



ROMEO

Centre de Calcul Régional

Région **ALSACE**
CHAMPAGNE-ARDENNE
LORRAINE



UNIVERSITÉ
DE REIMS
CHAMPAGNE-ARDENNE



RM
REIMSMETROPOLE

Chef de projet / CTO ROMEO

Arnaud RENARD

arnaud.renard@univ-reims.fr

<http://romeo.univ-reims.fr>



University of Reims

Université de Reims Champagne-Ardenne (URCA)



Multidisciplinary university

- about 23 000 students
- a wide initial undergraduate studies program
- graduate studies and PhD program linked with research labs



The ROMEO HPC Center is a platform hosted by URCA

- Funded by European Community, The french government, Champagne-Ardenne Council and the city of Reims
- high performance computing resources
- for both industrial and academic researchers in the region
- an in-depth expertise in different engineering fields: HPC, applied mathematics, physics, biophysics and chemistry.
- first *Cuda Research Center* in France (2012)



Integrated in the European HPC ecosystem

- link between large hardly accessible national centers and small research laboratories and SMEs of the region.
- member of the French Tier 1.5 network *equip@meso* managed by *GENCI*
- member of the European Platform *ETP4HPC*



Les Missions ROMEO

- Ressources Numériques pour la Recherche
 - Calcul / Stockage / Expertise / Logiciels / Support / Formations
- Pour les chercheurs des établissements de Champagne-Ardenne
 - 300 comptes, 4 comités thématiques
- Au service des entreprises de la région
 - Chaire Industrielle Calcul Intensif et Industrie
 - Partenaire du projet *Diffusion de la simulation numérique* (GENCI + TERATEC)
- Implication dans les Formations URCA
 - Masters Informatique, Mathématiques Appliquées, Chimie Théorique
 - RomeoLab (plateforme web de MOOC HPC)
 - GPU Education Center
- Expertise et innovation technique HPC
 - GPU Research Center / GPU Application Lab [NVIDIA]
 - Projet Infinicortex, GPU-Direct, rCUDA, ...
- Animation scientifique
 - Journée ROMEO (105 participants en 2015, Prochain : 9 juin 2016)
 - Ateliers thématiques



Historique ROMEO

romeo	romeo2	clovis	+ Romeo
2002 - Sun	2006 - Bull	2010 - Bull	2013 - Bull
24 CPU	100 cœurs x 4	500 cœurs x 5	2080 cœurs x4
47 Gflops - 9 KW	617 Gflops (x12) - 27 KW	6 Tflops (x10) - 25 KW	254,0 Tflops (x42) - 70 KW
24 Go RAM · 200 Go DD	320 Go RAM · 8 To DD	1 To RAM · 16 To DD	4 To RAM – 200 To DD + //
	7 + 1 + 1 nœuds	40 + 2 nœuds	130 noeuds
	Interco. 10 Gb/s	Interconnexion 40 Gb/s	Interconnexion 40 Gb/s
	locaux ouverture indus. projet régional	GPU Visualisation Distante hybride Win / Linux	260 K20X TOP500 #151 GREEN500 #5



Domaines & Utilisateurs

3 thèmes de recherche

- Les mathématiques et l'informatique
- La physique et les sciences de l'ingénieur
- La modélisation des systèmes moléculaires complexes

3 établissements régionaux

URCA · UTT · ENSAM CeC



Utilisateurs académiques

CNRS, INRA, INSERM, ...

ICMR (UMR CNRS 6229), GRESPI (EA 4301), LMR (EA 4535), IMAB, CRESTIC (EA 3804),

GSMA (UMR CNRS 6089), LISM, MEDyC (UMR CNRS 6237), ICD (UTT), MSMP (ENSAM)

Collaborations nationales (Amiens, Nancy, Montpellier, Marseille, Versailles ...)

Utilisateurs industriels : prestation de calcul, stockage, VM, support calcul, logiciels, expertise, formation, ...

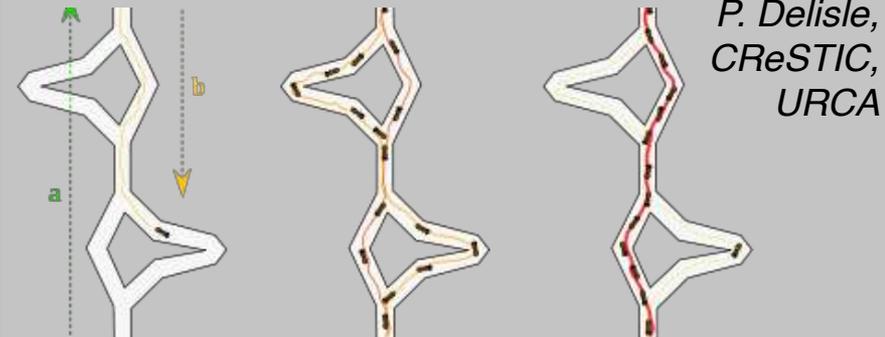


Domaines & Utilisateurs

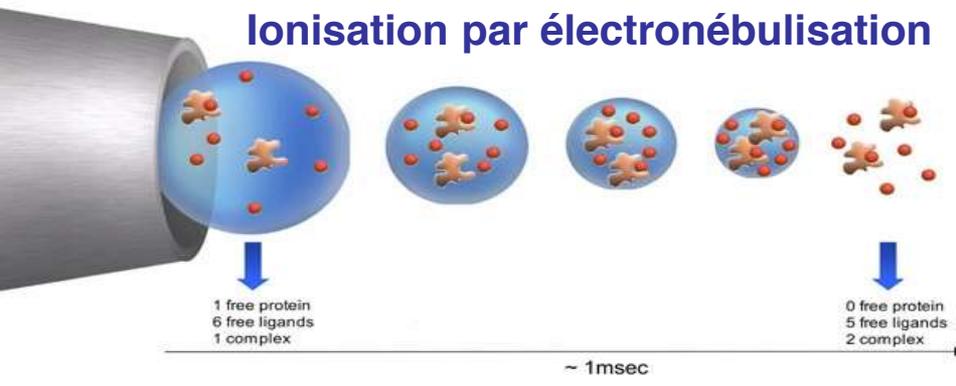
3 thèmes de recherche

- Les mathématiques et l'informatique
- La physique et les sciences de l'ingénieur
- La modélisation des systèmes moléculaires complexes

Recherche opérationnelle, Tournées de véhicules, Colonies de Fourmis

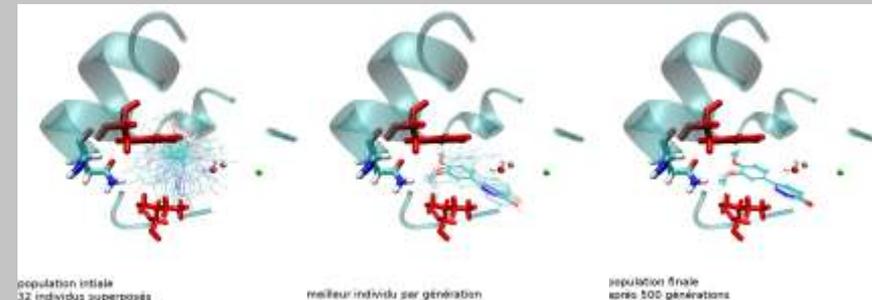


Ionisation par électronébulisation



Docking quantique

Molécules d'intérêt thérapeutique
C. Barberot, E. Henon, ICMR, URCA



Mécanismes d'évaporation, Modèle mésoscopique de gouttelettes chargées, simulations Monté Carlo
D. Bonhommeau, GSMA, URCA



Intégration / Collaborations / Visibilité

Visualiser

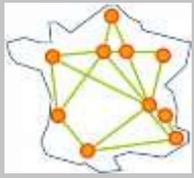


Simuler



Modéliser

Fondamental



Industriel



Maison de la Simulation de Champagne-Ardenne Accompagnement de la recherche

- 20 doctorants
- Collaboration nationales / internationales
- Plates-formes technologiques de l'URCA

Enseignement HPC (100 comptes)

- Master Chimie Substances Naturelles et Médicaments
- Pôle Grand-Est du Réseau Français de Chimie Théorique
- Master Informatique et Mathématiques

Animation scientifique

Congrès (IWOMP, LAD, ...), journées régionales, Fête de la science, journées ROMEO, Cuda Research Center, formations CUDA, OpenACC et DDT ...

Ouverture aux industriels



L'écosystème de ROMEO



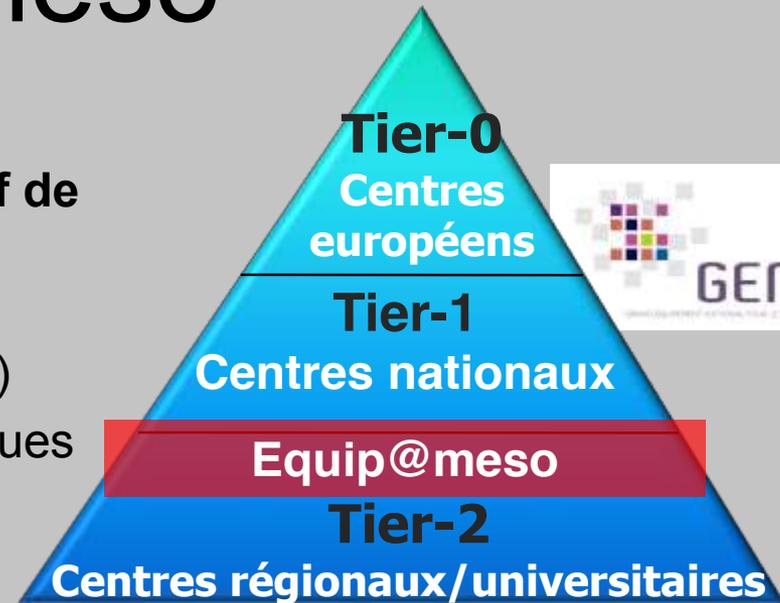
Equip@meso

Equipement d'excellence de calcul intensif de Mésocentres

- Coordonné par GENCI (Groupe des Equipements Nationaux en Calcul Intensif)
- Dix partenaires universitaires et académiques

Relayer au niveau régional

- la stratégie nationale HPC portée par GENCI
Renforcer les compétences et les capacités de calcul régionales
Excellence et de proximité (formation, éducation ou calcul)
Complémentarité régionale / nationale
- l'initiative GENCI / INRIA / OSEO
pour doper l'innovation et la compétitivité des PME



MEMBRES EQUIP@MESO

Partenaires

- GENCI
- UdS (Strasbourg)
- CEA (Maison de la Simulation)
- AMU (Aix-Marseille)
- URCA (Reims)
- UCBL (Lyon)
- PSL (Paris Sciences Lettres)
- UPMC (Pierre & Marie Curie)
- UT (Toulouse)
- UJF (Grenoble)
- CRIHAN (Rouen)

Partenaires adhérents :

- MCIA (Bordeaux)
- UFC (Franche-Comté)
- UB (Bourgogne)
- UM2 (Montpellier)
- CCSC (Orléans)



ETP4HPC

- Plateforme Technique Européenne pour le Calcul à Haute Performance
 - Forum industriel
 - Dialogue avec la commission européenne
 - Définir les priorités et plans d'action
 - Compétitivité technologique à moyen et long terme
 - Première Université Française adhérente
 - Au cœur de notre réseau
- + Mésocentres, BUX, CRC



Initiative bâtie en cohérence avec les recommandations du plan France Numérique 2012
Lancée avec l'INRIA et OSEO, en partenariat avec cinq pôles de compétitivité



Les objectifs HPC-PME

Amener les PME à « se poser la question de la simulation numérique » et leur démontrer le gain de compétitivité obtenu avec le HPC

But : Démonstration de la plus-value de la simulation et du calcul intensif sur la compétitivité.

- **Qualifier et Expertiser** le projet et s'appuyant sur les partenaires de l'initiative, et en particulier sur les écosystèmes des pôles de compétitivité partenaires
- **Aider** à la **construction** de ce projet dans sa dimension technique, en s'appuyant sur l'expertise et les ressources du programme
- **Insérer** ce projet dans les dispositifs de **financement existants**
- **Formation** et partage des bonnes pratiques ;
- **Expertise** fondée notamment sur un transfert de compétences issues de la recherche publique ;
- **Accès aux équipements** et logiciels de calcul intensif ;

2015 : la chaire Calcul Intensif et Industrie



Chaire Calcul Intensif et Industrie



- Partenaires industriels : BULL, NVIDIA, CEA DAM IdF
- Partenaires publics : Reims Métropole, Région Champagne-Ardenne
- Chaire déclinée en 3 axes
 - Calcul intensif et enseignement
 - CUDA Research Center
 - Calcul intensif et recherche
 - Calcul scientifique sur accélérateurs
 - Calcul intensif et industrie
 - Appropriation des outils numériques par les PME



Titulaire de la chaire C2I2 :

Recrutement d'un PR27 en cours

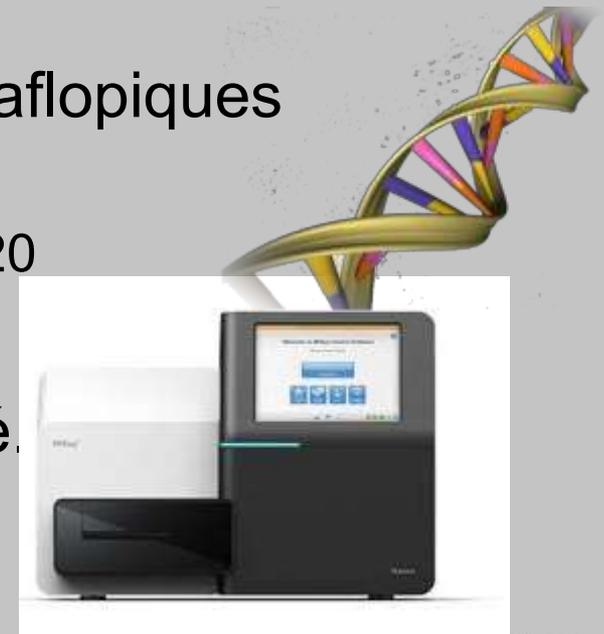


Calcul Intensif et Enseignement

- S'inscrit dans le cadre des filières en Informatique de l'URCA
- Prise en compte du plan supercalculateur
- 2 projets à court terme :
 - MOOC pour le HPC
 - Certification CUDA avec NVIDIA
- à moyen terme :
 - mastère spécialisé / filière ingénieur

Calcul Intensif et Recherche

- Algorithmique parallèle pour les accélérateurs et l'optimisation combinatoire
 - thèmes de recherche développés et reconnus à Reims depuis plus de 10 ans.
- Les architectures pétaflopiques et exaflopiques
 - efficacité énergétique / GREEN500
 - Échelle exaflopique : un enjeu pour H2020
- Calcul intensif, agro, biologie et santé.
 - Séquenceur ADN moyen débit
 - Acquisition récente par le laboratoire INSERM du CHU de Reims



Calcul Intensif et Industrie

- Une offre sectorielle :
 - S'appuyant sur une expertise locale
 - Des partenariats industriels
 - Du logiciel Open Source et propriétaire
- 3 offres en projet :
 - Mécanique des fluides
 - Ferme de rendu
 - Big Data

Offres sectorielles

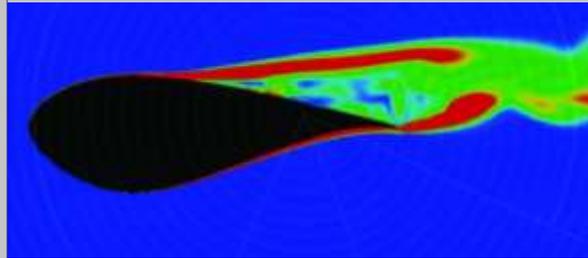
Ferme de Rendu 3D



PSA, NVIDIA, 3DX, Scalable
Graphics, Animation

Blender, Autodesk, 3ds Max,
Maya, DWF, OBJ, Collada,
Mental Ray

Cabinet CFD



Mécanique des Fluides,
Tech-am Ingénierie

Fluent*, OpenFOAM

Big Data

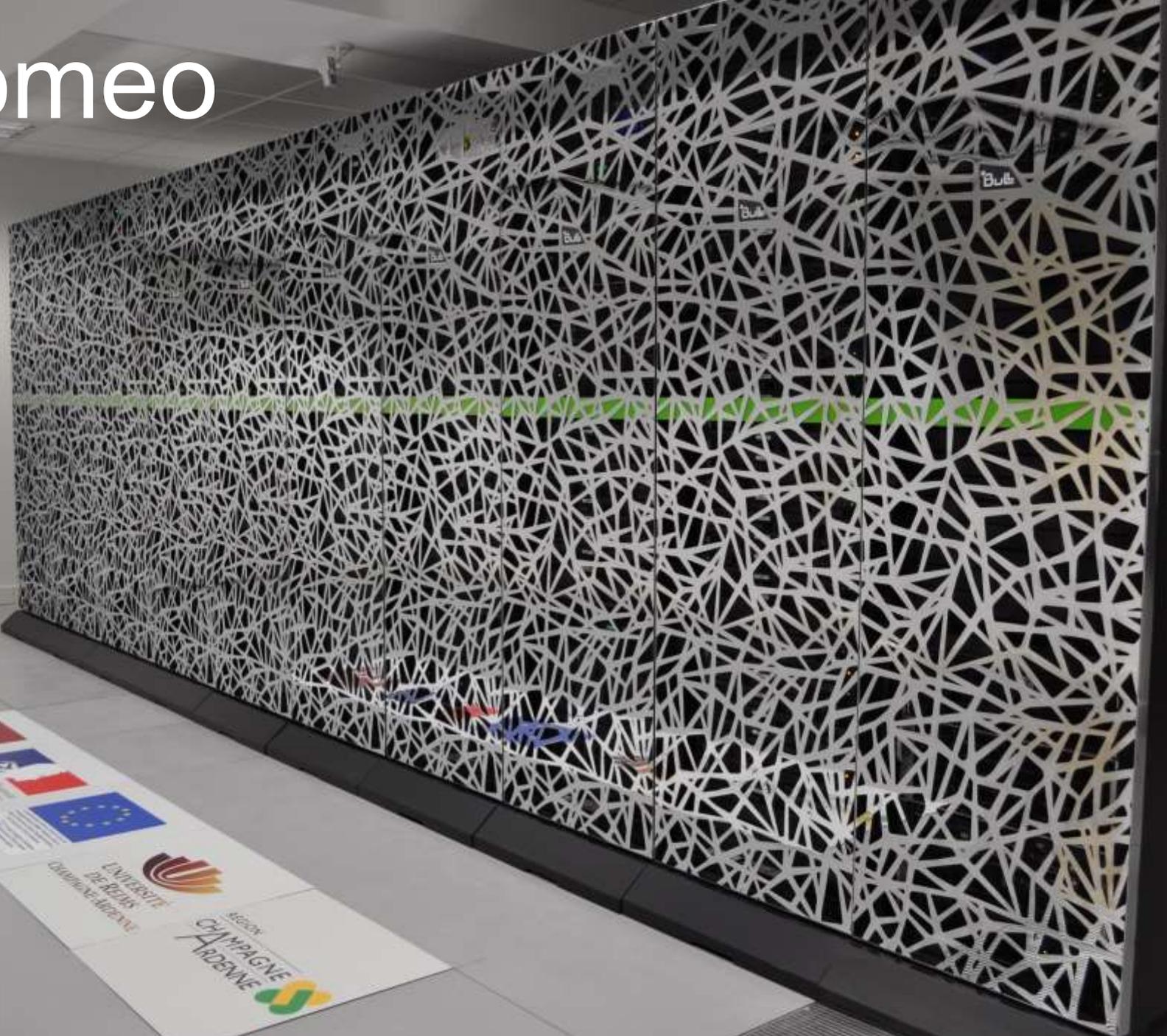


Comprendre ou corréliser les
mégadonnées pour prédire
et réagir

Hadoop, MapReduce,
MongoDB, Cassandra



Romeo



Le Supercalculateur Romeo

Computing



Displaying

5th 3131 MFLOPS/W
Bull Cool Cabinet Door

151th 254.9 Tflops
Linpack

260 NVIDIA Tesla
K20X accelerators

130 Bull servers
bullx R421 E3 – Bull AE & MPI

260 INTEL Ivy Bridge E5-2650 v2
Processor, non-blocking Mellanox
Infiniband, Slurm, 88 To Lustre
(NetApp), 57 To home, 130 To Storage.

Classements Top500 et Green500 novembre 2013.



Big Data, on-demand and remote

VirtualGL technology servers
Quadro 6000 & 5800

NVIDIA GRID + Virtualisation
NVIDIA VGX K2

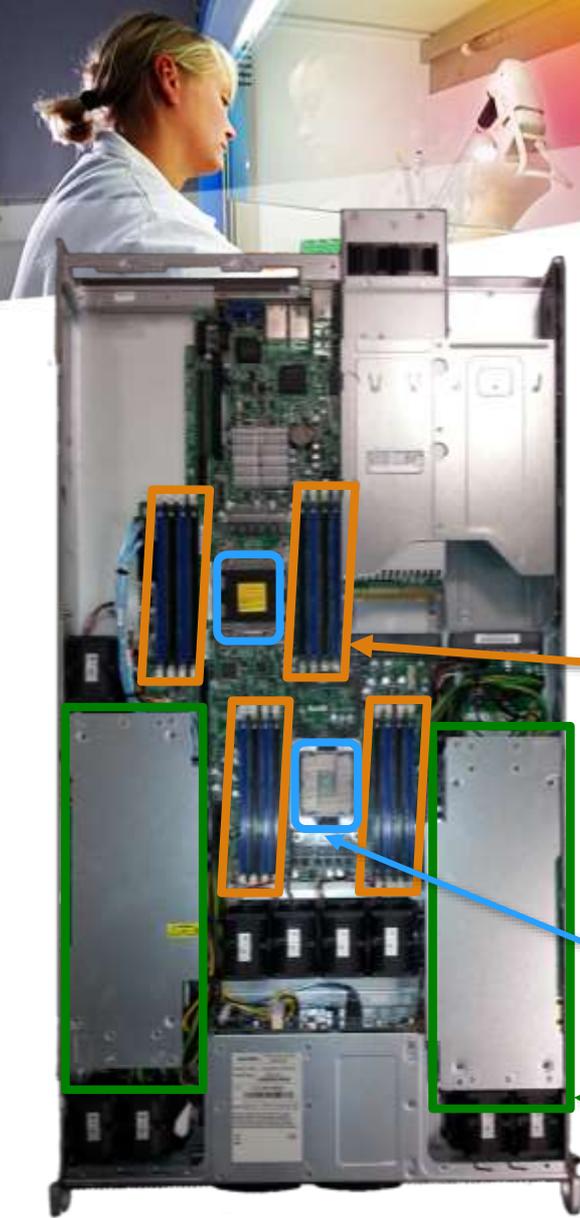
Scalable Graphics 3D cloud solution
NVIDIA K6000

Financement en 2013 – 2,5 M€ :

- Reims Métropole
- Conseil Régional de Champagne-Ardenne
- PIA - Equipement d'Excellence
- FEDER



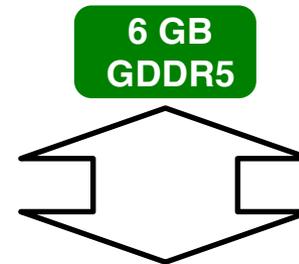
How fast are current GPUs?



32GB
DDR3



CPU
~160 GF
Intel Xeon CPU
E5-2650 v2 @
2.60GHz



6 GB
GDDR5

GPU
~1.3 TF
GK 110





Centre de Calcul
ROMEO

MAISON
DE LA
SIMULATION
de Champagne-Ardenne

MAISON DE LA SIMULATION

de Champagne-Ardenne

Université de Reims Champagne-Ardenne



Maison de la Modélisation
de la Simulation de Champagne-Ardenne
de la Visualisation

Modéliser



Plateau de
Modélisation
Moléculaire
Multi-échelle

Centre de
Calcul
ROMEO

Simuler



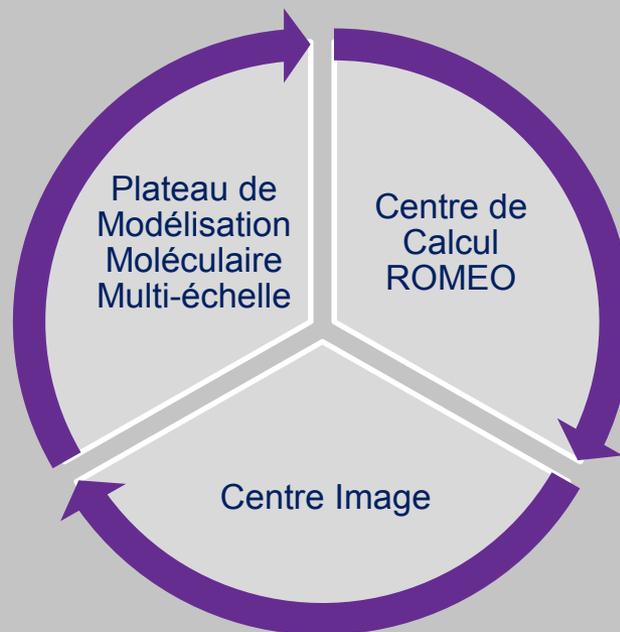
Centre Image

Visualiser



Thématiques

modélisation
moléculaire



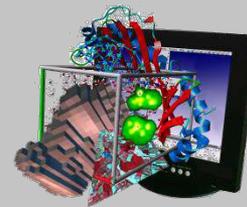
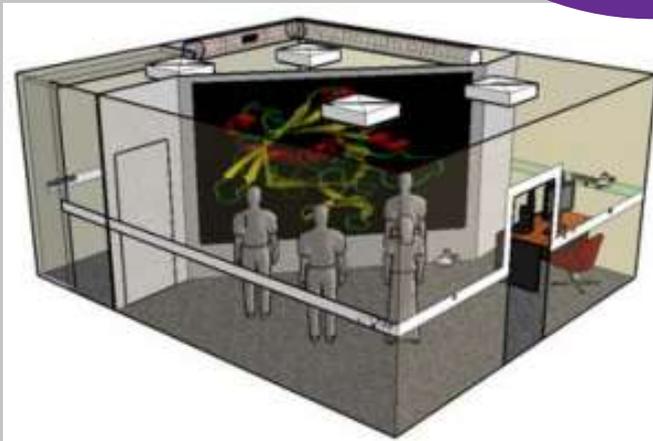
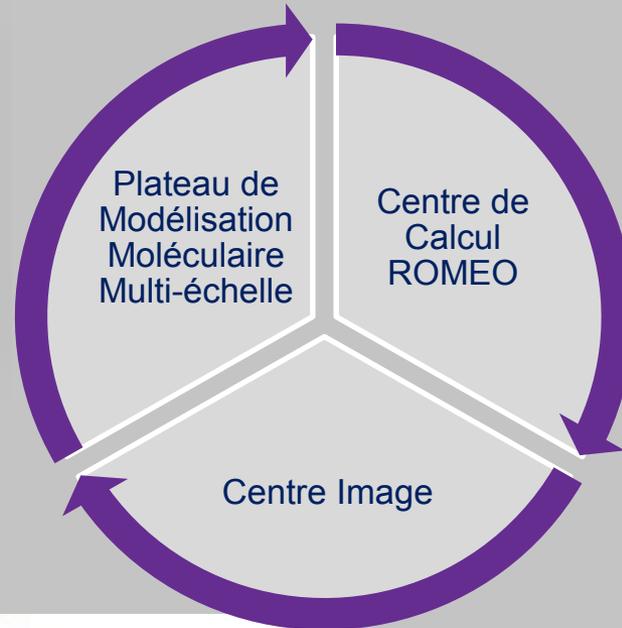
mésocentre

imagerie numérique

- Fédérer une communauté
- Recherche
- Pédagogie
- Industrie
- Animation

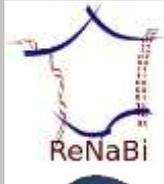


Equipements



Réseaux

PIA ANR INFRA Santé





ReNaBi

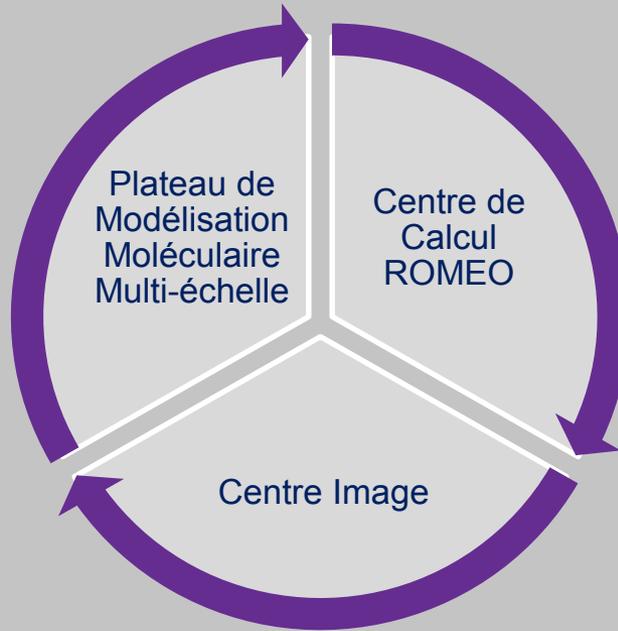
INSTITUT FRANÇAIS DE BIOINFORMATIQUE

IFB-NE UMS

gère les 23 plateaux
De bio-info



ELASTIN European Laboratories
Association in STructural
INvestigations



PIA FSN RECOVER3D

FUI16 ICOS 

ANR V-MONITOR

INNOVATION Nutristic

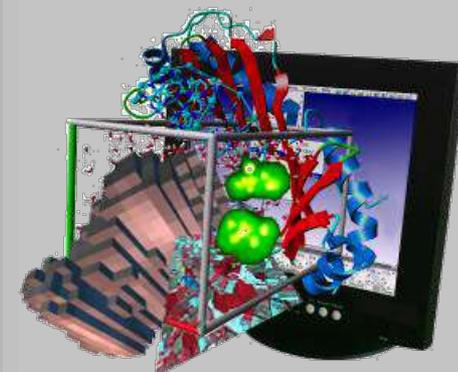
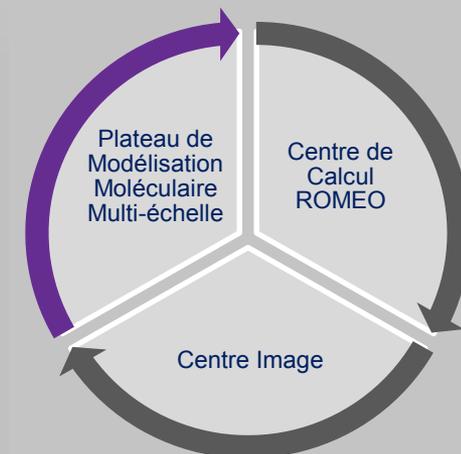
Emergence DURABIN



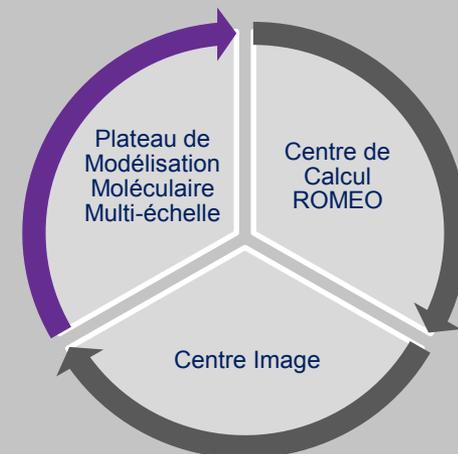
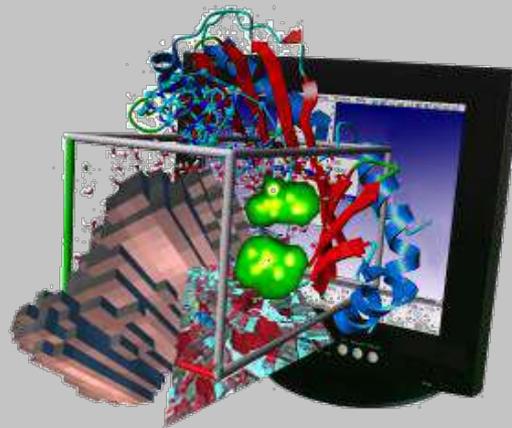
modélisation moléculaire multi-échelles

Centre de Calcul
ROMEO,

MAISON
DE LA
SIMULATION
de Champagne-Ardenne



modélisation moléculaire multi-échelles



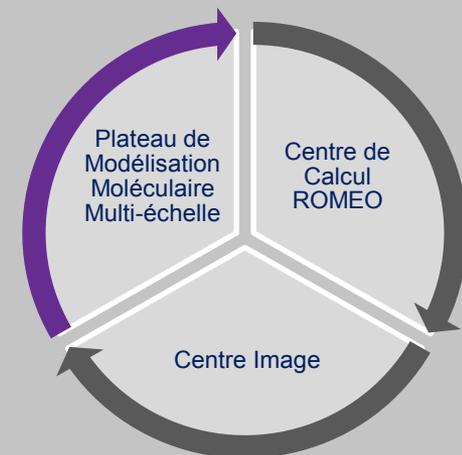
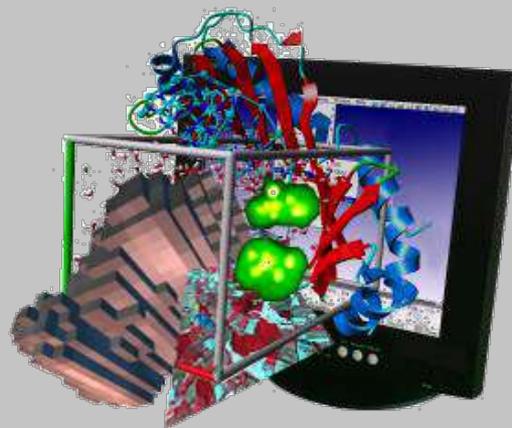
Modélisation moléculaire multi-échelles : de l'échelle de l'atome jusqu'à celle de l'organe dans le domaine du vivant.

Comprendre puis de prédire des comportements de systèmes complexes.
Lien avec les activités expérimentales des différents domaines

Structures tridimensionnelles + leurs dynamiques
⇒ caractéristiques + relations de type structures/fonctions.



modélisation moléculaire multi-échelles



santé

prédire le comportement de nouvelles molécules thérapeutiques avec leur cible et d'accélérer ainsi le développement expérimental de nouveaux médicaments.

physique moléculaire

absorption du gaz carbonique dans le champagne avec l'étude de la structure cristallière de matériaux et de leurs défauts, pour des usages dans l'électronique.



P3M + ROMEO

AMIDE : "Automatic Molecular Inverse Docking Engine"

Développement d'une méthode de distribution de calculs de docking moléculaire pour le criblage inverse de protéines à haut débit.

MEDyC (UMR CNRS 7369 Reims)

Calcul pour 1 ligand :

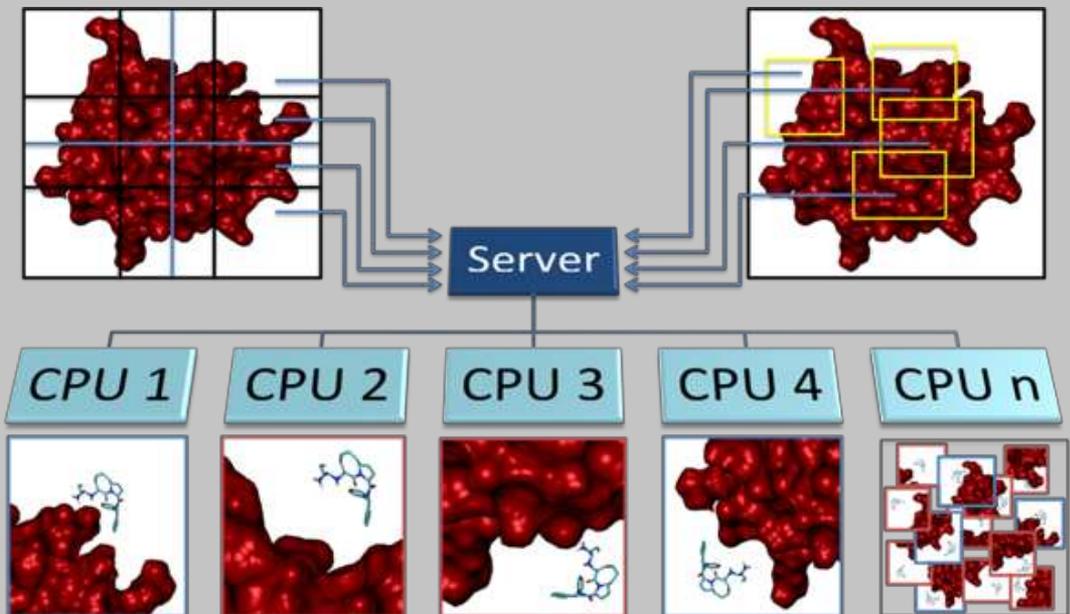
10 000 protéines (dans BD)

* 15 docking sur 15 sites (moy)

* 1 heure

ROMEIO :

- Distribution des calculs
- Docking GPU



P3M + CI

Nouveau mode de représentation des structures secondaires des proteines.

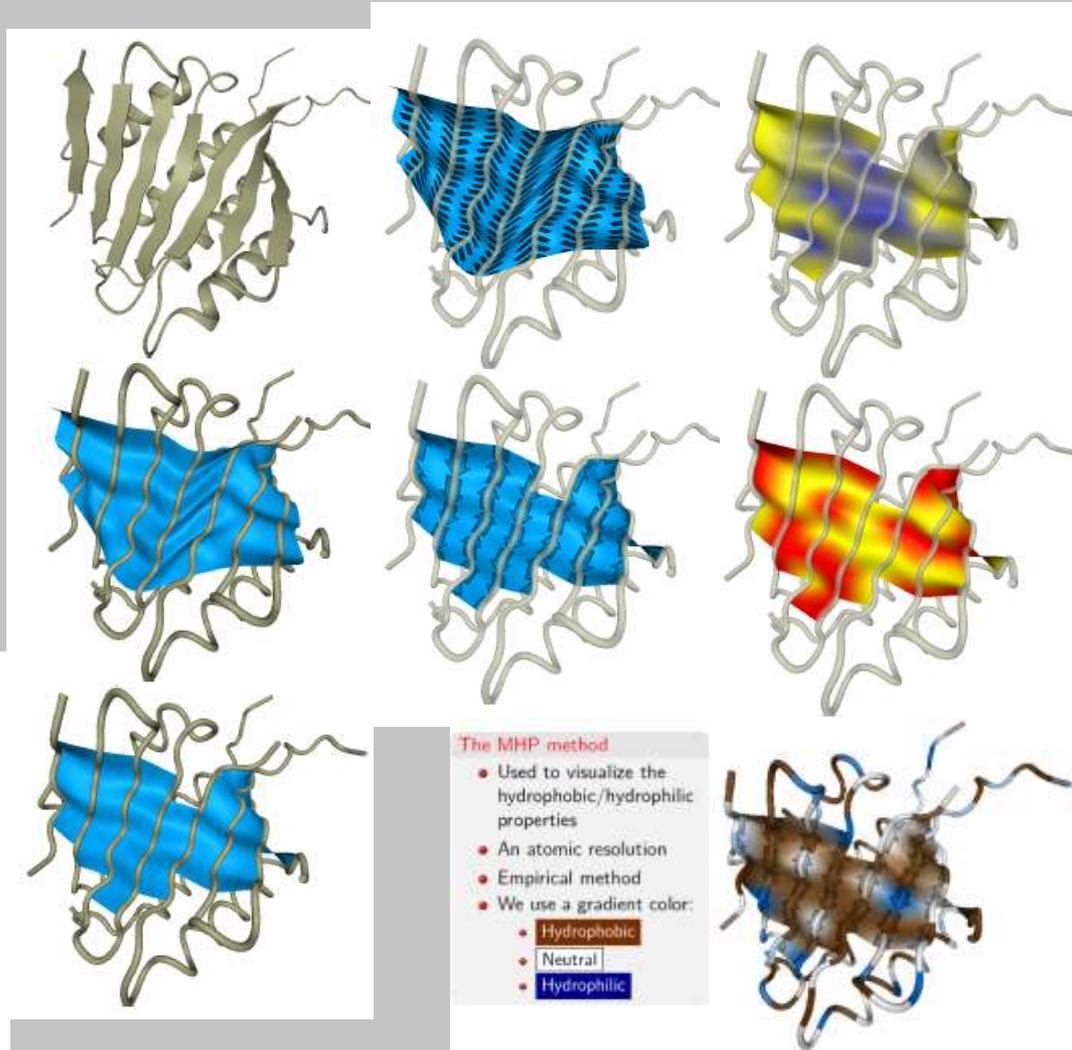
- brins -> tissus/tapis
- couleurs = propriétés phisico-chimiques (tailles des acides aminés)

SheHeRASADe



(Image: Editions Albert-René/Gaocissy-Uderzo)

Sheets Helper for RepresentAtion of SurfAce Descriptors



The MHP method

- Used to visualize the hydrophobic/hydrophilic properties
- An atomic resolution
- Empirical method
- We use a gradient color:
 - Hydrophobic
 - Neutral
 - Hydrophilic

ROMEIO + CI

PIA2 Développement de l'Économie Numérique « Calcul intensif et simulation numérique »

Développement d'une solution collaborative sécurisée pour l'innovation thérapeutique de rupture maîtrisant l'exploitation d'images 3D et de données complexes de grandes dimensions.

- Données/Images complexes de grandes dimensions
- Simulations numériques à l'échelle atomique pour analyse / traitement des données
- Représentation et de la visualisation interactive, immersive, coopérative



Modéliser



Plateau de
Modélisation
Moléculaire
Multi-échelle

Centre de
Calcul
ROMEO

Simuler



ROMEO
Centre de Calcul
Régional

Centre Image

Visualiser



GPU RESEARCH CENTER

- Activités GPU depuis 2008
- 1^{er} Université Française
- GPU Research Center
- Juin 2012



GPU EDUCATION CENTER*



GPU
EDUCATION
CENTER



GPU EDUCATION CENTER



romeoLAB

hpc programing in power cloud

REIMS.GPU Spring SCHOOL

9 - 13 mai
2016



REIMS.GPU Spring SCHOOL

9 - 13 mai
2016

Centre de Calcul
ROMEO,

MAISON
DE LA
SIMULATION
de Champagne-Ardenne

Jour 1 : lundi 9 mai (débutant)

10h00 - 12h30 [Arnaud Renard]

Introduction GPU (HPC, architecture, performances, différents types de portages)

Présentation des moyens de TP (utilisation de ROMEO, plateforme MOOC)

14h00 - 17h30 [Jean-Matthieu Etancelin et David Brusson, Université de Strasbourg]

L'approche haut niveau : Librairies, Thrust

Jour 2 : mardi 10 mai (débutant)

9h00 - 12h30 [Arnaud Renard]

OpenACC

14h00 - 17h30 [Julien Loiseau, CReSTIC]

CUDA 1/2 (modèle d'exécution, niveaux de mémoire, ...)

Jour 3 : mercredi 11 mai (moyen)

9h00 - 12h30 [Gunter Roth, NVIDIA]

CUDA 2/2 (asynchronisme, multi-GPU, profiler)

14h00 - 17h30 [François Alin]

OpenCL

Jour 4 : jeudi 12 mai (avancé)

9h00 - 12h30 [Georges-Emmanuel Moulard, ATOS]

CUDA Avancé (Optimisation, opérations atomiques et intrawarps, parallélisme dynamique)

14h00 - 17h30 [Jean-Matthieu Etancelin]

CUDA Multi-noeuds (rCUDA, programmation hybride MPI+GPU, GPUDirect)

Jour 5 : vendredi 13 mai (avancé)

9h00 - 12h30 [Jean-Matthieu Etancelin]

Programmation hybride avancée (MPI+OpenMP+GPU, profiler)

14h30 - 16h00 [Jean-Matthieu Etancelin]

Expérimentations sur un cas complexe



Université de Reims Champagne-Ardenne



Schedule Planner

[Show/Hide Session Filters](#)Refine: Day Session Type Tag(s) Krajecki Search by Session Levels: ALL BEGINNER INTERMEDIATE ADVANCED1 Session(s) found. | [Clear results](#) Short Link: <http://mygic.gpu4techconf.com/quicklink/7V2Y6fm>

HANDS-ON LAB

Presentation

Details

L6114 - Advanced Tools for GPU Cluster

[Jean-Mathieu Etancelin](#) Research Engineer, ROMED HPC Center, University of Reims Champagne-Ardenne
[Michael Krajecki](#) Professor, Computer Science, University of Reims Champagne-Ardenne IURCAL, France
[Federico Silla](#) Associate Professor, NVIDIA

In this lab, attendees will experiment with some leading-edge distributed GPU technologies that could strongly enhance HPC efficiency and productivity. We'll provide exercises on the ROMED GPU-powered cluster for getting faster GPU data communications with GPU Direct RDMA and for using many virtualized GPUs through rCUDA. GPU Direct RDMA technology enhances the efficiency of data exchange between GPU and PCI Express devices, such as other GPU or Infiniband networks. rCUDA is a virtualization framework that enables the usage of remote CUDA-enabled GPU devices locally in a transparent way. **This lab utilizes GPU resources in the cloud, you are required to bring your own laptop.**

Level: Advanced

Type: Hands-on Lab

Tags: Supercomputing & HPC, In-Situ and Scientific Visualization

Day: Wednesday, 04/06

Time: 09:30 - 11:00

Location: Room 210A



GTC : GPU Technology Conference

Amsterdam 28-29 SEP 2016

ETC DIGITAL VALLEY ETC EUROPE



GPU TECHNOLOGY
CONFERENCE

AMSTERDAM 28-29 SEP 2016

[ATTEND](#) [PRESENT](#) [EXHIBIT](#) [MEDIA](#) [CONTACT US](#) [REGISTER NOW](#)

[LOGIN](#)

EUROPE'S BRIGHTEST MINDS & BEST IDEAS

Join us in September for 2 days of unparalleled insights into how GPU computing is transforming Deep Learning and Artificial Intelligence, Self-Driving Cars, High Performance Computing and Virtual Reality.

REGISTER BY MAY 8TH TO SAVE UP TO €300

[REGISTER NOW](#)



GTC : GPU Technology Conference

Amsterdam 28-29 SEP 2016

ETC DIGITAL VALLEY ETC EUROPE NVIDIA

GPU TECHNOLOGY CONFERENCE

AMSTERDAM 28-29 SEP 2016

ATTEND PRESENT EXHIBIT MEDIA CONTACT US REGISTER NOW

LOGIN

REGISTER FOR GTC EUROPE 2016

SELECT YOUR TICKET AND REGISTER.

Registration is open now and, for a limited time, early birds will receive a discounted rate on attendance.

EARLY BIRD	PRE-REGISTRATION	STANDARD TICKET	LAST MINUTE TICKET
<p>Register between 03.02.2016 – 15.05.2016</p> <p>€195 exc. VAT</p>	<p>Register between 14.05.2016 – 15.06.2016</p> <p>€295 exc. VAT</p>	<p>Register between 16.06.2016 – 27.09.2016</p> <p>€395 exc. VAT</p>	<p>Register between 28.09.2016 – 28.09.2016</p> <p>€495 exc. VAT</p>
<p>BOOK NOW</p>	<p>AVAILABLE FROM 14.05.2016</p>	<p>AVAILABLE FROM 16.06.2016</p>	<p>AVAILABLE FROM 28.09.2016</p>

Attendees from academia receive a 50% discount on the general attendance rate for GTC Europe 2016.



Journée ROMEO 2016

9 juin 2016
CCI
REIMS



ROMEO 2016

Séminaire scientifique Calcul et Simulation
9 juin 2016 - Campus Sciences - Reims

<https://romeo.univ-reims.fr/ROMEO2016>



Centre de Calcul de
Champagne-Ardenne

ROMEEO

Maison de la Simulation de Champagne-Ardenne
Le numérique au service de l'innovation

Centre de Calcul
ROMEEO

MAISON
DE LA
SIMULATION
de Champagne-Ardenne



Vos contacts :

Directeur / Head ROMEEO
Michaël KRAJECKI
michael.krajecki@univ-reims.fr

Chef de projet / CTO ROMEEO
Arnaud RENARD
arnaud.renard@univ-reims.fr

<http://romeo.univ-reims.fr>

