



Laboratoire d'excellence (2^{ème} vague)

CALSIMLAB



MINISTÈRE
DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR
ET DE LA RECHERCHE

COMMISSARIAT GÉNÉRAL
À L'INVESTISSEMENT

INTITULE DU PROJET		CALSIMLAB : LABEX pour la modélisation et la simulation scientifiques en recherche
FINANCEMENT		5 000 000 €
PORTEUR / PARTENAIRES		PRES Sorbonne Universités / 1-ICS- Institut du calcul et de la simulation, 2-LCT-Laboratoire de chimie théorique, 3-LGM- Laboratoire de Génomique des Microorganismes, 4-LPTM - Laboratoire Physique Théorique de la Matière Condensée, 5-LIP6-Laboratoire d'Informatique de Paris 6, 6-LJLL-Laboratoire Jacques Louis Lions, 7-D'Alembert- Institut Jean Le Rond d'Alembert, 8-LOMIC - Laboratoire Océanographie Microbienne, 9-ISTEP - Institut des Sciences de la Terre de Paris
DISCIPLINE		Sciences du Numérique et Mathématiques
DESCRIPTION		Le projet vise à modéliser et simuler numériquement les grands défis de la chimie et de la biologie en réunissant mathématiciens, informaticiens, physiciens, chimistes et biologistes. Ces modèles permettront de concevoir par exemple de nouvelles molécules, de nouveaux matériaux ou de nouveaux médicaments.
APPORTS POUR	LA SCIENCE	Le projet concerne le développement de nouveaux modèles mathématiques et numériques, de nouveaux algorithmes pour de nouvelles bibliothèques logicielles de méthodes numériques, avec quatre objectifs principaux : une maîtrise de la complexité en chimie computationnelle pour la simulation de grands systèmes, des progrès dans l'approximation du calcul de l'énergie des molécules, la parallélisation massive des calculs en biologie.
	LE CITOYEN	L'utilisation de la modélisation et de la simulation numérique va permettre notamment de découvrir de nouveaux médicaments, et des nouvelles techniques de diagnostic.
	LE SYSTEME DE RECHERCHE	Le projet va permettre à la communauté scientifique française d'être plus présente dans le domaine de la simulation numérique et de pouvoir mieux exploiter les investissements réalisés par la France dans le projet PRACE. Grâce à lui, la France sera un acteur majeur de la plateforme européenne technologique qui est en train de se mettre en place sur le calcul intensif.
	LA FORMATION	Pour les disciplines qui utilisent le calcul scientifique et les simulations, tout l'enjeu est de renforcer l'interdisciplinarité avec ces domaines. CALSIMLAB veut jouer un rôle important dans la formation des étudiants à l'interface entre disciplines et leur permettre d'acquérir une double compétence, avec une incitation à choisir des unités d'enseignement sur la modélisation et des offres de doctorats à l'interface entre deux disciplines liées au calcul scientifique. Les partenaires du projet CALSIMLAB sont déjà largement impliqués dans ce type d'enseignement dans les masters existants sur les systèmes complexes, les méthodes numériques appliquées aux géosciences, la bioinformatique... Pour élargir cette offre à l'international, le programme "Bioinformatique, biomathématiques et modélisation" est proposé conjointement par l'UPMC et l'Université Libre de Bruxelles. Des écoles d'été seront aussi organisées et le lien avec les chercheurs de l'European High-Performance Computing Infrastructure assuré. CALSIMLAB prévoit aussi la formation continue nécessaire à l'industrie dans ce domaine.
	L'ECONOMIE	L'utilisation de la simulation numérique a des impacts économiques très importants avec d'une part une réduction des coûts de R&D et d'autre part, une plus grande réactivité concernant le développement de nouveaux produits. Le projet mènera une politique active de valorisation des résultats de la recherche avec la SATT LUTECH et en liaison avec les pôles de compétitivité Systematic, Aerospace Valley, Finance Innovation et CapDigital.
LOCALISATION	REGION(S)	Île-de-France, Languedoc-Roussillon
	VILLE(S)	Paris, Banyuls-sur-Mer