'aménagement au sens large, avec un intérêt particulier pour (a) les questions de compréhension et de modélisation des matériaux et des milieux hétérogènes, (b) de reconnaissance / contrôle non destructif et d'évaluation du patrimoine, (c) d'aide à la décision, que ce soit en phase de conception, de diagnostic ou de gestion des sites et des ouvrages (d) la modélisation de l'évolution des fissurations dans le bois sous des environnements climatiques variables. Les problèmes d'interface (ouvrage/atmosphère, ouvrage/sol/massifs) et d'échelles constituent un enjeu important du projet scientifique. Au

sein du département GCE, c'est essentiellement le code de calcul multiphysique par éléments fini « Cast3m » qui requiert des capacités de calcul élevées telles que celles disponibles au mésocentre MCIA.

Nombres de chercheurs/étudiants concernés

Département DUMAS : 3 permanents, 2 doctorants, 2 post-doctorants

Département TREFLE : 7 permanents, 4 doctorants, 2 post-doctorants

Département APY : 4 permanents, 3 doctorants, 1 post-doctorant

Département GCE : 2 permanents, 3 doctorants

Moyens de calcul

Le département TREFLE dispose, depuis 20 ans de moyens de calcul intensif propres qu'il renouvelle tous les 4 ou 5 ans afin de suivre l'évolution technologique et d'assurer un environnement de développement souple et réactif, notamment vis à vis des collaborations avec le milieu industriel. Parallèlement, le Mésocentre MCIA, les centres nationaux (GENCI) et européens (PRACE) sont largement sollicités (plusieurs millions d'heures de calculs par an). Cette logique s'inscrit pleinement dans la structure pyramidale nationale des moyens de calcul, à savoir à la base les moyens de laboratoire pour quelques centaines de milliers d'euros, les moyens régionaux (notre Mésocentre MCIA pour l'Aquitaine) pour quelques millions d'euros, les moyens nationaux pour quelques dizaines de millions d'euros et enfin les moyens européens (Tiers0). En concertation avec les acteurs du Mésocentre MCIA, le département TREFLE a obtenu sur le projet Région Aquitaine CIME (Calcul Intensif pour les Matériaux et l'Environnement) de renouveler son matériel par l'achat d'un nouveau calculateur SGI UV2000.

Le département DuMAS est doté de serveurs locaux de calcul (7 serveurs DELL PowerEdge et 2 serveurs TRANSTEC, totalisant environ une centaine de cœurs de calcul). Ces machines servent pour partie à des calculs de type FEM (code Zebulon), et pour partie aux calculs DEM GranOO. Le travail de parallélisation (MPI) de la plate-forme GranOO reste à faire afin de pouvoir bénéficier davantage de la puissance de calcul du cluster Avakas. À terme, il est prévu de ne passer sur les ressources locales DuMAS que les calculs de maquettage préliminaire, et de passer les calculs 'taille réelle' sur le cluster du MCIA.

Thèmes de recherche du département TREFLE.

Le point commun des projets de calcul intensif du département est le code Thétis, développé depuis 20 ans à l'I2M et dont l'objectif est de regrouper un large ensemble de modèles et méthodes numériques dans le domaine de la CFD, originales ou existantes, utiles aux partenaires et plus largement à la communauté scientifique. Thétis est à triple usage : recherche, industrie, pédagogie. Conscient de l'enjeu que représente le calcul intensif, l'architecture de Thétis a été revue il y a quelques années et il a été porté sur les plates-formes du Mésocentre et du GENCI pour être maintenant utilisé, en production, sur des problèmes de très grande taille (1 à 60 millions de points), jusqu'à 512 voire 1024 processeurs. Dans le cadre d'un projet PRACE 2013/2014 il a été porté sur la machine Curie du TGCC. Cela a ouvert la voie à des simulations de plusieurs centaines de millions de points (la figure suivante montre la scalabilité faible entre les 2 machines, Curie du TGCC et Avakas du MCIA).

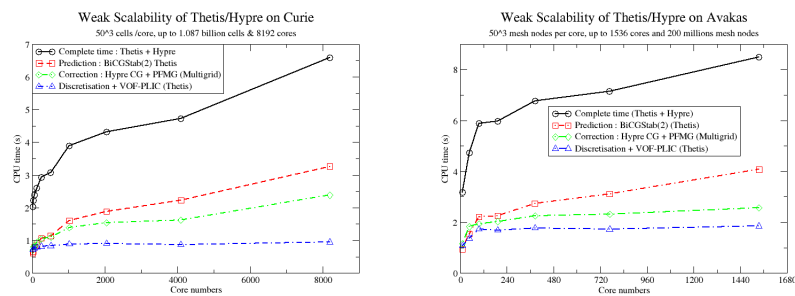


Figure 1 : comparaison de la scalabilité de Thetis/Hypre sur Avakas (MCIA) et sur Curie (TGCC).

Parmi les travaux du département, nous faisons ressortir dans le présent rapport scientifique trois d'entre eux, car ils ont été parmi les plus consommateurs de ressources informatiques. Ils sont aussi représentatifs d'un point de vue méthodologique d'autres projets comme l'étude du refroidissement de data center (avec Cap Ingélec), le projet Simulateur Lascaux, la simulation intensive de lits-fluidisés, la problématique du stockage de l'énergie solaire dans le cadre d'une équipe de recherche commune avec la société Abengoa Solar, etc.

Le premier projet du TREFLE concerne la simulation de procédés de cristallisation supercritique et plus particulièrement le procédé de cristallisation SAS (Supercritical AntiSolvent). La description complète du procédé SAS nécessite de modéliser plusieurs phénomènes physiques tels que le transfert de matière et de chaleur, l'hydrodynamique, les équilibres de phases ainsi que les phénomènes de germination croissance de l'espèce à précipiter. D'une manière générale deux cas peuvent être distingués :

- le cas d'écoulements monophasiques : les espèces injectées se mélangent à l'antisolvant (CO₂ supercritique) par diffusion moléculaire. Les phénomènes de nucléation-croissance sont pris en compte via l'implémentation de bilan de population ;
- le cas d'écoulements diphasiques : le mélange solvant/soluté est injecté sous forme liquide dans un gaz comprimé (CO₂ supercritique), des gouttes se forment par fragmentation du jet et s'ensuit la diffusion des espèces dans le mélange. Les principaux modes de rupture de jet sont étudiés : Rayleigh, First-wind-induced, Second-wind-induced et atomisation.

L'exploration numérique nous permet de prédire les tailles de particules générées et ainsi de mettre en évidence des interactions croisées entre les paramètres et de cerner les conditions susceptibles d'affecter profondément le régime du procédé. A titre d'illustration des résultats de la recherche, la figure 2-gauche représente la répartition de la masse des cristaux générés lors du procédé SAS en configuration monophasique, et la figure 2-droite représente l'atomisation d'un jet liquide dans du CO₂ supercritique.

Certains aspects de ces travaux sont effectués en collaboration avec Pascale Subra du laboratoire CBMN et Cyril Aymonier et Samuel Marre de l'ICMCB.

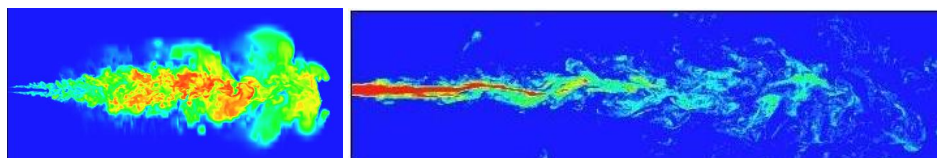


Figure 2 : (gauche) masse des particules créées dans le plan médian du réacteur ; (droite) représentation de la fonction couleur lors de l'atomisation d'un jet liquide dans du CO₂ supercritique

Le second projet du TREFLE est celui de l'étude du rôle de la turbulence dans les écoulements géophysiques. Les objectifs de cette partie sont d'étudier plus particulièrement le déferlement des vagues et les mascarets. Ces phénomènes restent encore très difficiles à appréhender tant d'un point de vue expérimental que numérique. L'apport du numérique est ici primordial devant les difficultés d'instrumentations de tels phénomènes.

L'étude du déferlement des vagues par la simulation numérique a pour objectif général la description complète et fine des processus rencontrés. Nous avons mis l'accent sur une configuration de déferlement plongeant qui représente actuellement un grand challenge scientifique du fait de sa complexité (entraînement d'air et génération de turbulence). En effet, le déferlement des vagues reste un problème de mécanique des fluides très difficile à appréhender du fait du grand nombre de points de discrétisation nécessaires pour la simulation des plus petites échelles spatiales et temporelles présentes dans l'écoulement. Les progrès effectués au niveau de l'outil de simulation nous ont permis de réaliser des simulations 3D avec des maillages très fins nous donnant accès à des structures tourbillonnaires aériées (filaments de vorticit ) qui n'ont jamais  t  observ es exp rimentalement jusqu'  pr sent (cf. figure suivante). A ce jour, ces structures turbulentes a r es n'ont  t  visualis es qu'  partir de photos et de vid os dans des documentaires (BBC). Les  quations de Navier-Stokes sont r solues dans l'air et dans l'eau sur des maillages de l'ordre de 100 millions de points de discr tisation sur le cluster du M socentre.

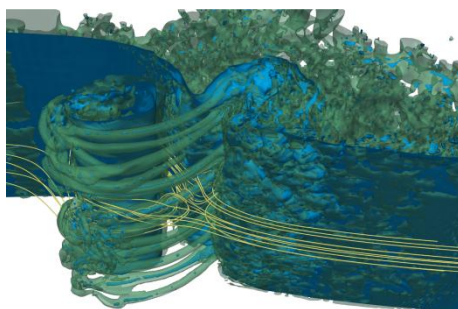


Figure 3 : Filaments de vortex sous la surface libre. La vague se propage de la gauche vers la droite de l'image. Isosurface entre l'air et l'eau (bleu), Isocontour du crit re Q (vert), trajectoires autour d'un filament.

L' tude des mascarets a pour objectif g n ral la description des processus turbulents observ s lors de la propagation d'onde positive de translation de type mascaret par la simulation num rique des  quations de Navier-Stokes en formulation diphasique. Ces travaux sont r alis s dans le cadre d'un projet ANR Blanc, qui a d but  le 1er d cembre 2010, sur l' tude de la turbulence dans les mascarets (ANR MASCARET - laboratoire coordinateur). L' quipe a pu r aliser les premi res simulations num riques de mascarets ondul s et d ferlants par la r solution des  quations de Navier-Stokes 3D. Un certain nombre de r sultats notables ont  t  obtenus, en particulier l'identification des structures tourbillonnaires localis es sous le front d ferlant du mascaret et la description de la g n ration et du comportement de ces structures (fr quence d'apparition, taille caract ristique, propagation et r le sur la mise en suspension des s diments). L'objectif est de mieux comprendre le ph nom ne du mascaret, ses cons quences et sa sensibilit    diff rents param tres, sur la base des premiers r sultats prometteurs. Il faut noter qu'aucun travail num rique de cette nature n'existe dans la litt rature, le cas est donc tr s peu balis .

Le troisi me projet est r alis  dans le cadre de l'ANR « Mod lisation Num rique » MODEMI.

Nous nous int ressons   la mod lisation et la simulation num rique de l'inversion de phase d'un volume d'huile pr sent dans un fluide plus dense, l'ensemble de l' coulement diphasique  tant contenu dans une cavit  ferm e. L'inversion de phase pr sente des particularit s physiques int ressantes. En effet, au cours du processus d'inversion, des interfaces d' chelles diff rentes peuvent  tre observ es suivant les ph nom nes de rupture de l'interface ou de coalescence (cf. figure suivante). Ce probl me de m canique des fluides est utilis  dans le cadre d'un benchmark o  diff rents codes de calculs vou s   la simulation num rique des  coulements multiphasiques sont  valu s et compar s entre eux (Archer-CORIA, Dyjeat-ONERA, Jadim-IMFT, Gerris-IJLRDA, Th tis-I2M). Des simulations num riques de type DNS (toutes les  chelles de l' coulement sont r solues) sont r alis es en

calcul parallèle sur des maillages présentant une résolution de l'ordre de $256 \times 256 \times 256$. Plusieurs paramètres tels que les propriétés physiques des fluides en question, la tension superficielle entre les différentes phases et les dimensions du domaine de calcul sont évalués. L'écoulement multiphasique est modélisé par le modèle à 1-Fluide diphasique. Le suivi de l'interface est effectué par la méthode VOF-SM. Le couplage vitesse-pressure est quant à lui assuré par la méthode du Lagrangien Augmenté. Les simulations sont effectuées au MCIA sur 252 processeurs. La réalisation de ce benchmark a permis de confronter différents codes de calcul et différentes méthodes numériques destinées à la simulation d'écoulements multiphasiques. Il est apparu une cohérence des résultats numériques entre tous les codes de calcul, à l'exception de l'entrophie, valeur représentative du caractère turbulent de l'écoulement, pour laquelle une étude supplémentaire réalisée sur des maillages plus fins serait nécessaire pour atteindre une réelle DNS.

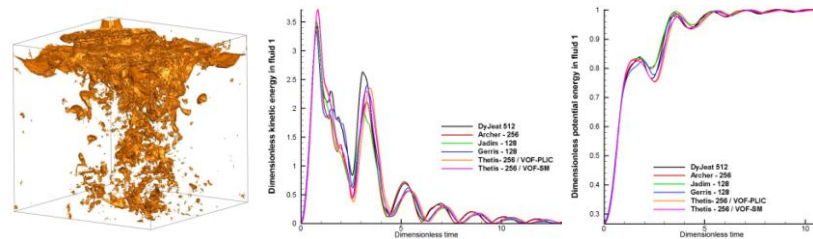


Figure 4 : inversion de phase (interface entre les deux fluides et comparaison des codes)

Thèmes de recherche du département DuMAS.

Le département DuMAS développe un environnement de simulation DEM (Discrete Elements Method) qui permet des simulations mécaniques originales en dynamique explicite rapide. Cet atelier est constitué du workbench GranOO, développé en C++ sur architecture GNU/Linux, porté sur le cluster Avakas en mai 2012. Depuis cette date, les modélisations DEM avec GranOO sont opérationnelles sur le cluster Avakas pour les chercheurs du département. À ce jour, des calculs de création de domaine discrets ont été menés sur le MCIA pour des domaines discrets allant jusqu'à 300000 particules (le calcul DEM d'un domaine discret de 300000 éléments prend typiquement environ 300 heures CPU, en version séquentielle, sur le cluster Avakas du MCIA).

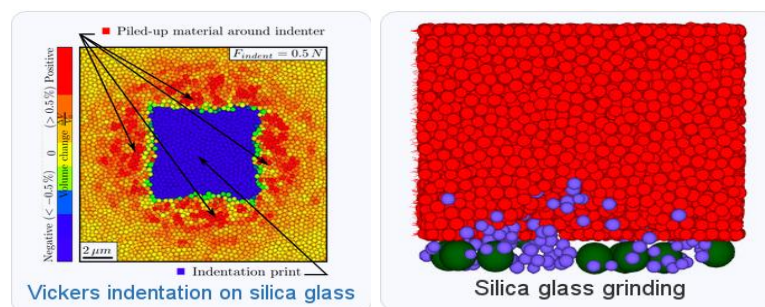


Figure 5 : simulation d'un essai d'indentation sur silice (gauche) ; simulation du surfacage de la silice (droite)

Les thèmes de recherche liés à la modélisation DEM sont :

- Le couplage approche discrète (DEM) – approche continue (CNEM) : thèse de Mohamed Jebahi soutenue en novembre 2013 (lauréat du prix CSMA en 2014) ;
- La caractérisation des propriétés intrinsèques des verres par choc laser : ANR GLASS déposé en mai 2014, avec le LARMAUR de l'université de Rennes1, le PIMM ENSAM Paris et le CEA pour étudier expérimentalement et simuler par DEM + Dynamique Moléculaire la rupture à cœur de la silice. Le MCIA est directement cité dans ce dossier.

- La modélisation du procédé de surfacage du verre, avec en particulier l'étude des SSD (Sub Surface Defaults) générés par les procédés d'ébauchage et de doucissage (thèse Damien André soutenue en mars 2012 ; Projet région EFESO2 avec le CEA Cesta).
- La modélisation des comportements visco-élastiques (thèse en cours de Nicolas Huchon) et élasto-plastiques (thèse IDEX en cours de Moubarak Gado).
- La modélisation de l'endommagement des milieux composites.

Thèmes de recherche du département APY

L'objectif de la **thématique « Acoustique non linéaire »** est d'étudier l'interaction non linéaire entre une onde acoustique et un défaut de type fissure fermée ou défaut d'adhésion dans un collage. L'objectif final est d'étudier la détectabilité de ces défauts difficiles à caractériser et à détecter. Le modèle numérique dynamique non linéaire Eléments Finis d'un milieu possédant une fissure d'orientation donnée prend en compte une loi de contact unilatéral avec frottement de Coulomb au niveau des lèvres de la fissure. Les nombreuses simulations réalisées sont en deux dimensions et sont effectuées par le logiciel PLAST2D, code temporel semi-implicite qui permet de gérer le contact par l'utilisation de multiplicateurs de Lagrange à incrément avant. L'interaction entre une onde plane de compression ou de cisaillement avec la fissure est étudiée dans le but de réaliser une caractérisation du comportement acoustique linéaire et non linéaire du milieu en fonction de l'orientation de la fissure. Le comportement non linéaire de la fissure implique la génération d'harmoniques supérieures dans le contenu fréquentiel des ondes transmises. L'évolution des harmoniques 2 et 3 en fonction de l'angle d'orientation est directement liée au comportement au contact. Les nombreuses simulations EF temporelles ont été réalisées sur le cluster du MCIA.

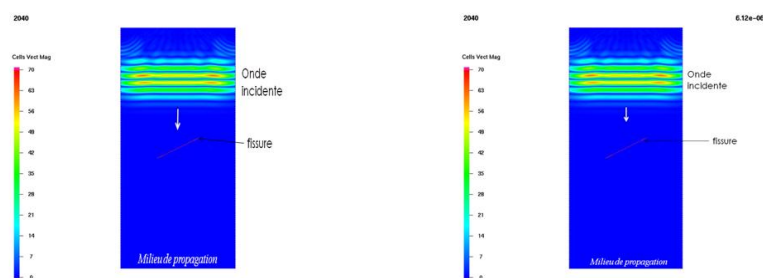


Figure 6 : Isovaleurs en vitesse (gauche) Visualisation de l'onde incidente et (droite) Diffraction non linéaire par la fissure d'orientation 25°. Les autres données du modèle $a = 20\text{mm}$ et $f = 500\text{kHz}$.

En ce qui concerne les thématiques « **Contrôle non destructif des matériaux composites de l'aéronautique** » et « **Modélisation de sondes ultrasonores multiéléments** » ou encore « **imagerie topologique de composites** », les moyens de calculs du Mésocentre MCIA ont permis de simuler, en trois dimensions, des systèmes complets et complexes de propagation d'ondes ultrasonores dans les matériaux composites. La géométrie des traducteurs ultrasonores (capteurs à couplage air ou sondes multiéléments), l'anisotropie des composites ou encore l'ouverture angulaire des faisceaux ultrasonores diffractés par des défauts, sont autant de paramètres qui ont pu être pris en compte grâce aux performances du ordinateur, permettant ainsi de simuler au plus près diverses configurations expérimentales de contrôle non destructif (CND) de matériaux. Ainsi, deux techniques de CND, basées sur la propagation d'ondes de Lamb guidées le long de grandes plaques, ont été modélisées. Les simulations numériques ont permis d'optimiser les caractéristiques des deux systèmes de CND (taille des capteurs, fréquence,...) avant de les mettre en œuvre et de les employer pour tester des pièces fournies par les partenaires industriels. *In fine*, plusieurs plaques composites possédant des défauts calibrés ont été fournies par le CETIM ou par le CRC-ACS (Australie), selon le projet, et testées avec succès grâce aux simulations numériques 3D performantes. Ces études ont été cofinancées par la Fondation CETIM, le CNRS, le CRC-ACS et le Conseil Régional d'Aquitaine.

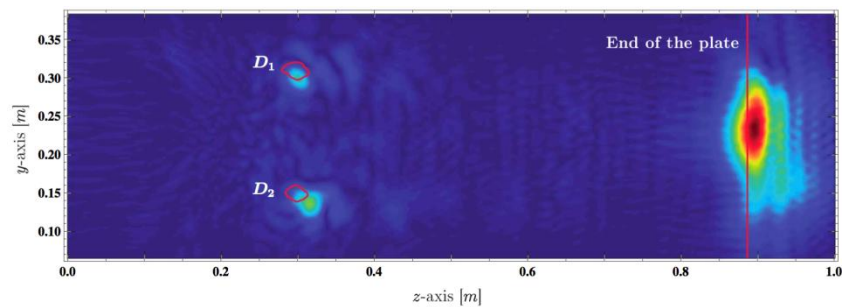


Figure 7 : Image ultrasonore d'une plaque composite (matériau anisotrope et viscoélastique) impactée en deux endroits (D_1 et D_2) par la méthode « imagerie topologique » qui requiert une simulation numérique complète de la propagation dans la plaque saine insonifiée par une source ultrasonore.

Thèmes de recherche du département GCE

Le premier thème porte sur l'étude expérimentale et numérique du comportement thermomécanique des parois de construction en bois et produits dérivés du bois (thèse en partenariat industriel avec le laboratoire de sécurité incendie « Efectis France »). Des travaux numériques sont réalisés dont le but est de simuler le comportement thermomécaniques de portes, ou de trappes, en condition d'incendie. Les matériaux étudiés sont le bois massif et les panneaux de produits dérivés du bois.

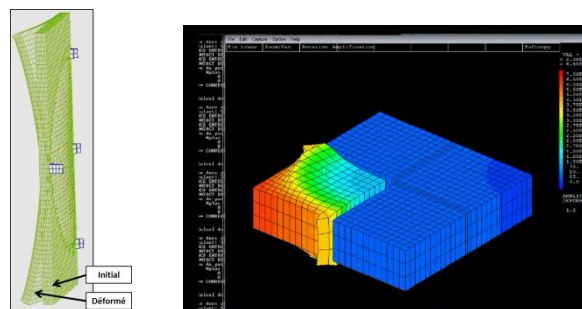


Figure 8 : A gauche, déformation simulée d'une porte en bois soumise à un incendie sur l'une de ses faces. A droite, outil de prise en compte du blocage de la porte et des transferts thermiques induits sur son huisserie du fait de sa déformation.

Un second sujet porte sur l'étude expérimentale et numérique de l'initiation et de la propagation de la fissure dans des éléments en bois sous des environnements climatiques variables (température T , humidité relative de l'air HR), dans le cadre d'une thèse cofinancée par la région Aquitaine et le CODIFAB (Comité de Développement des Industries du Bois et de l'Ameublement). Ce projet vise à améliorer la prédiction de la fiabilité des composants de structures bois sous chargements complexes. Ainsi, les variations saisonnières de l'humidité et de la température, ou celles dues à des événements exceptionnels, influencent la durée de vie des structures, mais ces effets sont encore mal quantifiés. Les scénarios crédibles de réchauffement climatiques font craindre une multiplication des désordres comme ceux observés lors de la sécheresse de 2003 sur les structures bois du patrimoine et, plus généralement une diminution de la durée de vie et de la fiabilité des ossatures bois. Le projet doit permettre de mieux identifier les cinétiques d'endommagement et de fissuration sous ambiances variables, d'améliorer les modèles mécaniques aptes à décrire les effets de l'environnement et de simuler la durée de vie et de mieux connaître la fiabilité des éléments structuraux permettant ainsi de quantifier l'impact économique du changement climatique sur le patrimoine existant.

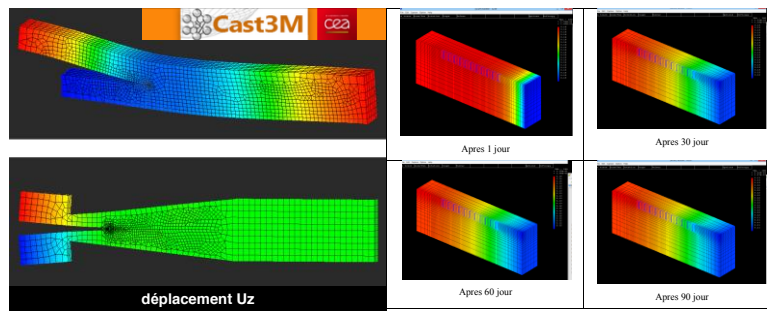


Figure 9 : A gauche, exemple de modélisation de la propagation de la fissuration pour 2 types d'éprouvettes. A droite, exemple de modélisation de transfert 1D (sous le code éléments finis Cast3M).

Un troisième sujet porte sur l'étude expérimentale et numérique de la rupture quasi-fragile d'un béton dans le cadre d'une thèse ministérielle en collaboration avec l'Université de Pau et Pays de l'Adour (laboratoire SIAME). Afin de mieux comprendre le comportement à rupture du béton en présence d'une zone d'élaboration de la fissure (FPZ), un béton numérique est modélisé à l'échelle mésoscopique (considération d'un milieu hétérogène diphasique).

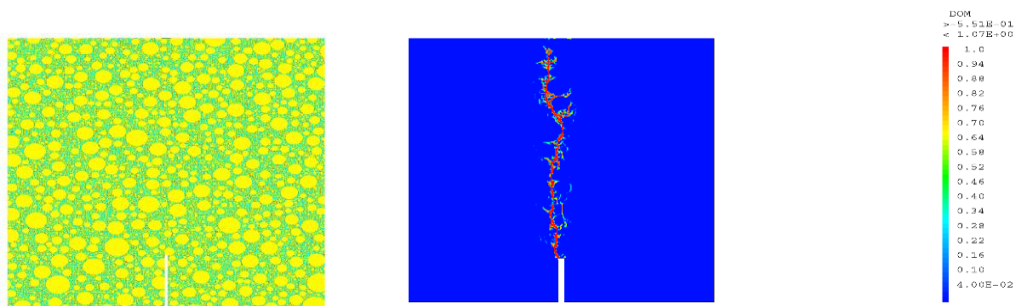


Figure 10 : A gauche, projection des granulats sur les points de Gauss. A droite la cartographie de l'endommagement à la suite d'une simulation (Calcul 2D sous Cast3M).

Le dernier sujet porte sur le comportement hydromécanique d'assemblages de bois collés à l'état vert : approches expérimentale et numérique dans le cadre d'une thèse CIFRE en collaboration avec l'I2M et l'entreprise Beynel Manustock. L'objectif principal de l'étude est de caractériser et de quantifier les phénomènes mécaniques se produisant dans une section de bilames de Pin Maritime (Pinus Pinaster) lors d'un séchage. Pour cela, un modèle numérique hydro-mécanique est proposé, dont le but est de mettre en évidence l'influence des transferts hydriques sur la déformation d'un bilame de bois collé à l'état vert.

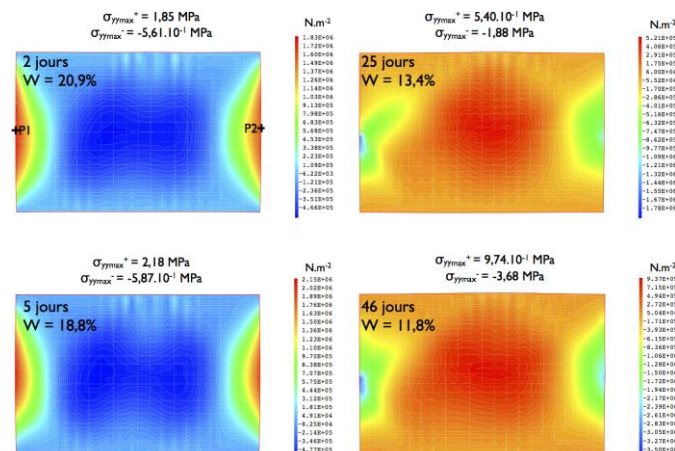


Figure 11 : Évolution des contraintes normales au joint lors d'un séchage de bois collé à l'état vert. (Calcul 2D sous Cast3M)

L'ensemble de ces sujets utilisent le code de calcul aux éléments finis (Cast3M) installé au MCIA. L'utilisation du cluster permet de faire de nombreuses simulations avec comme conséquence un gain de temps non négligeable sur l'avancée de la thèse sachant qu'un calcul peut prendre jusqu'à plusieurs jours voire semaines.

Projets et contrats

Département DuMAS. Le MCIA est mentionné pour le support des calculs nécessités par des ANRs en cours de montage ou déjà notifiés (ANR GLASS par exemple, portée par le LARMAUR, qui comporte un gros volet de simulation DEM couplée avec CNEM, pour la modélisation du choc laser sur éprouvettes de silice).

Département TREFLE. Le MCIA est donc un élément incontournable à la réalisation de nos travaux scientifiques dans le cadre de projets académiques auxquels nous participons :

- Projets liés au ClustEx CPU de l'IdEx de l'Université de Bordeaux ;
- Projet région Aquitaine CIME (calcul intensif pour les matériaux et l'environnement) 2012-2015 ;
- Projets ANR : MODEMI 2012-2015, COCRYST CO₂ 2012-2016, MASCARET 2010-2014 ;
- Projet européen ELUBSYS, sous -programme sur la simulation du refroidissement de paliers de turbine par des jets d'huile 2009-2012 ;
- Projet Région Aquitaine « Approche de l'évolution contemporaine (-50 ans à nos jours) de l'estuaire de la Gironde sous modifications des forçages hydro-climatiques et des contraintes anthropiques » 2009-2012 ;
- Projet Lascaux avec la DRAC, depuis 2007 ;
- Projet européen intitulé Sugar Alcohol based Materials for Seasonal Storage Applications (FP7 -ENERGY.2011.4.1-3 Materials for advanced compact storage systems), porté par Elena Palomo (I2M).

Département GCE. Le recours au mesocentre MCIA s'inscrit dans le cadre de multiples projets de recherche :

- Contrat de d'encadrement de thèse entre I2M/GCE et la société Efectis France (2011-2014) ;
- Le projet région Aquitaine : Vulnérabilité des Structures bois aux Changements Climatiques durée de vie et fiabilité des éléments structuraux sous sollicitations complexes. Co financement par le CODIFAB (Comité de Développement des Industries du Bois et de l'Ameublement) en partenariat avec le FIBC (Fédération de l'Industrie Bois Construction) et le SNBL (Syndicat National du Bois Lamellé).

Actions/collaborations avec l'industrie

- Département TREFLE : projets industriels avec ARCELOR, Peugeot, SAFRAN, EDF, Abengoa, etc.

Actions/collaborations avec les PMI-PME

- CAP-INGELEC : 1 thèse CIFRE sur l'optimisation du refroidissement des Data Center ;
- EFACTIS France : 1 thèse sur la modélisation du comportement thermomécanique de produits cellulosiques.

Publications choisies

André D., Iordanoff I., Charles J.L., Néauport J., Discrete element method to simulate continuous material by using the cohesive beam model. Ed. Elsevier, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 213-216, pp. 113-125, 2012.

André D., Jebahi M., Iordanoff I., Charles J.L., Néauport J., Using the discrete element method to simulate brittle fracture in the indentation of a silica glass with a blunt indenter, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 265, pp. 136-147, 2013

Blanloeuil P., Meziane A., Bacon C., Numerical study of the nonlinear interaction between a crack and elastic waves under an oblique incidence. *Wave Motion* 51, p. 425-437, 2014.

Blanloeuil P., Croxford A.J., Meziane A., Numerical and experimental study of the nonlinear interaction between a shear wave and a frictional interface. *Journal of the Acoustical Society of America* 135, p.1709-1716, 2014

D. Brouilliot and P. Lubin, Numerical simulations of air entrainment in a plunging jet, soumis à *Journal of Fluids and Structures* (2012).

G. Cueff, J.C. Mindeguia, V. Drean, D. Breyse, G. Auguin, Étude du comportement thermomécanique de matériaux composites cellulosiques : application à la résistance au feu d'un bloc-porte en bois, Congrès Français de Mécanique, 26 au 30 Août 2013, Bordeaux, France.

A. Erriguible, S. Laugier, M. Late, P. Subra-Paternault, Effect of pressure and non-isothermal injection on re-crystallization by CO₂ antisolvent: simulation and experimental investigations. *Journal of Supercritical fluids* 76, Pages 115-125, 2013.

A. Erriguible, T. Fadli, P. Subra-Paternault, A complete 3D simulation of a crystallization process induced by supercritical CO₂ to predict particle size. *Computer and Chemical Engineering* 52, Pages 1-9, 2013.

Lubin P., Glockner S., Numerical simulations of three-dimensional breaking waves: aeration and turbulent structures. Submitted to *Journal of Fluid Mechanics*, en correction.

R. Guillaument, A. Erriguible, C. Aymonier, S. Marre, P. Subra-Paternault, Numerical simulation of dripping and jetting in supercritical fluids/liquid micro coflows. *Journal of Supercritical fluids* 81, Pages 15-22, 2013.

Jebahi M., Charles J.L., Dau F., Illoul L., Iordanoff I., 3D coupling approach between discrete and continuum models for dynamic simulations (DEM–CNEM), *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 255, pp. 196-209, 2013

Jebahi M., André D., Dau F., Charles J.L., Iordanoff I., Simulation of Vickers indentation of silica glass, *Journal of Non-Crystalline Solids*, Vol. 378, pp. 15-24, 2013

A. Leleux, P. Micheau, M. Castaings, Long range detection of defects in composite plates using Lamb waves generated and detected by ultrasonic phased array probes. *Journ. of Non-Destructive Evaluation*. vol. 32(2), p. 200-214, 2013. DOI 10.1007/s10921-013-0173-0

P. Micheau, A. Leleux, M. Castaings, Comment réaliser une inspection rapide de grandes structures, *Contrôles Essais Mesures*, vol. 46, p. 103-108, 2014.

R. Ouchene, A. Erriguible, S. Vincent, P. Subra-Paternault, Simulation of liquid solvent atomization in compressed CO₂. *Mechanics Research Communications* 54. Pages 1-6, 2013.

A. Poux, S. Glockner, E. Ahusborde, M. Azaiez, Open boundary conditions for the velocity-correction scheme for Navier-Stokes equations. *Computers & Fluids*, Volume 70, 30 November 2012, Pages 29-43

A. Poux, S. Glockner, M. Azaiez, Improvements on open and traction boundary for Navier-Stokes time splitting methods. *Journal of Computational Physics*, Volume 230, issue 10, pp4011-4027, 2011.

N. Quaegebeur, P. Micheau, P. Masson and M. Castaings, Methodology for optimal configuration in Structural Health Monitoring of composite bonded joints. *Smart Mater. Struct.* vol. 21 (10), 2012 - <http://iopscience.iop.org/0964-1726/21/10/105001>

S. Rodriguez, M. Deschamps, M. Castaings, E. Ducasse, Guided wave topological imaging of isotropic plates. *Ultrasonics 2014* Sous presse.

D. Zhang, M. Rénier, M. Castaings, Numerical modelling for the optimization of multi-element, capacitive, ultrasonic, air-coupled transducer. 11st Anglo-French Physical Acoustics Conference, Brighton, England, January 18-20 2012, *Journal of Physics : Conference series*, Vol. 457, No. 012011, DOI 10.1088/1742-6596/457/1/012011, 2013.

Thèses soutenues

Blanloeuil P., Analyse de la non-linearité acoustique de contact pour l'Evaluation et le Contrôle Non Destructif. Doctorat, Université Bordeaux 1, 2013.

Antoine Goupil : Modélisation du lissage de défauts sur les optiques asphériques de photolithographie : approche par éléments discrets. Arts et Métiers Paristech, No. 0023, 2013.

Mohamed Jebahi : Discrete-continuum coupling method for simulation of laser-induced damage in silica glass (Université Bordeaux 1, No. 4911, 2013).

Jeremy Leboi : dégivrage des pompes à chaleur sur l'air : influence de la mouillabilité des ailettes d'échangeurs extérieurs et contrôle des flux hydriques lors du givrage et du dégivrage (soutenue le 06/2012)

A. Leleux, Contrôle non destructif de composites par ondes ultrasonores guidées, générées et détectées par multiélément (thèse UBx1 n° 4623, soutenue le 19 novembre 2012).

Ludovic Osmar : Modélisation du refroidissement des pistons - Hautes performances (soutenue le 28 juin 2012).

Alexandre Poux : conditions limites de sortie pour les méthodes de time-splitting appliquées aux équations de Navier-Stokes (soutenue le 7 décembre 2012).

Inigo Terreros : Modélisation DEM thermo-mécanique d'un milieu continu. Vers la simulation du procédé FSW. Arts et Métiers Paristech, No. 2013-ENAM-0060, 2013.

3.5 Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux

UPR CNRS 9048

<http://www.icmcb-bordeaux.cnrs.fr>

Correspondant : Dany Carlier-Larregaray (carlier@icmcb-bordeaux.cnrs.fr)

Disciplines : Chimie du Solide, Science des Matériaux et Sciences Moléculaires

Principaux axes de recherche

Les travaux de modélisation effectués à l'ICMCB, et faisant appel aux ressources du Pôle MCIA, s'appuient la théorie de la fonctionnelle densité électronique (DFT), telle qu'implémentée dans des codes bien adaptés aux architectures parallèles (VASP, GAUSSIAN, WIEN2K). Les principales thématiques abordées ont été :

Matériaux inorganiques pour l'énergie : hydrures, matériaux oxydes et non-oxydes pour électrodes et électrolytes dans les batteries et les piles à combustible.

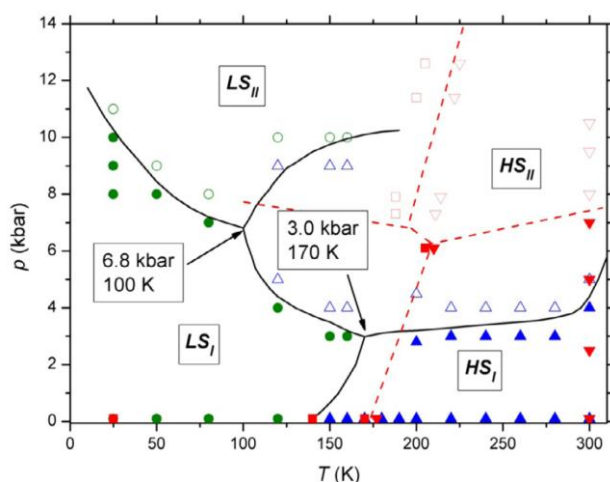
Plusieurs intermétalliques hydrogénés ont été étudiés afin de comprendre les mécanismes de changement de valence du cérium en relation avec les interactions magnétiques (*Prog. Solid State Chem.* **41**, 55, 2013).

Dans le domaine des batteries Li-ion ou Na-ion, nos travaux concernent principalement les matériaux d'électrode positive (oxydes ou phosphates), afin notamment i) d'améliorer le calcul des shifts de Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) en développant une approche quantitative combinant calculs DFT et utilisation de la susceptibilité magnétique, ii) de comprendre les mécanismes de transfert du spin électronique du métal de transition sur le noyau sondé (^7Li , ^1H , ^{31}P).

La problématique de la mobilité de l'ion O^{2-} dans les conducteurs ioniques, intervenant comme cathode dans les piles à combustible, a été abordée du point de vue de la dynamique de réseau, par le calcul des modes de phonons de basse énergie dans des nickelates à structure lamellaire.

Matériaux moléculaires magnétiques

Des travaux complémentaires (*ab initio* et semi-empiriques) sur molécules isolées et solide organisé ont permis l'étude de la dynamique de réseau dans des solides moléculaires complexes. Nous avons relevé ce défi pour une classe importante de matériaux, présentant des transitions type *spin crossover* (*Chemical Physics* **42**, 34, 2013). Des études Raman expérimentales et théoriques des complexes polymériques comme $[\text{Fe}(\text{NH}_2\text{-trz})_3](\text{X})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ont permis une attribution complète des modes Raman observés (*Phys.Chem. Chem. Phys.* **15**, 18128, 2013).



$[\text{Fe}(\text{PM-BIA})_2(\text{NCS})_2]$: Diagramme de phase (P, T) calculé par dynamique moléculaire semi-classique, montrant 4 phases solides : LS_I , HS_I , LS_{II} et HS_{II} . Points expérimentaux: symboles carrés.

Impact/contribution à des projets identifiés :

- ANR Blanche « LoCharATMO » (Local characterization of alkali-transition metal oxides and polyanionic compounds, porteur : M. Ménétrier) 2009-2012.
- ANR Blanche Internationale (ANR-NSC) France- Taiwan « LaNaMox » (Layered Sodium Metal oxides), 2012-2015.

Liste des publications

2012

Simulation of NMR Fermi contact shifts for Lithium battery materials: the need of an efficient hybrid functional approach. Yuesheng Zhang, Aurore Castets, Dany Carlier, Michel Ménétrier, and Florent Boucher. *J. Phys. Chem. C*, 116, 17393–17402, 2012.

A DFT-based analysis of the NMR Fermi contact shifts inavorite-like $\text{LiMPO}_4\cdot\text{OH}$ and $\text{MPO}_4\cdot\text{H}_2\text{O}$ ($M = \text{Fe, Mn, V}$). A. Castets, D. Carlier, Y. Zhang, F. Boucher and M. Ménétrier. *J. Phys. Chem. C*, 116, 18002-18014, 2012.

NMR study of the $\text{LiMnPO}_4\cdot\text{OH}$ and $\text{MPO}_4\cdot\text{H}_2\text{O}$ ($M = \text{Mn, V}$) homeotypic phases and DFT calculations. A. Castets, D. Carlier, Y. Zhang, F. Boucher, N. Marx, R. Gautier, E. Le Fur, L. Le Pollès, L. Croguennec, and M. Ménétrier. *Solid State NMR, special issue: Solid State NMR of Materials for Energy Storage and Conversion* 42, 42–50, 2012.

Rippled nanocarbons from periodic arrangements of reordered bivacancies in graphene or nanotubes. J.-M. Leyssale, G. L. Vignoles et A. Villesuzanne. *J. Chem. Phys.* 136, 124705-124712 (2012).

Electrochemical properties of crystallized dilithium squarate: insight from dispersion-corrected density functional theory. C. Frayret, E. I. Izgorodina, D. R. McFarlane, A. Villesuzanne, A.-L. Barrès, O. Politano, D. Rebeix, T. Bučko et P. Poizot. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 14, 11398-11412 (2012).

A density functional study of oxygen mobility in ceria-based materials.. C. Frayret, A. Villesuzanne, M. Pouchard, F. Mauvy, J.-M. Bassat et J.-C. Grenier.. *Def. Diff. Forum* 323-325, 233-238 (2012).

First principles investigations of the electronic structure and chemical bonding of $\text{U}_3\text{Si}_2\text{C}_2$ - A uranium silicide-carbide with the rare $[\text{SiC}]$ unit. Matar S, Pöttgen R. *Chem. Phys. Lett.*, 550, 88-93, 2012.

Underpinning energetics of lithium bonding in the Li-Pt-Sn system: an ab initio study. Matar S, Pöttgen R. *Solid State Sciences*, 14, 1471-1475, 2012.

Intermediate cerium valence intermetallics Ce_4RuMg , $\text{Ce}_{23}\text{Ru}_7\text{Mg}_4$, CeRu_2Mg_5 , and $\text{Ce}_2\text{Ru}_4\text{Mg}_{17}$: electronic structures and chemical bonding from DFT. Matar S, Chevalier B, Pöttgen R. *Intermetallics* 31, 88-93, 2012.

Electronic structure and chemical bonding of $\text{Li}_4\text{Pt}_3\text{Si}$. Matar S, Pöttgen R, Al Alam A, Ouiani N. *Chem. Phys. Lett.* 542, 47-51, 2012.

Ab initio investigation of the electronic structure of CeRh_2Sb_2 . Matar S, Chevalier B, Pöttgen R. *Chem. Phys. Lett.* 537, 48 - 52, 2012.

^{119}Sn Solid State NMR and Mössbauer Spectroscopic Studies of the Intermediate-valent Stannide CeRuSn . Schappacher F M, Khuntia P, Rajarajan AK, Baenitz M, Mydosh J A, Chevalier B, Matar S, Pöttgen R.Z. *Naturforsch. B*, 67b, 473 - 478, 2012.

Electronic structure and bonding of the hydrides Mg_3TH_7 ($T = \text{Mn, Re}$) from first principles. Matar S, Nakhl M, Zakhour M. *Solid State Sciences*, 14, 639-643, 2012.

Ab initio investigations of the electronic structure and and lithium stability in Li_2UN_2 and LiUN_2 . Matar S, Pöttgen R. *Monatsch. Chem. - Chemical Monthly*. 143 1341–1348 2012.

Ab initio investigations of the electronic structure and chemical bonding of Li_2ZrN_2 . Matar S, Pöttgen R, Al Alam A, Ouiani N. *J. Solid State Chem.* 190, 191-195, 2012.

Matar S, Jung D, Subramanian M.A. The predominance of the rutile phase of SnO_2 : First principles study. *Solid State Communications*, 152, 349-353, 2012.

Kersting M, Matar S, Schwickert, Pöttgen R. Segregation of Calcium and Magnesium into Different Substructures - $\text{Ca}_4\text{Ag}_{0.948}\text{Mg}$ and Other Compounds with Gd_4RhIn -type Structure. *Z. Naturforsch.*, 67b, 61- 69, 2012.

Matar S, Pöttgen R, Ouiani N. Electronic structure and chemical bonding of LiYSi . *Solid State Sciences*, 14, 375-380, 2012.

Langer Th, Dupke S, Eckert H, Matar S, Winter M, Pöttgen R. 7Li and 29Si solid state NMR and chemical bonding of the Zintl phase $\text{La}_2\text{Li}_2\text{Si}_3$. *Solid State Sciences*, 14, 367-374, 2012.

Matar S, Pöttgen R, Chevalier B. Electronic Structure and Chemical Bonding of $\square$ - and $\square$ - CeIr_2Si_2 intermediate valence compounds. *J. Solid State Chem.*, 186, 81-86, 2012.

Matar S. Electronic structure and anisotropic chemical bonding in TiNF from ab initio. *J. Solid State Chem.*, 185, 25-30, 2012.

Matar S, Pöttgen R, Hupertz H. Dimorphic LaPdSn and ErAgSn . *Intermetallics*, 20, 33-38, 2012.

2013

DFT+U calculations and XAS study: further confirmation of the presence of CoO_5 square-based pyramids with IS-Co^{3+} in Li-overstoichiometric LiCoO_2 . Dany Carlier, Ju-Hsiang Cheng, Chun-Jern Pan, Michel Ménétrier, Claude Delmas and Bing-Joe Hwang. *J. Phys Chem C*, 117, 26493-26500, 2013.

Energy levels and deformation potentials for rocksalt MgO . A. Gueddim, N. Bouarissa et A. Villesuzanne. *Optik* 124, 2670-2673 (2013).

Discussion on the structural anisotropy of würtzite-type compounds. I. Trenque, S. Mornet, A. Villesuzanne et M. Gaudon. *Solid State Sci.* 21, 81-84 (2013).

Anisotropic oxygen diffusion properties in $\text{Pr}_2\text{NiO}_{4+\delta}$ and $\text{Nd}_2\text{NiO}_{4+\delta}$ single crystals. J.-M. Bassat, M. Burriel, O. Wahyudi, R. Castaing, M. Ceretti, P. Veber, I. Weill, A. Villesuzanne, J.-C. Grenier, W. Paulus et J. A. Kilner. *J. Phys. Chem. C* 117, 26466-26472 (2013).

Tobon Y, Kabalan L, Bonhommeau S, Daro N, Grosjean A, Guionneau Ph, Matar S, Létard J-F, Guillaume F. Vibrational properties of the spin crossover complexes $[\text{Fe}(\text{NH}_2\text{trz})_3](\text{X})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ investigated by means of Raman scattering and DFT calculations. *Phys. Chem. Phys.*, 15, 18128, 2013.

Matar S, Al Alam A, Gédéon D, Ouaini N. Changes in electronic, magnetic and bonding properties from Zr_2FeH_5 to Zr_3FeH_7 addressed from ab initio. *Solid State Sci.*, 25, 55, 2013.

Matar S. (Article de synthèse) Review on cerium intermetallic compounds: A bird's eye outlook through DFT. *Prog. Solid State Chem.*, 41, 55-85, 2013.

Riane R, Abdiche A, Hamerelaine L, Guemmou M, Ouaini N, Matar S. Ab initio investigations of the electronic and magnetic structures of CoH and CoH_2 . *Solid State Sci.* 22, 77-81, 2013.

Hoffmann R-D, Pöttgen R, Chevalier B, Gaudin E, Matar S. The ternary germanides UMnGe and $\text{U}_2\text{Mn}_3\text{Ge}$. *Solid State Sci.*, 21, 73-80, 2013.

Svitlyka V, Hermes W, Chevalier B, Matar S, Gaudin E, Voßwinkel D, Chernyshov D, Hoffmann R-D, Pöttgen R. Change of the cerium valence with temperature - structure and chemical bonding of HT-CeRhGe . *Solid State Sci.*, 21, 6-10, 2013.

Reker B, Matar S, U.-C. Rodewald, R.D. Hoffmann, Pöttgen R. Single Crystal Data of Ternary Germanides $\text{RE}_2\text{Nb}_3\text{Ge}_4$ ($\text{RE} = \text{Sc}, \text{Y}, \text{Gd-Er}, \text{Lu}$) and $\text{Sc}_2\text{Ta}_3\text{Ge}_4$ with Ordered Sm_5Ge_4 -type Structure. *Z. Naturf.* 68b, 625, 2013.

Matar S. Drastic changes in electronic, magnetic, mechanical and bonding properties from Zr_2CoH_5 to Mg_2CoH_5 . *J. Solid State Chem.* 200, 209, 2013.

Matar S, Pouchard M. Ab initio investigation of the crystal and electronic structure of the nitride fluoride ThNF . *Solid State Sciences*, 18, 123-126, 2013.

Matar S, Al Alam A, Ouaini N, Pöttgen R. Ab initio investigations of the electronic structures and chemical bonding in LiCo_6P_4 and $\text{Li}_2\text{Co}_{12}\text{P}_7$. *J. Solid State Chem.* 202, 227-233, 2013.

Marbeuf A, Matar S, Négrier P, Kabalan L, Létard JF, Guionneau P. Molecular Dynamics of Spin Crossover: the (P,T) phase diagram of $[\text{Fe}(\text{PM-BIA})_2(\text{NCS})_2]$. *Chem. Phys.*, 420, 25-34, 2013.

Kersting M, Johnscher M, Matar S, Pöttgen R. Magnesium and Cadmium in Covalently-Bonded Lonsdaleite Networks: Synthesis, Structure, and Bonding of AETMg_2 and AETCd_2 ($\text{AE} = \text{Ca}, \text{Sr}$; $\text{T} = \text{Pd}, \text{Ag}, \text{Pt}, \text{Au}$). *Z. Anorg. Allg. Chem.* 639, 707-713, 2013.

Johnscher M, Kersting M, Matar S, Pöttgen R. CaTMg_2 and CaTCd_2 ($\text{T} = \text{Rh}, \text{Pd}, \text{Pt}$) with YPd_2Si -type Structure. *Z. Naturf. B*, 68b, 111, 2013.

Matar S. First principles study of the electronic and magnetic structures and bonding properties of UCoC_2 ternary, characteristic of C-C units. *Solid State Sciences*, 17, 128-133, 2013.

Matar S, Pöttgen R. Electronic structure and bonding in YTi_2Ga_4 - A gallide with linear titanium chains and four-bonded gallium atoms. *Z. Naturf. B*, 68b, 23-28, 2013.

Tappe F, Matar S, Schwickert Ch, Winter F, Gerke B, Pöttgen R. Linear infinite cadmium chains in CaAu_4Cd_2 and other intermetallics with YbMo_2Al_4 type structure. *Monatshefte Chemie (Chemical Monthly)* 144, 751-760, 2013.

Matar S. Drastic changes of electronic, magnetic, mechanical and bonding properties in Zr_2Co by hydrogenation. *Intermetallics*, 36, 25-30, 2013.

Matar S, Al Alam A, Ouaini N. Hydrogen Insertion Effects on the Electronic Structure of Equiatomic MgNi Traced by ab initio Calculations. *Z. Naturforsch.*, 68b, 44-50, 2013.

Matar S. Light elements -induced ionic-covalent character in MgH_2 : an ab-initio approach. *Computational Materials Science*, 69, 424-427, 2013.

Hoffmann R-D, Mishra T, Heying B, Rodewald U-Ch., Matar S, Deters H, Eckert H, Pöttgen R. ScPdZn and ScPtZn with YAlGe Type Structure - Group-Subgroup Relation and ^{45}Sc Solid State NMR Spectroscopy. *Z. Anorg. Allg. Chem.* 639, 246, 2013.

Hoffmann R-D, Mishra T, Heying B, Rodewald U-Ch., Matar S, Deters H, Eckert H, Pöttgen R. ScPdZn and ScPtZn with YAlGe Type Structure - Group-Subgroup Relation and ^{45}Sc Solid State NMR Spectroscopy. *Z. Anorg. Allg. Chem.* 639, 246, 2013.

2014

Cammarata M, Bertoni R, Lorenc M, Cailleau H, Di Matteo S, Mauriac C, Létard J-F, Matar S, Lemke, Chollet M, Ravy S, Laulhé C, Collet E. Curved photoswitching pathway across potential energy surface in a spin-crossover material. *Physical Review Letters*, under review 05-2014.

Evidence by X-ray Absorption Spectroscopy of simultaneous Co^{3+} and Mn^{4+} reduction during electrochemical Sodium intercalation in $\text{P2-Na}_2/3\text{Co}_2/3\text{Mn}_1/3\text{O}_2$. Ju-Hsiang Cheng, Chun-Jern Pan, Jyh-Fu Lee, Jin-Ming Chen, Marie Guignard, C. Delmas, Dany Carlier and Bing-Joe Hwang. *Chem Mater.* 26, 1219-1225, 2014

Matar S, Pöttgen R, Chevalier B. Electronic and magnetic structures and bonding properties of $\text{Ce}_2\text{T}_2\text{X}$ ($\text{T} = \text{nd element}$; $\text{X} = \text{Mg, Cd, Pb or Sn}$) intermetallics from first principles. *Intermetallics* 51, 18, 2014.

Hötting Ch, Eckert H, Matar S, Rodewald U Ch, Pöttgen R. The Silicides YT_2Si_2 ($\text{T} = \text{Co, Ni, Cu, Ru, Rh, Pd}$): A Systematic Study by ^{89}Y Solid State NMR Spectroscopy. *Z. Naturforsch. B*, 69b, 305, 2014.

Matar S. Drastic changes in the electronic and magnetic structures of hydrogenated U_2Ti intermetallic from first principles. *J. Magnetism and Magnetic Materials*, 358-359, 70, 2014.

Matar S, Subramanian M A, Etourneau J. Pressure induced Metallization of Fordite SnNb_2O_6 from First Principles. *Computational Materials Science* 84, 355, 2014.

Matar S, Subramanian M A, Etourneau J. Functional Materials Design through the 'Geo-inspired' Concept. *Universal Journal of Materials Science* 2(2): 36, 2014.

Matar S. Ab-initio Studies of the Electronic Structures of the Hexavalent Uranium Compounds K_4UO_4 and Na_4UO_5 . *Z. Naturforsch.*, 69b, 109, 2014.

Al Alam A, Matar S, Jammal A, Ouaini N. Drastic changes of electronic structure, bonding properties and crystal symmetry in Zr_2Cu by hydrogenation from ab initio. *Intermetallics*, 45, 5-10, 2014.

Matar S, Chevalier B, Pöttgen R. The $\text{U}_4\text{Re}_7\text{Si}_6$ type: Trends in electronic structure and chemical bonding. *Solid State Sci.* 27, 5-10, 2014 (Cover of January issue).

3.6 INRA

Institut National de la Recherche Agronomique

<http://www.bordeaux-aquitaine.inra.fr/>

UMR Biodiversité, Gènes et Communautés (BioGeCo)

<https://www4.bordeaux-aquitaine.inra.fr/biogeco/>

Unité Ecologie fonctionnelle et PHYSiQue de l'Environnement (EPHYSE)

<http://www7.bordeaux-aquitaine.inra.fr/ephyse/>

Correspondants : Alain Franc (Alain.Franc@pierroton.inra.fr)

Le calcul intensif n'est pas une discipline habituelle à l'INRA, à quelques exceptions près comme l'unité Ephyse au travers de thématiques en lien avec la mécanique des fluides. Le fonctionnement du Mésocentre de calcul et l'accès tant au cluster Avakas qu'à la grille EGI via les V.O. MCIA et France Grilles ont permis une percolation progressive mais sûre du calcul intensif dans les bonnes pratiques de modélisation. Cela a concerné plusieurs projets et chercheurs.

(1) BioGeCo

La « philosophie » retenue à BioGeCo est de favoriser l'utilisation de logiciels libres. Les disciplines concernées sont reliées à la bioinformatique. Le résultat essentiel est l'intégration progressive de la communauté INRA liée à l'écologie et à la biologie évolutive à celle du calcul intensif.

Suite à cette évolution, un chercheur (J.-M. Frigerio) a sollicité et obtenu le choix d'un changement de carrière, pour intégrer le corps des ingénieurs, sur un projet de développer ses compétences en calcul parallèle et/ou distribué. Ce changement est devenu effectif au 1er janvier 2013, et a été accompagné d'une formation.

Quatre projets ont pu se développer grâce à l'accès à Avakas dans l'unité BioGeCo :

Une utilisation de BioConductor (R) qui a été rapidement installé à notre demande, pour de la bioinformatique: tri de 2M de séquences courtes (NGS) selon la présence de tags présents dans une bibliothèque. Distribution en 1000 fragments de données. Le traitement a été réalisé en 2h et aurait été impossible sur un micro ou notre cluster local.

Une seconde utilisation a été faire tourner un programme écrit en C, appelé Metatrom, pour faire des simulations visant à tester des stratégies d'échantillonnage dans les populations, en collaboration avec l'INRA d'Orléans (un manuscrit est en cours de rédaction).

Une troisième utilisation a été de faire tourner un logiciel de génétique des populations appelé Structure à la fois sur des données de chênes (à l'occasion d'un travail de Master) et sur des données d'abricotier (à l'occasion d'un projet européen). Le travail se poursuivra sur abricotier.

Une quatrième utilisation a été de faire tourner un logiciel écrit localement en C (metaMatch) qui vise à mapper des reads issus de NGS sur des bases de référence. Ce programme est en fait distribué, et a vocation à travailler sur la grille de calcul. La stratégie utilisée est la suivante : les modules de calcul ont été écrits et testés sur des petits jeux de données sur un ordinateur personnel ; la distribution avec en entrée des grands jeux de données (taille réelle) a été testée avec succès sur le cluster Avakas ; enfin, ces deux

étapes ayant été acquises, le logiciel a été lancé avec succès sur la grille de production. C'est donc bien l'ensemble du MCIA (Avakas et grille) qui a été ainsi utilisé.

Enfin, l'INRA et la SFR de Biologie et Écologie Intégratives se sont unis au mésocentre de calcul pour acheter un cluster de calcul et l'installer sur le site de la Grande Ferrade. L'administration de ce cluster comme nœud de la V.O. MCIA de la grille EGI est assurée conjointement par Pierre Gay, Nabil Girollet (INRA Grande Ferrade) et David Benaben, ingénieur recruté sur un poste permanent INRA et travaillant au CBiB avec une double mission : une pour le CBiB et la seconde pour l'administration de cette machine.

(2) EPHYSE

Le calcul intensif est utilisé à EPHYSE depuis 2005 pour répondre à des questions environnementales mettant en jeu les écoulements atmosphériques à l'échelle du paysage. Les questions traitées peuvent aller de l'interaction vent-arbre en lien avec les tempêtes, à la dispersion de particules telles que pollens, pesticides ou poussières.

Concernant l'année 2012, les ressources utilisées sur le cluster Avakas nous ont permis d'aborder une nouvelle thématique sur l'érosion éolienne des sols (ANR blanc France-Chine PEDO COTESOF). Pour cela, nous avons développé un modèle complet de saltation du sol couplée à un modèle d'écoulement atmosphérique (en fortran). Ce modèle résout explicitement le transport individuel de particules de sable, leur rebond et splash à la surface. Une grosse partie de ce travail a consisté à paralléliser la partie saltation dans le modèle d'écoulement à l'aide de la librairie openmpi. Cette parallélisation et les ressources disponibles du cluster Avakas nous ont permis de simuler un très grand nombre de particules nécessaire à la simulation réaliste de l'érosion éolienne d'un sol nu (10 min d'érosion éolienne d'un sol de 20×10 m² nécessite grossièrement une simulation de 3×34 h sur 168 cœurs). Ces simulations ont permis de modéliser pour la première fois des structures allongées intermittentes de forte concentration de sable près de la surface, connues sous le nom de « serpents de sable » et visibles notamment sur les plages lors de journées venteuses. Nous avons pu confirmer une précédente hypothèse comme quoi ces structures sont liées à la turbulence de l'écoulement et peuvent être vues comme une empreinte visuelle de rafales de vent antérieures se propageant à la surface. Un article a été soumis à Journal of Geophysical Research début janvier.

3.7 INSERM

Centre de Recherche INSERM « Epidémiologie et Biostatistique »,

INSERM U897, ISPED, 146 rue Léo Saignat, 33076 Bordeaux Cedex

http://www.isped.u-bordeaux2.fr/FR_HTM_equipe.aspx?CLE_EQU=6

Correspondant : Daniel Commenges (daniel.commenges@isped.u-bordeaux2.fr)

L'équipe Biostatistique du Centre de Recherche « Epidémiologie et Biostatistique » dirigée par Daniel Commenges puis par Hélène Jacqmin-Gadda à partir du 1^{er} Janvier 2014, développe de nouvelles méthodes et modèles biostatistiques. L'équipe est forte de douze chercheurs et enseignants-chercheurs et bénéficie également de la présence de doctorants, post-doctorants et ingénieurs. Elle collabore en particulier avec les autres équipes du Centre de Recherche sur les thèmes de l'épidémiologie de la maladie d'Alzheimer, du SIDA et du cancer. D'une part les nouvelles méthodes développées par l'équipe doivent être validées par des simulations. D'autre part, l'inférence pour des modèles complexes peut demander un très grand nombre de calculs qui peuvent être parallélisés. En 2013 une équipe INRIA baptisée SISTM, dirigée par Rodolphe Thiébaut, a émergé de l'équipe Biostatistique.

Projets

Simulations pour valider de nouvelles méthodes :

- Vérifier les taux de couverture d'intervalles de confiance d'estimateurs de l'aire sous la courbe ROC, et vérifier les risques de première espèce de tests (Paul Blanche)
- Valider un algorithme d'estimation des modèles conjoints à classes latentes pour données multivariées et événements multiples (Cécile Proust-Lima)
- Valider un algorithme d'estimation des modèles conjoints à effets aléatoires partagés pour un marqueur longitudinal et des événements multiples (Loïc Ferrer)
- Evaluer les performances de tests statistiques pour diagnostiquer des écarts aux hypothèses dans les modèles conjoints pour données longitudinales et événements multiples
- Evaluer les performances de modèles mixtes à classes latentes dynamiques (Cécile Proust-Lima)
- Valider l'algorithme d'estimation de modèles conjoints à classes latentes pour données longitudinales et événements compétitifs censurés par intervalle (Anaïs Rouanet)
- Evaluation des performances pronostiques de modèles conjoints (Cécile Proust-Lima, Loïc Ferrer,...)

Modélisation complexe de données longitudinales multivariées et de temps d'événements

Plusieurs applications issues des développements décrits en partie 1 par des membres de l'équipe de biostatistique ou des collaborateurs du centre de recherche Inserm de Bordeaux :

- Analyse des trajectoires de dépendance dans le vieillissement mesurées par les réponses aux questionnaires ADLs et IADLs

- Analyse des trajectoires de vieillissement cognitif, anatomique et physique dans la maladie d'Alzheimer
- Evaluation de facteurs de risque nutritionnels dans le vieillissement cognitif.

Ces applications sont réalisées à partir du programme d'estimation Fortran90 parallélisé HETMIXSURV.

Fouille de données, application en génomique (Benoît Liquef, Boris Hejblum, Robin Genuer)

Les calculs sont faits principalement avec le logiciel R.

- simulation pour comparer la méthode du lasso et des méthodes de « partial least square » sPLS sur des données d'association génétique sur le génome (GWA).
- « pathway analysis » : interaction gène-environnement sur le cancer du sein sur des données de type SNP.
- application de méthode de sélection de variables basée sur les forêts aléatoires (Robin Genuer)

Modélisation de l'interaction VIH-Système immunitaire et effets des antirétroviraux (Mélanie Prague, Ana Jarne)

- Adaptation des traitements VIH (Prague et al. Biometrics 2012).
- Etudes Pharmacocinétiques et Pharmacodynamiques d'agent antirétroviraux pour VIH Prague et al., Advanced Drug Delivery Research, 2013).
- Quantification et prédiction de l'effet de d'immunothérapies (Thiébaud et al., PLOS Computational Biology, 2014).
- Estimation de l'effet de HAART sur le long terme avec des données de cohortes VIH (en cours).

Ces problèmes sont traités grâce au développement de modèles à effets aléatoires basés sur des systèmes d'équations différentielles. Un programme Fortran90 parallélisé, NIMROD (Normal approximation Inference in Models with Random effects based on Ordinary Differential equations), permet de faire l'inférence basée sur le maximum de vraisemblance ou sur une approche Bayésienne approximée.

Publications

Blanche P., Dartigues J-F and Jacqmin-Gadda H. (2012). Estimating and Comparing time-dependent areas under ROC curves for censored event times with competing risks. *Statistics in Medicine*, 32 (30) ;5381-5397.

Blanche P, Proust-Lima C, Loubère L, Dartigues JF, Jacqmin-Gadda H. Quantifying and comparing dynamic predictive accuracy of joint models for longitudinal marker and time-to-event in presence of censoring and competing risk events, en revision

Cécile Proust-Lima, Hélène Amieva and Hélène Jacqmin-Gadda. Analysis of multivariate mixed longitudinal data: A flexible latent process approach. *British Journal of Mathematical and Statistical Psychology* (2012), , 2013, 66 (3);470-487.

Prague, M., Commenges, D, Drylewycz, J and Thiébaud, R (2012) Treatment monitoring of HIV infected patients based on mechanistic models, *Biometrics* 68, 902-911.

Prague M. , Commenges, D., Guedj J., Drylewicz J. and Thiébaud R. (2013) NIMROD : A Program for Inference via Normal Approximation of the Posterior in Models with Random effects based on Ordinary Differential Equations. *Computer Methods and Programs in Biomedicine* 111, 447-458.

Mélanie Prague, Daniel Commenges, Rodolphe Thiebaut (2013). Dynamical models of biomarkers and clinical progression for personalized medicine: the HIV context. *Advanced Drug Delivery Reviews* 65, 954-965.

Thiébaud, R, Dyrlewicz, J, Prague, M, , Christine Lacabartz , Stéphanie Beq , Ana Jarne, Thérèse Crouchs , Rafick-Pierre Sekaly , Michael M. Lederman , Irini Sereti , Daniel Commenges , Yves Lévy (2014). 1Quantifying and Predicting the Effect of exogenous Interleukin-7 on CD4+T cells in HIV-1 Infection. *PLOS Computational Biology*, in press.

Proust-Lima, Amieva, Jacqmin-Gadda. Joint modelling of repeated multivariate cognitive measures and competing risks of dementia and death: a latent process and latent class approach, submitted.

A. Edjolo, C. Proust-Lima, F. Delva, J.-F. Darigues, K. Pérès. Natural history of functional dependency in the elderly population: A longitudinal Item Response Theory model to identify hierarchy and trajectories in IADL and ADL. Twenty-two years of follow-up of the Paquid cohort, submitted

Blanche P1, Proust-Lima C, Loubère L, Berr C, Dartigues JF, Jacqmin-Gadda H. Quantifying and comparing dynamic predictive accuracy of joint models for longitudinal marker and time-to-event in presence of censoring and competing risks. *Biometrics*. 2014 Oct 13. doi: 10.1111/biom.12232.

Thèses soutenues:

Paul Blanche (2013), Mélanie Prague (2013), Mberry Sène (2013), Audrey Mauguen (2014), Julie Boucquemont (2014).

3.8 Institut des Sciences Analytiques et de Physico-chimie pour l'Environnement et les Matériaux

UMR 5254 CNRS, Université de Pau et des Pays de l'Adour

<http://iprem.univ-pau.fr/live/>

Correspondant: Ross Brown (ross.brown@univ-pau.fr)

La simulation numérique est une activité essentielle de l'équipe de Chimie-Physique de l'IPREM (IPREM-ECP). Elle est au carrefour de nos expertises, tant expérimentales dans différentes spectroscopies ou microscopies, que théoriques telles que les méthodes de chimie quantique *ab-initio* périodiques ou moléculaire, ou la dynamique moléculaire classique ou quantique. Cette double approche est appliquée à des systèmes complexes, notamment dans des domaines de fort intérêt sociétal comme l'énergie, la gestion et traitement de problèmes environnementaux ou la mise au point de marqueurs fluorescents pour l'imagerie biomédicale.

Les travaux s'appuient d'une part sur des codes standards, comme DL-POLY, VASP, Siesta, CRYSTAL09 ou Gaussian09, d'autre part sur la mise au point de nos propres codes. Si les moyens de calcul de l'équipe permettent la mise au point des stratégies calculatoires sur des modèles de petite taille, la complexité des systèmes traités dans les différents domaines ne peut s'envisager qu'au travers des codes massivement parallèles. Le mésocentre remplit donc dans nos recherches des rôles évidents-- moyens numériques et de logiciel ou d'environnement de calcul, mais aussi un rôle catalyseur, à travers l'expertise de ses ingénieurs calcul ou celle d'autres membres de la communauté aquitaine du calcul à hautes performances. Cette action plus subtile que le simple décompte des heures de calcul a donné lieu à plusieurs collaborations fructueuses passées ou en cours.

Parmi les simulations récentes on peut citer à titre de simples illustrations les études suivantes:

Mécanismes de polymérisation organocatalysés par des carbènes :

Contrôler la polymérisation de monomères, donc la comprendre et l'anticiper est une étape indispensable à leur développement. Dans une collaboration avec le LCPO et l'ISM de Bordeaux (projet ANR CATAPULT), la chimie quantique (fonctionnelle de la densité, DFT) a permis de rationaliser des résultats expérimentaux inattendus. Par exemple, un polymère très courant, le PMMA (polyméthacrylate de méthyle), peut être obtenu par polymérisation de monomères de méthacrylate de méthyle (MMA), grâce à l'intervention de carbènes N-Hétérocycles (NHC). Toutefois, tous les NHC ne réussissent pas la polymérisation. Certains carbènes, par exemple ceux portant des substituants tertiobutyles, conduisent à la formation de longues chaînes de monomères MMA (PMMA), avec des propriétés intéressantes; mais avec d'autres carbènes, portant des groupements isopropyles, la réaction donne un produit de cyclo-dimérisation tout à fait original et inattendu.

Nos calculs ont permis de rationaliser ce comportement. En particulier, nous avons pu répondre à la question suivante : la nature du carbène agit-elle sur les deux mécanismes réactionnels ou sur un seul ? La simulation des premières étapes des réactions a permis en

effet de comprendre que la nature du substituant porté par le carbène n'influencerait pas la réaction de polymérisation souhaitée, mais seulement celle concurrente de cyclisation. Cette indication permettra à l'avenir aux organiciens de mieux orienter leurs synthèses. Ces travaux font l'objet d'une thèse en cours, d'une publication parue et de plusieurs interventions dans des conférences.

Participants : Damien Bourichon, Karinne Miqueu, Jean-Marc Sotiropoulos

Interfaces électrode/électrolyte pour batteries lithium-ion :

L'amélioration des performances des batteries est une préoccupation majeure actuelle, motivée par les nouveaux besoins de stocker l'énergie électrique issue de sources renouvelables mais fluctuantes, ou par la nécessité de miniaturisation pour des dispositifs portables. Les systèmes tout solide, l'électrolyte comme les électrodes, sont intéressants pour les microbatteries où l'objectif est de former une batterie d'une épaisseur de quelques μm qui peut par exemple être insérée dans une carte à puce. Cependant le développement de telles applications nécessite une meilleure compréhension des interfaces *solide-solide* mis en jeu, plus complexes que celles dans les batteries classiques, entre des électrodes solides et un électrolyte liquide.

En collaboration avec des expérimentateurs du laboratoire, nous nous sommes intéressés aux électrolytes solides de type $\text{Li}_x\text{PO}_y\text{N}_z$ et à leur interface avec une électrode de silicium. Dans ce système les atomes d'azote jouent le rôle de dopant pour améliorer la conductivité des ions lithium. La principale et première difficulté est de construire aux fins des calculs de chimie quantique, un modèle périodique de l'électrolyte, qui est en fait un verre, sans ordre à grande distance. Le modèle périodique doit reproduire les propriétés électroniques et spectroscopiques du vrai verre $\text{Li}_x\text{PO}_y\text{N}_z$. Nous pourrons ensuite nous intéresser à l'interface avec l'électrode.

Le modèle de l'électrolyte vitreux comporte un assemblage de mailles élémentaires d'une phase cristalline ('super-maille'), LiPO_3 ou Li_3PO_4 , dans lesquels sont introduits des atomes d'azote (N), dont les positions sont justifiées d'une part par la comparaison des propriétés du modèle avec des données spectroscopiques de la littérature, d'autre part par des calculs de dynamique moléculaire préalables.

L'obtention des résultats comparables aux données spectroscopiques et notamment le calcul des niveaux de cœur comparables aux spectres XPS, implique de tester de grands assemblages de mailles, jusqu'à 200 atomes au total, afin d'éviter l'interaction des trous d'électrons avec leurs images périodiques. Les calculs quantiques correspondants sont très lourds. Le choix coordonné des environnements de travail et de logiciels, engagé de concert au laboratoire, au pôle de calcul de l'UPPA et au MCIA, a grandement facilité le passage à l'échelle nécessaire d'une même application sur des machines de tailles successives croissantes.

Participants : Emilie Guille, Lucile Martin, Germain Vallverdu, Hervé Martinez, Isabelle Baraille

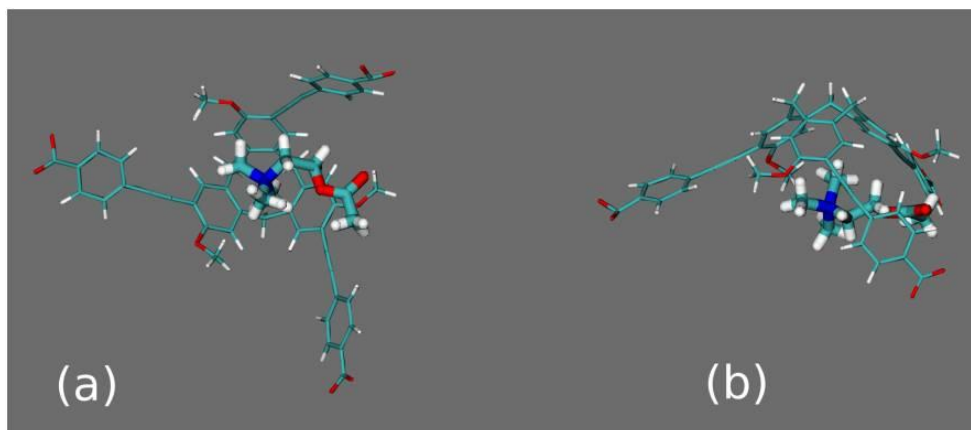
Mécanisme d'action d'une sonde fluorescente des neurotransmetteurs :

L'acétylcholine (ACh) est un neurotransmetteur impliqué dans des maladies telles que celle d'Alzheimer ou l'ischœmia, mais au rôle encore imprécis. L'imagerie *in situ* de l'ACh serait

d'un grand intérêt pour comprendre ces pathologies, mais l'ACh n'est malheureusement pas fluorescent lui-même. L'équipe d'I. Gosse à l'ISM de Bordeaux synthétise donc des sondes fluorescentes de l'ACh novatrices, visant un cahier de charges particulièrement contraignant : haut rendement de fluorescence dans un milieu physiologique (aqueux), émission dans le spectre visible, haute sensibilité et discrimination de l'ACh par rapport à la choline (Ch)... Ces sondes sont des cyclotrivératryènes (CTV), molécules en forme de muselet de bouchon de champagne (voir figure). La plus récente a des performances très intéressantes, que les simulations ont permis de comprendre.

Nous avons mené des simulations de chimie quantique et de dynamique moléculaire classique. Les calculs ont permis de comprendre pourquoi la sonde forme par auto-assemblage des nano-particules dans un milieu aqueux, pourquoi le rendement de fluorescence s'en trouve amélioré, d'identifier le mécanisme de reconnaissance de l'ACh, basé sur des interactions électrostatiques spécifiques sonde-substrat, et enfin, de suggérer comment l'ACh exalte la fluorescence de la sonde une double action, rendant la reconnaissance visible.

Les modèles sont de taille assez modeste, quelques 50000 atomes, donc ne relèvent pas du parallélisme massif disponible sur les supercalculateurs nationaux ou internationaux. Cependant leurs temps de relaxation très longs, plusieurs nano-secondes impliquent des temps de calculs très longs, qui ont pu trouver leur place dans un mésocentre de calcul tel que le MCIA.



Modélisation d'une sonde fluorescente directe de l'acétylcholine en milieu physiologique : structure du complexe ACh-sonde issue d'une simulation de dynamique moléculaire.

Participants : Claire Coiffier, Patrice Bordat, Didier Bégué, Isabelle Baraille , Ross Brown

Thèses :

Lucile Martin : *Etude de l'oxyde de cuivre CuO, matériau de conversion en film mince pour microbatteries au lithium : caractérisation des processus électrochimiques et chimiques en cyclage.* 15 novembre 2013

Damien Bourichon (2012-2015) : *Apport de la théorie dans la compréhension de mécanismes réactionnels de réactions de polymérisation organocatalysées par des carbènes N-Hétérocycliques (NHC).*

Emilie Guille, (2012-2015) : *Approche théorique de la réactivité de surface en présence d'un champ électrique : application aux interfaces électrode/électrolyte*.

Post-doc :

Claire Coiffier, bourse 'Advanced materials in Aquitaine', projet Comet.

Publications :

First principles calculations of solid-solid interfaces: an application to conversion materials for lithium-ion batteries, L. Martin, G. Vallverdu, H. Martinez, F. Le Cras, I. Baraille, *Journal of Materials Chemistry*, **22**, 22063-22071 (2012).

Cyclodimerization versus Polymerization of Methyl Methacrylate Induced by N-Heterocyclic Carbenes: A Combined Experimental and Theoretical Study, Nzahou Ottou, W., Bourichon, D., Vignolle, J., Wirotius, A.-L., Robert, F., Landais, Y., Sotiropoulos, J.-M., Miqueu, K., Taton, D. *Chem. Eur. J.*, **20**, 2014, 3889-3997.

Direct, selective detection of acetylcholine in PBS medium by self-assembled fluorescent nano-particles, Peyrard, L., Coiffier, C., Bordat, P., Bégué, D., Chiericici, S., Pinet, S., Gosse, I., Baraille, I., Brown, R., soumis à *Chem. Eur. J.* (2014).

Conférences/affiches:

Polymérisation organo-catalysée par les carbènes : une approche théorique, D. Bourichon, K. Miqueu, J.-M. Sotiropoulos, M. Fèvre, W. Nzahou Ottou, J. Vignolle, D. Taton, *Journée Grand Sud-Ouest*, Bordeaux, France, 2012. Affiche.

Mécanismes de polymérisation organocatalysée par les carbènes. Apport de la chimie théorique. D. Bourichon, K. Miqueu, J.-M. Sotiropoulos, *Journées de Rencontres du Groupe Français des Polymères Sud-Ouest (GFPSO)*, Sabres, France, 2013. Oral.

Methacrylates Organocatalyzed Polymerization by N-Heterocyclic carbenes : a joint experimental / theoretical approach.

D. Bourichon, K. Miqueu, J.-M. Sotiropoulos, W. Nzahou Ottou, M. Fèvre, J. Vignolle, D. Taton, *European Symposium on Organic Chemistry (ESOC)*, Marseille, France, 2013. Affiche.

Concurrence entre des réactions de polymérisation et de (cyclo)dimérisation organo-catalysées par les carbènes. Compréhension de la réactivité par une approche théorique, D. Bourichon, K. Miqueu, J.-M. Sotiropoulos, W. Nzahou Ottou, J. Vignolle, D. Taton, *Journées des Jeunes Physico-Chimistes*, Fréjus, France, 2013. Oral.

Dimérisation du MMA par un carbène NHC. Compréhension du mécanisme réactionnel par une approche théorique, D. Bourichon, K. Miqueu, J.-M. Sotiropoulos, W. Nzahou Ottou, J. Vignolle, D. Taton, *Journée Grand Sud-Ouest*, Pau, France, 2013. Affiche.

Theoretical interface investigations in conversion positive electrode for Li-ion batteries, G. Vallverdu, L. Martin, H. Martinez, I. Baraille, F. Lecras, B. Pecquenard *Material Research Society meeting*, San Francisco (USA), avril 2012. Oral.

Theoretical study of solid-solid interfaces in conversion materials: structure, electronic properties and thermodynamic stability, L. Martin, G. Vallverdu, H. Martinez, I. Baraille, *International Conference on Advanced Materials Modelling (ICAMM)*, Nantes, juin 2012. Oral.

Etude des interfaces formées au sein du matériau de conversion CuO, électrode positive pour microbatterie au Li, L. Martin, G. Vallverdu, H. Martinez, I. Baraille, *13^{ème} journée de la matière condensée*, Montpellier, France 2012. Oral.

CC. Coiffier, L. Peyrard, S. Chierici, S. Pinet, D. Bégué, P. Bordat, R. Brown, I. Baraille, I. Gosse, Switching fluorescence of cyclotrimeratrylenes : application to detection of acetylcholine, *Journées scientifiques, GDR Magnétisme et Commutation Moléculaire*, Dourdan, décembre 2012.

Approche couplée expérience-théorie des interfaces solide/solide dans le matériaux de conversion CuO : propriétés thermodynamiques et nanostructuration, L. Martin, G. Vallverdu, H. Martinez, I. Baraille, *GDR Co-DFT*, Guidel Plages, France, 2013. Oral

First principles based study of the surfaces and interfaces in Li batteries : structure, electronic properties and thermodynamic stability, I. Baraille, G. Vallverdu, H. Martinez, *Atelier « modélisation des oxydes » GDR ModMat et Co-DFT*, Paris, France; 2013. Oral.

First principles based study of the surfaces and interfaces in Li batteries : structure, electronic properties and thermodynamic stability, I. Baraille, *Theoretical chemistry for periodic systems (systematically improvable electronic structure methods)*, Ax-Les-Thermes, février 2013. Invitée

Interfaces au sein des batteries Li-ion : approche couplée expérience-théorie, I. Baraille, *Réseau pour le Stockage Electrochimique de l'Energie (RS2E), Bi-annual meeting*, Orléans, Février 2013. Invitée

Émilie Guille, Germain Vallverdu, Isabelle Baraille, "Theoretical study of $\text{Li}_x\text{PO}_y\text{N}_z$ as a solid electrolyte", *Journées GSO de la SFC*, Pau, 29/11/2013.

E. Guille, Modelling of the electronic properties of $\text{Li}_x\text{PO}_y\text{N}_z$: molecular dynamics and periodic DFT approaches, *ICAMM2014*, Nantes, 2-9 juillet 2014.

3.9 Institut des Sciences Moléculaires

ISM : UMR 5255 CNRS / Université de Bordeaux / Institut Polytechnique de Bordeaux

<http://www.ism.u-bordeaux1.fr/>

Correspondant : J-C. Soetens (jc.soetens@ism.u-bordeaux1.fr)

L'institut des Sciences Moléculaires rassemble 130 chercheurs, enseignants-chercheurs, techniciens et ingénieurs répartis dans des groupes thématiques et/ou des compétences spécifiques :

- Astrochimie
- Chimie Théorique et Modélisation
- Nanosciences Moléculaires et Catalyse
- Nanostructures Organiques
- Nanosystèmes Analytiques
- Matériaux
- Spectroscopie Moléculaire
- Synthèse et molécules bioactives

Les thématiques de recherche sont donc très variées mais ont en commun le désir et le besoin de comprendre et maîtriser les processus et propriétés des systèmes à l'échelle moléculaire. En conséquence, l'approche numérique est un complément indispensable. Les exemples suivants illustrent quelques thématiques et projets pluridisciplinaires s'appuyant très fortement sur les approches de chimie numérique :

Dans le domaine des matériaux

- Cellules solaires organiques et hybrides organique-inorganiques flexibles (projet Cellorgaflex du GIS Matériaux en Aquitaine)
- Etude des propriétés de réaction gaz surface de matériaux de rentrée atmosphérique
- Matériaux hybrides fonctionnels pour la conversion de l'énergie solaire en électricité (ANR FMOCSOLE), projet Européen ENERMAT (Matériaux pour l'Energie dans l'arc atlantique)
- Matériaux pour l'électronique organique (projet Européen MINOTOR, GDR CNRS « Electronique Organique »)
- Développement de nouveaux chromophores pour la conversion photovoltaïque

Dans le domaine de la chimie verte

- Réactivité et interaction moléculaire en milieu CO₂ supercritique (ANR CP2D "Polygreen")
- Silylboranes, New Reagents for Tin-free Radical Mediated Processes (ANR SiLABOR)
- Etude des processus de solvatation dans les liquides ioniques
- Etude des processus d'électrodéposition dans les liquides ioniques

Dans l'étude de la réactivité chimique

- Nouvelles approches de la compréhension de la réactivité des composés aromatiques dans l'atmosphère (projet bilatéral CNRS-INSU / DFG)
- Etude de la réactivité dans l'atmosphère des suies émises par les réacteurs d'avion

Moyens de calcul

Le groupe de « Chimie Théorique et Modélisation » est naturellement au cœur des développements et de l'application des méthodes numériques en Chimie au sein de l'Institut. Ainsi, ce groupe soutient et anime un centre de ressources informatiques à l'échelle du laboratoire, dénommé « Pôle Modélisation ».

Cette plate-forme de calcul permet de rassembler à destination de l'ensemble des chercheurs et étudiants des ressources matérielles et logicielles adaptées ainsi qu'une expertise dans leur utilisation. Réunir au niveau d'un laboratoire des compétences et des moyens spécifiques à la discipline correctement dimensionnés constitue un complément indispensable au bon usage des moyens plus conséquents proposés par le Mésocentre MCIA et les centres nationaux (IDRIS, Cines) et Européens. Cette plate-forme a renouvelé son calculateur en 2012 sur un cofinancement du Conseil Régional d'Aquitaine (dossier 2011604002PFM) en tant que volet laboratoire du projet MCIA.

Principales contributions scientifiques

Les principales contributions scientifiques ayant utilisé de manière intensive les moyens du Pôle Modélisation et du MCIA :

Etude des phénomènes de solvation et de réactivité au sein de liquides ioniques

Chercheurs : M. BESNARD, Y. DANTEN, J. MASCETTI

Les liquides ioniques (LI) constituent une nouvelle classe de solvants alternatifs aux solvants organiques utilisés dans de nombreux procédés industriels et offrent beaucoup de perspectives pour réaliser de nouvelles réactions chimiques. Ces propriétés spécifiques résultent essentiellement de l'organisation structurale au sein des liquides ioniques et en particulier de l'existence de *microphases de ségrégation* (à l'échelle nanométrique) qui change radicalement la façon dont on peut concevoir les processus de solvation dans ces milieux.

Les liquides ioniques de type *di-alkyl-imidazolium*, montrent une solubilité très élevée vis-à-vis du CO₂ qui à ce titre apparaissent comme des solvants possédant un réel potentiel dans le domaine des applications relatives à la capture ou la séquestration du CO₂. En particulier, les mesures de solubilité du CO₂ dans le BMI/Ac révèlent de façon assez inattendue une solubilité plus élevée que dans son homologue fluoré aux faibles concentrations ([CO₂] < 0.4 m.f., Figure 1). Les études que nous avons mené sur ces solutions CO₂/ BMI/Ac, indiquent que cette anomalie résulte d'un premier régime de solvation du CO₂ dominé par l'existence d'une réaction chimique du CO₂ (faibles concentrations). L'analyse détaillée des différentes signatures spectrales (Raman et RMN) combinée à une modélisation par calculs de DFT montre que ce premier régime implique deux mécanismes concertés conduisant à la carboxylation du cycle imidazolium, avec l'apparition de l'espèce *1-butyl-3-méthyl imidazolium-2 carboxylate* et de la formation d'acide acétique selon deux mécanismes concertés. Le premier mécanisme est associé à un processus d'échange du proton acide du cycle imidazolium avec l'anion acétate. Le processus de carboxylation est alors initié en présence du CO₂ à partir de la formation d'un complexe transitoire CO₂-*1-butyl-3-méthyl imidazolium-2 ylidène-carbene*. Cette association transitoire est précurseur du second mécanisme qui consiste à la capture définitive du CO₂ par le cycle de carbène vers la formation du carboxylate. À l'aide des méthodes de DFT, nous avons évalué différents chemins réactionnels conduisant à la formation du carboxylate à partir de complexes transitoires formés dans le [BMI/Ac] en présence de du CO₂. Dans cette approche, nous avons explicitement considéré les mécanismes d'interactions impliquant au moins 3-corps significatifs à la fois sur les hauteurs de barrières et la stabilisation des produits formés.

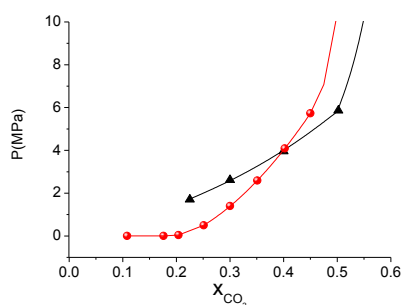


Figure 1: Courbes de solubilité du CO₂ à 313 K dans BMI/Ac (●) et dans BMI/TFA (▲).

Publications choisies :

M. I. CABAÇO, M. BESNARD, Y. DANTEN, J.P.A. COUTINHO, J. Phys. Chem. A 116 (2012), 1605-1620.

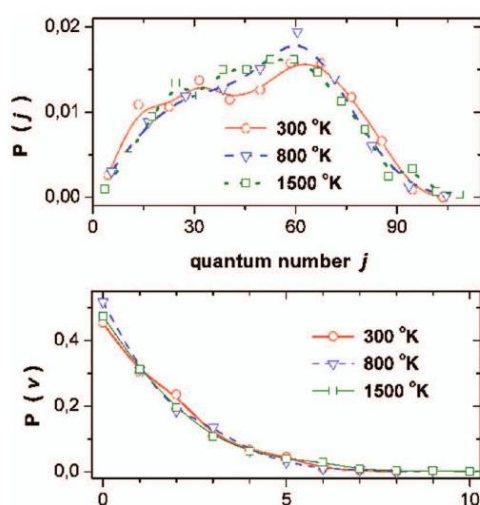
M. BESNARD, M. I. CABAÇO, F.V. CHÁVEZ, N. PINAUD, P. J. SEBASTIAO, J.P.A. COUTINHO, J. MASCETTI, Y. DANTEN, J. Phys. Chem. A 116 (2012), 4890-4901.

M. BESNARD, M. I. CABAÇO, F.V. CHÁVEZ, N. PINAUD, P. J. SEBASTIAO, J.P.A. COUTINHO, Y. DANTEN Chem. Commun. 48 (2012) 1245-1247

Dynamique des réactions élémentaires gaz-surface

Chercheurs : C. Crespos, P. Larregaray, R. Petuya (Doct.), E. L. Quintas Sanchez (Doct.)

Des codes de dynamique moléculaires quasi-classiques sont développés pour comprendre divers types de processus réactionnels hétérogènes impliquant des atomes/molécules (H,N,H₂,N₂) et des surfaces métalliques. Pour ce faire, après avoir déterminé les interactions entre les espèces chimiques par des calculs de chimie quantique (résolution de l'équation de Schrödinger électronique dans le formalisme de la théorie de la fonctionnelle densité), des représentations mathématiques globales de ces dernières sont élaborées. Ensuite, la dynamique des collisions est simulée et les observables prédites sont comparées à des expériences de jets moléculaires. La figure illustre la distribution des états rovibrationnels de molécules d'azote formées par l'abstraction directe (abstraction Eley-Rideal) d'un atome d'azote préadsorbé sur la surface du tungstène (100).



Distributions des états rovibrationnels de molécules d'azote formées par abstraction Eley-Rideal sur le tungstène (100) pour une énergie de collision de 1eV.

Publications :

Influence of surface symmetry on the onset of Nitrogen Eley-Rideal recombination on tungsten. E.Quintas-Sanchez, P. Larregaray, C. Crespos, J. Phys. Chem. C., accepted (2014) .

Comparative theoretical study of H₂ Eley-Rideal recombination dynamics on W(100) and W(110). R. Pétuya, C. Crespos, E. Quintas-Sanchez, and P. Larrégaray, J. Phys. Chem C., accepted (2014).

Estudio teórico del mecanismo Eley-Rideal en la recombinación de nitrógeno sobre tungsten(110). E.Quintas-Sanchez, P. Larregaray, C. Crespos, A. Perez-Mellor, Rev. Cub. Fis. Rev. Cub. Fis. 30, 66 (2013)

Potential Energy Surfaces for the Dynamics of Elementary Gas-Surface Processes. Pablo Gamallo, Ludovic Martin-Gondre, Ramon Sayos, Cédric Crespos, and Pascal Larregaray in "Dynamics of Gas-Surface Interactions: Atomic-level Understanding of Scattering Processes at Surfaces". Springer series in surfaces sciences, ed. H.F. Busnengo and R. Diez-Muino, Springer-Verlag, 2013.

Quasi-classical dynamics study of atomic oxygen over graphite (0001) with new interpolated and analytical potential energy surfaces. V. Moron, L. Martin-Gondre, C. Crespos, P. Larregaray, P. Gamallo and R. Sayos. Comp. Theo. Chem.

Projets :

- | | |
|-----------|---|
| 2011-2014 | ECOS-Sud (Argentine) « Modélisation à échelles multiples de systèmes réactionnels complexes ». C.Creos , H.F Busnengo (CONICET/UNR), W. Dong (ENS, Lyon) |
| 2008-2012 | Thèse MAE/MIB : (E.L. Quintas Sanchez) / Etude théorique des mécanismes hétérogènes de recombinaison diatomique. |
| 2012-2013 | Bourse "global training" fomento San Sebastian: stage 6 mois de MsC. Sarah Rodriguez Castillo "Etudes de collisions inélastiques molécules-surface" |
| 2013-2016 | Bourse thèse internationale , Initiative d'excellence (Idex) Bordeaux. (Oihana Galparsoro Larraza) « Excitations électroniques et phononiques au cours de réactions d'abstraction diatomique de surfaces métalliques », co-tutelle avec l'université du Pays Basque (M. Alducin). |

Simulations de phases condensées à et hors équilibre

Chercheurs : P-A. Bopp, J-C. Soetens

La modélisation, au sens large du terme, est un outil de conceptualisation qui permet de dégager une version abstraite, réduite mais consistante, de la réalité chimique. Elle est, de façon générale, constituée de trois étapes successives: La détermination du modèle (modélisation au sens strict du terme), la simulation d'un échantillon de l'ensemble thermodynamique et l'application des méthodes de la mécanique statistique (de Boltzmann) à l'échantillon.

C'est dans cet esprit que nous avons étudié la dynamique des molécules invitées dans les zéolithes (1, en collaboration avec Universität Leipzig), décortiqué très finement les influences du solvant sur vibrations de l'ion OH⁻ dans l'eau (2, collaboration Uppsala) et exploré les conséquences de certaines approximations utilisées en modélisation sur l'association des ions dans des solutions électrolytiques (3). La thèse de doctorat de G. Marchand (co-tutelle Universität Duisburg-Essen) a porté sur de gros systèmes membranaires pour piles à combustible (4). Toutes ces simulations cherchaient à représenter des systèmes

à l'équilibre thermodynamique (par exemple à température et pression ou volume constants). La série de travaux entrepris en collaboration avec les collègues de la chaire de génie thermodynamique de la TU de Darmstadt (5) visaient un phénomène observé à l'échelle macroscopique dans les mélanges biphasés hors-équilibre, par exemple en présence de gradients de température; les convections dites 'de Marangoni'. Nous avons pu démontrer l'existence de telles convections à une échelle microscopique, quelques dizaines de diamètres moléculaires, et étudier leur comportement. Les propriétés de dynamiques orientationnelles originales de liquides organiques observés par RMN ont par ailleurs été élucidées à l'aide de simulations (6).

Publications choisies :

- (1) R. Chanajaree, Ph. A. Bopp, J. Kärger, S. Fritzsche, *Water Dynamics in Chabazite, Microporous & Mesoporous Materials* 146, 106-118 (2011) (Corma Festschrift).
- (2) K. Hermansson, Ph. A. Bopp, D. Spångberg, L. Pejov, I. Bakó, P. D. Mitev, The vibrating hydroxide ion in water. *Chem.Phys.Let.* 514(1-3), 1-15 (2011). P. Mitev, Ph. A. Bopp, J. Petreska, K. Coutinho, H. Ågren, L. Pejov, K. Hermansson, *Different structures give similar vibrational spectra: The case of OH⁻ in aqueous solution*, *J.Chem.Phys.*, in press.
- (3) Ph. A. Bopp, K. Ibuki, *Ion clusters and ion-water potentials in MD-simulations*. *Condensed Matter Physics*, 15,2 23001 p 1-10 (2012).
- (4) StructureG. Marchand, Ph. A. Bopp, E. Spohr, *Molecular Simulations of Hydrated Proton Exchange Membranes*. *Z. Naturforsch*, in press.
- (5) H. A. Maier, M. J. Hampe, Ph. A. Bopp, *MD Simulations of the Soret Effect in Simple Partially Miscible Binary Biphasic Mixtures*. *Chem.Phys.Let.* 518, 55-60 (2011).
H. A. Maier, Ph. A. Bopp, M. J. Hampe, *Non-Equilibrium Molecular Dynamics Simulation of the Thermocapillary Effect*. *Can.J.Chem.Eng.* 90, 833 (2012).
- (6) N. Ahmad, R. Adnan, J.-C. Soetens, C. Millot, *Molecular Dynamics simulations of liquid isoquinoline as a function of temperature*. *Chemical Physics*, 407, 29 (2012)
J.-C. Soetens, N. Ahmad, R. Adnan, C. Millot, *Molecular Dynamics simulations of quinoline in the liquid phase*. *J. Phys. Chem. B* 116, 5719 (2012)

Solubilité et synthèse de polymères en milieu CO₂ supercritique

Chercheurs : T. Tassaing, Y. Landais, S. Foltran (Doct.), C.Smith (Doct.)

ANR CP2D "POLYGREEN" 2009-2013

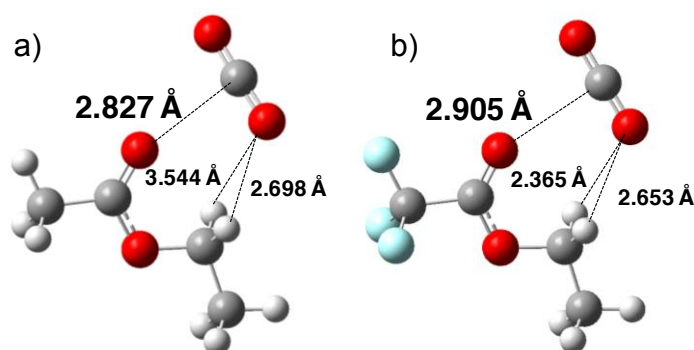
Le CO₂ supercritique comme solvant et/ou réactif pour la synthèse de polyuréthane

Le dioxyde de carbone (CO₂) utilisé comme source de carbone pour la synthèse de molécules organiques et de polymères est un sujet de recherche très actif. Ainsi, dans le cadre d'un projet ANR Polygreen (2009-2013), nous avons mené à bien des travaux afin de valoriser le CO₂ et des huiles végétales en tant que substitut de base aux dérivés pétroliers pour l'élaboration de nouveaux monomères et polymères bio et CO₂-sourcés. Dans une première étape, la synthèse de monomères cyclo-carbonatés au départ de CO₂ et d'époxydes modèles (et/ou d'huiles végétales époxydées) a été effectuée en présence d'un catalyseur. Ces monomères sont ensuite polycondensés en présence de diamines conduisant ainsi à la synthèse de polyuréthanes par une voie non-isocyanate aux propriétés physico-chimiques modulables et ajustables en fonction du choix des co-monomères. Ainsi,

en combinant des suivi cinétiques de la réaction de cycloaddition d'époxydes avec le CO₂ par spectroscopie FT-IR et/ou Raman in situ et des calculs de chimie quantique par méthode DFT, nous avons pu identifier les mécanismes de catalyse impliqués lors de la réaction époxyde-CO₂ en présence de différents systèmes catalytiques et déterminer les paramètres structuraux du catalyseur qui gouvernent son efficacité. Nous avons ainsi proposé un nouveau système catalytique performant qui présente une efficacité supérieure aux systèmes connus de la littérature.

Solubilité de co-polymères à bloc dans le CO₂ supercritique.

L'utilisation des fluides supercritiques dans un très grand nombre d'applications industrielles (synthèse, fractionnement ou mise en forme de polymères) a suscité de nombreuses recherches au cours de ces dernières années. Bien que le dioxyde de carbone supercritique (CO₂Sc) puisse être utilisé comme substituant des solvants organiques classiques, la faible solubilité en CO₂Sc de beaucoup de composés polaires et de la plupart des polymères limite le développement de cette technologie. Ainsi, en collaboration avec l'Université de Toulouse 1, nous avons proposé une nouvelle famille d'agents tensio-actifs pour le CO₂Sc pour lesquels nous avons pu établir des relations structure-solubilité dans le CO₂Sc en combinant mesures par spectroscopie infrarouge, mesures de tension de surface et modélisations moléculaires par DFT.



Structures optimisées (CAM-B3LYP/aug-cc-pVDZ) du complexe a) ethyl acétate – CO₂ et b) ethyl trifluoroacétate – CO₂

Publications

E. Girard, T. Tassaing, S. v. Camy, J.-S. p. Condoret, J.-D. Marty and M. Destarac, *Journal of the American Chemical Society*, 2012, **134**, 11920-11923.

E. Girard, T. Tassaing, C. Ladavière, J.-D. Marty and M. Destarac, *Macromolecules*, 2012, **45**, 9674-9681.

S. Foltran, R. Mereau and T. Tassaing, *Catalysis Science & Technology*, 2014. DOI: 10.1039/c3cy00955f

Thèses soutenues :

S. Foltran (Novembre 2012)

Collisions froides et ultra froides en phase gazeuse

Chercheurs : Philippe Halvick, Thierry Stoecklin, Otoniel Denis Alpizar (Doct.)

Les observations astronomiques dans les domaines millimétrique et submillimétrique ont pour but de découvrir les conditions physicochimiques régnant dans les nuages de gaz moléculaire qui sont à l'origine de la formation des systèmes stellaires. Mais il est généralement nécessaire de connaître les taux d'excitation (ou désexcitation) rotationnelle pour pouvoir remonter aux abondances des espèces observées. Puisque H_2 et He sont les espèces les plus abondantes, seules les collisions avec l'une de ces deux espèces sont étudiées. De plus, les simulations de dynamique collisionnelle sont toujours réalisées dans le cadre de l'approximation des molécules rigides, c'est à dire que l'on considère les molécules comme des structures indéformables. Nous avons étudié la collision H_2 -CS dans ce cadre. Mais il apparaît nécessaire de dépasser cette approximation, particulièrement dans le cadre des observations astronomiques dans les nuages de gaz circumstellaire où le flux radiatif permet des excitations vibrationnelles, et aussi pour les molécules qui possèdent des mouvements vibrationnels de basse fréquence. Dans ce but, nous avons étudié les collisions He-HCN et He- C_3 . Nous avons montré que l'approximation des molécules rigides est remarquablement fiable tant que l'énergie de collision est plus faible que l'énergie du premier niveau vibrationnel excité. Au delà de cette énergie, si on veut obtenir des résultats réalistes, il est nécessaire de prendre en compte le couplage rovibrationnel, ce que nous avons fait pour HCN et C_3 en incluant le mouvement de pliage vibrationnel dans le calcul des collisions. Notons que pour réaliser de telles simulations, il est d'abord nécessaire de construire des modèles précis des interactions entre les espèces entrant en collision. Cela est réalisé par des calculs *ab initio* de haut niveau, avec de très larges bases d'orbitales atomiques et un niveau élevé de calcul de la corrélation électronique de manière à calculer avec exactitude les interactions faibles à longue distances entre les espèces. Ensuite, La dynamique collisionnelle est simulé par des méthodes quantiques. L'ensemble de ces travaux de recherche n'auraient pas pu être réalisés sans les moyens de calculs du Pôle Modélisation et du MCIA.

Programme en cours:

ANR HYDRID, Excitation et chimie des hydrures interstellaires, 01/2013 – 12/2016

Thèse soutenue:

Calcul de dynamique inélastique pour des collisions moléculaires d'intérêt astrochimique, Otoniel denis Alpizar, 1 avril 2014.

Publications:

Potential energy surface and rovibrational energy levels of the H_2 -CS van der Waals complex. O. Denis-Alpizar, T. Stoecklin, Ph. Halvick, M.-L. Dubernet, and S. Marinakis. J. Chem. Phys. **137**, 234301 (2012)

The interaction of He with vibrating HCN: Potential energy surface, bound states, and rotationally inelastic cross sections. O. Denis-Alpizar, T. Stoecklin, Ph. Halvick, M.-L. Dubernet. J. Chem. Phys. **139**, 034304 (2013)

Ro-vibrational relaxation of HCN in collisions with He: Rigid bender treatment of the bending-rotation interaction. T. Stoecklin, O. Denis-Alpizar, Ph. Halvick, M.-L. Dubernet. J. Chem. Phys. 139, 124317 (2013)

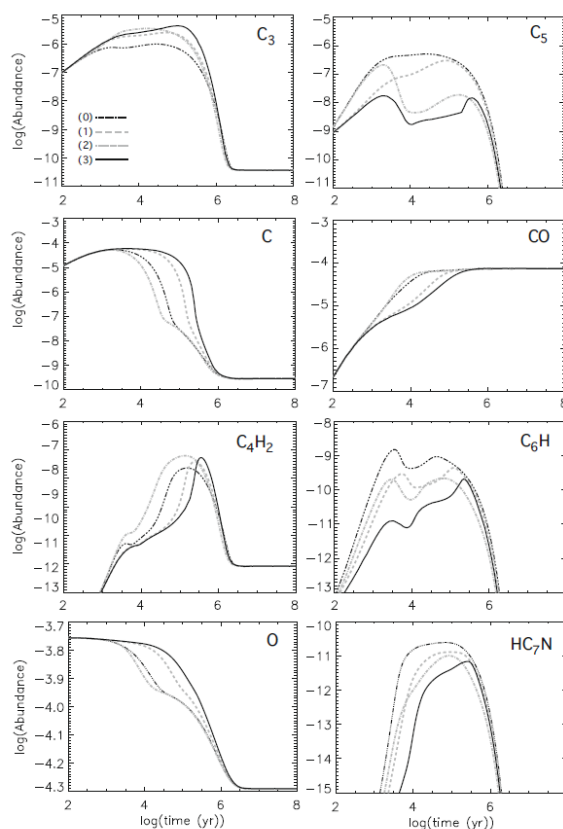
Rotational relaxation of CS by collision with ortho- and para-H₂ molecules. O. Denis-Alpizar, T. Stoecklin, Ph. Halvick, M.-L. Dubernet. J. Chem. Phys. 139, 204304 (2013)

Rovibrational energy transfer in the He-C₃ collision: Potential energy surface and bound states. O. Denis-Alpizar, T. Stoecklin, Ph. Halvick. J. Chem. Phys. 140, 084316 (2014)

Amélioration de la description chimique de milieux interstellaires

Chercheurs : Jean-Christophe Loison, Kevin M. Hickson, Astrid Bergeat, Philippe Halvick, Raphaël Mereau

La détection dans les milieux interstellaires de nombreuses molécules, dont certaines complexes, telles que les cyanopolynes, a permis d'établir désormais la certitude que ce milieu interstellaire, organisé sous forme de nuages denses et diffus, est le siège d'une chimie extrêmement riche et variée. La compréhension de la chimie en phase gazeuse pour le milieu interstellaire repose sur des modèles globaux mettant en jeu un ensemble d'équations couplées simulant des mécanismes physiques et chimiques. Contrairement à la chimie atmosphérique terrestre où les constantes de vitesse et les rapports de branchement des réactions mis en jeu sont en général plus ou moins bien connus pour les voies majoritaires (mais pas toujours pour les voies minoritaires comme pour OH + alcènes), l'astrochimie repose sur des réactions qui n'ont pour la plupart pas été étudiées. Les chercheurs de l'ISM développent un partenariat actif avec les astrophysiciens du Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux (Valentine Wakelam et Michel Dobrijevic) pour l'amélioration de la description chimique du milieu interstellaire et de l'atmosphère de Titan.



Abondance par rapport à H₂ de différentes espèces suivant les modèles. Traits-tirets noir : os.2003, tirés gris : quand C + C₃ est modifiée, traits-tirés gris : quand C + C₅ est modifiée et ligne noir quand C + C₃ et C + C₅ sont modifiées.

Cette amélioration passe, entre autre, par le calcul de chemins réactionnels à l'aide des programmes de chimie quantique MOLPRO et Gaussian. Sur la figure suivante est représentée l'influence des calculs des constantes de vitesse des réactions $C + C_3$ et $C + C_5$ sur différentes espèces :

Publications choisies :

J.-C. Loison*, P. Halvick, A. Bergeat, K. M. Hickson, V. Wakelam, *Review of OCS gas-phase reactions in dark cloud chemical models*, MNRAS, 421 (2012) 1476-1484

E. Hébrard*, M. Dobrijevic, J. C. Loison, A. Bergeat, K. M. Hickson, *Neutral production of hydrogen isocyanide (HNC) and hydrogen cyanide (HCN) in Titan's upper atmosphere* A&A 541 (2012) A21.

V. Wakelam*, E. Herbst, J.-C. Loison, Smith, I. W. M., Chandrasekaran, V., Pavone, Adams, N. G., Bacchus-Montabonel, M. C., Bergeat, A., Béroff, K., Bierbaum, V. M., Chabot, M., Dalgarno, A., Van Dishoeck, E. F., Faure, A., Geppert, W. D., Gerlich, D., Galli, D., Hébrard, E., Hersant, F., Hickson, K. M., Honvault, P., Klippenstein, S. J., Le Picard, S., Nyman, G., Pernot, P., Schlemmer, S., Selsis, F., Sims, I. R., Talbi, D., Tennyson, J., Troe, J., Wester, R., Wiesenfeld, L., *A kinetic database for astrochemistry (KIDA)*, Astrophysical Journal, Supplement Series 199 (2012) art. no. 21

J. Daranlot, K.M. Hickson, J.-C. Loison, R. Méreau, F. Caralp, W. Forst and A. Bergeat, *Gas-Phase Kinetics of the Hydroxyl Radical Reaction with Allene: Absolute Rate Measurements at Low Temperature, Product Determinations and Calculations*, J. Phys. Chem. A. 116 (2012) 10871-81.

J.-C. Loison*, M.-T. Rayez, J.-C. Rayez, A. Gratien, P. Morajkar, C. Fittschen and E. Villenave *Gas-Phase Kinetics of Hydroxyl Radical Reaction with Hexamethylbenzene*, J. phys. Chem. A, 116 (2012) 12189-12197.

Developpement et application des méthodes DFT à croissance linéaire

Chercheurs : Lionel Truflandier

On peut définir trois principaux axes de recherche dans ce domaine :

- Développement et application d'un code DFT à croissance linéaire
- Prédiction *ab initio* des observables RMN et simulation des effets de relaxation
- Etude des phénomènes d'interface et des processus de transfert électroniques dans les systèmes hydrides organique/inorganique

Leur réussite ne peut être envisagée qu'au travers d'un accès à des ressources de calculs importantes, ressources qui sont offertes par le mésocentre de calcul MCIA.

Dans le premier cas, il a été montré que le code Conquest permet de réaliser des calculs de structure électronique au niveau DFT (SCF+force) pour un système contenant 250 000 atomes en moins de 3h (1920 CPUs/K-computer/Japon¹), le temps de calcul étant strictement divisé par deux sur 3840 CPUs. Très récemment, les nouvelles fonctionnalités de Conquest ont été étendues à la dynamique moléculaire.² Dans le cadre de la thèse de Mamy Rivo Dianzinga (Sept. 2013/2016), nous projetons le développement d'un module

¹ http://www.nims.go.jp/eng/publicity/nimsnow/2013/vol11_09.html

² <http://xxx.tau.ac.il/abs/1402.6828>

permettant le calcul d'observable spectroscopique en nous basant sur la théorie des perturbations en matrice densité. L'accès aux ressources du mésocentre sera le point clé lors des phases de test de performance. Collaboration : D. Bowler (UCL/London), T. Miyazaki (NIMS/Japan).

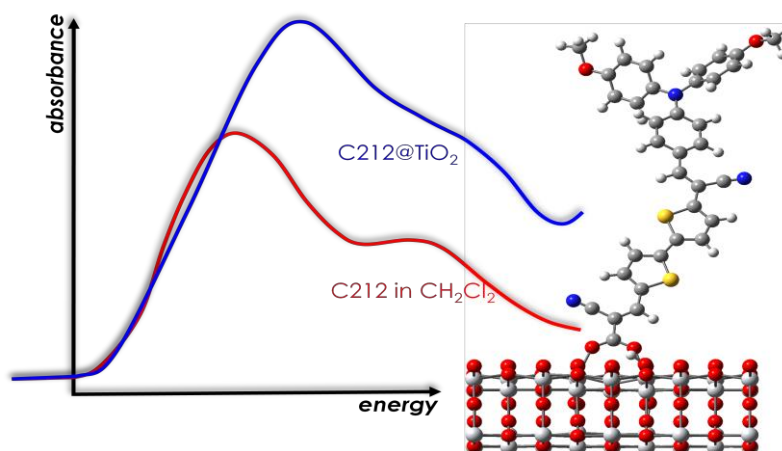
Le deuxième axe de recherche est inscrit dans une poursuite des travaux initiés précédemment avec différents collaborateurs, les applications visent: la résolution structurale de céramiques à base de carbure de bore (J.-M. Leyssale, G. Chollons, LCTS/Bordeaux & C. Gervais, UPMC/ParisVI), l'étude structurale et dynamique des actinides en solution aqueuse (J. Autschbach, A. Marchenko (PhD. student), SUNY/Buffalo).

Le dernier axe fait l'objet d'un stage de Master 2 (L. Prussel, Février/Juin 2014), en collaboration avec F. Castet et R. Méreau (ISM/Bordeaux).

Electronique Organique : les cellules solaires. Effet d'interface colorant – semi-conducteur sur le spectre d'absorption.

Chercheurs : L. Ducasse, F. Castet, R. Méreau, J. Idé (Doct.), T. Toupance, C. Olivier

L'augmentation de la demande en énergie et les problèmes environnementaux liés au réchauffement climatique et aux réserves limitées d'énergie fossile nécessitent, d'une part, le développement d'énergies renouvelables et, d'autre part, le design de nouveaux matériaux. Ainsi, l'électronique moléculaire constitue une alternative économique pour remplacer les technologies traditionnelles pour fournir des dispositifs comme les cellules solaires, les sources de puissance et les affichages optoélectroniques



Dans ce contexte, nous nous sommes intéressés, en collaboration avec le groupe de Matériaux de l'Institut qui synthétise les nouvelles molécules, aux cellules solaires hybrides organique-inorganique, dont l'efficacité atteint presque celle du Silicium amorphe. Un paramètre-clé pour la bonne marche d'un tel dispositif est le recouvrement maximal entre le spectre solaire et le spectre d'absorption du colorant. Généralement, la partie du spectre vers le rouge et l'infrarouge n'est pas couverte par la réponse du colorant. Il est donc primordial d'analyser les propriétés électroniques des colorants. Les données expérimentales montrent que le spectre UV-vis est décalé vers le bleu lorsque le colorant est adsorbé sur les nano-particules de semi-conducteur (TiO₂). Pour comprendre ce résultat, nous avons conduit une étude théorique qui s'est attachée, dans un premier temps, à déterminer la géométrie d'interaction par une méthode de liaison forte (interactions réduites aux premiers voisins) suivie d'un calcul DFT *ab initio* du spectre d'absorption. La théorie permet d'expliquer quantitativement le shift vers le bleu observé par, d'une part, la déprotonation du colorant aux abords de la surface, et, d'autre part, par la modification de la densité des orbitales moléculaires mises en jeu dans les excitations par les interactions entre le colorant et la surface.

Collaboration Théorie – Matériaux de l'ISM (ANR FMOSCOLE et Contrat Européen MINOTOR).

Publication choisie :

L. Ducasse, F. Castet, R. Méreau, S. Nénon, J. Idé, T. Toupance, C. Olivier, *Structure and Absorption Properties of the C212 dye Chemisorbed onto the TiO₂ (101) Anatase Surface*, Chem. Phys. Lett. In press (nov. 2012)

E. Bogdan, A. Plaquet, L. Antonov, V. Rodriguez, L. Ducasse, B. Champagne, F. Castet. *Solvent effects on the Second-Order Nonlinear Optical Responses in the Keto-Enol Equilibrium of a Hydroxynaphthaldehyde Derivative*. J. Phys. Chem. C, **2010**, 114, 12760.

E. Bogdan, L. Rougier, L. Ducasse, B. Champagne, F. Castet. *Nonlinear Optical Properties of Flavylum Salts: A Quantum Chemical Study*. J. Phys. Chem. A, **2010**, 114, 8474.

J. Idé, R. Méreau, L. Ducasse, F. Castet, Y. Olivier, N. Martinelli, J. Cornil, D. Beljonne. *Supramolecular Organization and Charge Transport Properties of Self-Assembled pi-pi Stacks of Perylene Diimide Dyes*. J. Phys. Chem. B. **2011**, 115, 5593.

Y. Nicolas, F. Castet, M. Devynck, P. Tardy, L. Hirsch, C. Labrugère, H. Allouchi, T. Toupance. *TIPS-triphenodioxazine versus TIPS-pentacene: Enhanced Electron Mobility for n-Type Organic Field-Effect Transistors*. Org. Elec. **2012**, 13, 1392.

F. Castet, B. Champagne. *Assessment of DFT exchange-correlation functionals for evaluating the multipolar contributions to the quadratic nonlinear optical responses of small reference molecules*. J. Chem. Theory. Comput. **2012**, 8, 2044.

J. Idé, S. Mothy, A. Savoyant, A. Fritsch, P. Aurel, R. Méreau, L. Ducasse, J. Cornil, D. Beljonne, F. Castet. *Interfacial dipole and band bending in model pentacene/C₆₀ heterojunctions*. Int. J. Quant. Chem. **2013**, 113, 580.

L. Ducasse, F. Castet, R. Méreau, S. Nénon, J. Idé, T. Toupance, C. Olivier. *Structure and Absorption Properties of the C212 dye Chemisorbed onto the TiO₂ (101) Anatase Surface*. Chem. Phys. Lett. **2013**, 556, 151.

G. D'Avino, S. Mothy, L. Muccioli, C. Zannoni, L. Wang, J. Cornil, D. Beljonne, F. Castet. *Energetics of Electron-Hole Separation at P3HT/PCBM Heterojunctions*. J. Phys. Chem. C **2013**, 117, 12981.

Y. Nicolas, F. Allama, M. Lepeltier, J. Massin, F. Castet, L. Ducasse, L. Hirsch, Z. Boubegtiten, G. Jonusauskas, C. Olivier, T. Toupance. *New synthetic routes towards soluble and dissymmetric triphenodioxazine dyes designed for dye-sensitized solar cells*. Chem. Eur. J. **2014**, 20, 3678–3688.

J. Idé, R. Méreau, L. Ducasse, F. Castet, H. Bock, Y. Olivier, J. Cornil, D. Beljonne, G. D'Avino, O. M. Roscioni, L. Muccioli, C. Zannoni. *Charge dissociation at interfaces between discotic liquid crystals: the surprising role of column mismatch*. J. Am. Chem. Soc. **2014**, 136, 2911-2920.

3.10 Laboratoire des Composites ThermoStructuraux

LCTS : UMR 5801 – CNRS / Université de Bordeaux / Herakles (groupe SAFRAN) / CEA

<http://www.lcts.u-bordeaux1.fr>

Correspondant : Jean-Marc Leyssale (leyssale@lcts.u-bordeaux1.fr)

Le LCTS est une unité mixte, regroupant des partenaires académiques et industriels, dont l'objet d'étude est les matériaux composites utilisés comme matériaux de structure dans des applications à haute température, éventuellement sous contraintes mécaniques et/ou en atmosphère réactive (oxydante). Ces composites sont généralement formés de fibres céramique ou carbone dans des matrices céramique ou carbone et d'une interphase en carbone ou nanoséquencee carbone/céramique.

Les travaux du laboratoire concernent

- I. l'élaboration de nouveaux composites et de nouveaux procédés de fabrication;
- II. la caractérisation des matériaux et de leurs propriétés (mécaniques, thermiques, oxydation, etc...) ;
- III. la modélisation de leur structure, à diverses échelles, de leurs propriétés, et des procédés d'élaboration.

Le laboratoire comprend environ 40 personnels permanents dont une vingtaine de chercheurs et d'enseignants chercheurs, ainsi qu'une vingtaine de doctorants et post-doctorants.

Le calcul scientifique au laboratoire concerne les domaines suivants :

1. Calculs de structure par méthodes éléments finis (G. Couégnat, E. Martin)
2. Reconstruction tomographique et calcul de propriétés dans les milieux reconstruits : (O. Caty, G. Couégnat, G. Vignoles).
3. Calculs ab-initio et simulations atomistiques (J-M Leyssale, G. Vignoles)
4. Calculs de thermochimie et de cinétique réactionnelle (G. Vignoles, J. Roger, S. Jacques)

Moyens de calcul

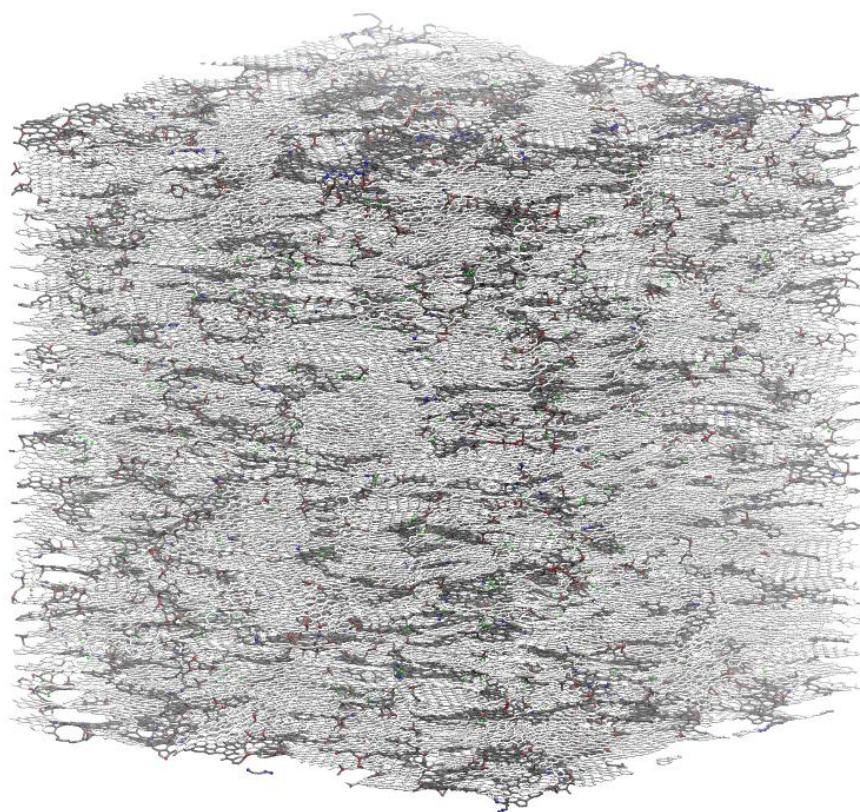
- Une station de calcul Linux de 80 cœurs en mémoire partagée (achat en 2012)
- Un cluster de calcul d'environ 100 cœurs acheté en 2009 (32 cœurs à l'époque), upgradé en 2010.
- Diverses stations de calcul individuelles de 4 à 8 cœurs.

Les activités les plus lourdes en calcul et qui ont donc nécessité l'utilisation des moyens du Mésocentre sont celles du point 3.

Résumés des principaux résultats des deux dernières années.

Au cours des deux dernières années les travaux effectués sur avakas ont permis d'élucider la structure à l'échelle nanométrique de divers matériaux et leur relation structure/propriétés. Quelques résultats majeurs sont:

- Résolution structurale de céramiques amorphes de type **carbure de bore**, par dynamique moléculaire *ab initio*. Nous avons clairement mis en évidence l'existence de motifs icosaédraux ($B_{11}C$) dans une matrice amorphe de stochimétrie proche de B_4C_3 [4].
- La génération de modèles réalistes de matrices de **pyrocarbone** (Figure 1). L'utilisation d'Avakas a été fondamentale afin d'obtenir des modèles de taille suffisamment grande ($> 200\,000$ atomes) pour capturer la relation ordre/désordre de ce type de matériaux [1].
- L'évaluation des **propriétés élastiques et thermiques** des modèles de pyrocarbones et leur mise en relation avec les propriétés structurales.



Modèle structural d'un pyrocarbone laminaire rugueux de 12.43 nm^3 [1].

- L'étude de la structure et des propriétés de nano-objets carbonés (**défauts ponctuels dans le graphène** ou **graphènes polycristallins**) afin de mieux comprendre la relation structure/propriétés de matériaux carbonés anisotropes sous forme bulk (pyrocarbones) [2].
- La réorganisations structurale de graphènes polycristallins à haute température, ouvrant ainsi la voie à l'étude par simulation de la **graphitisation** des matériaux.
- La détermination de l'affinité à former des interfaces entre un carbone désordonné et des surfaces céramique (dans les systèmes Alumine et Nitrure d'Aluminium) par dynamique moléculaire *ab initio* [3].
- Démarrage d'une collaboration avec un groupe de l'Université de Leeds visant à la simulation, par une approche reconstructive, de l'endommagement du graphite par irradiation. Des premiers résultats concernant l'irradiation électronique d'un graphite nucléaire sont sur le point d'être publiés.

Financements :

- ANR: programme blanc PyroMaN (Pyrocarbon Matrices at the Nanoscale) 2010-2014 (Coord. G. Vignoles)
- Institut Carnot MIB: bourse de thèse Baptiste Farbos.
- Messier-Dowty-Bugatti (groupe SAFRAN): bourse de thèse Nicolas Martin.

Collaborations:

- Laboratoire d'Intégration du Matériau au Système (IMS), Bordeaux (Jean-Pierre da Costa et Christian Germain).
- Institut des Sciences Moléculaires (ISM), Bordeaux (Lionel Truflandier).
- Centre d'Elaboration des Matériaux et d'Etudes Structurales (CEMES), Toulouse (Marc Monthieux, Pascal Puech et Virginie Serin).
- Institut Laue Langevin (ILL), Grenoble (Henry Fischer et Stéphane Rools).
- Laboratoire de Chimie de la Matière Condensée de Paris (LCPCP), Jussieu (Christel Gervais).
- Dept. of Physics, Leeds University (UK), Andrew Scott, Rik Brydson and Helen Freeman.

Thèses:

- Baptiste Farbos: "Structure et propriétés de carbones anisotropes par une approche couplant analyse d'image et simulation atomistique", soutenance prévue le 02/12/2014.
- Nicolas Martin: "Composite C/C à matrice nanochargée en alumine et en nitrure d'aluminium", soutenance prévue le 21/11/2014.

Publications faisant référence à des calculs effectués sur Avakas :

- [1] Farbos, B.; Weisbecker, P.; Fischer, H. E.; Da Costa, J.-P.; Lalanne M.; Chollon G.; Germain, C.; Vignoles, G. L.; Leyssale, J.-M., *Nanoscale structure and texture of highly anisotropic pyrocarbons revisited with transmission electron microscopy, image processing, neutron diffraction and atomistic modelling*, CARBON **2014**, 80, 472-489.
- [2] Leyssale J.-M.; Vignoles G. L., *A Large-Scale Molecular Dynamics Study of the Divacancy Defect in Graphene*, J. PHYS. CHEM. C **2014**, 118, 8200-8216.
- [3] Martin, N.; Pailler, R.; Leyssale, J.-M., *Carbon/ceramic (AlN) interfaces from liquid quench ab initio molecular dynamics simulations*, MOL. SIMUL. **2014**, 40, 160-168 (Alain Fuchs' Festschrift).
- [4] Pallier, C.; Leyssale, J.-M.; Truflandier, L. A.; Bui, A. T.; Weisbecker, P.; Gervais, C.; Fischer, H. E.; Sirotti, F.; Teyssandier, F.; Chollon, G., *Structure of an amorphous boron carbide film: an experimental and computational approach*, CHEM. MATER. **2013**, 25, 2618-2629.

3.11 Laboratoire des Fluides Complexes et leurs Réservoirs

LFCR : UMR 5150 – Université de Pau et des Pays de l'Adour / TOTAL / CNRS

<http://lfc.univ-pau.fr/>

Correspondant : Delage Santacreu (stephanie.delage@univ-pau.fr)

Le Laboratoire des Fluides Complexes et leurs Réservoirs est rattaché au CNRS, à TOTAL et à l'UPPA (UMR5150). Il fait également partie de la fédération IPRA FR CNRS 2952 (Institut Pluridisciplinaire de Recherche Appliquée dans le domaine du Génie Pétrolier) et est membre de l'Institut Carnot ISIFoR (Institute for the Sustainable engineering of Fossil Resources).

Le LFC-R est composé de cinq groupes de recherche: Colloïdes et interfaces, Propriétés de transport, Comportement de phase, Géomécanique-milieux poreux et Réservoirs géologiques.

Une partie croissante des activités du LFC-R concerne la simulation numérique et plus particulièrement la simulation de la dynamique moléculaire classique. Ces simulations sont réalisés sur des codes développés en interne et qui ont été récemment parallélisé (MPI). Les activités menées s'inscrivent dans la logique suivante : réaliser des simulations extensives sur des systèmes modèles bien maîtrisés de plus en plus complexe pour ensuite proposer des développements permettant d'améliorer la modélisation des propriétés thermophysiques de fluide en phase dense pour lesquels il n'existe pas encore de théorie moléculaire satisfaisante.

L'équipe Géomécanique – Milieux Poreux s'est structurée au cours du dernier contrat autour de l'étude des interactions entre l'endommagement de la phase solide d'un milieu poreux et l'état et les propriétés de transfert des fluides le contenant. Dans ce cadre, l'équipe Géomécanique-milieux poreux effectue également des simulations numériques concernant l'endommagement et la rupture des matériaux quasi-fragiles (roches, bétons...). Pour cela le code principal utilisé est un modèle mésoscopique de type lattice dont la particularité est de pouvoir représenter explicitement la micro-structure du matériaux. Développé en interne en partenariat avec Peter Grassl (University of Glasgow), il est basé sur la plateforme libre oofem (www.oofem.org). Un réseau hydraulique dual du réseau lattice mécanique permet également d'étudier les écoulements au sein du milieu poreux afin de caractériser les liens entre perméabilité, déformation et endommagement.

En parallèle, l'équipe modélise le comportement de fluides dans des milieux poreux pour lesquels le confinement extrême modifie de façon importante les propriétés thermodynamiques. Plusieurs directions sont privilégiées incluant la complexité des fluides adsorbés (eau, électrolytes, mélanges de gaz,...) ou le raffinement de la description de la géométrie des pores. La voie suivie par l'équipe est celle des modèles continus (DFT) couplés à des équations d'état performantes. La validation avec la simulation moléculaire sur des configurations simples fait l'objet de collaborations avec les autres équipes du laboratoire.

Nombres de chercheurs/étudiants concernés

Personnels permanents : 6 (3 PR, 1 MC Chaire CNRS, 1 MC, 1 IE)

Etudiants : 5 (doctorants, ater, post-doctorants).

Moyens de calcul

Le LFC-R dispose de 6 nœuds de calcul intégrés dans le cluster de calcul de l'UPPA. Comme pour l'ensemble du cluster de calcul de l'UPPA, l'administration de ces nœuds est volontairement réalisée selon un modèle similaire au cluster Avakas (utilisation des modules d'environnement par exemple). Cette gestion permet aux chercheurs du LFC-R de passer facilement des moyens de calcul locaux aux moyens de calcul régionaux (cluster Avakas du MCIA).

Description des principaux axes de recherche

Les principaux thèmes de recherche du laboratoire en lien avec la simulation numérique (simulation moléculaires classiques) portent sur :

- La caractérisation et la modélisation des propriétés interfaciales liquide/liquide, gaz/liquide et gaz/liquide/liquide en milieux libres ou poreux.
- L'amélioration des dispositifs expérimentaux d'étude des équilibres de phase sous pression pour pouvoir étudier en complément des équilibres liquide – vapeur, les transitions fluide – solide.
- L'estimation de propriétés thermophysiques et la construction de corrélations physiquement fondées, en particulier pour des mélanges multiconstituants et dans des contextes où l'expérimentation est difficile à mener.
- Le développement de méthodes expérimentales de caractérisation de l'adsorption et du transport en milieu poreux et aussi de modèles théoriques et numériques basés sur la simulation moléculaire, Monte Carlo et dynamique pour étudier le couplage entre endommagement par microfissuration et fissuration, et la perméation dans les géomatériaux.

Projets en cours

Les projets suivants ont été réalisés avec les moyens de calcul du MCIA.

Un outil de dynamique moléculaire (DM) développé en interne (« Transpore »), récemment parallélisé et largement validé au cours des dix dernières années a été utilisé pour traiter les trois premiers projets.

Propriétés thermophysiques des chaînes de Lennard-Jones (projet collaboratif LMAP/LFC-R)

Parmi les modèles moléculaires simples (à trois paramètres moléculaires), la chaîne de Lennard-Jones (LJC) est l'un des modèles qui permet d'être représentatif de nombreuses espèces non fortement polaires. Cependant ce modèle moléculaire n'est pas toujours à même de représenter à la fois les propriétés statiques et dynamiques avec le même jeu de paramètres moléculaires. Il a été montré qu'une manière de concilier résultats sur les propriétés thermodynamiques et les propriétés de transport, et en particulier la viscosité, pouvait se faire au travers de l'introduction d'une « rigidité » interne via un potentiel de flexion afin de moduler les propriétés de transport tout en ayant un impact limité sur le diagramme de phase liquide-vapeur [1]. Par ailleurs, il a pu être montré qu'en phase peu dense l'ajout de ce degré de liberté n'avait qu'un simple effet géométrique pour ce qui concerne la viscosité associée. Ainsi de manière intéressante une simple loi d'échelle permet de représenter la viscosité en gaz peu dense d'une chaîne et ce quelque soit sa rigidité [1].

Une extension de ce travail basée sur les fluides de Mie est en cours [2-3].

Personnes impliquées: J.-P. Bazile (LFC-R), C. Boned (LFC-R), S. Delage-Santacreu (LMAP), J. Fernandez (Université de Saint Jacques de Compostelle, Espagne), G. Galliero (LFC-R), M. Odunlami (IPREM)

Publications choisies:

[1] S. Delage-Santacreu, G. Galliero, M. Odunlami, C. Boned, Low density shear viscosity of Lennard-Jones chains of variable rigidities, *J. Chem. Phys.* **137**, 204306 (2012).

[2] G. Galliéro G., S. Delage Santacreu, J.-P. Bazile, J. Fernandez, C. Boned, Thermodynamic scaling of the shear viscosity: Mie fluids and real mixtures, 10th Asian Thermophysical Properties Conference, Corée 2013.

[3] G. Galliéro G., S. Delage Santacreu, J.-P. Bazile, J. Fernandez, C. Boned, Thermodynamic scaling of viscosity applied to mixtures: Model and real Fluids, 20th European Thermophysical Properties Conference, Portugal 2014.

Thermodiffusion en milieu ultra-confiné

La thermodiffusion, ou effet Soret, est un phénomène de transfert qui couple flux de masse et gradient de température. Cet effet, difficilement mesurable expérimentalement, a été étudié par dynamique moléculaire dans des pores lamellaires de largeur nanométrique.

Il a été montré que le facteur de thermodiffusion était très fortement influencé par la nature de la phase solide (lisse ou rugueuse), mais que d'une manière générale celui-ci était peu fonction de la taille du pore [4-5]. Cependant les résultats de simulation ont indiqués que le coefficient de thermodiffusion et celui de diffusion de masse avaient tendance à décroître fortement quand la taille du pore décroissait uniquement quand la paroi était rugueuse (effet de friction locale) [5-6].

Personnes impliquées: C. Boned (LFC-R), G. Galliero (LFC-R), R. Hannaoui (LFC-R), H. Hoang (LFC-R)

Publications choisies:

[4] R. Hannaoui, G. Galliero, C. Boned, Molecular dynamics simulation of thermodiffusion and mass diffusion in structureless and atomistic micro pores, *C.R. Meca*, **341**, 469, 2013.

[5] H. Hoang, G. Galliero, Grand canonical-like molecular dynamics simulations: Applications to anisotropic mass diffusion in a nanoporous medium, *J. Chem. Phys.* **136**, 184702, 2012.

[6] R. Hannaoui, G. Galliero, H. Hoang, C. Boned, Influence of confinement on thermodiffusion, *J. Chem. Phys.* **139**, 114704, 2013.

Propriétés de transport dans les fluides très inhomogènes

Lorsqu'un fluide est confiné entre deux plans distants de quelques tailles moléculaires il se structure fortement (adsorption + molecular packing). Ainsi les propriétés de ce type de fluide confiné sont fortement modifiées par rapport au cas *bulk* [7-8].

Dans cette configuration nous avons étudié l'impact de cette structuration sur la viscosité de différents type de fluides (sphères dures jusqu'à Lennard-Jones) via des simulations de dynamique moléculaire hors d'équilibre [9-10]. Il a notamment été montré qu'une approche de type DFT + LADM permettait d'estimer raisonnablement la viscosité locale à

condition d'utiliser une fonction poids adaptée au problème du transport de quantité de mouvement.

Personnes impliquées: G. Galliero (LFC-R), H. Hoang (LFC-R)

Publications choisies:

[7] H. Hoang, G. Galliero, *Local viscosity of a fluid confined in narrow pore*, *Phys. Rev. E* **86**, 021202, 2012.

[8] H. Hoang, G. Galliero, *Shear behavior of a confined thin film: Influence of the molecular dynamics scheme employed*, *J. Chem. Phys.* **138**, 054707, 2013.

[9] H. Hoang, G. Galliero, *Shear viscosity of Inhomogeneous fluids*, *J. Chem. Phys.* **136**, 124902, 2012.

[10] H. Hoang, G. Galliero, *Local shear viscosity of strongly inhomogeneous dense fluids : from the hard sphere to the Lennard-Jones fluids*, *J. Phys: Cond. Matter* **25**, 485001, 2013.

Rupture et endommagement des matériaux quasi-fragiles (bétons, roches, ...)

Vérous scientifiques :

Après le domaine élastique, la réponse mécanique des matériaux quasi-fragiles, tel que le béton ou les roches, est caractérisée par une partie adoucissante non-linéaire et irréversible. Elle se traduit par une dégradation des propriétés élastiques (endommagement) et une faible déformation permanente (plasticité). Cette dégradation est due à l'initiation et au développement de microfissures. Le siège de ces microfissures est appelé zone d'élaboration (FPZ). La caractérisation (taille, évolution) de cette zone d'élaboration est au cœur des problématiques actuelles en mécanique de la rupture et de l'endommagement des matériaux quasi-fragiles.

Actions :

- Une nouvelle base de données expérimentales a été construite mettant en lumière, pour un même matériau, les réponses complètes force/ouverture d'entaille obtenues sur des éprouvettes homothétiques (4 tailles), entaillées et non entaillées ;
- Des résultats numériques obtenus à l'aide d'un modèle mésoscopique basé sur un assemblage de type lattice ont montré que la prise en compte de façon intrinsèque des interactions non- locales, permet de reproduire et prédire les réponses expérimentales observées ;
- Un nouveau modèle non-local intégral macroscopique prenant également en compte de façon intrinsèque ces interactions non-locales a été développé ;
- Le processus local de fissuration a été étudié à l'aide du même modèle mésoscopique afin d'identifier les longueurs de corrélation entre lieux d'endommagements successifs pour caractériser l'évolution de la FPZ et une bonne concordance a été observée lors de comparaisons avec des résultats expérimentaux mettant en jeu une localisation de l'endommagement par émissions acoustiques.

Personnes impliquées: D. Grégoire (LFC-R), V. Lefort (LFC-R), G. Pijaudier-Cabot (LFC-R), L.B. Rojas-Solano (LFC-R)

Publications choisies:

[6] V. Lefort, D. Grégoire, L.B. Rojas-Solano, P. Grassl, G. Pijaudier-Cabot, Analyse spatiale du processus de localisation à l'aide des fonctions de Ripley, 21ème Congrès Français de Mécanique (CFM2013), 2013.

[7] V. Lefort, G. Pijaudier-Cabot, D. Grégoire, P. Grassl, Correlations in the mesoscale modelling of fracture of quasi-brittle materials – Extracting internal lengths, Computational modelling of concrete and concrete structures (Euro-C 2014), 2014.

[8] V. Lefort, D. Grégoire, P. Grassl, G. Pijaudier-Cabot, Experimental and numerical analyses of characteristic lengths in the failure of quasi-brittle materials, 48th US Rocks Mechanics, 2014.

[9] D. Grégoire, L.B. Rojas-Solano, V. Lefort, P. Grassl, G. Pijaudier-Cabot, Size and boundary effects during failure in quasi-brittle materials: experimental and numerical investigations, 20th European Conference on Fracture (ECF20), 2014.

[10] D. Grégoire, V. Lefort, G. Pijaudier-Cabot, Fracture process zone evolution in the course of failure in quasi-brittle materials: numerical investigations and experimental validations at the mesoscale, 11th world congress on computational mechanics, 2014.

3.12 Laboratoire de mathématiques et de leurs applications

UMR 5142, CNRS, Université de Pau et des Pays de l'Adour

<http://lma.umn5142.univ-pau.fr/>

Correspondant : Delage Santacreu (stephanie.delage@univ-pau.fr)

Le Laboratoire de Mathématiques et de leurs Applications de Pau (LMA) est rattaché au CNRS et à l'UPPA (UMR5142) depuis 2005. Il fait également partie de la fédération IPRA FR CNRS 2952 (Institut Pluridisciplinaire de Recherche Appliquée dans le domaine du Génie Pétrolier) et est membre de l'Institut Carnot ISIFoR (Institute for the Sustainable engineering of Fossil Ressources). De plus, le laboratoire participe aux actions des pôles de compétitivité Avenia et Aerospace Valley. Il est aussi partenaire du LABEX AMIES.

le LMA est composé de quatre équipes de recherche balayant un large spectre, des mathématiques pures aux mathématiques appliquées et dispose de trois équipes-projet avec l'INRIA Bordeaux Sud-Ouest: CONCHA, MAGIQUE-3D et CAGIRE.

Le laboratoire, au début des années 1990, avait pour vocation première la modélisation et l'analyse mathématique ainsi que l'analyse et la simulation numériques de problèmes posés par l'Industrie et notamment de ceux provenant de l'Industrie Pétrolière. Parallèlement, à partir de 1995, le Laboratoire s'est aussi intéressé aux problématiques environnementales. Certaines thématiques liées à l'industrie pétrolière sont d'ailleurs assez proches des préoccupations environnementales (par exemple : les milieux poreux, les nappes, le transport de polluants...). Le laboratoire s'est ouvert à de nouveaux axes en liaison avec sa stratégie de développement et ses partenariats (imagerie sismique, aérothermodynamique, sûreté de fonctionnement,...).

Le LMA a donc développé une expertise dans la modélisation, l'analyse et le développement de codes de calcul concernant la simulation de phénomènes physiques variés. Parmi les codes développés au LMA on peut par exemple citer :

- la bibliothèque CONCHA, de l'équipe-projet INRIA du même nom, dédiée à la simulation d'écoulements complexes.
- les plate-formes pour les milieux poreux Homogenizer++ et Mflow.
- les codes de calcul de solutions analytiques d'équations d'ondes pour les milieux poroélastiques stratifiés Gar6more2D et Gar6more3D développés au sein de l'équipe MAGIQUE-3D.
- le code GlassEel2D simulant la migration de civelles en estuaire selon des modèles non-linéaires de convection-diffusion-réaction.
- un projet de plate-forme académique de simulation de réservoir, dans le contexte de la bibliothèque libre Dune/DumuX, initié courant 2011 par le groupe de travail Milieux Poreux du laboratoire dirigé par B. Amaziane.

Le développement et l'exploitation de ces codes de calcul est intimement lié à l'utilisation de ressources en calcul intensif, ce dont le LMA bénéficie à l'UPPA et au MCIA.

Nombres de chercheurs/étudiants concernés

Personnels permanents : 24 (14 EC, 2 CR CNRS, 1 IR CNRS, 1 IE UPPA, 3 CR INRIA, 1 DR INRIA, 2 ingénieurs INRIA)

Etudiants : 10 (doctorants, ater, post-doctorants).

Moyens de calcul

Le LMAP dispose de 22 nœuds de calcul intégrés dans le cluster de calcul de l'UPPA. Parmi ces nœuds, les 8 plus récents ont été acquis en 2010 et financés pour moitié par le projet Région MCIA (volet « Plate-forme de calcul intensif des laboratoires de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour »).

Comme pour l'ensemble du cluster de calcul de l'UPPA, l'administration de ces nœuds est volontairement réalisée selon un modèle similaire au cluster Avakas (utilisation des modules d'environnement par exemple). Cette gestion permet aux chercheurs du LMAP de passer facilement des moyens de calcul locaux aux moyens de calcul régionaux (cluster Avakas du MCIA).

Description des principaux axes de recherche

Les principaux thèmes de recherche du laboratoire portent sur :

- l'analyse des équations aux dérivées partielles.
- l'optimisation et les systèmes dynamiques.
- la simulation numérique et le calcul scientifique.
- la statistique et les probabilités appliquées.
- l'algèbre et la géométrie.

Les activités HPC du laboratoire sont en rapport avec le thème « Simulation numérique et calcul scientifique » (dans une moindre mesure avec la Statistique et les probabilités appliquées). Parmi les domaines d'application privilégiés liés à cette activité, on peut citer :

- l'ingénierie pétrolière (collaborations avec TOTAL, l'IFP).
- l'aérothermodynamique (collaboration avec Turbomeca).
- l'environnement (collaborations avec IFREMER, l'IRSN).

Projets en cours

Parallélisation du code de dynamique moléculaire « Transpore » et étude de la viscosité de cisaillement pour des fluides de Lennard-Jones en milieu peu dense (projet collaboratif LMAP / LFC-R / UPPA)

Ce projet concerne la parallélisation d'un code de dynamique moléculaire « Transpore » en collaboration avec le LFC-R. 99% du temps de simulation sont occupés par le calcul des forces d'interaction, le calcul des nouvelles positions et vitesses. Ces parties du code ont donc été parallélisées avec la librairie MPI pour équilibrer au mieux les charges de travail sur chaque processeur. Ceci a permis de réduire considérablement le temps de simulation. Une des applications de ces développements consiste à améliorer la modélisation de la viscosité de fluides d'intérêt pétrolier. [1-2]

Personnes impliquées: C. Boned (LFC-R), S. Delage-Santacreu (LMAP), G. Galliero (LFC-R), M. Odunlami (LMAP)

Publications choisies:

[1] S. Delage-Santacreu, G. Galliero, M. Odunlami, C. Boned, Low density shear viscosity of Lennard-Jones chains of variable rigidities, *J. Chem. Phys.* **137**, 204306 (2012).

[2] S. Delage-Santacreu, G. Galliero, M. Odunlami, and C. Boned, *Viscosité de cisaillement pour des fluides de type Chaînes de Lennard-Jones en milieu peu dense*, journée scientifique du MCIA, Talence, février 2013.

Étude de la viscosité de cisaillement pour des fluides de Lennard-Jones en milieu dense (projet collaboratif LMAP / LFC-R)

Ce projet (commencé en 2013) concerne l'étude de la viscosité de cisaillement de fluides simples en phase dense. L'intérêt est porté sur des fluides réels de type pétrolier dont le potentiel d'interaction est modélisé par le potentiel de Mie (partie répulsive variable). Ce travail a consisté à implémenter ces potentiels dans le code de dynamique moléculaire « Transpore » puis à étudier l'influence de l'intensité de sa partie répulsive sur la viscosité via de nombreuses simulations de dynamique moléculaire hors équilibre. [3]

Personnes impliquées: J.-P. Bazile (LFC-R), C. Boned (LFC-R), S. Delage-Santacreu (LMAP), J. Fernandez (LFC-R), G. Galliero (LFC-R)

Publications choisies:

[3] G. Galliéro G., S. Delage Santacreu, J.-P. Bazile, J. Fernandez, C. Boned, *Thermodynamic scaling of the shear viscosity: Mie fluids and real mixtures*, 10th Asian Thermophysical Properties Conference, Corée 2013.

Projet COLARGOL : COMparaison des algorithmes dans AeRosol et aGhOra pour les fluides compressibles (projet CEMRACS porté par l'équipe-projet INRIA CAGIRE adossée au LMAP)

http://smi.emath.fr/cemracs/cemracs12/sql_projets.php.

Ce projet propose de comparer les algorithmes de méthodes éléments finis d'ordre élevé implantées dans deux bibliothèques éléments finis développées depuis un an : AGHORA, développé à l'ONERA/DSNA, et AEROSOL, développé à INRIA Bordeaux Sud-Ouest (équipes Bacchus et Cagire). Les calculs liés à ces travaux sont effectués depuis octobre 2012 sur les machines du MCIA.

Personnes impliquées: P. Bruel (LMAP), S. Delmas (LMAP), Y. Moguen (LMAP), V. Perrier (LMAP), J.-F. Wald (LMAP)

Projet de simulation de propagation d'ondes acoustiques et élastodynamiques pour l'imagerie du sous-sol (équipe projet INRIA MAGIQUE 3D).

L'équipe-projet INRIA MAGIQUE 3D, commune au LMAP, développe, en collaboration avec Total, un code de simulation de propagation d'ondes acoustiques et élastodynamiques pour l'imagerie du sous-sol. Ce code, basé sur une formulation éléments finis de type Galerkin discontinu, permet de modéliser des milieux hétérogènes complexes. Trois doctorants et un ingénieur de MAGIQUE 3D utilisent le cluster du MCIA pour valider ce code dans des configurations simples (milieux homogènes ou bicouches), mais nécessitant néanmoins des moyens de calcul conséquent, avant de le tester sur des cas réalistes.

Personnes impliquées: J. Alvarez Armendi (LMAP), M. Amara (LMAP), H. Barucq (LMAP), L. Boillot (LMAP), M. Bonasse-Gahot (LMAP), J. Chabassier (LMAP), T. Chaumont-Frelet (LMAP), V. Darrigrand (LMAP), J. Diaz (LMAP), A. Erdozain (LMAP), S. Etouati (LMAP), J. Luquel (LMAP), V. Mattesi (LMAP), V. Peron (LMAP), A. Rodriguez Rozas (LMAP), S. Tordeux (LMAP), F. Ventimiglia (LMAP)

3.13 Laboratoire Ondes et Matière d'Aquitaine

LOMA : UMR 5805 - UMR 5804 - Université Bordeaux / CNRS

<http://www.loma.cnrs.fr/>

Correspondants : Joseph Leandri (j.leandri@cpmoh.u-bordeaux1.fr)

Le Laboratoire Ondes et Matière d'Aquitaine, Unité Mixte de Recherche CNRS/Université de Bordeaux, se prévaut d'une pluridisciplinarité scientifique et d'une grande diversité des thématiques de recherche qui s'appuient sur un tissu collaboratif universitaire important. Deux axes centraux de recherche sont privilégiés au LOMA, articulés autour de deux départements.

LE DÉPARTEMENT PHYSIQUE DE LA MATIÈRE CONDENSÉE : Dont les thèmes principaux sont :

- Matière Molle
- Écoulements
- Matériaux et Nanostructures

LE DÉPARTEMENT PHOTONIQUE ET MATÉRIAUX : Dont les thèmes principaux sont :

- Génération et Manipulation de la Lumière.
- Matériaux, Dynamiques et Nanostructures
- Méthodes Innovantes en Photonique

Pour les activités scientifiques du LOMA utilisant le HPC (serveurs/grille et cluster) :

- ANR ORGAVOLT: Mathias Ljungberg, Peter Koval, E. Casida, **Dietrich Foerster** (PR29). **But et motivation.** Le projet ANR "ORGAVOLT" cherche à prédire par le calcul « ab initio » ou de « premiers principes » les propriétés des semi-conducteurs organiques et de leurs interfaces.

Le regain d'intérêt pour les semi-conducteurs organiques est dû à leur utilisation dans des hétéro jonctions en volume et à l'effort actuel d'imprimer de telles cellules. En cas de succès, elles seront une alternative pas chère aux coûteux dispositifs solaires conventionnels. A Bordeaux, ces matériaux sont synthétisés dans le laboratoire de Georges Hadzioannou <http://www.lcpo.fr/wordpress/> et les cellules correspondantes sont étudiées dans le laboratoire de Lionel Hirsch.

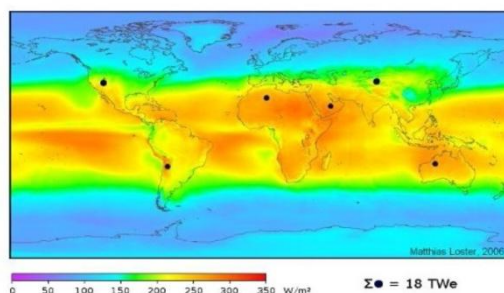
Méthodologie. Le cadre théorique usuel pour les semi-conducteurs inorganiques a été créé en 1965 – il s'agit de l'approximation GW qui remplace les équations exactes, mais à ce jour non résolues pour le gaz d'électrons publiée en 1965. Cette approximation a été utilisée avec succès au pendant les 30 dernières années pour étudier les semi-conducteurs *inorganiques*. Parce que les semi-conducteurs *organiques* sont constitués de molécules plutôt que d'atomes, leur traitement théorique est bien plus difficile que celui des semi-conducteurs inorganiques. Il y avait peu d'espoir de résoudre les équations GW de Hedin pour les semi-conducteurs organiques, vu leur coût CPU qui augmente comme N^4 avec un nombre d'atomes N de typiquement au moins quelques centaines dans une cellule périodique. Deux développements rendent une percée probable :

- i. les ordinateurs parallèles et hybrides qui associent GPU et CPU.

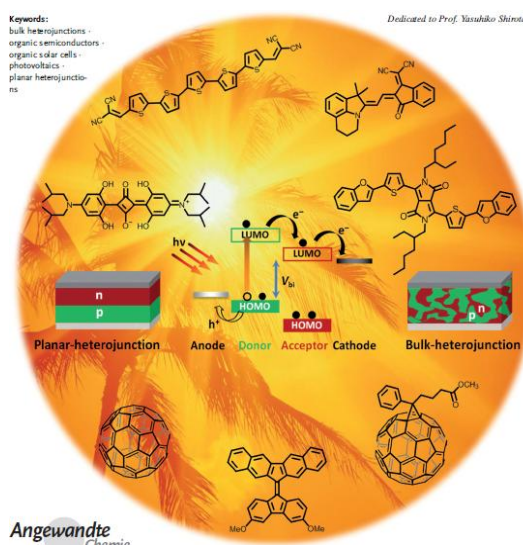
- ii. deux algorithmes N^3 pour résoudre les équations GW, dont un qui a été trouvé par notre équipe.

L'ANR nous a donné des fonds pour développer un code qui décrit les semi-conducteurs organiques et leurs hétéro interfaces et qui prédira les caractéristiques de leurs photocourants.

Le projet vient de commencer et nous pouvons que flasher l'idée générale. Le grand défi du domaine photovoltaïque est d'exploiter le fait que la surface de la terre nécessaire (représentée par des points noirs) pour couvrir les besoins du monde en énergie est faible par rapport à la surface totale de la planète.



La complexité des hétérojonctions en volume est due à l'existence d'interfaces à l'échelle atomique et moléculaire, comme illustre la figure suivante prise du journal « Angewandte Chemie ».



En dépit du comportement d'échelle N^3 amélioré de notre algorithme - par rapport aux algorithmes qui existent déjà - notre projet aura besoin de la puissance de l'ordinateur avakas.

Le projet est structuré en trois étapes :

- (i) bandes et bandes interdites du bulk -
- (ii) hétéro jonctions entre deux semi conducteurs organiques -
- (iii) le photo courant de la hétéro jonction sous lumière.

Dans chacune des étapes de ce projet, il y aura besoin de calculs massivement parallèles, à la fois pour des questions de mémoire et pour des questions de vitesse.

Pour plus de détails sur notre projet, voir :

<https://sites.google.com/site/markcasida/home/project-orgavolt>

Pour notre méthode voir : <http://mbpt-domiprod.wikidot.com/>

► Equipe "Transport quantique et systèmes nano-électromécaniques" : **F. Pistolesi** (DR2 06) **R. Avriller** (CR2 06)

Axe de recherche centré sur la description des processus d'interaction (matière-lumière, électron-phonon, électrons-électrons) dans les jonctions de taille moléculaire et de leur impact sur les propriétés électroniques de ces dernières (calcul du courant moyen et des fluctuations de courant traversant la jonction, dans le régime quantique cohérent). Le but est à terme de décrire les effets de structure électronique de manière réaliste et inclure les effets d'interaction hors-équilibre. Actuellement la phase du travail est à la préparation des codes et test sur des machines locales. Plus des Calculs "raisonnables" adaptés aux machines locales. A plus long terme ces codes seront portés sur clusters de calculs et calculs massivement parallèles pour des calculs réalistes et/ou auto-cohérents.

Ce travail s'inscrit aussi dans le cadre de l'ANR ORGAVOLT et du Labex AMADEUS

► **M. Perrin** (CR1 04) Membre de l'Equipe PULS du LOMA

Axe de recherche centré sur la Modélisation de propagation d'impulsion dans un laser picoseconde en anneau à l'aide d'un code 'maison' écrit en Fortran. En collaboration avec T. Crouzil, Doctorant.

Un autre axe est centré sur la Modélisation de la réponse optique d'une chaîne de gouttes (en utilisant des intégrales d'Huygens Fresnel). En collaboration avec la société Eolite dans le cadre d'une thèse CIFRE.

Dans la phase actuelle nous utilisons un cluster local (propre à l'équipe).

3.14 Domaine Mathématique – Informatique

Concernant la simulation, la modélisation et le développement logiciel en mathématiques et informatique, les activités de recherches sont principalement structurées en équipes communes entre plusieurs laboratoires (CBiB, IMB, LaBRI, LMA) et le centre de recherche INRIA-Bordeaux Sud Ouest. En conséquence, de nombreuses équipes travaillent sur des domaines applicatifs et font appel à des compétences multidisciplinaires.

CBiB : Centre de BioInformatique de Bordeaux (Univ. Bdx2)

<http://www.cbib.u-bordeaux2.fr>

Correspondant : Dr. Macha Nikolski

IMB : Institut de Mathématiques de Bordeaux (Univ. Bdx1)

<http://www.math.u-bordeaux1.fr>

Correspondant : Pr. Luc Mieussens

LaBRI : Laboratoire Bordelais de Recherche en Informatique (Univ. Bdx1)

<http://www.labri.fr>

Correspondant : Dr. Pierre Ramet

LMA : Laboratoire de Mathématiques et de leurs Applications (Univ. Pau)

<http://lma-umr5142.univ-pau.fr>

Correspondant : Dr. Hélène Barucq

INRIA – Bordeaux Sud Ouest

<http://www.inria.fr/centre/bordeaux>

Correspondant : Dr. Olivier Coulaud

On peut présenter l'organisation de ces activités sous trois axes de collaborations :

- LaBRI / CBiB : autour des recherches en bio-informatique.
- LaBRI / INRIA : autour du développement d'outils génériques pour le calcul haute performance.
- IMB / INRIA et LMA / INRIA : autour du développement d'algorithmes pour la simulation numériques (prédiction et analyse de phénomènes physiques).

Nous détaillons ci-dessous les principales équipes qui utilisent actuellement les moyens de calcul aquitain, mais il existe d'autres équipes qui ont pour projet d'utiliser ces moyens de calcul.

3.14.1 Projets LaBRI / CBiB

Le CBiB est impliqué dans des projets de traitement de données issues de nouvelle génération de séquençage (NGS) : assemblage de novo, détection de SNP, métagénomique. Les données NGS représentent d'importants volumes (plusieurs centaines de Go de données d'entrée par projet), et requièrent très souvent de grandes quantités de mémoire pour être traitées.

3.14.2 Projets LaBRI / INRIA

BACCHUS : <http://bacchus.bordeaux.inria.fr/>

Cette équipe est également commune avec l'IMB. La composante LaBRI s'intéresse au développement d'outils parallèles pour le partitionnement de graphes et de maillage.

HIEPACS : <http://hiepacs.bordeaux.inria.fr/>

Cette équipe s'intéresse au développement de solveurs parallèles (en algèbre linéaire et multipôles) pour des simulations numériques de très grandes tailles.

MANAO : <http://manao.bordeaux.inria.fr/>

L'activité de cette équipe est l'infographie et l'optique numérique. Dans ce cadre, l'équipe développe une bibliothèque qui implémente efficacement des algorithmes pour le calcul matriciel.

RUNTIME : <http://runtime.bordeaux.inria.fr/>

Cette équipe développe des outils pour abstraire la complexité grandissante des nouveaux calculateurs parallèles.

3.14.3 Projets IMB / INRIA

BACCHUS : <http://bacchus.bordeaux.inria.fr/>

Cette équipe est également commune avec le LABRI. La composante IMB s'intéresse au développement et à la validation de méthodes numériques destinées à des problèmes physiques modélisés par des propagations d'ondes (écoulements de gaz compressibles en aérodynamique, ondes sismiques, propagation de vagues, etc.)

MC2 : <http://www.inria.fr/equipes/mc2/>

Cette équipe développe des outils numérique pour décrire l'évolution de systèmes complexes avec évolution d'interfaces (cellules cancéreuses en médecine, nage de poisson, etc.)

ALEA : <http://alea.bordeaux.inria.fr/>

Cette équipe analyse et construit des outils probabilistes d'analyse de systèmes complexes (probabilité d'occurrence d'événements rares).

CQFD : <http://www.inria.fr/equipes/cqfd/>

Le travail de cette équipe consiste à appliquer des outils probabilistes et statistiques, issus de la théorie de l'estimation et du contrôle, au domaine de la sûreté de fonctionnement et plus particulièrement à la fiabilité dynamique et au contrôle de qualité, avec des applications à de nombreux domaines industriels.

LFANT : <http://www.inria.fr/equipes/lfant/>

Cette équipe travaille sur les algorithmes en théorie des nombres et en géométrie arithmétique. Elle couvre toute la chaîne de la conception et l'analyse d'algorithmes passant par des implantations performantes jusqu'aux applications (en particulier la sécurité de tous les cryptosystèmes à clef publique).

CARMEN : <http://www.inria.fr/equipes/carmen/>

Cette équipe s'intéresse aux modèles et aux méthodes numériques qui permettent la simulation de l'électrophysiologie cardiaque, de l'échelle cellulaire à l'échelle de l'individu, afin d'améliorer la compréhension et le traitement des pathologies cardiaques d'origine électrique et la valeur informative des signaux électriques disponibles.

REALOPT : <http://realopt.bordeaux.inria.fr/>

Cette équipe travaille développe des algorithmes d'optimisation combinatoire, avec es applications complexes en logistique (problèmes de tournées), en planification de la production et ordonnancement des tâches, conception et gestion des réseaux et des horaires.

3.14.4 Projets UPPA / INRIA

MAGIQUE3D : <http://uppa-inria.univ-pau.fr/m3d/>

Cette équipe, commune au LMA de l'UPPA, développe, en collaboration avec Total, un code de simulation de propagation d'ondes acoustiques et élastodynamiques pour l'imagerie du sous-sol. Ce code, basé sur une formulation éléments finis de type Galerkin discontinu, permet de modéliser des milieux hétérogènes complexes. Trois doctorants et une ingénieur de MAGIQUE 3D utilisent le cluster du MCIA pour valider ce code dans des configurations simples (milieux homogènes ou bicouches), mais nécessitant néanmoins des moyens de calcul conséquent, avant de le tester sur des cas réalistes.

CAGIRE: <http://cagire.bordeaux.inria.fr/>

Cette équipe, commune au LMA de l'UPPA, travaille sur les modèles et la simulation informatiques en mécanique des fluides. Elle étudie en particulier sur un type particulier de jet que l'on rencontre souvent en aérodynamique interne: les jets en transversal. L'originalité de ce projet découle du caractère simultané et fortement couplé des études expérimentales et numériques conduites. Ces travaux ont permis de développer des outils de simulation numérique en lien avec les écoulements complexes.

3.14.5 Moyens de calcul

Les quatre composantes (IMB, INRIA, LaBRI, LMA) ont regroupé leurs moyens de *développement logiciel autour de la plateforme expérimentale « PLAFRIM »*. Cette plateforme a pour vocation à valider et calibrer (à faible échelle) les outils et modèles développés au sein des équipes avant leur mise en exploitation sur le Mésocentre. Son mode d'exploitation permet une meilleure disponibilité pour les études de performances.

Ceci explique, en partie, pourquoi seules les équipes qui effectuent des simulations à grande échelle ont utilisé cette année les ressources du MCIA.

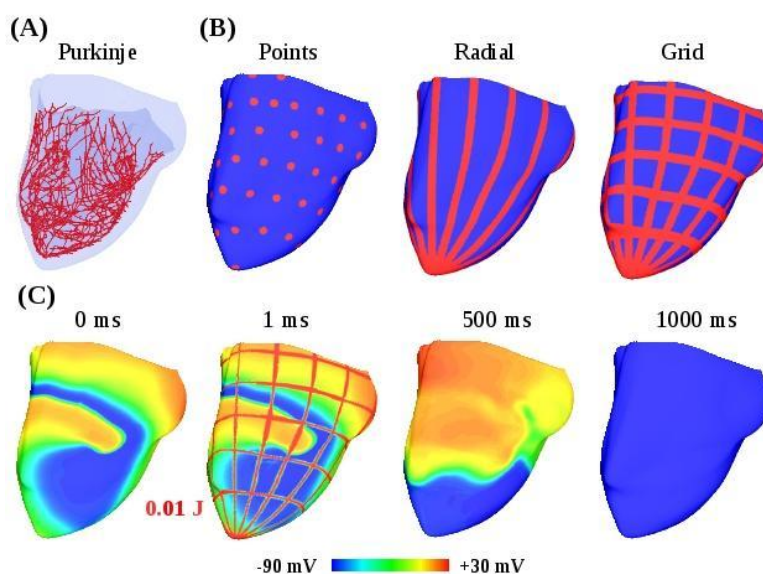
Cependant, de nombreux logiciels développés dans ces équipes ont été portés sur le Mésocentre (par exemple : HWLOC, PaStiX, EIGEN, ScalFMM, SCOTCH ...).

3.14.6 Principales contributions scientifiques

Quelques contributions scientifiques ayant utilisé de manière intensive le MCIA cette année:

Simulation numérique de la fibrillation ventriculaire (équipe Calcul Scientifique et Modélisation de l'IMB et équipe INRIA CARMEN) :

Le traitement le plus efficace pour la défibrillation ventriculaire est un fort choc électrique délivré par un défibrillateur-cardiovertreur implantable. Toutefois, la haute énergie requise pour la défibrillation « far-field » provoque des douleurs, des lésions tissulaires et une mortalité accrue. L'étude des nouvelles technologies de défibrillation in vivo étant extrêmement difficile, nous avons eu recours à la modélisation informatique pour tester la simulation WAN basse énergie tissulaire pour réduire les besoins énergétiques de la défibrillation. La fibrillation ventriculaire a été initiée via une stimulation rapide par un modèle numérique de la défaillance des ventricles humains basé sur une technique d'imagerie et complétée par le réseau de Purkinje (Fig A). La défibrillation a été testée avec les configurations de l'électrode montrée Fig. B, pour une énergie inférieure au seuil de la douleur humaine ($< 0.1\text{J}$). Des trois configurations, seules les configurations à électrode en ligne sur la surface ventriculaire ont permis l'arrêt de la fibrillation aux niveaux d'énergie $< 0.1\text{J}$ (Fig C). Il a été conclu que stimulation tissulaire de basse énergie avec électrodes en ligne stoppe effectivement la fibrillation ventriculaire, ce qui ouvre ainsi la voie à une thérapie sans douleur et moins nocive que les thérapies traditionnelles de défibrillation. Les résultats obtenus ont nécessité plus de trois millions d'inconnues, entre 48 et 96 processeurs, 24 heures de temps calcul par simulation, une soixantaine de simulations.



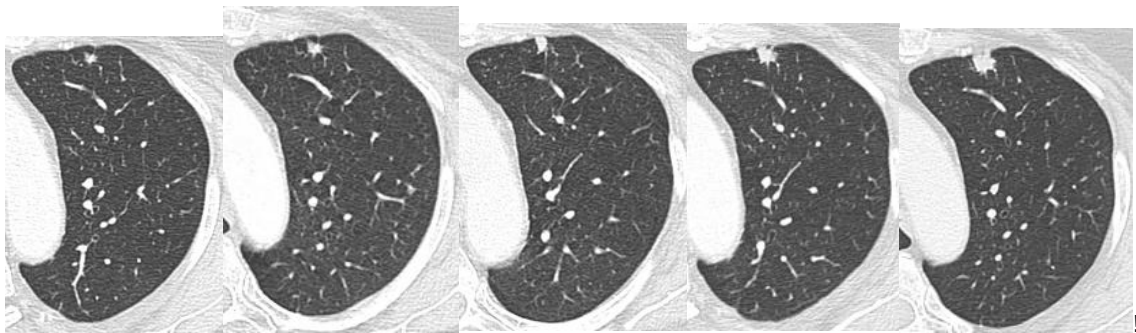
Simulation de différents types de stimulation électrique des tissus cardiaques

Publication choisie :

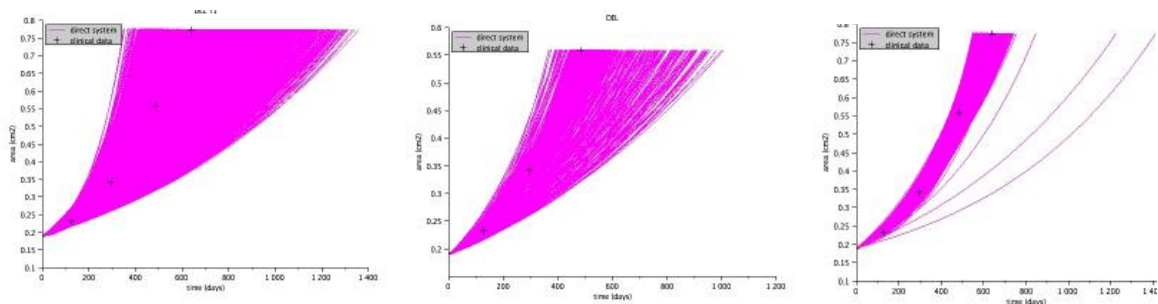
J.D. Bayer, F. Vaddakkumpadan, E.J. Vigmond. Terminating ventricular fibrillation in the human ventricles with wide-area low-energy tissue stimulation. Heart Rhythm. Vol. 11, No. 5, pp. 5, 2014.

Estimation de la croissance de tumeurs cancéreuses par modélisation et simulation numérique (équipe Calcul Scientifique et Modélisation de l'IMB et équipe INRIA MC2) :

L'équipe MC2 équipe commune INRIA-IMB développe des méthodes pour l'estimation de la croissance de tumeurs. En collaboration avec les médecins de l'Institut Bergonié et du CHU de Bordeaux, nous mettons au point un système d'équations aux dérivées partielles pour la description de cette tumeur. Nous vérifions que ce système est bien capable de rendre compte des différents comportements observés en clinique grâce aux outils d'imagerie (CT-scan, MRI, PET). L'étape suivante est d'effectuer une prévision personnalisée. Pour cela, il faut paramétrer le système précédent pour chaque patient. Cette calibration se fait en résolvant un problème inverse qui utilise comme donnée une série temporelle de plusieurs images. Une fois le modèle paramétré, il devient possible de faire une prévision pour le patient. Nous avons testé cette approche sur des tumeurs primitives variées, initialement traitées ou non, qui métastasent aux poumons. Chaque cas représente plusieurs milliers de calcul pour un coût cpu de une à deux heures sur 12 cœurs.



Simulations using (t_0, t_1) , (t_0, t_1, t_2) and (t_0, t_1, t_2, t_3) to predict t_4 .



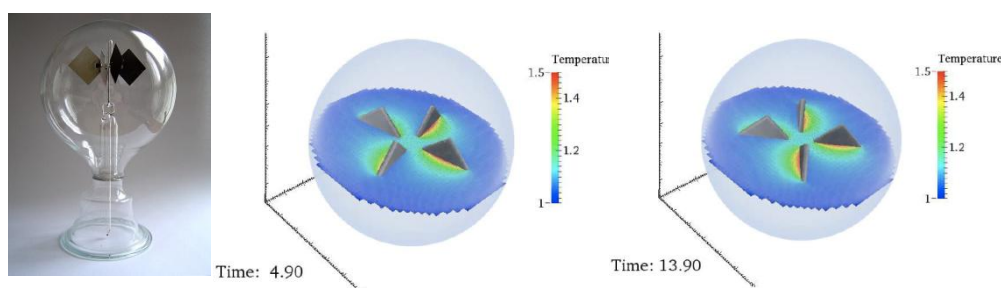
Haut : evolution en temps d'une métastase au poumon à 5 temps $t_0, t_1, t_2, t_3, t_4, t_5$. Bas : Simulation du volume de la lésion en fonction du temps en utilisant respectivement (t_0, t_1) , (t_0, t_1, t_2) , (t_0, t_1, t_2, t_3) pour prédire la situation en t_4 . Les croix noires représentent la mesure sur l'image. On voit que la prédiction s'améliore si l'on utilise plus de données.

Publication choisie :

F. Cornelis, O. Saut, P. Cumsille, D. Lombardi, A. Iollo, J. Palussiere, T. Colin, In vivo mathematical modeling of tumor growth from imaging data : soon to come in the future ? Diagnostic and Interventional Imaging, Vol 94, Issue 6, Pages 571-574 (June 2013).

Simulation numérique du radiomètre de Crookes (équipe Calcul Scientifique et Modélisation de l'IMB / équipe INRIA Bacchus)

Le radiomètre de Crookes consiste en un moulin à 4 pales enfermé dans une cloche de verre et baigné dans un gaz à basse pression. Chaque pale a une face noire et une face argentée. Lorsque le radiomètre est exposé à la lumière, le moulin se met à tourner : ce mouvement est dû au déplacement du gaz le long des parois des pales, lui-même induit par la différence de température entre les deux faces des pales. Cet étrange phénomène ne se produit que quand le gaz est suffisamment raréfié. Une méthode numérique et un code de calcul développés dans l'équipe (G. Dechristé, L. Mieussens) ont permis d'obtenir la première simulation 3D d'un tel radiomètre (voir figure 3). Ces calculs sont basés sur l'approximation numérique de l'équation de Boltzmann, ce qui demande des ressources en temps calcul très importantes. La simulation présentée ci-dessous a nécessité 128 cœurs et 2h de temps utilisateur



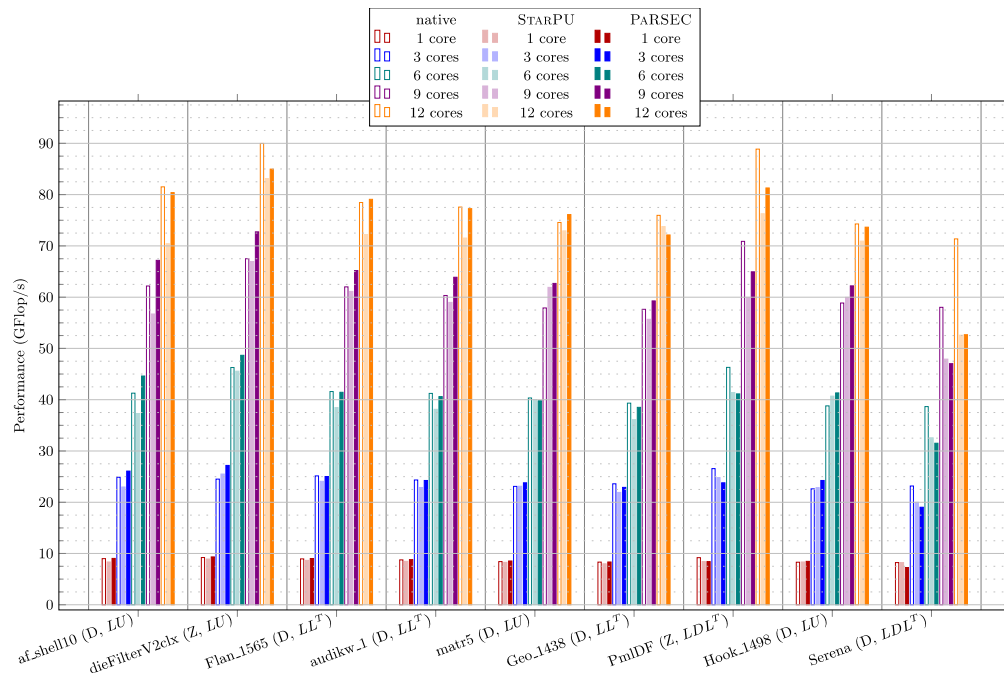
Gauche : radiomètre de Crookes, droite : deux simulations à deux temps différents

Publication choisie :

G. Dechristé, L. Mieussens, An adaptively refined Cartesian cut-cell method for the Boltzmann kinetic equation, AIP Conf. Proc. , 29th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, à paraître.

Développement d'un solveur en algèbre linéaire creuse pour des architectures hétérogènes (équipe Satanas du LaBRI / équipe INRIA HiePACS)

Dans de nombreuses simulations numériques, l'étape la plus consommatrice en ressources (CPU et mémoire) est la résolution de systèmes linéaires creux de très grande taille. En plus de la difficulté numérique inhérente à certains modèles physiques employés, l'augmentation de la taille des systèmes linéaires conduit même les méthodes réputées scalables, telles que les méthodes itératives classiques, à ne plus converger de manière efficace. De nombreuses avancées ont été proposées pour améliorer la scalabilité des méthodes directes. Par exemple, le solveur PaStiX (<https://gforge.inria.fr/projects/pastix/>) intègre une gestion fine et efficace des multiples niveaux de parallélisme exploitables. Les nouvelles architectures de calcul intensif intègrent de plus en plus de microprocesseurs qui eux-mêmes intègrent un nombre croissant de cœurs de calcul. Cette multiplication des unités de calcul dans les architectures a fait apparaître des topologies fortement hiérarchiques (NUMA) et des techniques d'ordonnancement dynamique ont été adaptés pour exploiter au mieux les architectures multicœurs et la mémoire partagée. L'écriture générique du schéma de résolution, sous la forme d'un graphe de tâches, permet de disposer d'une plateforme efficace pour concevoir et développer des ordonnancements pour des architectures encore plus hétérogènes, comme celles qui mixent CPUs et GPGPUs.



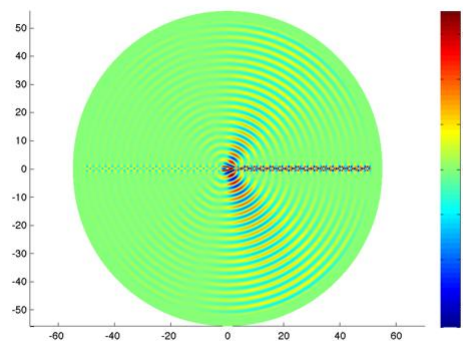
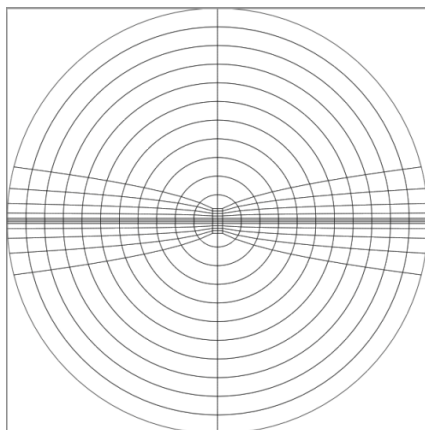
Performances du solveur PaStiX sur plusieurs matrices (> 1 million d'inconnues) sur un nœud de 12 cœurs, en utilisant 2 supports d'exécution différents (StarPU et PaRSEC) ou un support interne.

Publication choisie :

Lacoste, Xavier and Faverge, Mathieu and Ramet, Pierre and Thibault, Samuel and Bosilca, George , Taking advantage of hybrid systems for sparse direct solvers via task-based runtimes, HCW'2014 workshop of IPDPS, Phoenix, USA, 2014.

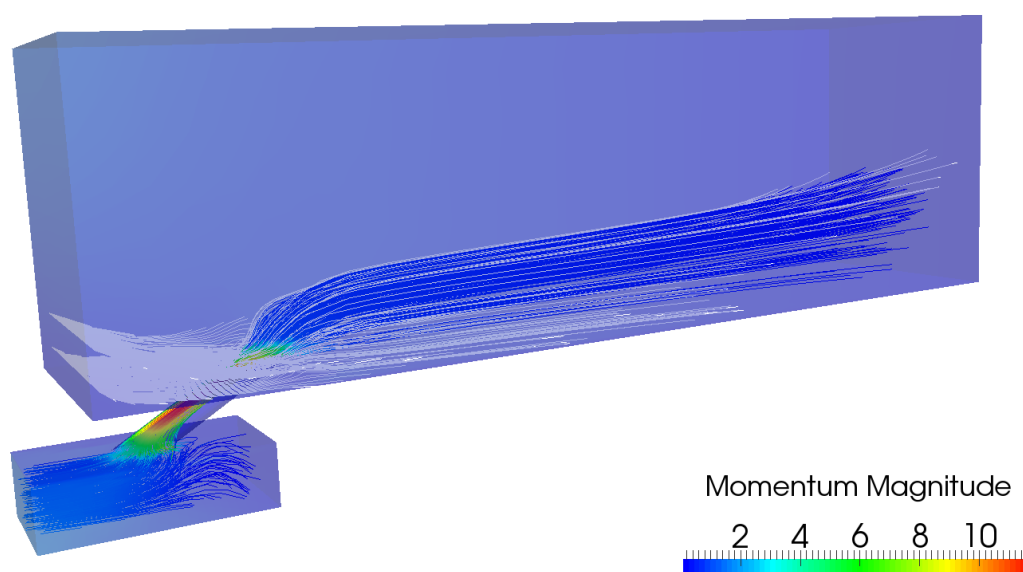
Etude du comportement asymptotique des solutions du problème de Helmholtz en milieu stratifié (équipe Calcul Scientifique du LMA de l'UPPA / équipe INRIA Magique3D)

L'objectif de ce travail collaboratif entre Magique 3D et le groupe de recherche Junior MATHEON de Kersten Schmidt, Université technique de Berlin, est de valider numériquement le comportement asymptotique théorique pour les solutions des équations de Helmholtz et Maxwell en milieux infinis stratifiés. Une première étape est d'utiliser des Perfectly Matched Layers (PML) sur un domaine constitué de deux demi-cercles entourant une couche médiane constante par morceaux, et d'intégrer le problème dans le contexte des éléments finis h-p adaptatifs. Des modes guidés peuvent exister dans la couche médiane, et modifient le comportement à l'infini de la solution au voisinage de la couche. Les comportements théoriques se retrouvent numériquement pourvu que le domaine soit assez grand et la précision assez bonne, ce qui requiert des moyens de calculs conséquents. Une seconde étape sera de proposer des conditions aux limites pour les milieux stratifiés, ce qui devrait significativement réduire le coût de calcul et améliorer la précision.



Simulation d'un jet en écoulement traversier avec la bibliothèque Aerosol (équipe Calcul Scientifique et Modélisation de l'IMB / équipe INRIA Cagire)

Le jet en écoulement traversier est un écoulement que l'on rencontre dans le processus de refroidissement par effusion, utilisé pour le refroidissement des parois de chambres de combustion aéronautiques. La différence de pression entre les deux écoulements, celui du haut et celui du bas, induit une aspiration de l'écoulement du bas vers celui du haut à travers la perforation. Ceci induit un jet d'air froid, qui permet d'isoler la paroi basse de l'écoulement (chaud) du haut. Le calcul a été effectué avec 60000 degrés de liberté sur 12 coeurs, avec maillage hybride. La bibliothèque Aerosol est une bibliothèque d'éléments finis d'ordre élevé, continus et discontinus en maillages hybrides et curvilignes. Elle est développée conjointement par les équipes INRIA Bacchus et Cagire.



Visualisation des lignes de courant de l'écoulement du bas, coloriés par la norme de la quantité de mouvement, et des lignes de courant de l'écoulement du haut en couleur neutre.

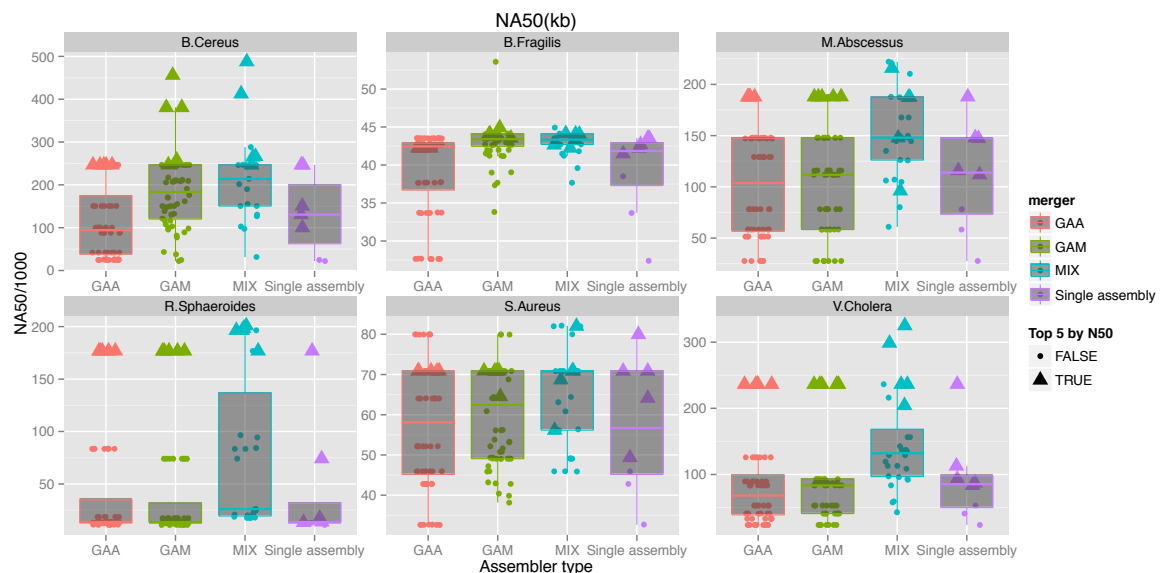
Calculs sur des données issues de nouvelle génération de séquençage (CBiB).

Le CBiB réalise plusieurs traitements dont, l'assemblage et le finishing de génomes, l'alignement de séquences sur un génome de référence, la recherche de single-nucleotide polymorphisms (SNP). La métagénomique comprend la détection de chimères et l'assignation taxonomique de reads de séquençage. Par ailleurs, au travers de l'initiative de fédération de stockage sur la Région Aquitaine, le CBiB complète la solution en fournissant des équipements, des moyens humains et en hébergeant des serveurs (solution iRODS).

- ANR « Biominés » en collaboration avec IFPEN : Le projet ANR Biominés vise à identifier des nouveaux micro-organismes et enzymes pour un schéma de procédé "Consolidated Bioprocessing" (CBP). Dans cette configuration, un seul organisme est employé pour l'hydrolyse de la biomasse lignocellulosique et la fermentation des sucres libérés. Pour cela, des enrichissements de microflore issues de compost ont été réalisés sur différents substrats lignocellulosiques. Les meilleures cultures en terme de production de CO₂ et d'enrichissement de la microflore initiale ont été sélectionnées pour un séquençage haut-débit de l'ADN métagénomique, ainsi que pour la production de banques métagénomiques qui sont soumises à un criblage fonctionnel. Une des cultures sera également analysée au niveau du transcriptome par RNA-seq. Dans ce projet nous avons utilisé les Avakas pour (1) évaluer la performance des assembleurs de

métagénomiques et (2) à comparer les contigs ainsi obtenus aux séquences protéiques contenues dans les bases publiques. Ces résultats sont en cours de publication.

- ANR « MYCxCxGENE » : le sujet de ce projet porte sur les transferts horizontaux entre mycoplasmes. Suite à des croisements expérimentaux entre différentes souches connues, plusieurs souches hybrides sont disponibles. Ces souches ont été séquencées et l'objectif est de déterminer les parties de génomes qui ont été transférées ainsi que les remaniements qui ont pu avoir lieu. Le CBiB a ainsi pour mission d'assembler deux génomes de mycoplasmes et d'analyser les régions transférées lors du croisement. Bien que le génome des mycoplasmes soit de relativement petit, leur séquençage étant réalisé avec une couverture très importante (1000X), leurs assemblages nécessitent beaucoup de mémoire. De plus, pour certains assembleurs, il est nécessaire de réaliser plusieurs fois le même assemblage en faisant varier un paramètre pour trouver sa meilleure valeur. L'utilisation d'Avakas nous permet de lancer toutes ces exécutions simultanément et d'avoir des résultats dans des temps plus que raisonnables, là où une exécution séquentielle prendrait un temps considérable. Par ailleurs, nous avons pu développer une nouvelle méthode Mix qui permet de combiner de façon avantageuse ces différents assemblages. L'algorithme est basé sur la recherche de chemins les plus longs dans un graphe et nécessite des ressources de calculs considérables. Les génomes ainsi assemblés ont été soumis dans des banques de données publiques.



Evaluation de qualité de combinaison d'assemblages réalisés par Mix comparés avec GAA, GAM et absence de combinaison (Single assembly). La qualité est évaluée pour le jeu de données GAGE-B et elle est mesurée en se basant sur la valeur NA50.

Publications :

D. Alonso-Aleman, A. Barre, S. Beretta, P. Bonizzoni, M. Nikolski, and G. Valiente. Further steps in TANGO: improved taxonomic assignment in metagenomics. Bioinformatics, 2013.

H. Soueidan, F. Maurier, A. Groppi, P. Sirand-Pugnet, F. Tardy, C. Citti, V. Dupuy and M. Nikolski, Finishing bacterial genome assemblies with Mix, BMC Bioinformatics 2013, 14(Suppl 15):S16

L. Manso-Silvan, F. Tardy, E. Baranowski, A. Barre, A. Blanchard, M. Breton, C. Cou- ture, C. Citti, E. Dordet-Frisoni, V. Dupuy, P. Gaurivaud, D. Jacob, C. Lemaitre, M. Nikolski, L.X. Nouvel, F. Poumarat, P. Thbault, S. Theil, F. Thiaucourt, and P. Sirand- Pugnet. Draft genome sequences of mycoplasma alkalescens, mycoplasma arginini, and mycoplasma bovigenitalium, three species with equivocal pathogenic status for cattle. Genome Announcements, 2013.

E. Dordet-Frisoni, E. Baranowski, A. Barr, A. Blanchard, M. Breton, C. Couture, V. Dupuy, P. Gaurivaud, D. Jacob, C. Lemaitre, L. Manso-Silvn, M. Nikolski, LX. Nou- vel, F. Poumarat, P. Sirand-Pugnet, P. Thbault, S. Theil, F. Thiaucourt, C. Citti, and F. Tardy. Draft genome sequences of *Mycoplasma auris* and *Mycoplasma yeatsii*, two species of the ear canal of Caprinae. *Genome Announcements*, 1 (3), 2013.

V. Dupuy, P. Sirand-Pugnet, E. Baranowski, A. Barr, M. Breton, C. Couture, E. Dordet- Frisoni, P. Gaurivaud, D. Jacob, C. Lemaitre, L. Manso-Silvn, M. Nikolski, LX. Nouvel, F. Poumarat, F. Tardy, P. Thbault, S. Theil, C. Citti, A. Blanchard, and F. Thiaucourt. Complete genome sequence of *Mycoplasma putrefaciens* strain 9231, one of the agents of contagious Agalactia in goats. *Genome Announcements*, 1 (3), 2013.

3.15 Observatoire Aquitain des Sciences de l'Univers

Composante de l'Université de Bordeaux – OSU du CNRS

Département Sciences et Technologies

UMS 2567 – EPOC UMR 5805 – LAB UMR 5804 - Université de Bordeaux/ CNRS

<http://www.oasu.u-bordeaux1.fr/>

Correspondants : Vincent Marieu (vincent.marieu@u-bordeaux.fr)

Sylvie Rousseau (sylvie.rousseau@u-bordeaux.fr)

L'Observatoire Aquitain des Sciences de l'Univers est une école interne à statut dérogatoire "article L713-9" qui regroupe des services communs et plusieurs unités de recherche :

- Une Unité Mixte de Service (UMS 2567 CNRS – Université de Bordeaux), qui héberge les services communs de l'OASU.
- Le Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux (LAB) : UMR 5804 CNRS - Université de Bordeaux).
- Le laboratoire Environnements et Paléoenvironnements Océaniques et Continentaux (EPOC) : UMR 5805 CNRS - Université de Bordeaux).

ainsi que sept autres unités ou équipes associées par convention avec l'OASU :

- Le laboratoire ISPA (Interaction Sol Plante Atmosphère) : UMR 1391 INRA - BSA.
- L'équipe de recherche G&E (Géoressources et Environnement) 4592 de l'ENSEGID Institut Polytechnique de Bordeaux - Université Bordeaux Montaigne.
- L'équipe IVS (Interactions Vagues Structures) : EA 4581 SIAME, MIRA, Univ. de Pau et des Pays de l'Adour.
- L'équipe PPP (Préhistoire, Paléoenvironnements, Patrimoine) de PACEA UMR 5199 CNRS – Université de Bordeaux).
- L'équipe R&E (Radioactivité et Environnement) du CENBG (UMR 5797 CNRS - Université de Bordeaux).
- L'équipe CEMT (Caractérisation Electromagnétique des Matériaux et Télédétection) de l'IMS (UMR 5218 CNRS - Université de Bordeaux).
- L'équipe ISOE du Département Génie Civil Environnement de l'I2M (UMR 5295 CNRS – Université de Bordeaux - IPB – Arts et Métiers ParisTech).

L'Observatoire Aquitain des Sciences de l'Univers regroupe dans son périmètre élargi environ 300 chercheurs et/ou enseignants-chercheurs permanents et/ou personnels techniques ou administratifs, et environ 200 doctorants, post-doctorants et CDD répartis sur six sites : le site de Floirac (LAB et UMS OASU), le campus de Talence (EPOC, CEMT, PPP, G&E, ISOE), la station marine d'Arcachon (EPOC), le site INRA de Villenave d'Ornon (ISPA), le site UB de Gradignan (R&E) et le site d'Anglet-UPPA (IVS).

Les thèmes de recherche abordés au sein de l'OASU vont de la structure des galaxies et des planètes, aux processus biogéochimiques dans les fleuves, lagunes et à l'interface eau-sédiment, en passant par l'hydrodynamique côtière, la pollution de l'atmosphère et

de l'eau, les surfaces continentales, la télédétection, la genèse des corps sédimentaires océaniques ou encore la variabilité haute fréquence des climats passés et la préhistoire.

Au laboratoire EPOC « **Environnements et Paléoenvironnements Océaniques et Continentaux** », les recherches sont déclinées en trois grands axes thématiques : Ecotoxicologie, Océanographie côtière et Géosciences marines, au sein desquels se répartissent sept équipes thématiques.

Transferts Géochimiques des Métaux à l'interface continent-océan (TGM) : L'équipe TGM focalise ses activités de recherches sur la compréhension des cycles des éléments traces métalliques dans les environnements aquatiques de la surface terrestre.

Physico et Toxico Chimie de l'environnement : L'équipe LPTC développe des méthodes et des protocoles d'analyses permettant l'accès aux molécules et espèces chimiques ainsi qu'aux cycles biogéochimiques des substances chimiques dans les différents compartiments de l'environnement (eaux, sédiments, sols, organismes). D'autre part, l'équipe étudie les mécanismes biochimiques de réponse des organismes à la présence de contaminants dans l'environnement.

Ecotoxicologie Aquatique: L'équipe EA étudie l'impact des métaux traces dans les milieux aquatiques et les organismes associés.

Ecologie et Biogéochimie des Systèmes Côtiers: Les recherches de l'équipe ECOBIOC sont centrées sur la structuration du vivant ainsi qu'à son rôle dans le fonctionnement des écosystèmes côtiers. La connaissance du fonctionnement de ces écosystèmes est appréhendée par la prise en considération du couplage entre sels nutritifs, matière organique et organismes.

Modélisation Expérimentale et Télédétection en Hydrodynamique Sédimentaire: Les recherches de l'équipe METHYS visent à mieux comprendre et modéliser les phénomènes hydrodynamiques et sédimentaires côtiers et plus particulièrement ceux concernant les environnements littoraux que sont les plages sableuses et les systèmes lagunaires et estuariens.

Paléoclimats: L'équipe PALEO étudie la dynamique passée du climat à l'échelle du Quaternaire et du Néogène et à toutes les latitudes par l'analyse des archives naturelles marines et terrestres.

Sédimentologie: L'équipe Sédimentologie a pour thème général de recherche l'enregistrement des processus de dépôts et de construction des corps et des systèmes sédimentaires dans les environnements marins et de transition.

Le **Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux** regroupe des équipes de recherche organisées autour de quatre grandes thématiques :

Astrochimie Moléculaire et ORigines des systèmes planétaires : L'équipe AMOR étudie les régions où se forment les planètes à partir d'observations du gaz et de la poussière gravitant autour des étoiles en formation et de leur modélisation spécifique, en particulier en astro-chimie.

Galaxies, Formation stellaire, Physique des disques et modélisation : Les thèmes de recherche de l'équipe *Formation stellaire* concernent l'observation et l'étude de la structure des galaxies afin de mieux comprendre et modéliser leur évolution, la

caractérisation des premières phases de formation stellaire avec l'étude de la structure chimique, physique et dynamique des étoiles massives et de type solaire, le développement et l'utilisation de modèles et d'outils numériques permettant de caractériser les propriétés des disques.

Les systèmes de référence, Cinématique de la Galaxie, Objets du système solaire : L'équipe M2A mène des recherches à la frontière de l'astrométrie et de l'astrophysique sur le thème général de la Métrologie de l'espace. Elle s'intéresse principalement à la réalisation du système de référence extragalactique (ICRF) et à la cinématique des étoiles de la Galaxie tout en abordant les questions astrophysiques sous-jacentes (évolution de la Galaxie) ou la physique des objets eux-mêmes (morphologie des quasars, composition chimique des étoiles). Des travaux liés à l'astrodynamique du système solaire sont également développés.

Atmosphères des planètes du système solaire et des exoplanètes : L'activité de recherche de l'équipe SSE est centrée sur l'étude des atmosphères et des surfaces planétaires via l'observation et la modélisation. Le groupe est impliqué dans des missions spatiales d'exploration de Mars et de Titan, l'étude de l'origine de la vie sur Terre et sa distribution dans l'Univers. L'équipe participe activement à l'enseignement de l'astrophysique, de la physique et des outils de modélisation à l'Université Bordeaux 1 et assure la valorisation des avancées en Astrophysique et Exobiologie auprès du grand public.

Projets scientifiques liés au HPC

Plusieurs projets de recherche sont concernés par le HPC et nécessitent en plus des moyens mis à disposition au sein de l'OASU et par le GENCI/CINES, l'utilisation des ressources disponibles au MCIA, tant sur le plan matériel que sur le plan du support technique offert par les ingénieurs du MCIA.

Nous pouvons ainsi citer les principaux travaux réalisés grâce aux ressources du MCIA:

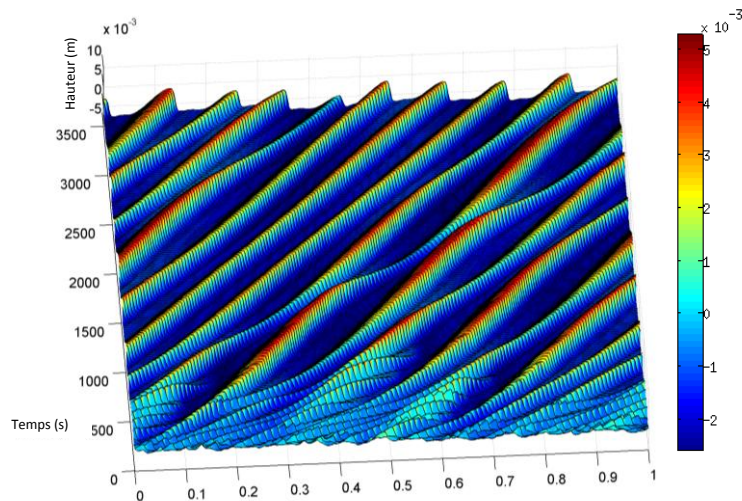
3.15.1 UMR 5805 EPOC CNRS/Université de Bordeaux

Actuellement au sein de l'UMR EPOC, deux projets principaux font appel aux moyens de calculs mis à disposition par le MCIA. Ces projets sont actuellement en cours et devraient déboucher sur des publications dans les 2 années à venir.

1. Simulation de la dynamique des dunes sous-marines.

Ce projet est porté par Philippe Bonneton, dans le cadre de la thèse d'Arnaud Doré financé par le Service Hydrographique et Océanographique de la Marine (SHOM). Les dunes sous-marines sont des formes sédimentaires très fréquentes en milieu côtier et littoral, leur taille pouvant aller de quelques centimètres à une centaine de mètres. Elles sont formées par les courants marins et rétroagissent sur ceux-ci. Leur présence a de fortes conséquences sur la circulation côtière, de plus leur développement et migration a un fort impact sur la sécurité de la navigation. L'objectif de ce travail est d'utiliser la simulation numérique pour améliorer les connaissances des processus régissant l'évolution des dunes sous-marines. Un modèle 2D

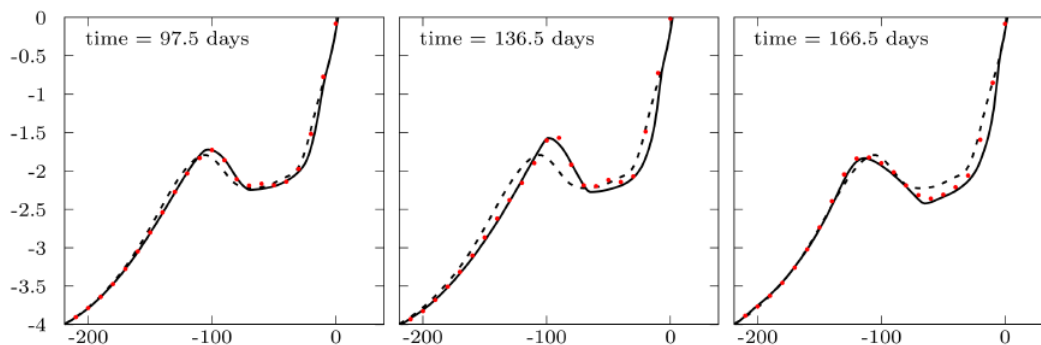
vertical est utilisé, couplant hydrodynamique par les équations de Reynolds, transport sédimentaire par charriage et advection/diffusion, et morphodynamique par la résolution de l'équation d'Exner. Du fait de la rétroaction de la morphologie des dunes sur l'hydrodynamique, ce modèle est extrêmement couteux en temps de calcul si l'on veut étudier la croissance de dunes jusqu'à saturation. Actuellement, le modèle est utilisé sur peu de cœurs, avec des temps de calcul extrêmement longs.



Evolution temporelle d'un fond faiblement perturbé vers une structures de dunes régulières.

2. Optimisation d'un modèle de profil de plage

Ce projet est réalisé par Benjamin Dubarbier dont le doctorat est financé par le projet ANR BARBEC porté par Bruno Castelle. Ce projet ANR concerne la morphodynamique des plages sableuses, en particulier dans la zone de surf régie par la dynamique des barres sableuses pré-littorales. Jusqu'à présent, les processus permettant la croissance des barres sableuses et leur tridimensionnalisation lors des séquences de vagues peu énergétiques étaient bien reproduits mais les modèles n'étaient pas capables de simuler le raidissement et la migration vers le large des barres sous l'action des vagues de tempête. L'objectif de la thèse est d'améliorer la modélisation des processus cross-shore en zone de surf, de manière à simuler la migration des barres sous toutes les conditions. Une nouvelle paramétrisation du transport sédimentaire a été mise en place et pour ce faire, le cluster Avakas a été utilisé afin de trouver les coefficients permettant d'optimiser les résultats de simulations sur des cas réels. Une recherche des paramètres optimaux a été réalisée par la méthode du recuit simulé. Il s'agit d'une méthode d'optimisation non-linéaire très couteuse en temps de calcul, ici chaque itération étant une simulation morphodynamique complète. Le cluster MCIA a permis d'obtenir des très bons résultats qui sont actuellement en cours de publication.

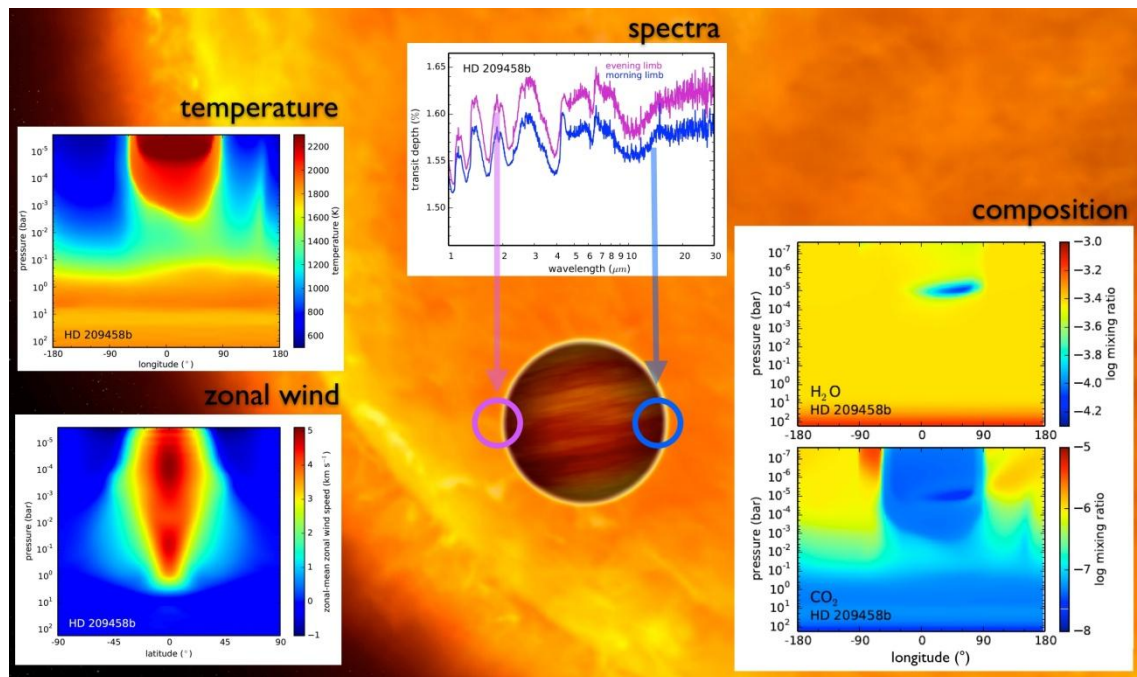


Evolution temporelle du profil de plage mesuré (points rouges) et simulé (trait continu) durant l'expérience Duck94. Le profil de plage initial est représenté par le trait pointillé.

3.15.2 UMR 5804 LAB CNRS/Université de Bordeaux

Au sein de l'équipe SSE, la mise à disposition de moyen HPC par le MCIA a permis d'une part de mener à bien les travaux de modélisation des atmosphères d'exoplanètes financés par une ERC et d'autre part de réaliser des travaux de thèse.

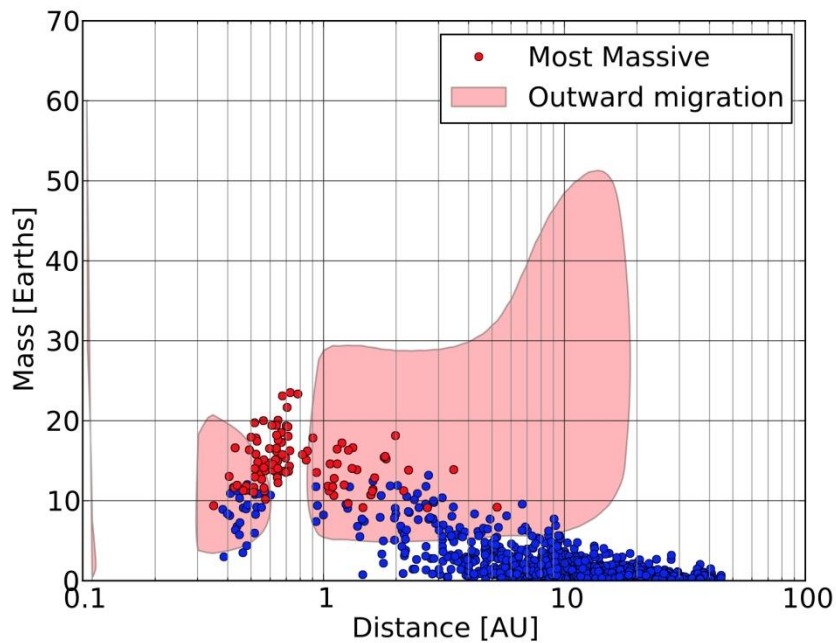
La modélisation des atmosphères d'exoplanètes nécessite de grandes capacités de calcul non disponibles au LAB, et l'équipe a utilisé les ressources mises à disposition par le MCIA (cluster Avakas). L'utilisation d'Avakas a permis d'étudier de façon théorique la composition chimique et les spectres de Jupiters chauds (des exoplanètes de la taille de Jupiter mais très proches de leur étoile). Ce travail, mené par Marcelino Agundez, a été financé par la starting grant ERC 209622 (E3ARTHS, PI: F. Selsis).



Simulations de l'atmosphère du Jupiter Chaud HD209458b et de ses signatures spectroscopiques.

Dans le cadre d'une thèse avec une bourse région, les travaux de C. Cossou sur des simulations N-corps avait pour but d'étudier *la dynamique planétaire*, et en particulier la formation et les interactions entre des planètes en formation et un disque protoplanétaire:

Il construit et teste le code dans des cas isolés sur un serveur AMD 48 coeurs du Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux, puis, pour faire des statistiques de population planétaire, nécessitant beaucoup plus de temps de calcul, il utilise Avakas, ce qui lui permet de générer et d'étudier plusieurs centaines de systèmes planétaires aux propriétés statistiques initiales aléatoires. L'illustration représente les résultats typiques obtenus. Le disque de gaz a une influence sur les positions des planètes. En effectuant une centaine de simulations, on peut observer les effets statistiques, et lisser les effets stochastiques



Positions finales de toutes les planètes de 100 systèmes planétaires ayant évolué pendant 100 millions d'années dans un disque de gaz

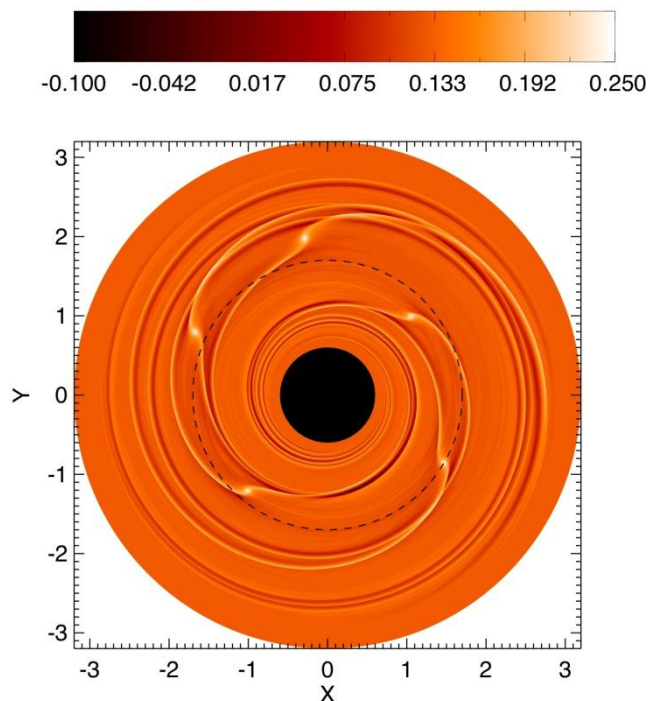
Au sein de l'équipe Formation stellaire, deux projets portés par A. Pierens donnant lieu à des publications dans des revues de rang A ont pu être menés à bien en 2013. Un article soumis et un autre en cours d'écriture présentent les résultats de simulations hydrodynamiques effectuées sur la machine AVAKAS.

1. Formation des cœurs de planètes aux zones de convergence. (article paru dans la revue A&A, Pierens et al. 2013)

Le but de ce projet est l'étude de la dynamique de planètes de faible masse dans un disque radiatif, et situées au voisinage d'une zone de convergence. A l'intérieur de la zone de convergence, ces protoplanètes migrent vers l'extérieur due à l'interaction avec le disque, et vers l'intérieur lorsqu'elles sont situées au-delà. Pour cette raison, les zones de convergence sont généralement considérées comme des endroits privilégiés pour la formation de cœurs de planètes géantes par migration convergente puis collisions entre corps de faible masse. Dans un article paru dans la revue A&A (Pierens et al. 2013), nous avons présenté les résultats de simulations hydrodynamiques et de calculs N-corps de ce processus, effectuées pour moitié sur AVAKAS et pour l'autre moitié sur la machine JADE du CINES. Un exemple de simulation hydrodynamique réalisée sur AVAKAS est présentée à la figure 1. Ici, la zone de convergence est représentée par le cercle noir et l'effet de la turbulence du disque est prise en compte. Nous avons montré dans cet article que la formation de planètes géantes est effectivement possible aux zones de convergence, en particulier lorsque l'amplitude de la turbulence est suffisamment élevée pour casser les résonances qui s'établissent entre protoplanètes. 40 % des simulations N-corps que nous avons réalisées conduisent en effet à la formation de cœurs de planètes géantes de plus de 10 masses terrestres, suffisamment massifs pour accréter une enveloppe massive de gaz.

2. Destruction des résonances coorbitales lors de la migration dans un disque de gaz. (article soumis à la revue MNRAS, Pierens & Raymond 2014)

Ce projet concerne l'étude de l'évolution et de la stabilité des planètes coorbitales, situées sur une même orbite mais séparées azimuthalement d'un angle de 60° . Les modèles de formation planétaire prédisent généralement l'existence de telles planètes et de nombreuses études se sont attachées aux possibilités de leur détection par transit. Cependant, aucun système coorbital n'a été découvert à ce jour. Dans un article soumis à la revue MNRAS (Pierens & Raymond 2014), nous présentons les résultats de simulations effectuées sur AVAKAS de l'évolution de systèmes coorbitaux et montrons que de tels systèmes composés de deux planètes pouvant ouvrir un sillon dans le disque sont dynamiquement instables. L'instabilité se produit lorsque le sillon commun aux deux planètes devient non axi-symétrique, avec la partie située entre les deux planètes devenant beaucoup moins dense que le reste du disque. La conséquence est que le couple exercé par le disque et ressenti par chaque planète est de signe opposé, engendrant une migration divergente entre ces planètes. Nous montrons dans cet article qu'un tel mécanisme peut détruire les résonances coorbitales entre deux planètes de la masse de Saturne dans les régions externes des disques, et entre deux planètes de quelques masses terrestres dans les parties les plus internes, là où la hauteur du disque est plus faible et donc où un sillon peut s'ouvrir plus facilement.



Exemple d'une simulation de planètes immergées dans un disque radiatif et migrant vers une zone de convergence.

Publications:

Agúndez, M.; Venot, O.; Iro, N.; Selsis, F.; Hersant, F.; Hebrard, E.; Dobrijevic, M.; The impact of atmospheric circulation on the chemistry of the hot Jupiter HD209458b; A&A 2012

Agúndez, Marcelino; Venot, Olivia; Selsis, Franck; Iro, Nicolas; The Puzzling Chemical Composition of GJ 436b's Atmosphere: Influence of Tidal Heating on the Chemistry; Astrophysical Journal 2014

Venot, Olivia; Agúndez, Marcelino; Selsis, Franck; Tessenyi, Marcell; Iro, Nicolas; The atmospheric chemistry of the warm Neptune GJ 3470b: Influence of metallicity and temperature on the CH₄/CO ratio; A&A 2014.

Agúndez, M., Parmentier, V., Venot, O., Hersant, F., Selsis, F.; Pseudo 2D chemical model of hot Jupiter atmospheres: application to HD 209458b and HD 189733b; A&A 2014.

Cossou, raymond, pierens, Making systems of Super Earths by inward migration of planetary embryos, IUA symposium proceedings.

Cossou, C.; Raymond, S. N.; Pierens, A. - Convergence zones for Type I migration: an inward shift for multiple planet systems - A&A 2013.

Pierens,A. ; Baruteau, C; Hersant, F. , "Protoplanetary migration in non-isothermal discs with turbulence driven by stochastic forcing", Royal Astronomical Society (MNRAS) 2012.

Pierens, Arnaud; Nelson, Richard P.- Migration and gas accretion scenarios for the Kepler 16, 34 and 35 circumbinary planets - A&A 2013.

3.16 Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur Appliquées à la Mécanique et au génie Electrique

SIAME : Fédération de recherche CNRS IPRA FR 2952

[http:// siame.univ-pau.fr/live/](http://siame.univ-pau.fr/live/)

Correspondant : Stéphanie Delage Santacreu (stephanie.delage@univ-pau.fr)

Le Laboratoire SIAME a été habilité en janvier 2011. Il regroupe des enseignants chercheurs issus de trois unités de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour :

- Le Laboratoire des Sciences Appliqués au Génie Civil et au Génie Côtier (LaSAGeC) (JE 2519),
- Le Laboratoire de Génie Électrique (LGE) (EA 3001),
- Le Laboratoire de Thermique Énergétique et Procédés (LaTEP) (EA 1932), dont 9 EC ont rejoint le SIAME.

Il fait également partie de la fédération IPRA FR CNRS 2952 (Institut Pluridisciplinaire de Recherche Appliquée dans le domaine du Génie Pétrolier). Le laboratoire est composé de deux équipes de recherches "Mécanique" et "Génie Électrique".

Nombres de chercheurs/étudiants concernés

Personnels permanents : 3 (1 MC, 2 MC HDR)

Etudiants : 2 (doctorants, ater, post-doctorants).

Moyens de calcul

Le SIAME dispose de 6 nœuds de calcul intégrés dans le cluster de calcul de l'UPPA. Comme pour l'ensemble du cluster de calcul de l'UPPA, l'administration de ces nœuds est volontairement réalisée selon un modèle similaire au cluster Avakas (utilisation des modules d'environnement par exemple). Cette gestion permet aux chercheurs du LFC-R de passer facilement des moyens de calcul locaux aux moyens de calcul régionaux (cluster Avakas du MCIA).

Description des principaux axes de recherche

Les principaux thèmes de recherche du laboratoire portent sur :

- L'aérodynamique et les écoulements de fluides compressibles: Transferts associés aux écoulements turbulents, modélisation numérique du mélange et du transport turbulent, transport de particules dans des écoulements réactifs turbulents.
- L'étude expérimentale ou numérique des écoulements et des transferts au sein de fluides incompressibles avec ou sans changement de phase.
- Les interactions vagues-structures, génie côtier.
- La sûreté des ouvrages (résistance au feu, fissuration et perméabilité des ouvrages dont nucléaires).
- La haute tension impulsionnelle.
- La modélisation et l'étude expérimentale des décharges électriques à pression atmosphérique et des phénomènes d'interaction entre décharges électriques et matériaux à propriétés diélectriques.

Projets en cours

Les projets suivants ont été réalisés avec les moyens de calcul du MCIA.

Effets thermocapillaires sur la convection mixte en canal ouvert

Personnes impliquées: L. Bammou (SIAME), S. Blancher (SIAME), K. El Omari (SIAME), Y. Leguer (SIAME)

Publications choisies:

[1] *Thèse de Lahcen Bammou, soutenue en décembre 2012. Cotutelle entre UPPA et les université' de Marrakech et d'Agadir. Programme Hubert Curien Volubilis 2009-2012*

[2] *Bammou L., Blancher S., Le Guer Y., El Omari K., Benhamou B. Poiseuille-Rayleigh-Benard-Marangoni flow in a horizontal infinite liquid film, Int. Comm. In Heat and Mass Transfer, 54, pp. 126-131, 2014.*

[3] *Bammou L., El Omari K., Le Guer Y., Blancher S., Benhamou B., Mediouni T., Numerical study of longitudinal thermoconvectives rolls in mixed convection flow in a horizontal channel with free surface, Int. J. of Heat and Fluid Flow, 42, pp. 265-277, 2013.*

Communications internationales et nationales avec actes et comité de lecture

[4] *L. Bammou , S. Blancher ,Y. Le Guer , K. El Omari, B. Benhamou. Stabilité linéaire de l'écoulement de Poiseuille-Rayleigh-Bénard-Marangoni au sein d'un film liquide d'extension infinie, Actes du congrès de la Société Française de Thermique, Lyon, 2014.*

[5] *Bammou L., Blancher S., Le Guer Y., El Omari K., Stabilité linéaire de l'écoulement de convection mixte et thermocapillaire d'un film liquide sur un plan horizontal chauffée uniformément par le bas. Actes du congrès Français de mécanique, Bordeaux, 2013.*

[6] *Bammou L., El Omari K., Le Guer Y., Blancher S., Benhamou B., Marangoni effect on the longitudinal rolls of a mixed convection flow in a horizontal open channel, ICHMT Int. Symposium on Advances in Computational Heat Transfer, Bath, England, 2012.*

[7] *Bammou L., El Omari K., Le Guer Y., Blancher S., Benhamou B., Mediouni T., Thermocapillary effect on the mixed convection in horizontal open channel, Int. Symposium on Multiphase Flow and Transport Phenomena, Agadir, Morocco, 2012.*

[8] *Bammou L., El Omari K., Le Guer Y., Blancher S., Benhamou B., Mediouni T., Étude numérique de l'influence du rapport de forme sur un écoulement de convection mixte dans un canal horizontal à surface libre, Actes du congrès de l'Association Marocaine de Thermique, Casablanca, 2012.*

[9] *Bammou L., El Omari K., Blancher S., Le Guer Y., Benhamou B., Effet thermocapillaire sur la convection mixte en canal ouvert. Actes du congrès Français de mécanique, Besançon, 2011.*

[10] *Bammou L., El Omari K., Blancher S., Le Guer Y., Benhamou B., Étude numérique de la convection mixte dans un canal horizontal à surface libre. Actes du congrès de la Société Française de Thermique, Perpignan, 2011.*

Simulation de la convection de Bénard-Marangoni dans des récipients cylindriques à fond conducteur chauffés par le bas

Personnes impliquées: S. Blancher, R. Es Sakhy, K. El Omari, Y. Le Guer

Publications choisies:

[11] Thèse de Rachid Es Sakhy, soutenue en décembre 2012. Cotutelle entre UPPA et l'université d'Agadir. Programme Hubert Curien Volubilis 2009-2012,

[12] Es Sakhy R., El Omari K., Le Guer Y., Blancher S., Simulation of Rayleigh-Bénard-Marangoni convection and conjugate heat transfer in an open cylindrical container heated by a non-uniform flux, révision en relecture pour Int. J. of Thermal Sciences, 2014.

[13] Es Sakhy, R., El Omari, K., Le Guer, Y., Blancher, S., Feddaoui, M., Mediouni, T. Simulation of the Bénard-Marangoni convection in cylindrical containers heated by non-uniform flux, Physical and Chemical News, 67, pp. 108-112, 2013.

Communications internationales et nationales avec actes et comité de lecture

[14] Es Sakhy R., El Omari K., Le Guer Y., Blancher S., Mediouni T., Feddaoui M., Simulation of Bénard-Marangoni convection in cylindrical containers heated by a non-uniform flux, Int. Symposium on Multiphase Flow and Transport Phenomena, Agadir, Morocco, 2012.

[15] R. Es Sakhy, S. Blancher, Y. Le Guer, K. El Omari, M. Médale, Étude expérimentale de l'influence d'un chauffage localisé sur la convection de Rayleigh-Bénard-Marangoni dans une couche liquide en récipient cylindrique. Actes du congrès de la Société Française de Thermique, Lyon, 2014.

[16] Es Sakhy R., El Omari K., Le Guer Y., Blancher S., Benhamou B., Feddaoui M., Mediouni T., Simulation de la convection de Bénard-Marangoni dans des récipients cylindriques chauffés par un flux non-uniforme, Actes du congrès de l'Association Marocaine de Thermique, Casablanca, 2012.

[17] Es Sakhy R., El Omari K., Blancher S., Le Guer Y., Convection de Bénard-Marangoni induite par un flux pariétal non-uniforme en récipient cylindrique. Actes du congrès Français de Mécanique, Besançon, 2011.

[18] Es Sakhy R., El Omari K., Le Guer Y., Blancher S., Feddaoui M., Mediouni T., Simulation de la convection de Bénard-Marangoni dans des récipients cylindriques chauffés par un flux non-uniforme. Actes du congrès de la Société Française de Thermique, Perpignan, 2011.

Modélisation du refroidissement d'un magma basaltique en régime d'advection chaotique

Collaboration scientifique avec l'université de Perugia en Italie (depuis 2013).

Personnes impliquées: K. El Omari (SIAME), Y. Le Guer (SIAME), D. Perugini (université Perugia)

Publications choisies:

[19] El Omari K., Le Guer Y., Perugini D., Cooling of a magmatic system under thermal chaotic mixing, soumis à Pure and Applied Geophysics, 2014.

[20] El Omari K., Le Guer Y., Perugini D., Refroidissement d'un magma à viscosité thermodépendante en régime d'advection chaotique, Actes du congrès de la Société Française de Thermique, Lyon, 2014.

[21] El Omari K., Le Guer Y., Perugini D., Chaotic advection for thermal mixing in magmatic systems, 6th International Conference on Fractal and Dynamic Systems in Geoscience, 2013, Perugia, Italie.

Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain (MCIA)

Bâtiment A5, Direction Informatique, Secteur Calcul Intensif
Université de Bordeaux
351, cours de la Libération
33405 Talence

<http://www.mcia.univ-bordeaux.fr>