

## Projet MNSN – Maison Normande des Sciences du Numérique

### Action « Recensement des compétences et des besoins »

v1 – 18/10/16

Avec le soutien de la Région Normandie, de l'Union Européenne, et avec l'appui scientifique des établissements et des équipes de recherche impliquées dans le projet, le CRIANN a une mission de deux ans pour initier la construction de la Maison Normande des Sciences du Numérique (MNSN). Cette action de coordination inter-établissements vise à structurer et consolider, à l'échelle de Normandie Université, un écosystème normand du calcul intensif (HPC), de la simulation numérique avancée et de l'ingénierie des données numériques.

Pour répondre aux enjeux liés aux évolutions rapides des technologies de processeurs et d'accélérateurs et soutenir le travail de développement de codes effectué au sein des laboratoires, le service de support applicatif et scientifique du CRIANN se trouve renforcé par l'arrivée d'un deuxième ingénieur spécialiste en calcul intensif, embauché dans le cadre de la MNSN. L'objectif est de renforcer et de mettre en place :

- des formations spécialisées ;
- un accompagnement de type « support avancé », qui permettra d'accueillir les doctorants, post-doctorants ou chercheurs au-delà des formations pour quelques heures à quelques jours afin de les guider dans leurs développements.

Sur le plan académique, la MNSN vise également à accueillir et orienter les nouvelles demandes, en particulier issues de disciplines peu familiarisées à l'utilisation de la modélisation ou du calcul intensif. Pour faciliter l'expression de ces nouvelles demandes et y répondre en favorisant les échanges et les synergies entre les différentes disciplines scientifiques, le CRIANN a également pour mission de mettre en place, dans le cadre de la MNSN, un portail web dédié à la cartographie des besoins et des compétences, accessible aux établissements et laboratoires de recherche.

Enfin, la MNSN sera ouverte aux entreprises, au travers des formations qu'elle proposera et du dispositif SIMSEO, programme des investissements d'avenir coordonné par GENCI et TERATEC et financé par la DGE et Bpifrance. Ce programme, dont l'objectif est d'inciter les PME et ETI à utiliser davantage la simulation numérique, prendra en charge une partie des coûts de calcul, d'expertise et d'accompagnement par les laboratoires de recherche.

Pour toutes ces raisons, nous vous remercions de consacrer une quinzaine de minutes pour répondre à ce questionnaire, qui vise différents publics et dont la grille de lecture sera multiple. N'hésitez pas à y répondre de façon partielle ou à nous contacter si certaines rubriques vous paraissent trop techniques.

Un premier objectif est d'exprimer vos besoins et vos attentes vis à vis de la MNSN, au regard de ce que vous faites déjà (colonne « l'existant ») et de vos projets (colonne « projections »). Cela permettra de prioriser les actions concrètes à mettre en place dans les prochains mois.

#### CRIANN

Centre Régional Informatique et d'Applications Numériques de Normandie  
Technopôle du Madrillet – 745 avenue de l'Université – 76800 SAINT-ÉTIENNE-DU-ROUVRAY  
Tél. : 02 32 91 42 91 – admin@criann.fr - www.criann.fr  
SIRET N° 383 599 990 00025 – CODE APE 7219Z

MNSN-RCB-v1

Vous pouvez également, au travers de ce questionnaire, proposer de contribuer à la MNSN en partageant votre expertise.

Vous recevez ce questionnaire dans sa première version car vous êtes utilisateur des ressources de calcul du CRIANN. A terme, ce questionnaire aura vocation à être diffusé plus largement. Vos remarques et suggestions d'améliorations sont donc les bienvenues.

Merci pour votre contribution,

Marie-Sophie Cabot  
Coordinatrice du projet MNSN  
02 32 91 42 91 – [marie-sophie.cabot@criann.fr](mailto:marie-sophie.cabot@criann.fr)

Thibault Ménard – [thibault.menard@coria.fr](mailto:thibault.menard@coria.fr)  
Correspondant MNSN pour l'Université de Rouen

**NOM Prénom,**  
**Fonction, laboratoire, tél. et mail**

**J'accepte, je n'accepte pas (1)** que ce formulaire soit présenté dans son intégralité lors des réunions de travail de la MNSN.

**J'accepte, je n'accepte pas (1)** que les informations transmises dans ce formulaire fassent l'objet d'un traitement informatique par le CRIANN pour recenser les besoins et orienter les actions de la MNSN.

**Date du document**

(1) Supprimer la mention inutile

Conformément à la loi « informatique et libertés » du 6 janvier 1978 modifiée, vous disposez d'un droit d'accès et de rectification aux informations qui vous concernent. Ce droit peut être exercé auprès du CRIANN à l'adresse [admin@criann.fr](mailto:admin@criann.fr)

|  | <b>Existant (ce que vous faites actuellement)</b><br>Préciser [1] simple utilisateur, [2] utilisateur avancé,<br>[3] expert | <b>Projection d'évolution et besoins associés</b><br>(préciser l'échéance et/ou le niveau de priorité) |
|--|---|--|
| <b>Domaine d'application scientifique</b><br>Utiliser la nomenclature proposée page suivante<br>Préciser succinctement   |   |  |
| <b>Mathématiques utilisées</b><br>Equations aux Dérivées Partielles, mathématiques<br>pour le traitement de données<br>Préciser ensuite : type d'équation, type de<br>traitement |   |  |
| <b>Méthodes numériques et algorithmie</b><br>Exemples : volumes finis, méthode stochastique,   |   |  |

|  |  |  |
|--|--|--|
| FFT, structures de données, etc.   |  |  |
| <b>Logiciels de calcul, pré et post traitement, visualisation</b>  |  |  |
| <b>Langage de programmation</b><br>Préciser l'environnement de travail (OS)  |  |  |
| <b>Bibliothèques de parallélisation</b>  |  |  |
| <b>Outillage (bibliothèques, debugger, profilage, suivi de version...)</b>   |  |  |
| <b>Environnement matériel utilisé</b> (PC, cluster, ...)<br>Préciser l'architecture (x86, GPU) et les limitations rencontrées (mémoire, temps de calcul) |  |  |
| <b>Besoins complémentaires et attentes vis à vis de la MNSN</b><br>En particulier, préciser les formations souhaitées                                    |  |  |
| <b>Proposition de contribution</b> à la MNSN (domaine d'expertise, proposition de séminaire ...)   |  |  |
| <b>Suggestions relatives à ce questionnaire</b><br>Pistes d'amélioration   |  |  |

## **Annexe : Nomenclature des domaines d'application scientifique (nomenclature Genci)**

### **1. Environnement**

Mots clés : Modélisation de l'atmosphère, de l'océan et du climat. Modélisation des atmosphères planétaires. Analyse et assimilation des données. Physico-chimie atmosphérique. Biogéochimie océanique. Fonctionnement et évolution des écosystèmes terrestres. Hydrologie des sols.

### **2a. Écoulements non réactifs**

Mots clés : Dynamique des écoulements compressibles. Hydrodynamique. Aérodynamique stationnaire et instationnaire. Écoulements en rotation. Transferts thermiques et convection forcée. Convection naturelle.

### **2b. Écoulements réactifs ou/et multiphasiques**

Mots clés : Interfaces et écoulements polyphasiques. Changements de phase. Rhéologie complexe. Combustion turbulente. Simulation directe des écoulements réactifs. Structure de flammes. Cinétique de la combustion. Écoulements diphasiques réactifs. Plasmas froids. Arcs électriques. Milieux hors d'équilibre.

### **3. Biologie et santé**

Mots clés : Interaction particule/tissu et calcul par méthodes de Monte-Carlo. Nanotechnologies en thérapeutique. Imagerie médicale (acquisition et traitement). Outils d'aide à la décision médicale. Bioinformatique. Génomique. Modélisation du corps humain. Biomécanique. Dynamique des écoulements physiologiques. Modélisation/simulation des systèmes physiologiques. Epidémiologie et dynamique des populations.

### **4. Astronomie et géophysique**

Mots clés : Cosmologie. Formation des galaxies, des étoiles et des systèmes planétaires. Dynamique des systèmes gravitationnels. Modélisation d'objets astrophysiques (hors fluides et chimie). Plasmas géophysiques et planétaires. Géophysique interne. Hydrologie des sols. Géomatériaux.

### **5. Physique théorique**

Mots clés : Electromagnétisme, optique, physique sur réseau dont QCD, Chaos quantique, Propriétés électroniques des solides, Physique nucléaire, Interactions ondes électromagnétiques avec la matière. Plasmas chauds, Sciences de la fusion magnétique ou inertielle. Physique de la matière condensée.

### **6. Informatique, algorithmique et mathématiques**

Mots clés : Réseaux, middleware, algorithmes pour le parallélisme, algèbre linéaire, EDP, traitement du signal, stockage et analyses des données, visualisation.

### **7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie**

Mots clés : Structure, dynamique moléculaire, interaction des macromolécules et édifices moléculaires. Chimie supramoléculaire, relations structure-fonction. Biopolymères, interfaces, matériaux hétérogènes. Auto-assemblage, réplication. Génomique.

### **8. Chimie quantique et modélisation moléculaire**

Mots clés : Propriétés électroniques des molécules. Structures. Réactivité. Calculs ab initio. Calculs semi-empiriques. Dynamique quantique (Car-Parinello). Calculs Monte Carlo quantique (Méthodes QMC). Etat liquide. Solvation. Diffusion moléculaire. Collisions (molécules-ions, électrons). Dynamique quantique. Evolution d'un paquet d'ondes.

### **9. Physique, chimie et propriétés des matériaux**

Mots clés : Modèles de cohésion des matériaux adaptés à la simulation à l'échelle atomique (ab initio, liaisons fortes, potentiels empiriques). Simulation des systèmes classiques et quantiques par dynamique moléculaire et méthodes de Monte-Carlo. Thermodynamique

numérique d'équilibre et de non-équilibre. Simulation des cinétiques à l'échelle atomique. Echelle mésoscopique. Dynamique des populations des défauts, comportement mécanique des matériaux hétérogènes. Physique et chimie des matériaux granulaires. Simulation numérique pour le dépouillement d'études expérimentales de structure des matériaux. Propriétés électroniques des matériaux.

#### **10. Nouvelles applications et applications transversales du calcul intensif**

Cette thématique permet d'accueillir les applications nouvelles ou multidisciplinaires.