



Présentation des projets financés au titre de l'édition 2010 du Programme COSINUS

FOSTER – Fouille de données Spatio-Temporelles : application à la compréhension et à la surveillance de l'ERosion.....	2
HAMM – Architecture Hybrides et Méthodes Multi-échelles.....	4
HORUS – Horaires Optimisés dans les Réseaux de transports Urbains et Interurbains.....	6
MAPPI – Nouvelles approches algorithmiques et bioinformatiques pour l'analyse des grandes masses de données issues des séquenceurs de nouvelle génération.	8
NEWCASTLE – Calcul de Structure électronique à Très Large Échelle :Ondelettes et ordre N pour le passage à l'échelle des méthodes ab initio	10
OPARUS – Optimisation et Parallélisme pour l'Analyse et la Reconstruction du CND par UltraSons	12
OPTIDIS – Optimisation d'un code de dynamique des dislocations	14
PETALH – Préconditionnement pour des applications scientifiques sur des machines pétascale hétérogènes	16
REALISTIC – Simulation des Grands Espaces et des Temps Longs.....	18
SIM-DREAM – Nouveau paradigme en SIMulation numérique – Décomposition en variables séparées pour la REduction A priori de Modèle.....	20
SIMINOLE – Méthodes de simulations pour des applications de grande échelle en physique expérimentale : inférence statistique, optimisation et apprentissage discriminant.....	22
SIMUDMRI – Simulation du signal d'IRM diffusion dans tissus biologiques	24
SKIPPI – Système d'Ingénierie Kansei - Conception Intégrée Produit/Process Image de marque.....	26
SOHUSIM – Simulation molle de l'humain	28
SPUTNIK – Simulation d'expériences pour l'étude de la structure et de la dynamique de protéines	30
SYNE2ARTI – Des réseaux de régulation génique aux tissus artificiels.....	32

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet

FOSTER – FOuille de données Spatio-Temporelles : application à la compréhension et à la surveillance de l'ERosion

Résumé

Ces dernières années, l'environnement, le développement durable et la gestion des risques naturels sont devenus des enjeux majeurs. A ce titre, la Nouvelle-Calédonie représente un observatoire environnemental d'exception. Par exemple, la majeure partie de la grande barrière de corail néo-calédonienne vient d'être classée au patrimoine mondial de l'UNESCO. La protection et la sauvegarde de cet environnement fragile en présence d'importants projets miniers et d'une pression anthropique croissante sont donc des enjeux prioritaires. Ces activités humaines accentuent l'érosion de reliefs naturellement sensibles (roches très altérées), aggravant des phénomènes dangereux pour les personnes, les biens et les ressources. Parallèlement, une augmentation de la fréquence des glissements de terrain est observée depuis quelques années dans le sud du massif alpin, en lien avec des forçages climatiques et géodynamiques (tremblements de terre) variables et des pratiques d'utilisation du sol souvent peu adaptées. Ces deux exemples montrent la nécessité d'une approche globale de suivi de l'environnement, notamment en matière d'érosion pour une meilleure compréhension des processus physiques et la caractérisation de leurs impacts sur le milieu naturel.

Actuellement, les scientifiques travaillant sur ces problématiques se heurtent à des difficultés grandissantes dans le traitement et l'analyse des données qu'ils recueillent. La multiplication des données collectées en géosciences, et la précision de celles-ci, ont laissé entrevoir des applications très prometteuses en matière d'étude de l'environnement et des processus qui contrôlent son évolution. L'arrivée des images à très haute résolution autorise, par exemple, l'étude d'objets plus petits. Cependant, les techniques d'analyses actuelles sont limitées face à cette avalanche d'informations. En effet, les bases de données sont hétérogènes, multi-échelles, incomplètes, imprécises, et contiennent des objets complexes. L'exploitation de ces masses de données spatio-temporelles générées par les sciences de l'environnement pose donc un grand nombre de problèmes. Dans ce contexte, ce projet a pour objectif de concevoir, développer et mettre en œuvre des nouveaux processus d'analyse adaptés ces masses de données (MNT, images satellites, données météorologiques,...). Deux tâches critiques de ce processus seront plus

particulièrement étudiées : la segmentation des images satellitaires basée sur des méthodes collaboratives, et la construction de modèles descriptifs (motifs, « clustering », ...) et/ou prédictifs (arbres de décision,...) intégrant de l'information spatio-temporelle. Ce projet visera ainsi à apporter de nouveaux moyens (méthodes, algorithmes, logiciels) d'exploitation des masses de données spatio-temporelles générées par les sciences environnementales, avec plus particulièrement la volonté d'assister les experts dans leur découverte de connaissances.

Ce projet regroupe des laboratoires de recherche et une entreprise autour de compétences pluridisciplinaires. Notre consortium intègre (1) des informaticiens des laboratoires LIRIS, LISTIC, LSIIT et PPME avec des expertises complémentaires dans les domaines de la fouille de données et de l'imagerie ; (2) des géologues du laboratoire PPME et de l'IPGS experts dans la caractérisation et la quantification de l'érosion; (3) la société Bluecham spécialiste des systèmes d'aide à la décision en environnement intertropical. Les compétences de chacun des partenaires permettent de couvrir tout le processus de découverte de connaissances, depuis l'acquisition et la préparation de données variées jusqu'à la découverte de connaissances proprement dites. Le consortium ainsi établi nous permet donc de proposer un projet dont les résultats auront un impact à la fois sur le domaine des « masses de données » en général (méthode de fouille de données) mais aussi sur la problématique environnementale de l'érosion.

Partenaires

PPME
LIRIS
LSIIT
LISTIC
BlueCham

Coordinateur

Nazha SELMAOUI - PPME
nazha.selmaoui@univ-nc.nc

Aide de l'ANR

921034€

Début et durée

01/01/2011 - 36 mois

Label pôle

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet	HAMM – Architecture Hybrides et Méthodes Multi-échelles
Résumé	<p>Ce projet de recherche vise le développement, l'analyse et l'implémentation logicielle de modèles mathématiques pour des applications multi-échelles sur architectures hybrides. Les applications multi-échelles de grandes échelles sont en effet accessibles avec les infrastructures de calcul émergentes mais elles requièrent des méthodes numériques multi-échelles robustes et efficaces qui tiennent compte de ces nouvelles architectures. Ceci est très ambitieux car les logiciels n'ont souvent pas été conçus pour ces méthodes et ces architectures. En effet, les scientifiques et ingénieurs doivent manager (i) la complexité des modèles multi-échelles sous-jacents, typiquement exprimés en termes de systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDP) complétés par des lois de fermetures algébriques, (ii) la complexité des méthodes numériques utilisées pour résoudre ces systèmes d'EDP et finalement (iii) la complexité des services informatiques de bas niveau sous-jacents requis afin d'avoir un code performant sur ces architectures (e.g. multicœurs CPU/GPU). Des méthodes multi-échelles robustes et efficaces ainsi que techniques de programmation avancée et un environnement d'exécution doivent être combinés pour bénéficier pleinement de ces architectures hybrides massivement parallèles. Bien que le projet HAMM soit très orienté vers les mathématiques appliquées et les méthodes numériques multi-échelles, il est véritablement multidisciplinaire et requiert l'expertise de spécialistes des applications, en architecture et calcul haute performance et des designers d'infrastructures de calcul. C'est pourquoi nous créons un consortium très solide: (i) CEA et IFP dirigeants les spécifications des applications multi-échelles, (ii) UJF dirigeant le développement des méthodes numériques et l'implémentation efficace sur architectures hybrides et finalement (iii) BULL dirigeant les activités de benchmarking et ultimement le dimensionnement des infrastructures de calcul future en accord avec les contraintes actuelles d'énergie par exemple.</p>
Partenaires	UJF IFP Bull CEA

Coordinateur Christophe PRUD'HOMME - UJF
christophe.prudhomme@ujf-grenoble.fr

Aide de l'ANR 876124€

Début et durée 01/10/2010 - 48 mois

Label pôle

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet	HORUS – Horaires Optimisés dans les Réseaux de transports Urbains et Interurbains
Résumé	<p>Projet HORUS Consortium composé du laboratoire PRISM (équipe CaRO), EURODECISION et du laboratoire CReSTIC (équipe SysCom). La construction d'une offre optimisée de transport (urbain, périurbain et interurbain) est un enjeu majeur pour les opérateurs publics et privés. La très grande complexité de cette tâche justifie généralement son découpage en étapes séquentielles : construction des horaires des bus, tramways ou trains (graphicage), puis leur couverture par des services conducteurs (habillage), et enfin, élaboration de plannings individuels nominatifs. Seuls de grands réseaux peuvent s'appuyer pour cette tâche sur des systèmes d'aide à la décision faisant appel à des modules d'optimisation. Depuis une dizaine d'années, EURODECISION a équipé la RATP et plus récemment le groupe VEOLIA Transport de son composant métier LP-EasyDriver permettant un habillage optimisé des horaires de bus par des services ou horaires de chauffeurs. Les méthodes d'optimisation de cet outil et des offres concurrentes sont basées sur des techniques de génération de colonnes et des approches d'optimisation hybrides. En élargissant leur périmètre fonctionnel, ces approches peuvent être appliquées également au domaine ferroviaire. L'objectif principal du projet HORUS est de préparer les offres de la nouvelle génération en relevant plusieurs défis :</p> <ul style="list-style-type: none">- extension au domaine ferroviaire (complexité combinatoire accrue et plus grande complexité métier),- conception d'une optimisation globale du graphicage et de l'habillage,- accès au calcul multi-coeur via la parallélisation des algorithmes,- mise à disposition des algorithmes d'optimisation via des logiciels libres et des Web services de calcul mutualisés. <p>D'un point de vue académique, le PRISM et le CReSTIC, deux laboratoires universitaires reconnus pour leur expertise en optimisation combinatoire (méthodes avancées en génération de colonnes et métaheuristiques) et en calcul parallèle, proposent ainsi des contributions significatives dans les méthodes de résolution séquentielles et parallèles dédiées à ces problématiques: modélisation par arcs-états, génération de colonnes, métaheuristique innovante (Trust Branching Path) et hybridation entre métaheuristiques et méthodes</p>

exactes. D'un point de vue industriel, EURODECISION est un centre d'expertise technique sur les méthodes citées plus haut et d'expertise dans les métiers du transport. EURODECISION est en mesure d'exploiter les innovations en les diffusant directement chez les opérateurs de transports ou via des éditeurs de solutions logicielles métiers.

Partenaires

PRiSM
EURODECISION
CReSTIC

Coordinateur

Alain BUI - PRiSM
Alain.Bui@prism.uvsq.fr

Aide de l'ANR

595521€

Début et durée

01/10/2010 - 36 mois

Label pôle

Advancity (ex Ville et Mobilité Durables)

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet	MAPPI – Nouvelles approches algorithmiques et bioinformatiques pour l'analyse des grandes masses de données issues des séquenceurs de nouvelle génération.
Résumé	<p>Une grande percée dans le domaine du séquençage est en cours depuis quelques années. Elle est due au développement de nouveaux séquenceurs basés sur de nouvelles méthodes. Ces séquenceurs produisent d'énormes quantités de petites séquences. La masse de données à mapper et assembler est si importante qu'il représente maintenant le goulot d'étranglement de ces nouvelles technologies, les plus rapides des logiciels actuels n'étant pas capable de passer à l'échelle en terme de temps de calcul intensif. En outre, ces séquenceurs sont aussi capables de séquencer d'un coup tout l'ADN contenu dans une population entière d'organismes vivants, ce qui ouvre la voie à des analyses dites "meta" pour classifier des espèces, estimer la biodiversité et les changements de biodiversité entre deux échantillons, etc. Notre projet de 36 mois a pour but de proposer des nouvelles approches et des nouveaux logiciels pour relever le défi du passage à l'échelle et du calcul intensif que nécessite maintenant les algorithmes de mapping, d'assemblage et de méta-assemblage sur de tels volumes de données. Notre projet regroupe quatre partenaires. Le LIAFA (Université Paris-Diderot), le LIFL (Lille) et l'IRISA (Rennes) sont des groupes de recherche en informatique dont l'expertise est complémentaire pour les données à traiter et les techniques à développer, chacun étant spécialiste dans au moins un des thèmes du projet: structures d'indexation, algorithmes sur les séquences, algorithmes distribués et parallèles, analyse de séquences biologiques, etc. Ces groupes vont proposer de nouveaux algorithmes et développer des logiciels open source. Un point crucial pour que ces algorithmes et ces logiciels ne restent pas théoriques et que notre projet ait une application directe est que MAPPI est lié à l'ambitieux projet de biologie Tara Oceans dont fait partie le Genoscope (CEA), qui est aussi le quatrième partenaire de ce projet. Le Genoscope est spécialisé dans la production de séquences et dispose des dernières technologies. Tara Oceans est un projet multidisciplinaire unique qui regroupe des océanographes, des écologistes, des biologistes et des</p>

physiciens experts dans la vie marine et dont le but est d'étudier le phytoplancton de plusieurs océans. Le rôle du Genoscope est de séquencer des échantillons d'ADN et ARN de protists (petits organismes eucaryotes) récoltés dans différents lieux à la surface du globe. Tara va fournir des données de méta génomique (ADN des cellules d'un échantillon complet) et de métatranscriptomique (ARN). Le nombre total d'échantillon est prévu entre 2000 et 4000, ce qui devrait générer plus de 100TB de données. Les logiciels que nous proposerons seront intégrés dans une chaîne bioinformatique au Genoscope.

Partenaires

LIAFA
LIFL
INRIA Rennes - Bretagne Atlantique
Genoscope

Coordinateur

Mathieu RAFFINOT - LIAFA
raffinot@liafa.jussieu.fr

Aide de l'ANR

456830€

Début et durée

01/10/2010 - 36 mois

Label pôle

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet	NEWCASTLE – Calcul de Structure électronique à Très Large Échelle : Ondelettes et ordre N pour le passage à l'échelle des méthodes ab initio
Résumé	<p>Les méthodes ab initio sont les méthodes d'excellence pour prédire la structure et les propriétés des systèmes atomiques car elles sont sans paramètres. La majorité de ces méthodes résolvent l'équation de Schrödinger dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité. Elles sont utilisées en chimie, en science des matériaux, en nanosciences et aussi en biologie. Ces méthodes utilisent traditionnellement, pour représenter les fonctions d'onde des électrons, des bases de fonctions gaussiennes ou bien d'ondes planes. Le temps de calcul varie alors en puissance 3 en fonction du nombre d'atomes limitant la taille des systèmes à quelques centaines d'atomes. D'autre part, ces deux bases de fonctions limitent considérablement le parallélisme à quelques centaines de cœurs. Nous avons montré dans le code BigDFT que les bases en espace réel comme les ondelettes étaient réellement utilisables pour des codes en production sur machines parallèles et n'étaient pas soumises aux limitations des codes traditionnels. Il est possible, notamment, d'avoir un maillage adaptatif dans les régions de fortes variations de densité électronique. Les approches d'ordre N sont surtout plus facilement applicables pour avoir un comportement linéaire du temps de calcul en fonction du nombre de cœurs. En se fondant sur l'expérience déjà accumulée sur les ondelettes, sur les approches d'ordre N et sur le développement d'applications parallèles, ce projet a comme ambition de passer à l'échelle, c'est-à-dire d'être capable d'utiliser des milliers voire des dizaines de milliers de cœurs pour simuler des systèmes physiques réels. Pour cela, nous souhaitons nous appuyer sur le code BigDFT pour pouvoir exploiter des milliers de cœurs pour le calcul de la structure électronique via une approche d'ordre N déjà validée pour des systèmes de quelques dizaines d'atomes. Une partie du projet est d'ailleurs d'avoir une meilleure transférabilité du code et un maillage plus large via l'implémentation de pseudo-potentiels plus doux. Toutes ces avancées bénéficieront à d'autres codes de calcul de structure électronique via la réutilisation des modules développés comme cela a été le cas dans le passé (code ABINIT, Octopus, CP2K). Suite à</p>

des tests sur plusieurs milliers de cœurs sur les différents centres français (CCRT, INES), nous souhaitons, en partenariat avec Bull, améliorer la robustesse et le passage à l'échelle de la bibliothèque MPI (OpenMPI), notamment des messages collectifs comme MPI_ALLTOALL et MPI_ALLREDUCE, c'est à dire ne pas avoir le même type d'algorithmes pour un petit et un grand nombre de cœurs. Enfin, la tolérance aux pannes d'un nœud via un mécanisme de reprise dans la bibliothèque MPI sera étudiée et implantée dans le code. L'objectif de ce projet est double : 1.avoir un code ab initio « opensource » moderne, fiable, robuste pouvant exploiter des dizaines de milliers de cœurs pour la science des matériaux (défauts ponctuels), la chimie (macro-molécules), les nanosciences (fonctionnalisation de surface) et même la biologie (protéines) ; 2.valider un ensemble de solutions robustes et fiables pour le calcul massivement parallèle et hybride pouvant être ré-utilisé par d'autres logiciels.

Partenaires

INAC/SP2M
ESRF
CEA-DIF-DPTA
BULL

Coordinateur

Thierry DEUTSCH - INAC/SP2M
thierry.deutsch@cea.fr

Aide de l'ANR

660088€

Début et durée

01/01/2011 - 36 mois

Label pôle

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet	OPARUS – Optimisation et Parallélisme pour l'Analyse et la Reconstruction du CND par UltraSons
Résumé	<p>Le projet OPARUS "Optimisation et Parallélisation pour l'Analyse et la Reconstruction du CND par UltraSons" porte sur le développement d'outils de modélisation et de traitement dédiés à la reconstruction de données ultrasons multi-éléments des contrôles non destructifs. L'objectif du projet est d'optimiser les performances numériques des algorithmes et de repousser de manière significative les limitations qui pèsent aujourd'hui sur l'utilisation de modèles précis pour la visualisation, l'analyse et l'aide au diagnostic, afin de disposer d'outils de modélisation innovants en accord avec les contraintes industrielles. Les choix technologiques sont clairement orientés vers les architectures parallèles multi-cœurs et les processeurs GPGPU, dans un environnement type "station de travail" compatible avec les moyens industriels mis en œuvre lors des contrôles sur site. Les verrous technologiques concernent aussi bien la capacité d'exploitation optimale des nouvelles architectures parallèles que la mise en œuvre d'algorithmes optimisés dédiés à la reconstruction des données à des fins d'analyse. Les développements seront focalisés sur des applications représentatives des problématiques industrielles. Les outils de reconstruction s'appuyant sur ces développements seront intégrés à trois ensembles : les systèmes d'acquisition M2M, la plate-forme de simulation et d'analyse CIVA, et le logiciel d'analyse en production NDT-kit. OPARUS est un projet de recherche industrielle d'une durée de trois ans qui regroupe des industriels utilisateurs finaux du CND, EADS et EDF, des entreprises de haute technologie, la société M2M, qui développe des chaînes d'acquisitions multi-éléments et la société CAPS-Entreprise, PME experte en solutions de calculs parallèles, le CEA LIST qui développe la plate-forme logicielle CIVA, ainsi que l'IEF, laboratoires universitaires spécialiste des architectures parallèles, du traitement d'image et des systèmes complexes. Les résultats du projet OPARUS seront valorisés directement par leur intégration dans des ensembles déjà opérationnels en milieu industriel. D'un point de vue scientifique les résultats feront l'objet de communications dans le cadre des revues et conférences</p>

dédiées au contrôle non destructif, ainsi que dans des revues consacrées à la recherche en informatique et en architecture.

Partenaires

CEA
EADS
EDF
M2M
IEF
CAPS

LIST

Coordinateur

Stéphane Le Berre - CEA LIST
stephane.leberre@cea.fr

Aide de l'ANR

769331€

Début et durée

01/10/2010 - 36 mois

Label pôle

SYSTEM@TIC Paris région

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet	OPTIDIS – Optimisation d'un code de dynamique des dislocations
Résumé	<p>Dans le cas de matériaux cristallins, la déformation plastique est principalement accommodée par le mouvement de lignes de dislocations [Jaoul 1965]. Si le comportement d'un segment de dislocation est parfaitement connu depuis les années 1960 [Friedel 1964, Hirth et Lothe 1968], l'effet de populations de dislocations en interaction sur la réponse mécanique du matériau reste très difficile à appréhender sans avoir recours à l'informatique. Des codes numériques simulant ces interactions en trois dimensions ont été développés à partir des années 1990 sous l'impulsion de chercheurs Français [Kubin et al. 1992]. Le code TRIDIS développé au SIMaP de Grenoble est issu de ces tout premiers développements. En 2007, le projet NUMODIS a été monté en collaboration entre SIMaP et le SRMA du CEA de Saclay avec pour objectif de construire un tout nouveau code de dislocations qui devra lever les limites de TRIDIS et utiliser des techniques de calcul modernes (développement orienté objet sur plateforme collaborative). En décembre 2009, la version NUMODIS 1.0 a été livrée démontrant ainsi la faisabilité du projet. Le projet OPTIDIS est déposé au moment où des routines de calculs parallèles sont implémentées dans le code. Le projet a pour objectif de développer et valider les meilleurs algorithmes possibles afin d'optimiser au mieux l'efficacité du code NUMODIS. Il s'agit à terme de disposer d'un code performant capable de simuler des situations réalistes comme par exemple le cas d'un grain irradié et déformé pour lequel on devra calculer les nombreuses interactions entre dislocations et défauts d'irradiations. Ce genre de situations intéresse fortement l'industrie nucléaire qui cherche à relier le comportement mécanique macroscopique aux mécanismes locaux. Les développements numériques à réaliser sont conséquents et requièrent des compétences pointues en algorithmique, mathématiques appliquées et techniques de calculs parallèles. Le projet est construit autour d'un partenariat de chercheurs pour la moitié spécialistes des dislocations et l'autre des méthodes numériques. Le projet est divisé en 8 tâches réparties sur quatre années. Deux thèses seront directement financées par le projet. Une thèse à forte composante algorithmique numérique et parallèle sera</p>

dédiée aux développements numériques, à la validation des algorithmes optimisés et la confrontation avec les codes concurrents. La seconde thèse aura pour objectif ultime la réalisation d'une simulation test de grande envergure jamais réalisée à ce jour. Dans les deux cas, les résultats obtenus seront directement comparés à des observations expérimentales menées pour l'occasion.

Partenaires

CEA/DEN/DMN/SRMA
SIMaP / Grenoble INP
ICMPE / Paris-Est
HIEPACS / INRIA

Coordinateur

Laurent DUPUY - CEA/DEN/DMN/SRMA
laurent.dupuy@cea.fr

Aide de l'ANR

365232€

Début et durée

01/10/2010 - 48 mois

Label pôle

SYSTEM@TIC Paris région

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet	PETALH – Préconditionnement pour des applications scientifiques sur des machines pétascale hétérogènes
Résumé	<p>Les simulations numériques modernes et l'utilisation des plateformes de calcul de plus en plus puissantes ont été une force motrice qui a conduit à des progrès importants dans de nombreux domaines aussi différents que les sciences fondamentales, les applications techniques et technologiques, les sciences de la vie. Ces simulations impliquent souvent une succession de problèmes matriciels tels que résolutions de systèmes linéaires et calculs de valeurs propres. Ce projet se concentre sur la résolution de grands systèmes linéaires d'équations creux en utilisant des méthodes itératives. Plus précisément, il se concentre sur préconditionneurs parallèles qui sont adaptés aux modèles émergents hiérarchiques des grappes de processeurs multicœur, comme utilisé par exemple dans les machines pétaflopiques. Ces préconditionneurs sont importants pour accélérer les méthodes itératives, et ils représentent le principal sujet de recherche dans ce contexte. Ce projet est une continuation du projet PETAL qui a été financée par ANR Cosinus 2008. PETAL a été présenté comme un projet pour 3 ans, et a été accepté pour 2 ans. Les premiers résultats que nous avons obtenus dans la première année sont très prometteurs. Ils ont prouvé le fondement scientifique de notre approche. Le but de PETALh est de poursuivre cette recherche avec un accent particulier sur préconditionneurs parallèles adaptés à être utilisé sur les modèles émergents hiérarchiques des grappes de processeurs multicœur. Notre projet comprend également une étude de leur pertinence pour les machines hétérogènes formées par les processeurs multicœurs et GPUs. Ceci est au-delà de l'objectif du projet PETAL initial dans lequel nous nous sommes concentrés uniquement sur les clusters de processeurs multicœurs.</p>
Partenaires	INRIA Saclay - GRAND-LARGE UPMC - CNRS UMR7598 INRIA Bordeaux Sud-Ouest IFP CEA

Coordinateur Laura GRIGORI - INRIA Saclay - GRAND-LARGE
Laura.Grigori@inria.fr

Aide de l'ANR 388769€

Début et durée 01/01/2011 - 24 mois

Label pôle

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet	REALISTIC – Simulation des Grands Espaces et des Temps Longs
Résumé	<p>Les objectifs du projet REALisTIC consistent à lever les verrous technologique et théorique pour la résolution des problèmes de la simulation numérique des procédés de grandes dimensions et de grands temps physiques. Aujourd'hui, le calcul intensif appliqué aux procédés industriels tels que le chauffage ou les installations de trempe est de loin irréaliste en termes de temps de calcul. Les dimensions des équipements (dizaine de mètres) et les temps physiques à considérer (dizaine d'heures avec des transitoires rapides) conduisent à des modèles virtuels inaccessibles aux industriels pour de la simulation d'écoulements.</p> <p>La simulation numérique est une solution attendue pour aider les industriels dans leur démarche d'optimisation des procédés. Ces Optimisations sont une nécessité économique aussi bien qu'un moyen essentiel d'acquérir un avantage concurrentiel, ainsi que dans le moyen terme de réaliser des économies d'énergie et des diminutions de production de CO2.</p> <p>La tendance mondiale actuelle est de fournir à l'industrie des plates-formes collaboratives hébergeant des logiciels nouvelle génération, utilisant la plupart du temps des algorithmes de dernière génération. Le projet REALisTIC propose de contribuer au développement de logiciels conçus par des laboratoires français et industrialisés par des sociétés françaises et ayant vocation à être hébergés sur ces plateformes.</p> <p>Le partenariat de REALisTIC rassemble un laboratoire de recherche renommé, 2 sociétés d'édition de logiciel ainsi que 4 sociétés majeures dans le domaine de la transformation de l'acier. Ce partenariat est bien équilibré et a démontré sa forte motivation.</p> <p>Le projet prévoit d'analyser les problèmes de Grands Temps et Grands Espaces par 2 types d'algorithmes capables d'atteindre les objectifs de "quelques jours" de temps de calcul pour des installations de chauffage ou de traitement thermique avec un couplage métallurgique dans les charges.</p> <p>Le programme de travail est décomposé en 4 tâches. Les</p>

travaux théoriques seront centrés sur les techniques de maillage auto-adaptatifs et le traitement des pas de temps de calcul de façon anisotropique (WP2).

Ces développements seront intégrés dans des logiciels de simulation des procédés (ThosT et Forge) pour livrer des démonstrateurs aux industriels utilisateurs (WP3).

Les partenaires industriels utiliseront ces démonstrateurs fonctionnels pour comparer aux expérimentations et quantifier la valeur ajoutées de ces développements pour leurs activités (WP4).

Le projet relève à la fois des axes thématiques "Calcul Intensif" et "Conception et Optimisation" de l'appel Cosinus 2010. Le travail théorique est une contribution aux chercheurs pour atteindre une rapidité accrue en temps de calcul, l'adaptation de ces travaux à des applications industrielles assurera la promotion de la simulation en temps que solution économique dans l'amélioration des procédés et des avantages concurrentiels associés.

Partenaires

Sciences Computers Consultants
Aubert Duval
Industeel-ArcelorMittal
AREVA Creusot Forge
Snecma
ARMINES Centre CEMEF de l'Ecole des Mines de Paris
TRANSVALOR S.A.

Coordinateur

Chantal DAVID - Sciences Computers Consultants
chdavid@scconsultants.com

Aide de l'ANR

749688€

Début et durée

01/12/2010 - 48 mois

Label pôle

PEGASE
Pôle Nucléaire de Bourgogne
SYSTEM@TIC Paris région
VIAMECA

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet	SIM-DREAM – Nouveau paradigme en SIMulation numérique – Décomposition en variables séparées pour la REduction A priori de Modèle
Résumé	<p>La simulation numérique de nombreux problèmes en science et en ingénierie, de par la complexité des modèles, reste aujourd'hui inaccessible malgré les progrès impressionnants des capacités de calcul. Deux familles de problèmes difficiles peuvent être distingués: - La première famille concerne les modèles classiquement rencontrés en ingénierie, définis sur des géométries 3D complexes, impliquant des phénomènes non linéaires, multi-échelles (en temps et espace), multi physiques, et dont l'analyse transitoire requiert des simulations temporelles d'une grande précision. Lorsque de plus les chargements deviennent complexes (chargements cycliques, ...) ou que l'on s'intéresse à des études paramétriques (optimisation, analyse inverse, ...), la solution numérique des modèles devient tout simplement inaccessible avec des techniques standards. - La deuxième famille de problèmes concerne les modèles définis dans des espaces de grande dimension. Ces problèmes, qui apparaissent naturellement en modélisation des matériaux à des échelles fines, en analyse de modèles paramétriques ou stochastiques, mais également dans de nombreuses autres disciplines, souffrent de la redoutable malédiction de la dimensionnalité, associée à l'augmentation dramatique de la dimension des modèles numériques lorsque des techniques de discrétisation classiques sont utilisées. Pour pallier les difficultés liées à la première famille de modèles, de nombreux auteurs ont considéré l'utilisation de méthodes de réduction de modèle basées sur la Proper Orthogonal Decomposition (POD). Cependant, ces méthodes sont loin d'être optimales. Les bases réduites construites sont en effet optimales uniquement quand elles sont calculées a posteriori, et ne sont qu'approchées quand elles sont utilisées a priori. L'alternative idéale réside clairement dans la construction simultanée de la solution et de la base réduite permettant d'exprimer cette solution. Les partenaires de ce projet (A. Ammar, F. Chinesta, P. Ladevèze, A. Nouy) ont récemment proposé une nouvelle méthode, baptisée Proper Generalized Decomposition method (PGD), capable de contourner les difficultés mentionnées plus haut. Cette méthode est basée</p>

sur une représentation séparée de la solution de modèles multidimensionnels. En utilisant cette méthode, les temps de simulation pour la première famille de modèle ont été réduits de plusieurs ordres de grandeur (dans certains cas des millions). Des problèmes de très grande dimension, jusqu'ici réputés incalculables car souffrant de la malédiction de la dimensionnalité, ont également pu être résolus par cette approche. De par la jeunesse et la nouveauté de la PGD, de nombreux aspects n'ont pas été abordés ou sont encore mal maîtrisés. L'objectif de ce projet est de repousser les limites de cette méthode. Les développements pourraient conduire à un réel changement de paradigme en mécanique numérique et dans le calcul scientifique en général. Ce projet rassemble les « inventeurs » de la PGD, reconnus par ailleurs pour leurs contributions respectives en mécanique numérique. Les chercheurs impliqués dans ce projet développent activement et indépendamment la méthode PGD depuis plusieurs années. Ce projet tend à regrouper ensemble ces chercheurs afin d'accélérer les développements autour de cette méthode et de faciliter l'émergence de nouvelles idées pour repousser ses limites. Ce projet pourrait avoir un impact majeur aussi bien d'un point de vue fondamental qu'applicatif. De nouvelles méthodes sont clairement nécessaires afin d'aborder à court terme la simulation numérique de modèles complexes rencontrés dans les applications de haute technologie (aéronautiques et spatiales parmi d'autres) avec des moyens de calcul raisonnables. Ce projet propose une alternative à l'augmentation croissante des ressources de calcul et au développement de techniques d'accélération des méthodes standard.

Partenaires GEM
LMT
LAMCOS

Coordinateur Francisco CHINESTA - GEM
francisco.chinesta@ec-nantes.fr

Aide de l'ANR 601827€

Début et durée 01/10/2010 - 36 mois

Label pôle EMC2 (Ensembles métalliques et composites complexes)

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet	SIMINOLE – Méthodes de simulations pour des applications de grande échelle en physique expérimentale : inférence statistique, optimisation et apprentissage discriminant
Résumé	<p>La simulation constitue dorénavant un enjeu majeur dans la plupart des expériences scientifiques de grande échelle. Avec le développement des techniques et des moyens de calcul, la simulation est véritablement devenue le troisième pilier des découvertes scientifiques actuelles, à côté des deux premiers piliers que sont la modélisation et l'expérimentation. Le rôle le plus important de la simulation est de permettre le lien entre les différents niveaux de modélisation. La simulation complète voire, dans certains cas, supplée l'expérimentation. Elle peut aussi être utilisée pour valider des modèles de haut niveau à partir de données expérimentales. La simulation peut enfin servir d'outil de conception pour mettre au point des dispositifs expérimentaux. En inversant la perspective, on constate que la simulation est également souvent devenue un facteur limitant dans beaucoup de ces applications où la question de l'efficacité numérique de la simulation constitue un verrou fondamental. Les approches les plus classiques face à cette question consistent soit à rechercher des modifications internes des principes de simulation de façon à accroître leur efficacité soit à tabler sur une implémentation sur du matériel à hautes performances pour rendre la simulation viable. Dans ce projet, nous travaillons dans une optique différente dans laquelle les méthodes de simulations sont, partiellement, vues comme des "boîtes noires", éventuellement paramétrées, que l'on cherche à utiliser le plus efficacement possible (notamment à travers l'ajustement adaptatif de paramètres de simulation) pour effectuer une tâche donnée. Dans le cadre du projet, nous avons identifiés trois scénarios spécifiques d'utilisation des méthodes de simulation. Dans le premier, correspondant à l'inférence statistique probabiliste, l'outil principal considéré est celui des méthodes de Monte Carlo par chaîne de Markov (MCMC) qui constituent une alternative efficace aux approches, plus usuelles dans le cadre de la physique expérimentale, d'exploration exhaustive sur une grille. Dans le second scénario, le but est d'explorer l'espace des paramètres de façon à maximiser une fonction d'utilité (ou</p>

minimiser une fonction de coût). Dans ce deuxième scénario, nous souhaitons focaliser nos efforts autour des méthodes stochastiques d'optimisation qui ont connu récemment des développements méthodologiques très significatifs. Enfin, dans le dernier scénario, le but de la simulation est de permettre la découverte de caractéristiques pertinentes des données, par exemple, d'observables qui prédisent bien certains paramètres d'intérêt du système. Là encore, le but est de fournir des outils, issus des approches d'apprentissage artificiel, fournissant une alternative à la recherche exhaustive d'observables du système. Les scénarios considérés dans le cadre de ce projet sont directement liés aux tâches d'inférence et de conception suscitées par deux expériences majeures dans le domaine de la physique des astroparticules, les expériences Pierre Auger et JEM-EUSO. Dans les deux cas, le but recherché est l'étude des propriétés des rayons cosmiques à très haute énergie à partir de l'observation des gerbes de particules générées par la collision de particules issues de rayons cosmiques avec des particules atmosphériques. L'expérience Auger et d'ores et déjà déployée sur 3000 kilomètres carrés de la pampa argentine tandis que le télescope JEM-EUSO est prévu pour être mis en place sur la station orbitale internationale à partir de 2015. Bien que les développements méthodologiques évoqués ci-dessus soient motivés par ces deux applications concrètes, les techniques développées ont également pour but d'être directement utilisables dans d'autres applications nécessitant des simulations intensives.

Partenaires

LAL
LTCI
INRIA Saclay - Île-de-France - Equipe-Projet TAO

Coordinateur

Balázs Kégl - LAL
balazs.kegl@gmail.com

Aide de l'ANR

1042903€

Début et durée

01/10/2010 - 48 mois

Label pôle

Cap Digital Paris-Région

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet	SIMUDMRI – Simulation du signal d'IRM diffusion dans tissus biologiques
Résumé	<p>L'imagerie par résonance magnétique du processus de diffusion cérébrale de l'eau (IRMD) est une technique d'imagerie qui repose sur le codage en phase du mouvement brownien des molécules d'eau. La résolution des images obtenues est proche du millimètre alors que le déplacement observé des molécules reste limité à quelques dizaines de micromètres. Un coefficient de diffusion apparent (ADC) ou un tenseur de diffusion (TD) peuvent être calculés en chaque voxel de l'image à partir d'un modèle analytique de l'atténuation du signal observée. L'IRMD est devenue un outil diagnostic standard de l'ischémie cérébrale et d'inférence de la connectivité anatomique cérébrale. Aujourd'hui, elle reste l'unique méthode d'accès in vivo au connectome humain. Récemment, il a été démontré que l'IRMD peut rendre compte de l'activité cérébrale, devenant ainsi un champ actif de la recherche méthodologique en imagerie fonctionnelle. Le but de ce projet est de comprendre, au-delà de de l'ADC et du TD, l'influence de la microstructure des tissus cérébraux sur le signal observé. A l'échelle cellulaire, le cerveau humain est composé de structures aux dimensions proches du micromètre, taille bien inférieure à la meilleure résolution spatiale de l'IRMD. Chaque voxel renferme quantité de cellules aux tailles et aux formes variables, dont les membranes constituent une géométrie tortueuse qui perturbe le mouvement des molécules d'eau, et donc le signal IRM associé. Dans une expérience d'IRMD, le temps d'observation du phénomène de diffusion est de l'ordre de 20-50 ms. En tenant compte du coefficient de diffusion de l'eau « libre » $D=3.10^{-9}$ m²/s à 37°C, on aboutit à un libre parcours moyen proche de 15-25 micromètres. Les molécules d'eau sont donc amenées à interagir avec les nombreuses membranes anisotropes des cellules, des fibres ou des macromolécules du milieu cellulaire. Afin de comprendre le rôle de cette anisotropie sur l'atténuation du signal IRM, nous développons actuellement un code de simulation du signal d'IRMD à l'échelle du voxel, en tenant compte d'une géométrie réaliste des modèles de cellules à partir d'information issues de microscopie électronique, ainsi que d'encodage en phase</p>

du processus de diffusion similaires à ceux possibles sur les systèmes IRM. La simulation numérique sera abordée en suivant deux directions. La première direction repose sur la recherche d'une solution numérique de l'équation phénoménologique de Bloch-Torrey en utilisant les fonctions de Green. La seconde direction reposera sur une simulation de type Monte-Carlo. Les deux approches seront ensuite combinées pour donner naissance à une méthode hybride : l'approche reposant sur les fonctions de Green sera utilisée pour accélérer le code Monte-Carlo dans les régimes où les résultats de la simulation satisfont l'équation de Bloch-Torrey et aux endroits où la géométrie peut être modélisée à l'aide de simples surfaces régulières ; le code Monte-Carlo sera conservé dans les autres cas. A terme, ce nouveau simulateur hybride devrait permettre de significativement diminuer le temps de calcul et donc autoriser la simulation d'environnement aux dimensions décuplées. L'objectif final de ce projet est de proposer un nouvel outil de simulation du signal d'IRMD tenant compte de rendus géométrique réalistes de l'environnement cellulaire, de paramètres d'acquisition réalistes concernant les impulsions de gradients d'encodage en diffusion, tout en assurant des résultats précis, à plusieurs échelles, et dans un temps de simulation acceptable. Ce nouveau simulateur constituera un outil unique pour comprendre l'impact de la microstructure du parenchyme cérébral sur le signal d'IRMD, et aidera probablement à la mise au point de nouveaux schémas de séquence d'imagerie qui tireront partie des découvertes faites à travers son utilisation.

Partenaires

INRIA Saclay - Ile-de-France Equipe-Projet DEFI
CEA I2BM NeuroSpin

Coordinateur

Jing-Rebecca Li - INRIA Saclay - Ile-de-France Equipe-Projet DEFI
jingrebecca.li@inria.fr

Aide de l'ANR

400036€

Début et durée

01/11/2010 - 36 mois

Label pôle

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet	SKIPPI – Système d’Ingénierie Kansei - Conception Intégrée Produit/Process Image de marque
Résumé	<p>Les recherches en Sciences de la conception s’orientent en partie vers la numérisation des phases amont du processus de conception. Cette évolution répond à une problématique industrielle visant à réduire les délais de développement tout en augmentant la variabilité de l’offre. La numérisation s’appuie sur une formalisation des processus cognitifs métiers implicites des concepteurs, suivie par la définition de règles de conception visant à assister et optimiser certaines parties routinières de l’activité. Ces règles sont ensuite relayées par des algorithmes appropriés pour donner lieu à de nouveaux outils d’aide à la conception. A ce stade de la conception, les données sont par nature vagues et incomplètement définies. Les algorithmes utilisés se basent avant tout sur des approches statistiques classiques. Pourtant certains outils issus du domaine de l’intelligence artificielle se sont avérés plus efficaces pour ce type de données qui sont par nature hétérogènes.</p> <p>Des approches scientifiques qui ont pour ambition de répondre à cette problématique existent. L’ingénierie Kansei par exemple vise à établir des liens entre des paramètres produits et une sémantique spécifique génératrice d’émotions. L’intensité de ces émotions est alors évaluée pour comprendre la réaction vis à vis d’une sémantique particulière. Cependant ces approches restent encore parcellaires et ne couvrent pas l’ensemble du processus de conception et développement. Il s’ensuit une rupture dans la chaîne numérique donnant lieu à deux systèmes distincts: un système amont pour la conception globale, et un système aval pour la conception détaillée et le développement. Cette rupture a un impact négatif sur la cohérence du produit. D’autant plus qu’elle s’accompagne souvent d’une dé-contextualisation du projet avec une déconnexion en amont de l’impulsion stratégique, et en aval des spécifications procédés qui permettront de réaliser concrètement une conception. Les valeurs de la marque sont rarement prises en compte malgré leur impact hautement stratégique sur les orientations design. Il n’y a pas non plus de liens bien établis entre les spécifications produit et procédés dans le cadre de ces approches.</p> <p>Le projet SKIPPI est un projet de recherche industrielle collaborative qui vise à développer un système d’aide pour concevoir et fabriquer l’image de marque de manière intégrée en s’appuyant sur les différentes technologies suivantes: l’ingénierie Kansei, les</p>

technologies d'extraction automatique de connaissance issues de l'intelligence artificielle et la conception intégrée produit/process. Ce système numérique modélisera un processus informationnel capable de traiter de l'information analogique et floue allant de valeurs sociologiques à des attributs Kansei (sémantiques, sensoriels, stylistiques) jusqu'à des attributs produits ou procédés (forme, matériaux, caractéristiques mécaniques). Ce système sera réversible, dans la mesure où il assistera en sortie la génération de solutions design et procédés. Inversement il permettra de valider la correspondance de produits, matériaux ou procédés avec les valeurs de la marque. Dans un premier temps, le projet portera particulièrement sur le secteur sensible de l'industrie du luxe. Il sera ensuite disséminé dans d'autres secteurs de l'industrie.

Partenaires Arts et Métiers ParisTech
LIP6 - UPMC
GRENOBLE INP G-SCOP
IOBJECTS
PSYCLE
DIEDRE DESIGN
SAGEM WIRELESS

Coordinateur Améziane AOUSSAT - Arts et Métiers ParisTech
ameziane.aoussat@paris.ensam.fr

Aide de l'ANR 1209115€

Début et durée 01/12/2010 – 36 mois

Label pôle Cap Digital Paris-Région

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet	SOHUSIM – Simulation molle de l'humain
Résumé	<p>Ce projet propose de s'intéresser à la problématique de la modélisation et de la simulation d'interaction molle entre humain et objets. A l'heure actuelle il n'existe pas de logiciel capable de modéliser le comportement physique des tissus mous d'un être humain (muscles, graisse, peau) en interaction mécanique avec son environnement. Les logiciels existants tel que LifeMod ou OpenSim, modélisent les muscles comme des liens de longueur variable et appliquant une force sur un squelette rigide articulé. La gestion des tissus mous n'est pas prise en compte et ne constitue pas l'objectif principal de ces logiciels.</p> <p>Un premier axe de ce projet vise à la modélisation simple et la simulation d'un humain passif manipulé par un dispositif mécatronique avec pour objectif l'étude et la conception de systèmes de manipulation de patient à très faible mobilité (lit médicalisé). Un deuxième axe se concentre sur la modélisation détaillée et la simulation de l'interaction d'un membre inférieur actif avec des objets de type orthèses, exosquelettes, vêtements ou chaussures. L'objectif étant là aussi d'obtenir un outil de conception pour des dispositifs en contact permanent avec l'humain qui permette de déterminer l'ergonomie adéquate en termes de formes, de positionnement, de matériaux, en fonction de l'utilisation visée.</p> <p>Les problématiques dans ce projet se situe au niveau de la modélisation de « matériaux mous » en interaction avec divers objets. Les « matériaux mous » que l'on entend modéliser peuvent être des matériaux artificiels tels que le silicone ou naturel tel que le latex. Ces matériaux pourront constituer des objets homogènes (ex : balle en caoutchouc pleine) ou hétérogènes (ex : mousse de silicone contenant des micros bulle d'air), on pourra envisager la modélisation de structures gonflables. Outre les matériaux mous inertes, nous envisageons aussi et surtout la modélisation de l'humain au niveau de ses tissus organiques vivants (muscle, graisse). Ce niveau de modélisation nécessitera un couplage avec des données issues d'imagerie médicale de type IRM afin d'être le plus fidèle possible avec l'humain considéré. La modélisation des muscles devra prendre en considération le caractère actif de ce tissu organique. Ces structures organiques molles auront donc des propriétés variables par exemple en termes de forme ou de raideur. La modélisation des déformations et des phénomènes de frottement seront un aspect important du projet. La fonction propre des muscles étant la mobilité, l'interaction avec le squelette et ses conséquences au niveau de la posture et des mouvements de l'humain modélisé devront être pris en considération par l'implémentation de modèles biomécaniques. Cette modélisation/simulation des tissus mous constituera une réelle avancée dans le domaine de la simulation de</p>

l'humain. Elle permettra, d'étudier le comportement des tissus mous en interaction avec l'environnement sur des aspects manipulation de patient, de simuler les effets d'appuis prolongés, de prédéterminer les zones de frottements excessifs, de formation d'escarres et de lésions liées à l'utilisation d'objets. Les aspects dynamiques de ses simulations permettront d'étudier les énergies mise en jeu lors de phases de mouvements de la vie courante. Les outils développés dans ce projet auront vocation à être intégrés, sous forme de module, à des logiciels de conception assisté par ordinateur (CAO).

Partenaires

INRIA Grenoble - EVASION / LJK
FATRONIK FRANCE
INRIA / Université Sciences et Techniques du Languedoc
Montpellier I
HPC Project
CHU Montpellier - Lapeyronie

Coordinateur

Francois FAURE - INRIA Grenoble - EVASION

Aide de l'ANR

569731€

Début et durée

01/10/2010 – 48 mois

Label pôle

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet	SPUTNIK – Simulation d'expériences pour l'étude de la structure et de la dynamique de protéines
Résumé	<p>L'objectif de ce projet est d'améliorer le lien entre simulation et expériences dans l'étude des macromolécules biologiques, et notamment des protéines. Il rassemble des experts des principales techniques utilisées dans l'exploration de la structure et dynamique des biomolécules: simulation moléculaire, diffusion de neutrons, résonance magnétique nucléaire et calcul scientifique. Les techniques de simulation sont déjà un outil important dans l'interprétation d'expériences en biophysique. Pourtant, l'état de l'art en simulation moléculaire est la simulation d'une protéine unique entourée d'une faible quantité de solvant. Un tel système minimaliste ne représente pas la réalité d'un échantillon expérimental, qui prend la forme ou d'un cristal de protéines ou d'une solution diluée, avec dans les deux cas des impuretés et d'autres imperfections. Un système de simulation typique ne représente pas non plus les caractéristiques importantes d'une installation expérimentale. Des effets indésirables mais inévitables, comme la diffusion multiple et l'absorption (pour la diffusion de neutrons) ou la destruction d'un cristal par le rayonnement (en cristallographie), ne sont pas pris en compte. Ceci est à l'origine de différences entre simulation et expérience qui diminuent l'utilité des simulations dans l'interprétation des données expérimentales. Un aspect important du projet proposé est le développement d'expériences « virtuelles », dans le sens d'inclure les effets indésirables mentionnés ci-dessus. De cette manière des montages expérimentaux peuvent être conçus en évitant, dans la mesure du possible, l'approche « trial and error » et des études préliminaires peuvent être effectuées in silico. Cette approche est aussi indispensable afin d'établir une relation avec des modèles théoriques. Afin d'atteindre ces objectifs les partenaires peuvent s'appuyer sur leurs compétences variées en modélisation et simulation de systèmes biomoléculaires. Trois des quatre partenaires ont déjà collaboré avec succès dans le cadre du projet ANR THALER (ANR-06-CIS6-012-01). Les deux autres points importants du projet sont liés à la simulation de systèmes biomoléculaires de grande taille. Ils concernent le calcul lourd des interactions électrostatiques dans ces systèmes</p>

sur des ordinateurs massivement parallèles, ainsi que le traitement efficace des opérations entrée/sortie (E/S). Depuis l'apparition des machines vectorielles dans le domaine du calcul scientifique dans les années 1980, les opérations E/S sont une préoccupation permanente, car elles représentent un obstacle majeur pour le développement de programmes pour la simulation de systèmes de N particules. Et pour le calcul des interactions électrostatiques et pour la solution du problème des E/S parallèles le FZJ a développé des solutions qui sont une bonne base pour des extensions du moteur de simulation qui a été développé dans le cadre du projet THALER. Les équipes du CBM et du FZJ ont des contacts de longue date et ont collaboré dans le passé essentiellement sur l'étude de la dynamique des liquides. Le projet présenté sera une opportunité de profiter de l'environnement excellent de l'équipe du FZJ, en ce qui concerne les installations de d'ordinateurs parallèles de l'expertise technique.

Partenaires CNRS
ILL
ENS
FZJ

Coordinateur Gerald Kneller - CNRS
gerald.kneller@cnsr-orleans.fr

Aide de l'ANR 703681€

Début et durée 01/01/2011 - 36 mois

Label pôle

Programme COSINUS

Edition 2010

Titre du projet	SYNE2ARTI – Des réseaux de régulation génique aux tissus artificiels
Résumé	<p>La biologie synthétique ou bio-ingénierie vise à développer et construire in vivo des systèmes biologiques qui réalisent des tâches nouvelles, potentiellement utiles. Concrètement, il s'agit de reprogrammer des systèmes biologiques existants. Par opposition avec les méthodes de biotechnologies traditionnelles, une attention particulière est portée au développement d'outils biotechnologiques et informatiques qui facilitent la conception et la construction de nouveaux systèmes. Dans ce projet, nous nous intéressons plus particulièrement à l'utilisation de méthodes de biologie synthétiques pour la conception de nouveaux tissus biologiques. Ces nouveaux tissus ayant la capacité de compenser des défauts de tissus existants voire de complètement les remplacer, ces travaux ont un potentiel thérapeutique important. Leur développement nécessite premièrement de reprogrammer la croissance, la différenciation et la mort cellulaire, ce qui implique des modifications profondes des réseaux de régulation intracellulaires, et deuxièmement, de mettre au point des systèmes de communication intercellulaire pour coordonner au niveau supra-cellulaire le développement du tissu. Cette tâche est délicate car d'une part, la modification des réseaux d'interactions moléculaires dans la cellule peut affecter les interactions entre cellules et entre la cellule et son substrat, ce qui peut affecter la structure et le fonctionnement du tissu, et d'autre part, les changements de structure et de fonction des tissus affectent en retour le fonctionnement de la cellule, notamment via des changements de l'expression génique. Ainsi, le comportement global de ces tissus émerge des interactions locales entre des cellules profondément modifiées : cet aspect multi-échelle doit être pris en compte. Malheureusement, à cause précisément de cet aspect multi-échelle, l'analyse par simulation numérique monolithique des modèles de tissus, développés pour assister la conception, n'est pas réalisable : il s'agit d'analyser des systèmes d'équations différentielles composés de millions d'ODEs dont les paramètres sont incertains (définis par des distributions de probabilités; équations différentielles aléatoires). En plus d'importants moyens de calculs,</p>

l'analyse de tels systèmes nécessite des développements méthodologiques nouveaux pour la simulation numérique multi-échelle. Pour traiter de ces problèmes, nous proposons d'utiliser des abstractions. Plus précisément, d'abord une représentation abstraite du modèle original est calculée sous la forme d'un automate stochastique à temps continu, et ensuite cette représentation abstraite est utilisée à la place du modèle différentiel original pour la simulation de modèles de tissu basé sur une représentation explicite de cellules individuelles. Le système abstrait est défini de telle sorte que ces comportements sont approximativement équivalant à ceux du système original (équivalence comportementale approchée). On peut identifier trois tâches principales. La première consiste à développer un cadre général permettant de définir formellement cette notion d'équivalence comportementale approchée entre processus aléatoires, et de proposer des algorithmes et des outils informatiques permettant de calculer ces abstractions à partir des systèmes différentiels originaux et d'estimer leur qualité. La deuxième tâche consiste à appliquer ces méthodes au calcul d'une représentation abstraite d'un réseau de régulation génique construit dans des cellules embryonnaires reprogrammées pour former un tissu synthétisant de l'insuline. La dernière tâche est de développer des modèles de cellules isolée de tissu monocouche de cellules embryonnaires et de cellules pancréatiques (beta), et de les étendre avec la représentation abstraite des mécanismes intracellulaires déterminée précédemment. Le modèle ainsi obtenu sera utilisé pour prédire le comportement du tissu et suggérer des améliorations potentielles.

Partenaires

Contraintes
Verimag
Bang
MIT

Coordinateur

Gregory Batt - Contraintes
gregory.batt@inria.fr

Aide de l'ANR

387370€

Début et durée

01/10/2010 - 36 mois

Label pôle