

Projet MesoBFC



**UNIVERSITÉ
MARIE & LOUIS
PASTEUR**

Un mésocentre unique en région BFC

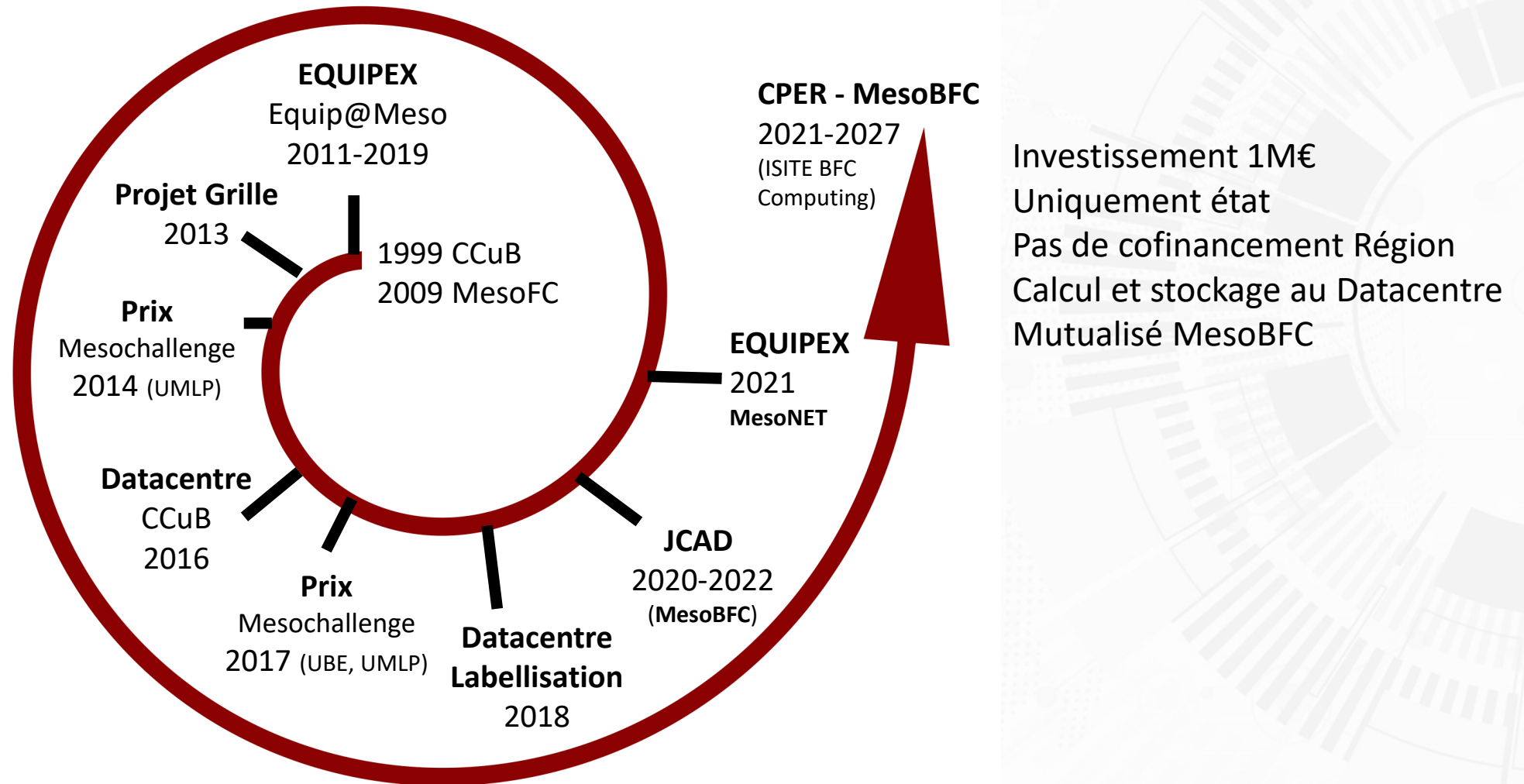
Fabien Picaud – UMLP

Kamel Mazouzi - UMLP

Projet MesoBFC

- Historique
- Motivations du projet
- Missions
- Statuts et gouvernance
- Moyens mis en œuvre
- Usages
- Positionnement et feuille de route
- Remerciements

Historique



Motivations du projet

- **Pourquoi MesoBFC ?**

- Le MESR exige un hébergement dans les datacenters régionaux qu'il a labellisés
- La Région demande un seul mésocentre en Région BFC
- La Région ne soutient plus financièrement les mésocentres locaux depuis 2021, bien qu'ils soient labellisés en tant que plateforme.
- La DRARI soutient et soutiendra financièrement uniquement MesoBFC

- **Pour qui ?**

- En priorité pour l'ensemble de la communauté recherche BFC et les acteurs économiques

- **Pour quel bénéfice ?**

- Alignement avec les politiques/stratégies régionales et nationales de mutualisation. Eligibilité aux financements.
- Amélioration des services proposés.
- Economies d'échelle sur l'hébergement (Salles IT, fluides, efficacité énergétique, sécurité physique).

Missions

- Assurer le financement du projet
- Mutualiser et mettre en œuvre des moyens de calcul et de stockage dédiés à la recherche au niveau régional
- Assurer une veille technologique
- Assurer le rôle de plateforme de recherche
 - Une animation scientifique
 - La formation des usagers
- Assurer le lien avec l'écosystème national du calcul intensif
- Assurer la promotion des usages de la simulation numérique auprès des entreprises régionales
- Assurer la sécurité de l'information et protection des données à caractère personnel (Certification ISO-27001 et HDS)



Statuts

- Réunions des ressources des 2 mésocentres historiques de Bourgogne (CCUB) et de Franche-Comté (MésFC)
- Création d'un service inter-établissement unique opéré par ses personnels initiaux et dont les équipements sont hébergés au datacenter labellisé. (Convention soumise à signature)
- Le consortium comprend les tutelles fondatrices du mésocentre MesoBFC
 - Université Bourgogne Europe (UBE)
 - Université Marie et Louis Pasteur (UMLP)

Elles apportent les services généraux de nature à permettre le fonctionnement du mésocentre (notamment les ressources humaines).

Gouvernance

Comité de direction - CODIR (opérationnel)

Comité de pilotage - CP (politique)

Comité scientifique - CS (consultatif, usages)

Moyens mis en œuvre

Répartition RH

Rôles	ETP UBE	ETP UMLP
Responsable scientifique	1 enseignant chercheur en décharge d'enseignement de 64h heures par an	1 enseignant chercheur en décharge d'enseignement de 64h heures par an
Responsable technique	½ ETP IGR	1 ETP IGR
Maintien en condition opérationnelle (physique et environnement)	½ ETP IGR/IGE	
Administrateur	2 ETP IGE (4 IGE 50%)	2 ETP IGE
Calcul scientifique	1. ETP IGE poste à créer	

Fluides : Pris en charge par UBE et UMLP comme décrit dans la convention de service inter-établissements

Gestion financière : Portée par UBE

Moyens mis en œuvre

Cluster de calcul MesoBFC actuel (PoC)

- Machines en production fin 2024 dans le datacenter 1 et prêtes à fonctionner

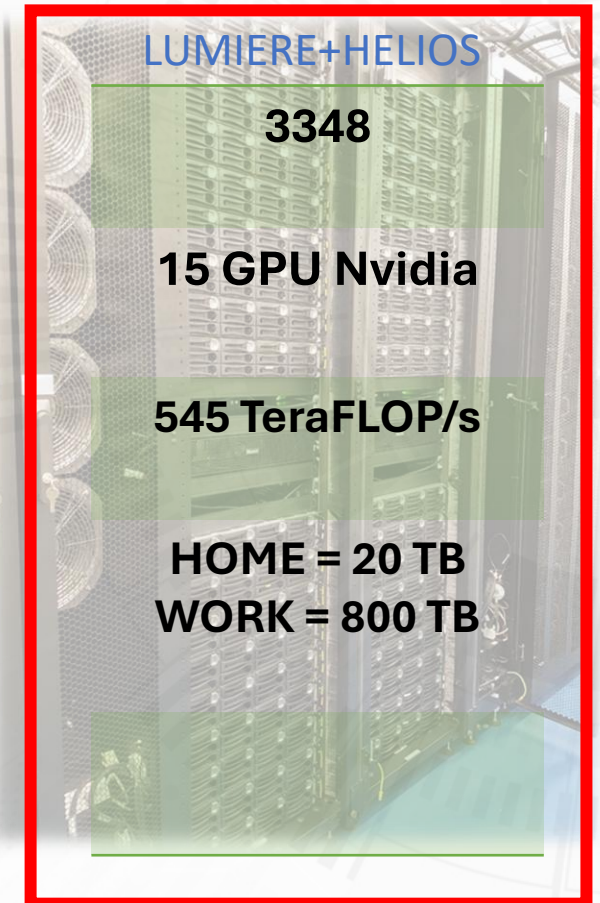
Nombre de cœurs CPU	3680
Nombre de GPU	32 GPU Nvidia
Puissance	670 TeraFLOP/s
Stockage	HOME = 300 TB WORK = 700 TB ARCHIVE = 4100 TB
Cout d'investissement	1400 K€ HT

Moyens mis en œuvre

Cluster de calcul MesoBFC actuel (PoC)

- Machines en production fin 2024 dans le datacenter 1 et prêtes à fonctionner

Nombre de cœurs CPU	3680
Nombre de GPU	32 GPU Nvidia
Puissance	670 TeraFLOP/s
Stockage	HOME = 300 TB WORK = 700 TB ARCHIVE = 4100 TB
Cout d'investissement	1400 K€ HT



Moyens mis en œuvre

Cluster de calcul MesoBFC

- 212 Machines en production dès 2027 dans le datacenter 2 (janvier 2027)

Nombre de cœurs CPU	8352 (CPU Intel)
Nombre de GPU	102 GPU Nvidia (A100-H200)
Puissance	1523 TeraFLOP/s
Stockage	HOME = 300 TB WORK = 700 TB ARCHIVE = 4100 TB
Cout d'investissement	3014 K€ HT



- Le réseau Ethernet est pris en charge par l'uBE



Usages

Domaines	Laboratoires / Etablissements	Projets financés (2023-2025)
• Santé • Imagerie médicale • Biomédicaments • Génomique • Cancérologie • Maladies Neurodégénératives	CHU-Dijon, CHU-Besançon UMR INSERM UMR CNRS UMR INRAE UR UBE UR UMLP	- 73 Projets scientifiques utilisent les ressources de calculs dont ❑ 20 projets ANR ❑ 8 projets PIA/Région ❑ 15 projets Europe ❑ 3 Equipex ❑ 3 projets internationaux ❑ 5 projets CNRS ❑ 2 projets INSERM ❑ 1 projet « privé » ... - 125 publications
• Sciences de la matière et technologies • Matériaux & nanomatériaux • Photonique & plasmonique • Chimie organique		
• Sciences de l'Aliment et Agro-Environnement • Climatologie • Physicochimie des molécules		
• Sciences Humaines et Sociales • Statistiques, langage, culture, patrimoine, société, ...		

Usages

Premiers grands défis MesoBFC

- Premier appel à projet sur le nouveau cluster
- Mise à disposition pendant 1 mois, environ, du supercalculateur
- 4 projets sélectionnés par le comité de direction
- Utilisation des 48 serveurs de calculs pour plus de 4 millions d'heures de calculs MPI

Usages



Certifié ISO-27001 - septembre 2024 (sécurité des systèmes d'information)



Certification d'Hébergeur de Données de Santé (niveau 4) juillet 2025

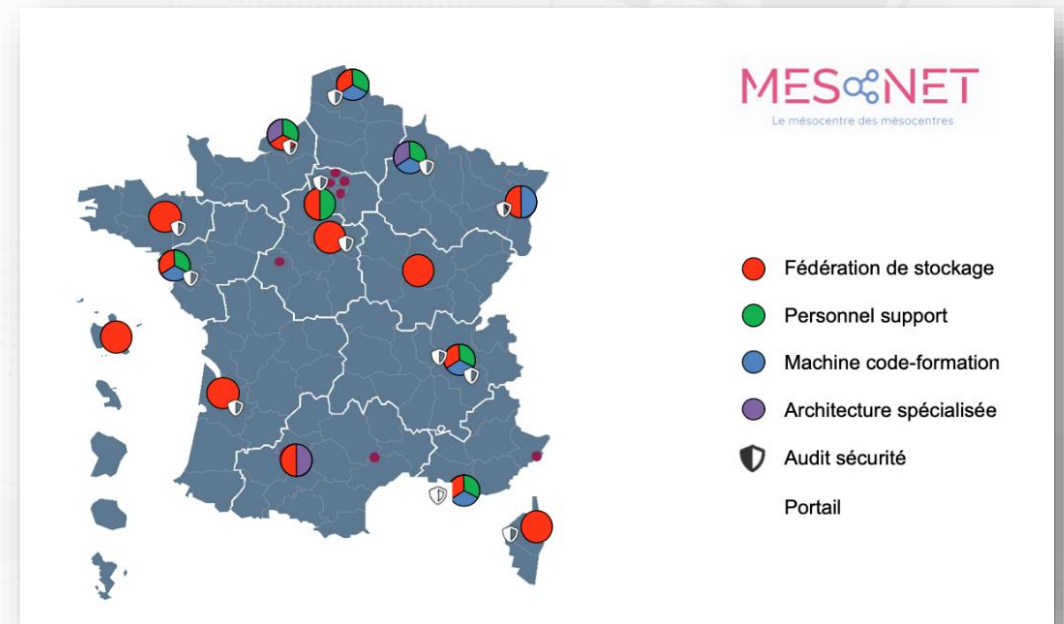
EXEMPLES DE PROJETS EN SANTE (DIAGNOSTIC, SUIVI...)

- NEOMICS : PERIGENOMED (Dépistage Néonatal par la médecine génomique)
- SAIAD (Imagerie 3D pour la chirurgie pédiatrique rénale)
- ERC SH4 (Neuropsychiatrie)
- OCTAVIA (Prise en charge de patients atteints par le VIH)
- SIA REMU (Gestion des urgences)
- GESICA (Gestion de crises sanitaires)



POSITIONNEMENT DANS LE CONTEXTE NATIONAL

- MesoBFC partenaire du **projet EQUIPEX+ 2021-27 : MesoNET**:
 - Renforcer la structuration des offres nationales et régionales en simulation numérique
 - ➔ HPC, IA, quantique
 - Mettre en place une infrastructure régionale distribuée
 - ➔ en intégrant au moins un mésocentre par région
 - Offre nationale de services associés
 - ➔ support mutualisé, ouverture au monde économique
 - Fédération des moyens de calcul en région
- MesoBFC partenaire de la future **Infrastructure de Recherche : Mesocloud** début 2026
 - Développement de l'IA et du cloud computing
 - Soutenir les projets régionaux et nationaux



Feuille de route

- Inauguration du MesoBFC (Estimée septembre 2026)
- Prochain CPER
 - Besoin estimé 3M€ tous les 5 ans pour soutenir un objectif de 10% puissance centre national
- Poursuivre notre partenariat dans **MesoNET**
- Rejoindre l'infrastructure de Recherche **MesoCloud** dès sa création. *Lettre d'engagement cosignée par UBE et UMLP.*
- Etendre les usages en intelligence artificielle et en santé.

Remerciements



Support slides

Gouvernance et comitologie

Comité de direction - CODIR (opérationnel)

Composition du comité de direction

- Responsables techniques du MesoBFC
 - Kamel MAZOUZI, UMLP
 - Didier REBEIX, UBE
- Responsables scientifiques du MesoBFC
 - Fabien PICAUD, UMLP
 - Patrick SENET, UBE

Missions

- Consulte le CS sur les besoins. Rapporte au CS la mise en œuvre.
- Dirige les projets et orientations en liens avec les besoins formulés par le conseil scientifique et objectifs fixés par le comité de pilotage

Comité de pilotage – CP (politique)

Composition du comité de pilotage

- Comité de direction du MesoBFC
- Vice-Président(e) numérique, UBE
- Vice-Président(e) numérique, UMLP
- Vice-Président(e) recherche, UBE
- Vice-Président(e) recherche, UMLP
- Représentant de la région BFC
- Représentant de la DRARI

Invités

Rôle consultatif ponctuellement en fonction des besoins.

Missions

Ce comité sera chargé de formuler des objectifs, des orientations et recommandations et soutenir les réponses aux appels à projet.

Un CR des réunions est transmis au CS par le CODIR

Gouvernance et comitologie

Comité scientifique - CS (consultatif, usages)

Composition du comité scientifique

- Comité de direction du MésobFC
- Un représentant par laboratoire de recherche utilisateur de la plateforme
- D'autres personnalités peuvent être invitées par le CODIR en fonction des besoins

Missions

- Collecter les besoins des utilisateurs et les exprimer au comité de direction.
- Assurer l'animation scientifique et la promotion des usages de la simulation numérique.
- Réunir annuellement une assemblée générale des utilisateurs.
- Organiser ponctuellement un challenge scientifique (Mésochallenge/Défi).



INVESTISSEMENTS MATERIELS MESOBFC

Serveurs de stockage haute performances	AAP RBFC - UBE 2019 = 180k€
Serveurs de calcul génériques	UMLP 2019 = 200 K€
Serveur de calcul grande mémoire HPE SuperDome	CPER 2021 = 175 K€ + 87k€ UBE
Serveurs de calcul GPU / IA	CPER 2022 = 120 K€
Serveurs de calcul génériques	FEDER UBE 2023 = 1.530 K€
Serveurs de calcul GPU / IA	AAP UBE 2020 = 200 K€
Serveurs de stockage	UBE BQR 2023 = 10 K€
Serveur de calcul génériques	UBE 2023 = 50 K€
Serveurs de connexion	Mesonet 2024 = 2 × 15 k€
Serveurs de calcul et de stockage	Laboratoires = 500k€
Serveurs de stockage	Mesonet = 80k€
Serveur de connexion	Mesonet = 32k€
Serveurs de calcul GPU / IA	CPER 2024 = 370k€ + 30k€ UBE

Les ressources pour l'IA

Logiciels (installés à la demande)

- Pytorch
- Tensorflow
- Python

Hardware IA

- En production :
 - 6 NVIDIA A100 80GB
 - 2 NVIDIA A100 40GB
 - 2 Tesla V100 16GB
 - 6 Tesla V100 32GB
 - 14 Tesla V100S 32GB
- A venir avec livraison DC2 :
 - 40 NVIDIA A100 80GB
 - 12 NVIDIA H200 141GB

Finance et tarification proposées

Modèle économique

- Les établissements mettent à disposition des laboratoires un outil stratégique, ils prennent en charge les coûts environnementaux :
 - Fluides
- Les tickets modérateurs, basés sur la consommation, sont pris en charge par les laboratoires et alimentent le budget de fonctionnement de MesoBFC :
 - Hébergement IT (hors fluides)
 - Calcul
 - Stockage
 - Support
- Investissements
 - AAP locaux & régionaux, nationaux (CPER,...) , Europe (FEDER, ...)
 - Cofinancements par les établissements

Finances et tarification proposées

Coût pour les établissements (au prorata des heures consommées par l'établissement)

Simulation exemple:

Paramètres globaux Datacenter	
Coût kWh	0,33 €
PUE	1,5
Paramètres MesoBFC	
kWh MesoBFC / h	75
KWh MesoBFC / an	657 000
Total heure consommées (Global MesoBFC)	39 000 000
Etablissement 1	
Heures consommées par l'établissement 1	32 000 000
Tarif établissement 1	266 843,08 €
Etablissement 2	
Heures consommées par l'établissement 2	7 000 000
Tarif établissement 2	58 371,92 €

$$\text{Tarif établissement membre} = \text{PART_MESOBFC} * \text{RATIO_HEURES_CONSOMMEES}$$

PART_MESOBFC : Estimation du coût de l'énergie totale consommée par les machines MesoBFC.

$$\text{RATIO_HEURES_CONSOMMEES} = \text{TOTAL_HEURES_ETABLISSEMENT} / \text{TOTAL_HEURES_GLOBAL}$$

$$\text{PART_MESOBFC} = \text{KWH_MESO} * \text{PUE} * \text{TARIF_KWH}$$

KWH_MESO = Consommation électrique annuelle des machines MesoBFC, calculée à partir d'un relevé régulier de la consommation réelle des machines (calcul, stockage et réseau).

PUE = 1.5 (Coefficient qui représente la consommation pour le refroidissement. Valeur à confirmer par le Pôle Patrimoine)

TARIF_KWH = Tarif actuel du kWh (0.33 €/kWh en 2023).

Application de la nouvelle tarification
Cible : janvier 2026

Coût pour les laboratoires *(intègre les m² consommés par les machines, hors fluide et hors amortissement)*

- 1h CPU consommée = 0.000201909 €
- 1h GPU consommée = 0.01938326 €
- 1 Tio stockage = 24.57€ / Tio

Exemples:

100000h CPU = 20,19€ 10000 h GPU = 193,83 € 10 Tio = 245,7€
5000000h CPU = 1009,54€ 50000 h GPU = 969,16 €

Recettes estimées sur la base des consommations 2023 : 80k€ / an

Coût support = 32€/heure – on compte 1/2h/utilisateur/an
Tarif horaire dégressif par paliers en fonction du nombre de comptes

Exemples:

10 comptes. = 160€
50 comptes. = 800€
100 comptes = 1280€
400 comptes = 2880€

Exemple de forfait :

100 comptes
4 000 000 h CPU
10 000 h GPU
10 Tio stockage
 $1280 + 807,6 + 193,83 + 245,7 = 2527,13€$

Organisation du travail

- Projets et activités communes
 - Travail collaboratif en mode projet des deux équipes
 - Formation aux utilisateurs
 - Mise en place des infrastructures
 - Réponses aux appels à projet
 - Animation scientifique
 - Sécurité de l'information
 - Projets transversaux
- Support utilisateur
 - Chaque équipe assurera le support de proximité aux utilisateurs de leur périmètre respectif
- Maintenance en condition opérationnelle
 - Les infrastructures matérielles étant installées sur le site de Dijon, l'équipe locale assurera principalement les petites interventions physiques (diagnostics matériel, dépannage, installation des pièces de rechange)

Le Centre de Calcul

Mission

- Fédérer les moyens de calcul et de stockage de données scientifiques à l'échelle régionale

Offre de service

- Fourniture de puissance de calcul (HPC et IA)
- Stockage et traitement de données
- Hébergement de moyens de calcul et de stockage
- Assistance
- Formation

PHOTO/illustration



Le Centre de Calcul

Le super calculateur

- 400 serveurs
 - 8000 cœurs de calcul
 - 30 GPU (3d, IA)
 - 47 To mémoire vive
- 812 Tflops :
812 000 Milliards d'ops/secondes
- 5 Po de stockage
 - Interconnexion Réseau jusqu'à 100Gbit/s
 - Plus de 200 logiciels installés à la demande et optimisés par le CCuB.



INVESTISSEMENTS MATERIELS MESOBFC ~ 3 M€ SUR 5 ANS

Serveurs de stockage haute performances	AAP RBFC - UBE 2019 = 180k€
Serveurs de calcul génériques	UMLP 2019 = 200 K€
Serveurs de connexion	UMLP 2023 = 35 K€
Serveur de calcul grande mémoire HPE SuperDome	CPER 2021 = 175 K€ + 87k€ UBE
Serveurs de calcul GPU / IA	CPER 2022 = 120 K€
Serveurs de calcul génériques	FEDER UBE 2023 = 1.530 K€
Serveurs de calcul GPU / IA	AAP UBE 2020 = 200 K€
Serveurs de stockage	UBE BQR 2023 = 10 K€
Serveur de calcul génériques	UBE 2023 = 50 K€
Serveurs de connexion	Mesonet 2024 = 2 × 15 k€
Serveurs de calcul et de stockage	Laboratoires = 500k€
Serveurs de stockage	Mesonet = 80k€
Serveur de connexion	Mesonet = 32k€
Serveurs de calcul GPU / IA	CPER 2024 = 370k€ + 30k€ UBE



Le Centre de Calcul

Le super calculateur

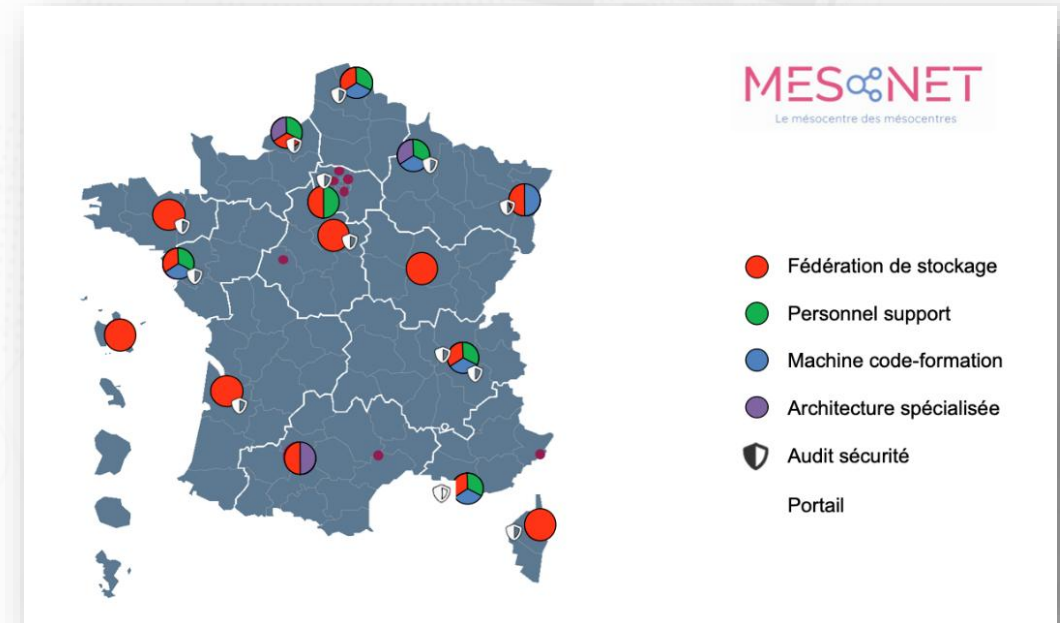
- 400 serveurs
 - 8000 cœurs de calcul
 - 30 GPU (3d, IA)
 - 47 To mémoire vive
- 812 Tflops :
812 000 Milliards d'ops/secondes
- 5 Po de stockage
 - Interconnexion Réseau jusqu'à 100Gbit/s
 - Plus de 200 logiciels installés à la demande et optimisés par le CCuB.





POSITIONNEMENT DANS LE CONTEXTE NATIONAL

- MesoBFC partenaire du **projet EQUIPEX+ 2021-27 : MesoNET**
 - MesoBFC partenaire de la future **Infrastructure de Recherche : Mesocloud**
→ début 2026
 - **Objectifs du projet MesoNET**
 - renforcer la structuration des offres nationales et régionales en simulation numérique
→ HPC, IA, quantique
 - mettre en place une infrastructure régionale distribuée
→ en intégrant au moins un mésocentre par région
 - offre nationale de services associés
→ support mutualisé, ouverture au monde économique
 - fédération des moyens de calcul en région
 - formation
 - **Trajectoire MesoBFC**
 - développement de l'IA et du *cloud computing*
 - soutenir les projets régionaux et nationaux
- = besoins conséquents en financements au travers du prochain **CPER** → **estimation de 3M€ / 5 ans**





UNIVERSITÉ
BOURGOGNE
EUROPE

Offre de service IA - Centre de Calcul
14/05/2025

UNIVERSITÉ
MARIE & LOUIS
PASTEUR

Le Centre de Calcul

Actions

UNIVERSITÉ
MARIE & LOUIS
PASTEUR



UNIVERSITÉ
BOURGOGNE
EUROPE

PHOTO/illustration

Vers un centre de calcul régional unique : **MesoBFC**

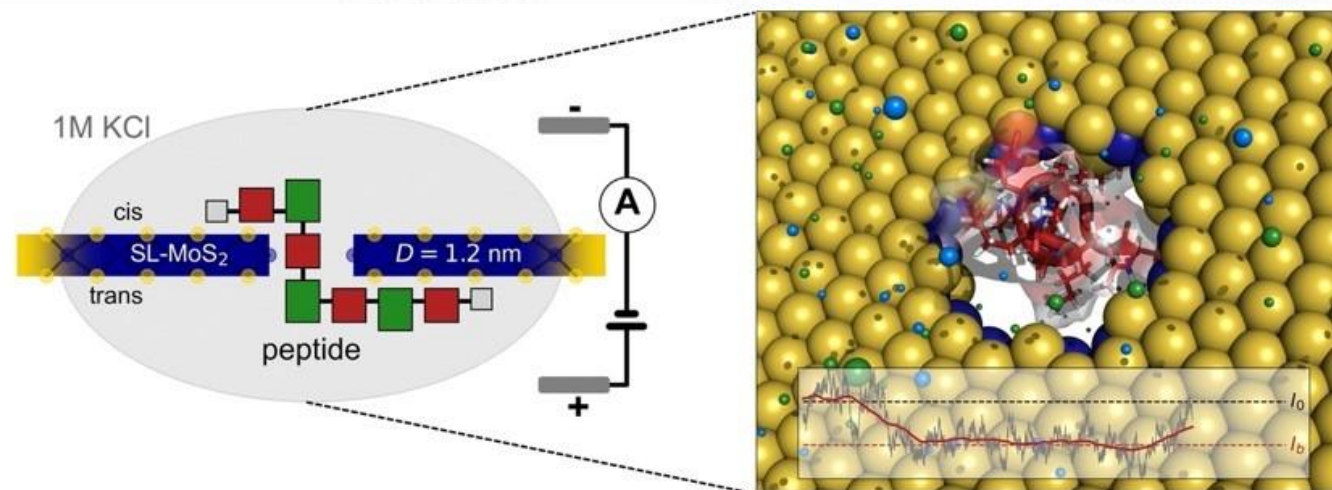
Ouverture cible : septembre 2025

- Environnement logiciel rénové
- Nouveaux comptes d'accès

Défi « Dynamique Moléculaire »

PARKIN-NANO (NICOLAÏ Adrien et DELARUE Patrice, ICB)

Séquençage d'un biomarqueur de la maladie de PARKINson



Nanocapteur

- Utilisation de nanopores 2-D solides pour la détection de la protéine α -Synucléine
- Etude par dynamique moléculaire du passage complet de la protéine (140 acides aminés; 535000 atomes)
- Enregistrement caractéristique du signal électrique au passage de la protéine
- Mise en évidence de la capacité de détection de ce nanopore

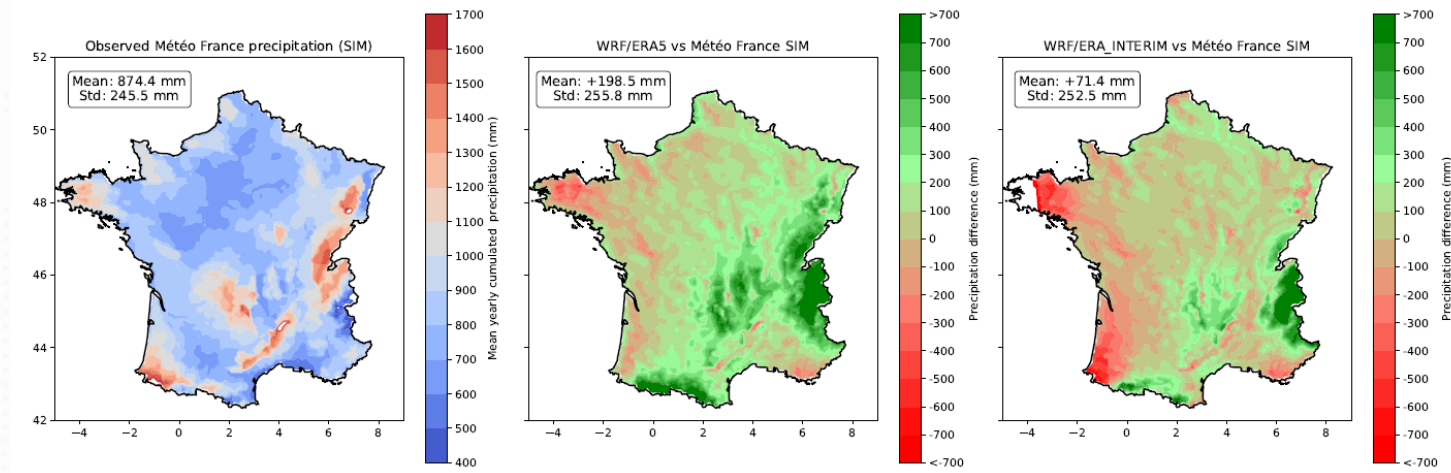
Nombre de coeurs utilisés : 1392 (2.2 M Hcpu)

Vitesse d'exécution : 400 ns/jour

Défi « Climat »

REDYCEO (CASTEL Thierry, UMR 6282 Biogéosciences, Agrosup)

REgionalisation DYnamique du futur possible du Climat de l'Europe de l'Ouest



- Simulation climatique régionale mono-domaine de 60 ans
- Basées sur le code informatique du modèle climatique régional ARW/WRF (Boulder, Colorado, USA)
- Pas d'améliorations saillantes sur la crédibilité du climat via les protocoles utilisés
- L'amplitude des biais est exacerbée avec le protocole « mono-domaine »
- Le protocole « deux domaines » est plus performant quant à sa capacité à produire un climat régionalisé crédible

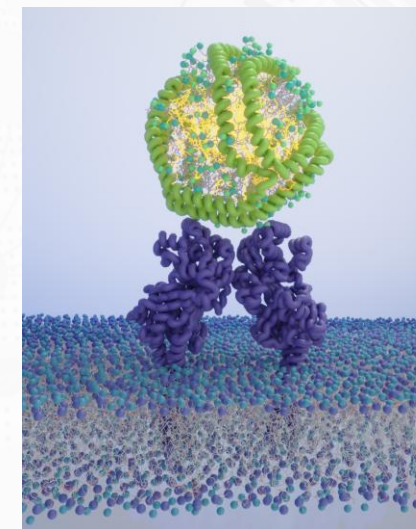
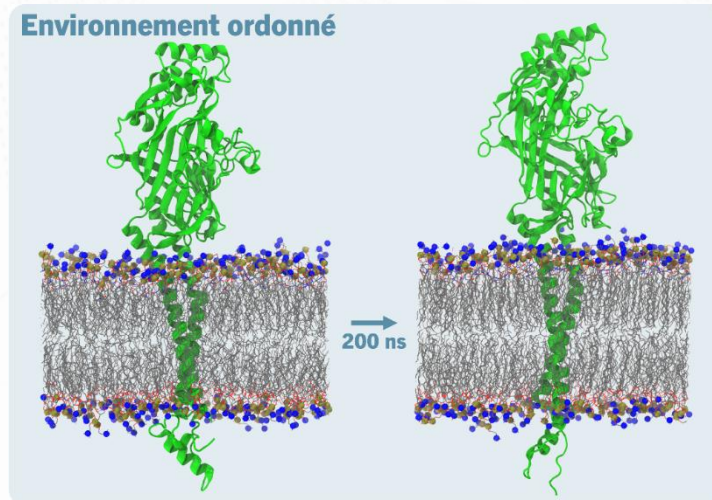
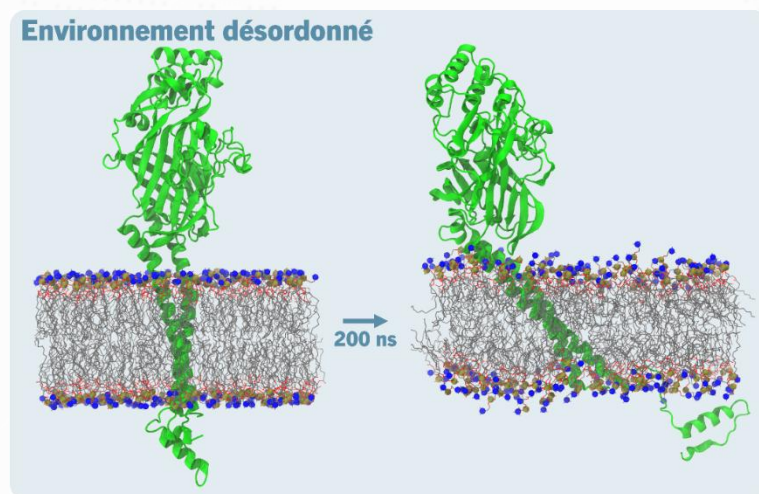
Nombre de coeurs utilisés : 600 0.8 M Hcpu

58To de données brutes générées

Défi « Dynamique Moléculaire »

DECLIP (ALLEMAND Florentin, Lab Chrono-Env)

DELivrance d'anticancéreux et Ciblage à l'aide de LIPoprotéines de haute densité (HDL)



- Influence de l'environnement lipidique sur les récepteurs de lipoprotéines de haute densité SR-BI
- Etude par dynamique moléculaire de l'interaction entre une nanoparticule lipidique (NP= et ces récepteurs (jusqu'à 800 000 atomes)
- Mise en évidence d'une interaction favorable de SR-BI dans un milieu ordonné
- Interactions clés révélées entre NP et SR-BI

Nombre de coeurs utilisés : 834 (1.2M Hcpu)

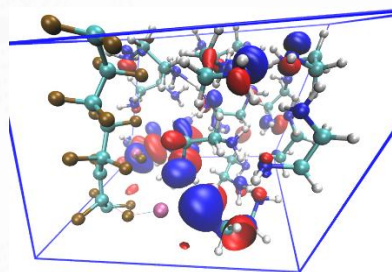
Vitesse d'exécution : 30 ns/jour

10/12/2025

Expériences en cours au Medical College of Wisconsin

AIMD-AMIDURES (*HERLEM Guillaume, Lab SINERGIES*)

Modélisations de type ab initio molecular dynamics (AIMD) des réactions de défluoration et d'amination de fluoropolymères (téflon et nafion) par des alkylamidures



- Etude théorique du mécanisme réactionnel entre un fluoropolymère (PTFE) et un sel d'alkylamidure de lithium
- Utilisation de la dynamique moléculaire ab initio (CP2K) (environ 350 atomes)
- Mise en évidence des étapes de réactions à l'échelle électronique
- Réorganisation des orbitales moléculaires pour une substitution nucléophile de mécanisme S_N1

Nombre de coeurs utilisés : 312 (0.08M Hcpu)

Temps simulé : 544 fs

**Travail soumis
Brevet accepté
Start-up en création**