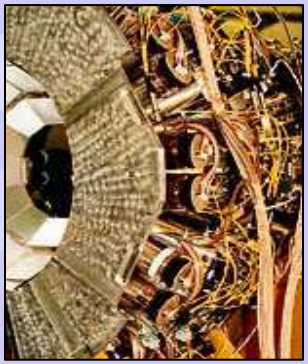
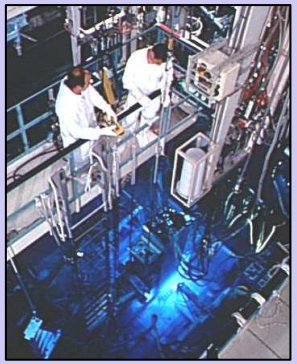
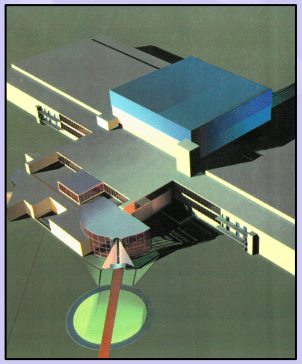
Centre de Calcul Recherche et Technologie

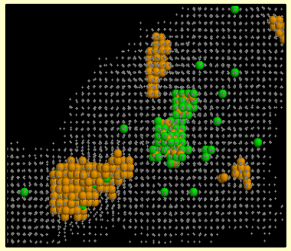
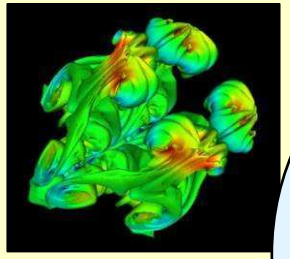
Le CCRT

Centre de calcul Recherche et Technologie

christine.menache@cea.fr

Le Complexe de Calcul Scientifique du CEA

Centre de Calcul Défense
TERA

Pôle

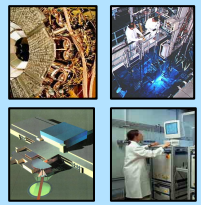
d'expertise et de veille technologique

Très Grand Centre de Calcul du CEA
TGCC

PRACE

GENCI
GRAND EQUIPEMENT NATIONAL DE CALCUL INTENSIF

CCRT



cea AREVA EDF SAFRAN CEPEAO INERIS ONERA EADS trium

Mutualiser

- ✓la veille technologique
- ✓l'expertise dans les domaines du HPC

Maitriser

la complexité des grands équipements de calculs

Répondre aux besoins

- ✓ du programme Simulation
- ✓ des projets scientifiques et industriels
- ✓ des grands programmes de recherche Européens

CCRT: Missions et Objectifs

- Le CCRT a 2 missions principales:
  - Répondre aux besoins de ses partenaires en matière de grandes simulations numériques
  - Créer une synergie entre la recherche, le monde académique et le monde industriel en favorisant les échanges, les collaborations scientifiques entre partenaires
- Il a été localisé sur le site du CEA-DIF pour bénéficier des compétences existantes du Centre de calcul classifié (Tera) et créer un complexe de calcul haute performance de dimension européenne s'inscrivant dans la dynamique Ter@tec
- ***<u>Depuis 2008</u>: sous l'égide de GENCI, s'ouvrir à toutes les communautés scientifiques via des appels à projets***

Organisation et Gouvernance

CCRT: les partenariats

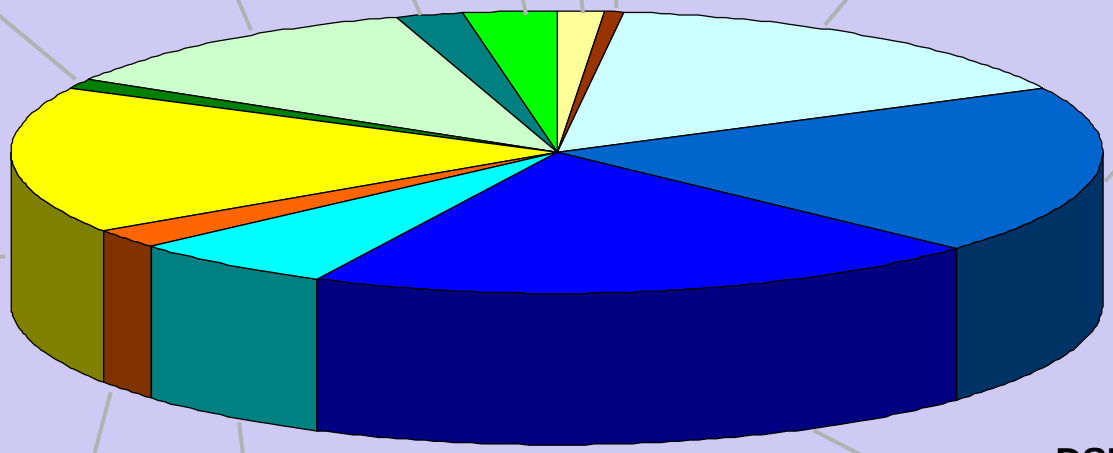
- Une volonté forte du CEA d'avoir des Partenaires Recherche et Industrie
- Un engagement durable via des contrats de partenariats: environ 3 ans
- Des règles communes pour tous les Partenaires
  - Partage des risques
  - Gestion des demandes spécifiques
- Des parts calculées en fonction des apports financiers
- Une organisation comportant 2 instances :
  - Un comité de pilotage
  - Un comité utilisateurs

CCRT: Organisation

- **Maîtrise d'œuvre du CCRT confiée à DAM-DIF/DSSI**
  - Pilotage opérationnel (sous-traitance pour infogérance et assistance applicative)
  - Chargé d'affaires-relations partenaires
  - *Veille technologique et expertise (mutualisée avec Tera)*

- **Instances de pilotage:**
  - *Comité de pilotage* ***COPIL (maîtrise d'ouvrage)***
    - Rôle: décisions budgétaires et stratégiques, validation des nouveaux partenaires, arbitrage sur les évolutions techniques
    - Participants: représentants de chacun des partenaires
  - *Comité utilisateur* ***COMUT***
    - Rôle: recense les besoins utilisateurs, propose les évolutions techniques, définit la politique d'exploitation
    - Participants: représentants de chacun des partenaires

CCRT: répartition des partenaires en 2011



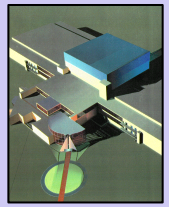
INERIS* 1.9%

Areva* 2.8%

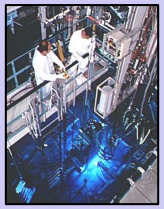
Astrium 1,4%

Cerfacs 0,7%

DAM 15.6%



DEN 19.4%



DSM 20.4%

DSV 6.2%

EDF 2.3%

Snecma 17.1%

Techspace Aero 1.2%

Turbomeca 11.8%

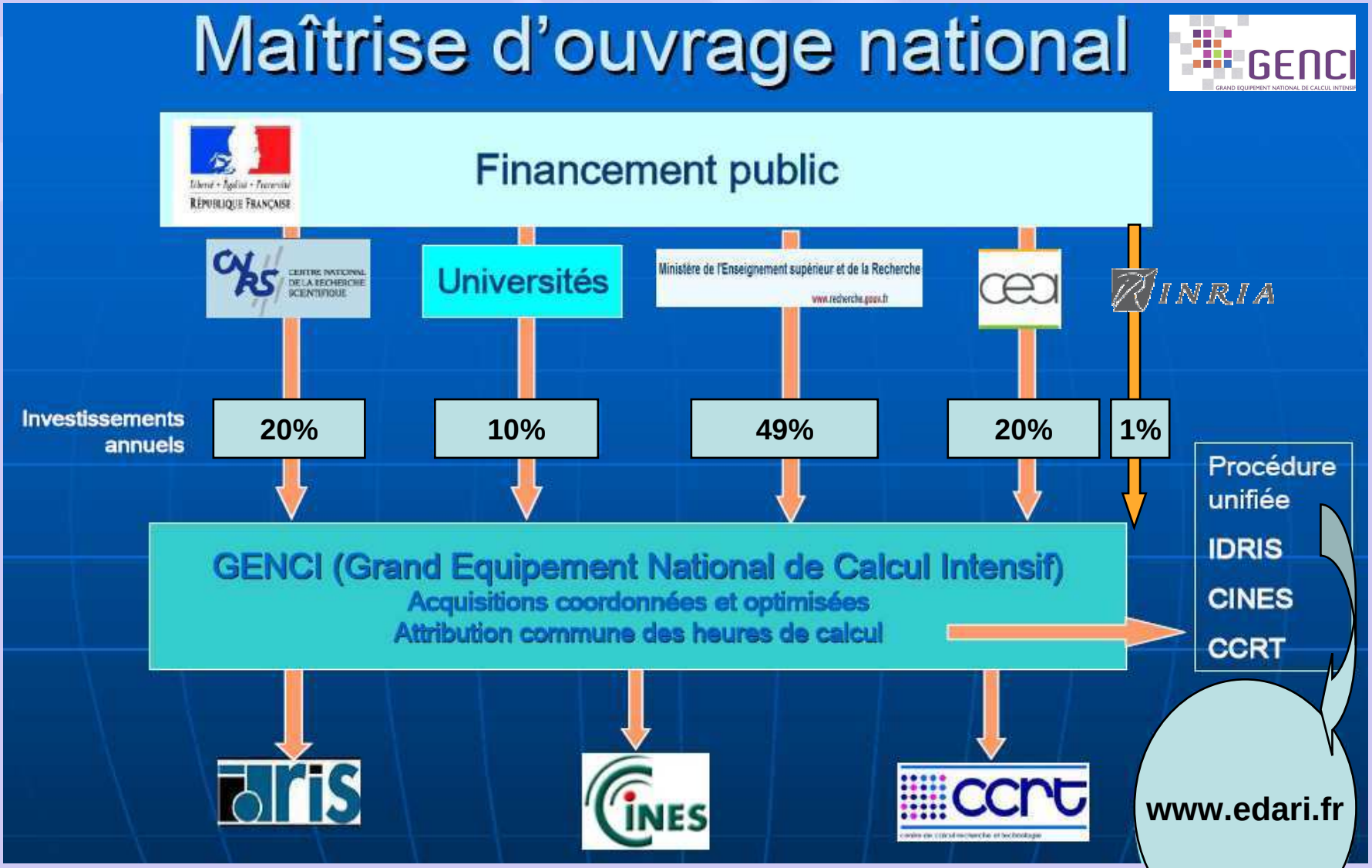
Principe d'attributions des ressources hors Genci

- **Les parts de ressources de calculs sont:**
  - Calculées en fonction de l'apport financier
  - Attribuées par partenaires (Edf,Snecma, Turbomeca, TechspaceAero, Onera, Ineris, Areva, CEA:DAM, DEN, DSM, DSV)
  - Définies par calculateur en pourcentage de ressources *disponibles*

- **Chaque partenaire est responsable de la « répartition » de sa part** (interne ou via les mécanismes proposés par le centre de calcul)

- Possibilité de modes de passage exceptionnels à valider par le comité de Pilotage CCRT

Rappels sur GENCI



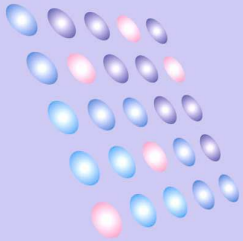
Attributions des ressources de calculs financées par GENCI

- **Par le biais d'appels à projets scientifiques**

- **Population concernée**
  - Le CEA, les chercheurs du CNRS et des universités, des grandes écoles…

- **Sélection**
  - Évaluation par des comités thématiques composés de scientifiques reconnus et représentés par des présidents
  - Arbitrage réalisé lors de réunions annuelles, par:
    - GENCI+présidents de comités+représentants centre de calculs
  - Cas particuliers pour les gros projets

Moyens de calculs



Architecture du CCRT 2011

Machine NEC
Mercure

SX8	SX9
8 nœuds	3 nœuds
2 Tflops	4.8 Tflops
0.9 To	3 To
40 To de Disques	

Calculateur BULL Itanium
Platine

47.7 Tflops
Mémoire 23.2 To
Disques 420 To

Calculateur Bull Hybride (CPU/GPU)
Titane

Extension CCRT-2010 40 Tflops

1 092 nœuds Bull **8736** cœurs Intel/nehalem **3 Go/cœur** **103 TFlops**	**48serveurs Tesla S1070** **46 080** cœurs NVIDIA **4 Go/GPU** **192 Tflops-SP**

Disques 500To

8 Liens 1Gb/s

6 Liens 10 Gb/s

8 Liens 10 Gb/s

8 Liens 10 Gb/s

Cluster HP de dépouillement

38 nœuds graphiques
mémoire 3.2 To, disques 100 To

Backbone Ethernet 10Gb/s

Serveur NFS

utilisateurs

2 Gb/s

SGI Altix 450
DMF

Niveau 1: **1 Po disques Sata DDN**

Niveau 2: **robotique SUN-SL8500 (9940, T10000)**

Système de stockage

CCRT: Les moyens de calcul actuels

Platine

Calculateur BULL 47.7 Tflops

960 nœuds (8 coeurs, itanium 1.6 Ghz)

420 To de stockage

Interconnect **Infiniband DDR**

OS= **Linux-** BULL (BASV5.1)

LSF pour le batch,

Produits de développement Intel

Mise en production 01/10/2007

Titane

Calculateur BULL 140 Tflops

+ 192 Tflops SP GPU

1068 nœuds **(8 cœurs, Nehalem 2.93Ghz)** + **48 serveurs GPU**

24 serveurs BullX-B500 432 noeuds

500 To de stockage

Interconnect **Infiniband DDR**

OS= **Linux-** BULL (BASV5.1)

LSF pour le batch,

Produits de développement Intel

Mise en production 07/09/2009

Mercure

Calculateur NEC 7 Tflops

8 nœuds SX8R (16 Ghz,64Go)

40 To de stockage

Interconnect IXS (16 Go/s-/nœud)

Frontale 16 cœurs Itanium

3 nœuds SX9 (16 procs, 1 To)

Mise en production 28/11/2006

CCRT: les services de traitements et de stockage

Système de dépouillement et visualisation

30 nœuds graphiques (64Go, 8 core Intel, FX5800)

8 nœuds gros traitement (128Go, 8 core Intel, FX5800)

100To de stockage

Interconnect **Infiniband**

RGS+VisuPortal

Système de stockage

2 serveurs SGI (24 et 16 cœurs Itanium)

1 Po de disques SATA DDN

*Extension à **5 Po** sur bandes*

SL8500 = lecteurs T10000

HSM= DMF

OS= Linux (Suse)

CCRT: évolution à moyen terme

- **Les partenariats actuels ont été reconduit jusqu'au 31/12/2014**

- **L'étape suivante est appelée CCRT-C et va donner lieu à la mise en place de nouveaux moyens de calculs scalaires début 2012 au TGCC:**
  - L'appel d'offre pour de nouvelles ressources est en cours
  - De nouveaux partenaires sont les bienvenus pour cette nouvelle étape

CCRT: les services pour les utilisateurs

- **Un point d'accueil unique**
  - ☎ 01 69 26 66 66
  - ✉hotline.ccrt@cea.fr
  - Assistance à l'utilisation du CCRT
  - Assistance aux développements de codes
- **Des formations pour les utilisateurs**
  - le CCRT et son environnement
  - la programmation MPI
  - les environnements de développement
    - compilateurs intel, Intel trace analyser, Débuggeur
  - Les architectures GPU
- **Site web pour les utilisateurs**

https://www-ccrt.ccc.cea.fr en plus de http://www-ccrt.cea.fr

La dynamique scientifique

CCRT: les colloques scientifiques

Des colloques à thématiques scientifiques organisées régulièrement:

17 Juin 2004:

« Dynamique des matériaux »

10 Février 2005:

« Bilan et perspectives CCRT »

17 Octobre 2005:

« Gestion des grands volumes de données »

17 Octobre 2006:

« Dynamique des fluides »

12 Décembre 2007:

« Le passage à l'échelle »

17 Octobre 2008:

« Simulation et physique multi-échelle »

28 septembre 2009:

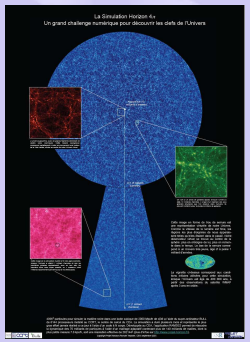
« Grands challenges Genci-CCRT »

5 Novembre 2010:

« Simulation et innovation »

20 Octobre 2011:

« Simulation et flots de données »

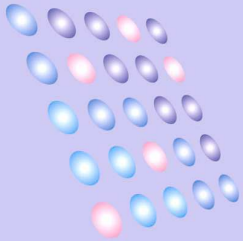


CCRT: les collaborations techniques

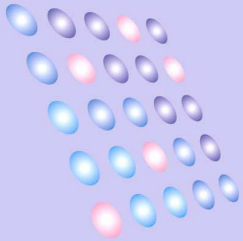
- Collaboration technique entre les partenaires
  - Outils du domaine public : avantages et limitations
  - Veille technologique: retour d'expérience sur des technologies émergentes
  - Workshop sur les technologies de type GPU (Total, IFP, Cines, partenaires CCRT…)
  - Groupe de réflexion sur la « Méthodologie de validation des codes de simulation »

- Réunions techniques avec d'autres organismes
  - In2P3, Idris, Cines, DOE, AWE, HLRS, Jülisch…
  - Participation du CEA à Supercomputing

Questions ?



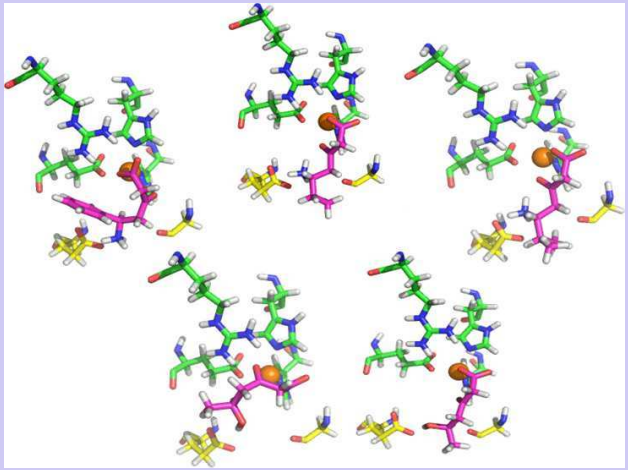
Quelques applications de type grand Challenge



Structure 3D des protéines (GC 2009)

- **Prédiction de sites actifs de protéines pour la découverte de nouvelles activités enzymatiques :**

  Le Laboratoire d'analyse bioinformatique des séquences du Génoscope (Institut de génomique, CEA) vient de prédire, par un calcul de modélisation moléculaire réalisé sur le supercalculateur «Titane » du CCRT, la structure spatiale de 60 000 protéines.
  A partir de ces données, les chercheurs ont pu caractériser les motifs d'acides aminés indispensables à la fonction des protéines, que l'on appelle « sites actifs ».



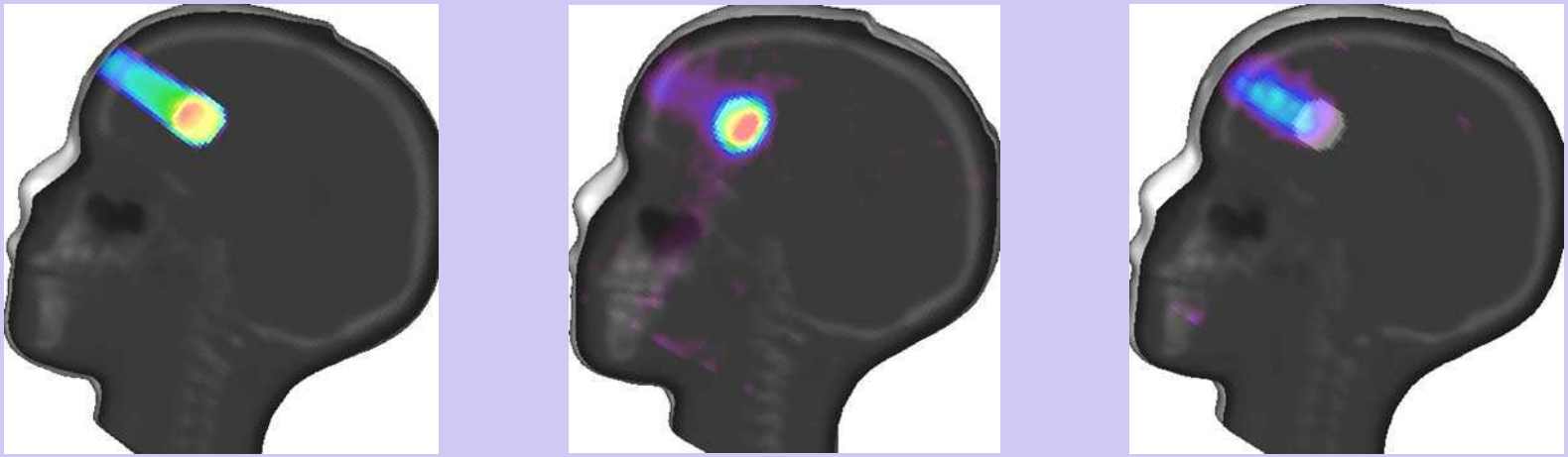
Modelisation de la structure des sites actifs et prédiction des interactions avec le substrat.

François Artiguenave et Raquel Cardoso De Melo Minardi, CEA/DSV/Institut de génomique.

Imagerie pour le traitement du cancer (GC 2009)

- **Simulation en hadronthérapie et imagerie tomographique pour le traitement du cancer**

  L'hadronthérapie est une nouvelle voie de recherche dans le traitement du cancer. La simulation de sa mise en œuvre et de ses effets sur le patient a été pour la première fois simulée sur le calculateur Titane du CCRT.



Résultats de simulation illustrant la dose déposée sur une tumeur cérébrale
- ***par 3 faisceaux d'ions de carbone (à gauche),***
- ***l'imagerie TEP « en ligne »de la distribution résultant des isotopes de carbone 11 (au milieu)***
- ***l'imagerie TEP « en ligne »de la distribution résultant des isotopes d'oxygène 15 (à droite).***

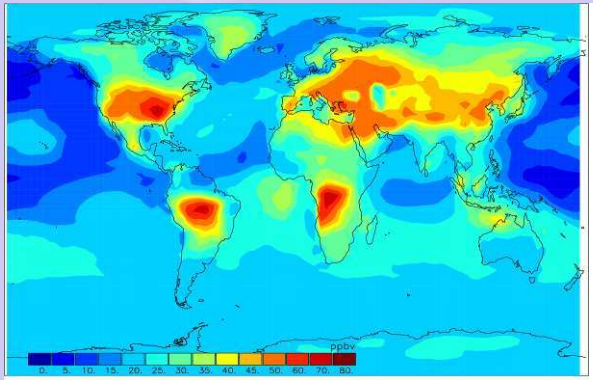
SÉBASTIEN JAN, CEA/DSV/Service hospitalier Frédéric Joliot

Ozone et interactions chimie-climat

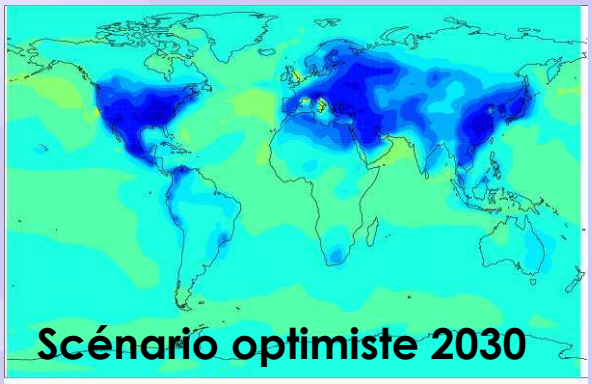
Comment les futurs niveaux d'ozone évolueront-ils avec le changement climatique et celui des émissions anthropiques et naturelles?

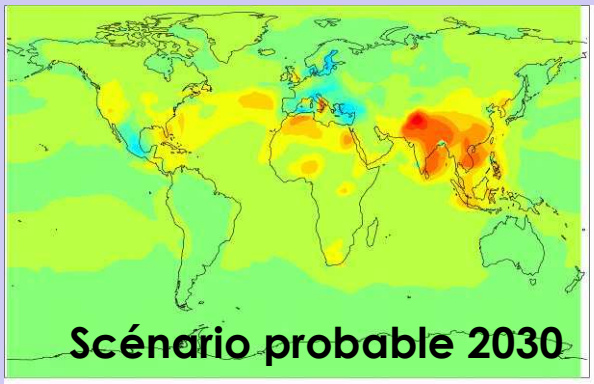
⇒ Travail ayant contribué au dernier rapport du GIEC (AR4-IPCC)

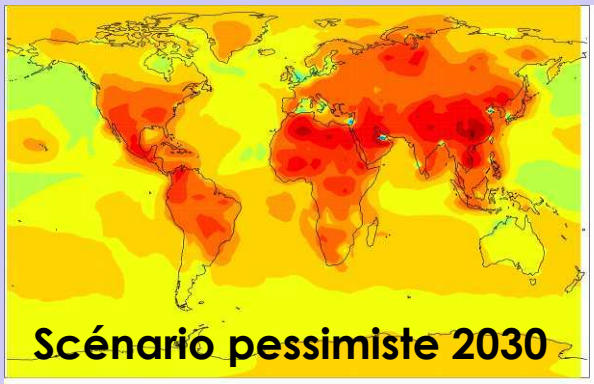
Ozone présent à la surface (ppb)
Simulation de référence

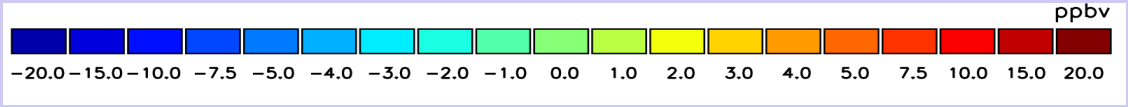


Changement de l'O3 de surface (ppb) - Juillet







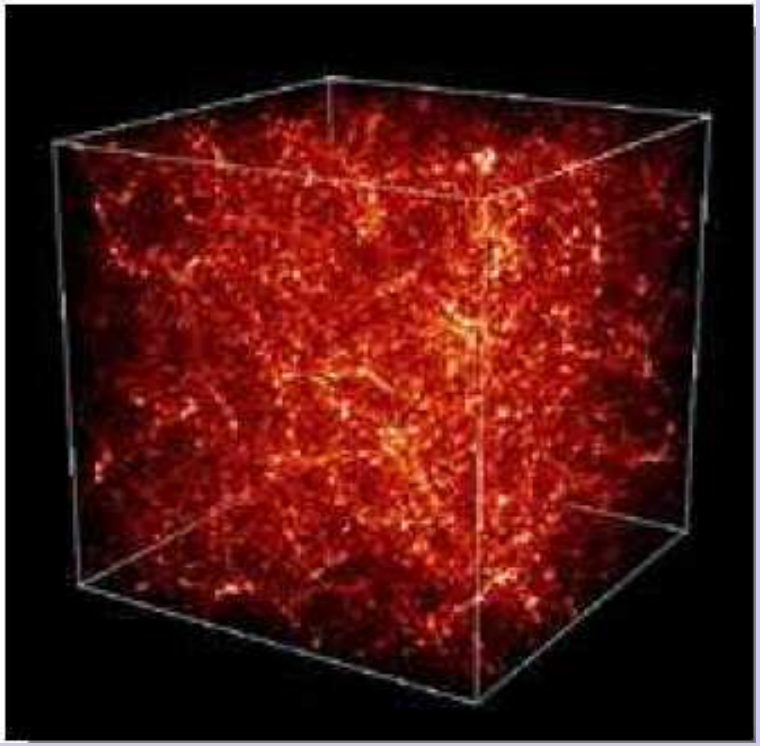


Szopa et Hauglustaine, *C. R. de l'Académie des Sciences*, 2007

- **Le projet Horizon: une première mondiale**

Avec près de 70 milliards de particules et plus de 140 milliards de mailles, le calcul réalisé au CCRT représente le record absolu pour un système à N corps[21] modélisé par ordinateur.
Pour la première fois dans l'histoire du calcul scientifique, il est possible de décrire la moitié de l'univers observable tout en couvrant une galaxie comme la Voie Lactée avec plus d'une centaine de particules !

La simulation du Projet Horizon permet de prédire la distribution de matière dans l'Univers avec une précision et un réalisme sans précédent. Les chercheurs pourront bientôt comparer le modèle avec les observations de tout le ciel bientôt disponibles grâce à la mission spatiale Planck de l'Agence spatiale européenne, dont le lancement est prévu en 2008.

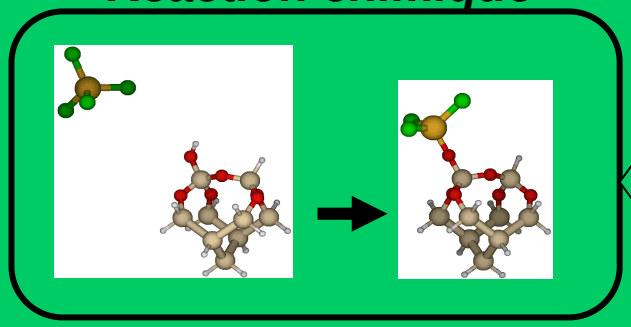


Rendu volumique de la densité de matière dans une simulation numérique de la formation des structures dans l'univers.
© Projet Horizon, S. Colombi (CNRS) et R. Teyssier (CEA)

Les nouveaux matériaux en microélectronique

Calcul quantique

Réaction chimique



Centaines d'atomes

Échelle de temps: picoseconde

TERA10, CCRT

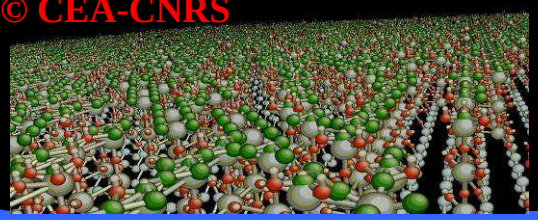
64 processeurs pendant 5 heures
400 calculs
128 000 h/cpu

Monte-Carlo Cinétique

Processus de fabrication

HIKAD

© CEA-CNRS



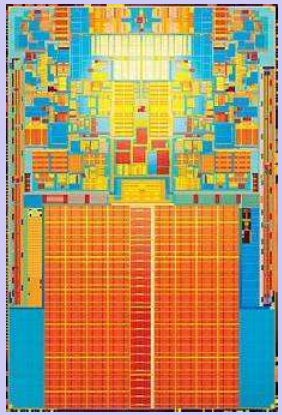
Plusieurs millions d'atomes

Échelle de temps: seconde

Station Linux

2 processeurs pendant 12 heures

Technologie déjà utilisée



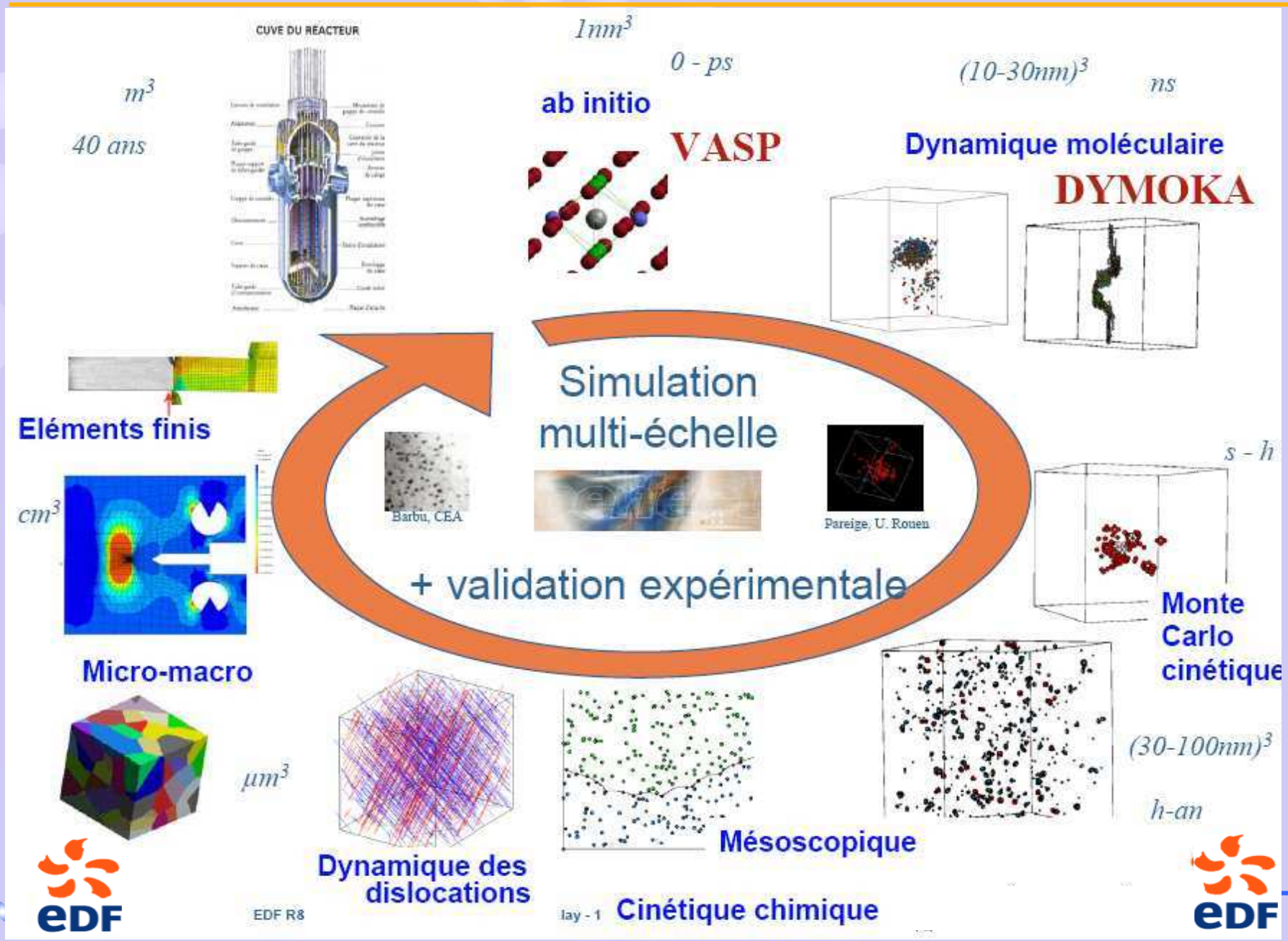
Processeurs 45 nm "Penryn" d'Intel à base d'Hafnium

Permet de simuler le procédé de fabrication pour les nouveaux matériaux de la microélectroniques

Projet LN3M

Financé par ANR

Simulation multi-échelle du vieillissement des matériaux



FIN