



UNIVERSITÀ DI PARMA

## Presentazione del servizio di Calcolo Scientifico

*Prof. Roberto Alfieri – Dip. SMFI*

*Dott. Fabrizio Russo – Resp. UO Erogazione Servizi*

[www.hpc.unipr.it](http://www.hpc.unipr.it)

- La vision
- I vantaggi
- Il contesto organizzativo
- Il servizio
- La roadmap
- La ricerca
- La didattica
- La terza missione

## SISTEMI AUTONOMI DIPARTIMENTALI



## HPC DI ATENEO

### 100 TFlops



## HPC CINECA

### 19 PFlops



# IL CONTESTO - Situazione pregressa sul Calcolo scientifico e rimedi

FINO AL 2015



DOPO IL 2015

# Vantaggi di un servizio di Ateneo rispetto a sistemi autonomi e locali

## Benefici non monetizzabili

Trasversalità  
interdipartimentale

Aggregazione delle risorse

Tempi di accesso rapidi

Prototipazione e  
addestramento

Personale qualificato di  
supporto

Condivisione di risorse

Maggiore collaborazione tra  
gruppi di ricerca

Maggiore collaborazione per  
spunti didattici

Facilitazione verso Centri HPC  
internazionali

## Benefici economici

Bandi competitivi

Economie di scala

Risparmi consumi energetici

Uso efficiente risorse

Potere contrattuale forniture

Risparmi Costi assistenza

Sostenibilità modello di  
finanziamento

Terza missione

# Vantaggi di un servizio di Ateneo rispetto al centro HPC del Cineca

## Benefici non monetizzabili

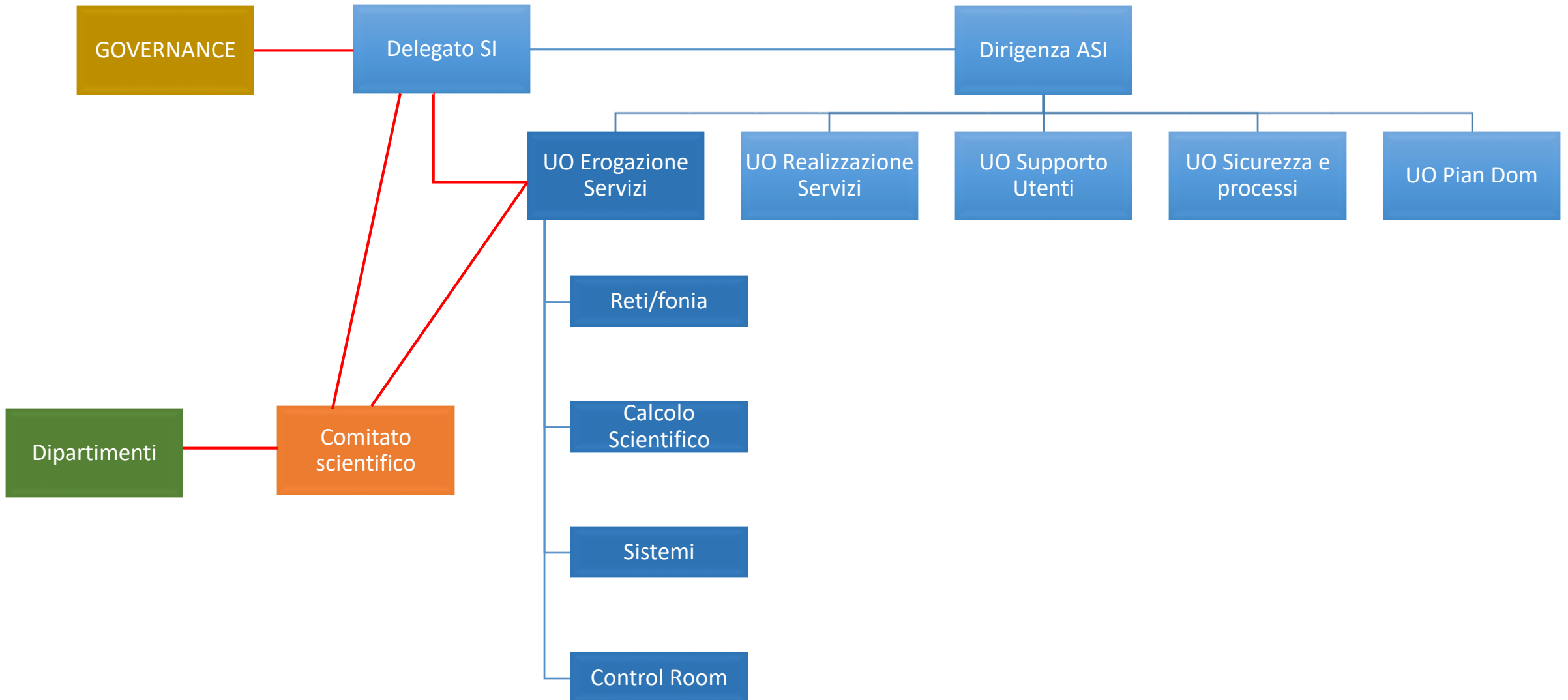
- Trasversalità interdipartimentale
- Aggregazione delle risorse
- Tempi di accesso rapidi
- Prototipazione e addestramento
- Personale qualificato di supporto
- Condivisione di risorse
- Maggiore collaborazione tra gruppi di ricerca
- Maggiore collaborazione per spunti didattici
- Facilitazione verso Centri HPC internazionali



## Benefici economici

- Bandi competitivi
- Economie di scala
- Risparmi consumi energetici
- Uso efficiente risorse
- Potere contrattuale forniture
- Risparmi Costi assistenza
- Sostenibilità modello di finanziamento
- Terza missione

# Organizzazione e gestione relazioni sul Calcolo Scientifico



## UO Erogazione Servizi

### Competenze gestionali

- *Budget e Procurement*
- *Gestione relazioni fornitori*
- *Gestione relazioni con i partner*
- *Avvio e tuning dei progetti di ricerca*
- *Supporto avanzato all'utenza scientifica*

### Competenze tecniche

- *Gestione e sviluppo dell'infrastruttura*
- *Controllo e monitoraggio*
- *Problem Solving*
- *Installazione Hardware e Software*

## Comitato Scientifico

### Funzione di indirizzo

- *Proposte evolutive del servizio*
- *Innovazione didattica (Corsi, seminari, Master...)*
- *Coordinamento progetti (Finanziamenti esterni)*
- *Collaborazioni extra Unipr*

### Funzione di interfaccia

- *Corretto instradamento delle esigenze/richieste*
- *Relazioni e partnership*

Delegato ai SI

**GOVERNANCE**



## VALORE: usare un servizio, non solo un'infrastruttura



Pubblicazione

- Competenze specialistiche e gestionali
- Orientamento al servizio



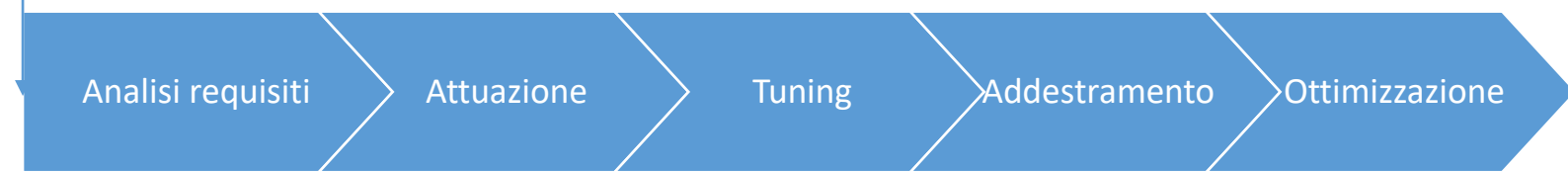
Infrastruttura HPC

Pianificazione

Affiancamento specialistico

Progetto scientifico

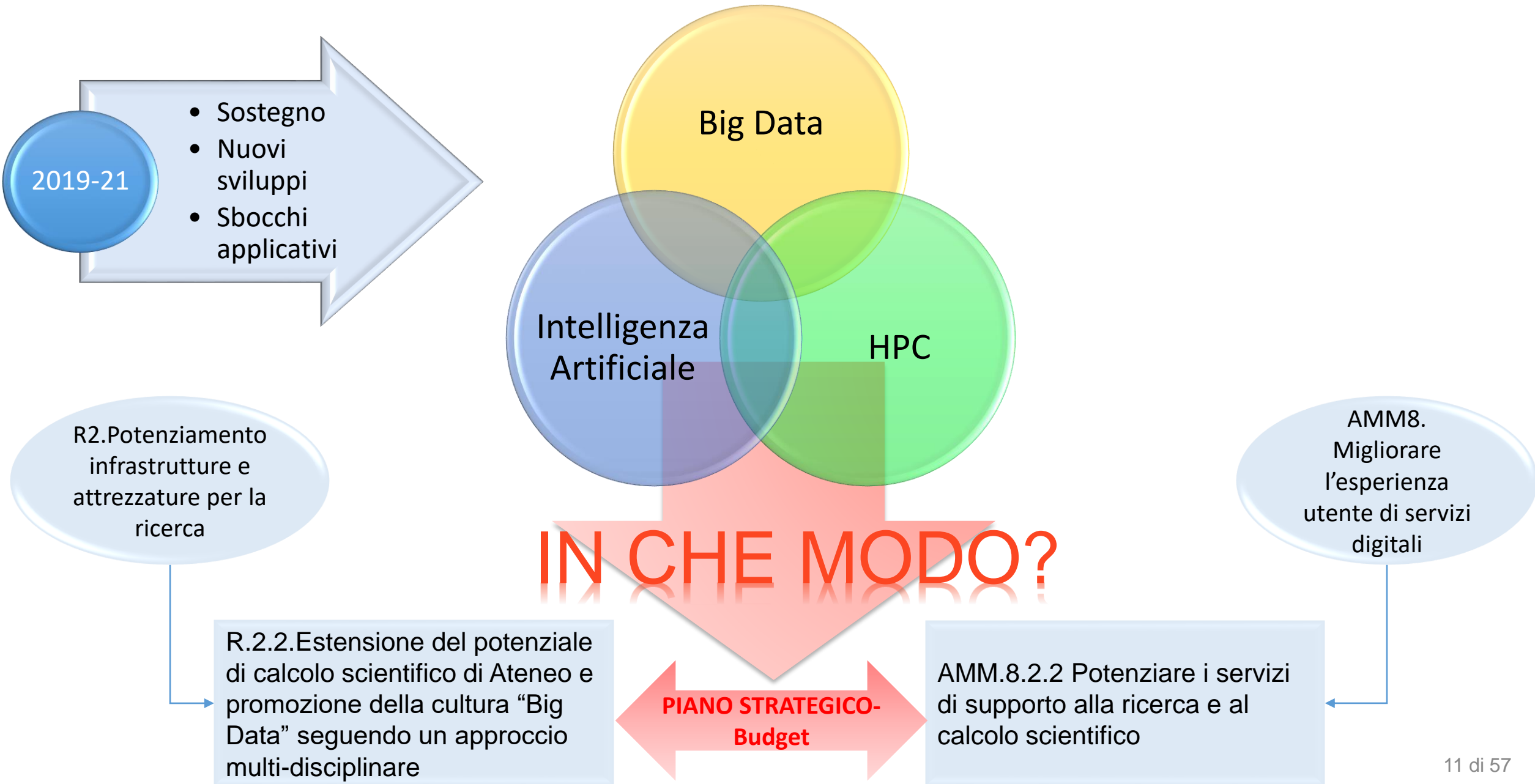
Supporto continuo



- 47 gruppi di ricerca
- ~ 150 utenti
- Studenti
- 50 inst. Software custom
- 80% di utilizzo

# ROADMAP





## COSTI DI INVESTIMENTO E DI ESERCIZIO

### Ateneo - UO ES

- **2016:** €204.600
- **2017:** €127.433,72
- **2018:** €17.723
- **2019:** € 110.000

### INFN

- **2016:** €30.000
- **2017:** €36.000
- **2018:** €10.000

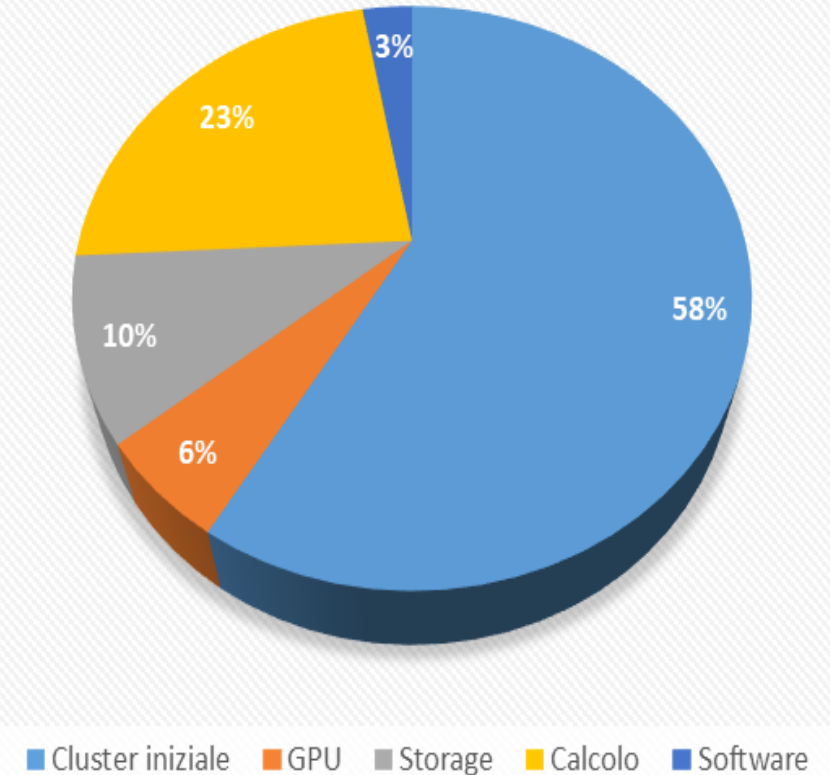
### Fondi di ricerca

- **2019:?**

**€ 459.756,92**

**€ 76.000**

## RIPARTIZIONE INVESTIMENTO



# Problema risorse umane

## Servizio di Gestione e sviluppo rete e fonia di Ateneo

- |   |                         |
|---|-------------------------|
| 1)WAN – Rete internet verso GARR e Lepida | 5)Sicurezza perimetrale |
| 2)MAN – Sedi di Ateneo                    | 6)Fonia fissa           |
| 3)LAN – Rete interna alle singole sedi    | 7)Fonia Mobile          |
| 4)WIFI                                    | 8)Cablaggio strutturato |

## Servizio di Calcolo Scientifico

- |   |  |
|---|--|
| 1)Gestione cluster HPC                          | 5)Integrazione gruppi di ricerca       |
| 2)Gestione Calcolo Seriale                      | 6)Gestione delle priorità di accesso   |
| 3)Gestione calcolo avanzato su sistemi virtuali | 7)Gestione dell'evoluzione tecnologica |
| 4)Adattamento applicativi                       |  |

## Servizio Control Room e continuità operativa

- |   |                                   |
|---|-----------------------------------|
| 1)Gestione emergenze informatiche                           | 4)Gestione delle operazioni       |
| 2)Monitoraggio centralizzato della rete e della fonia (NOC) | 5)Gestione delle modifiche minori |
| 3)Monitoraggio centralizzato dei sistemi                    |                                   |

## Servizio sistemi di Ateneo

- |   |   |
|---|---|
| 1)Data Center di Ateneo                                 | 11)Sistemi di condivisione e collaborazione |
| 2)Sistemi di Virtualizzazione - Server                  | 12)Sistemi di Stampa                        |
| 3)Sistemi di Virtualizzazione client                    | 13)Sistema di rilevazione presenze          |
| 6)Sistemi di Storage                                    | 14)Sistema di Controllo Accessi             |
| 7)Sistemi di autenticazione (LDAP e AD)                 | 16)Sistemi di Backup e DR                   |
| 8)Sistemi di autenticazione federata e (Singol Sign On) | 17)Sistemi di web hosting                   |
| 9)Sistemi di Database (RDBMS)                           | 18)Sistemi di E-Learning                    |
| 10)Servizio di Posta elettronica                        |   |

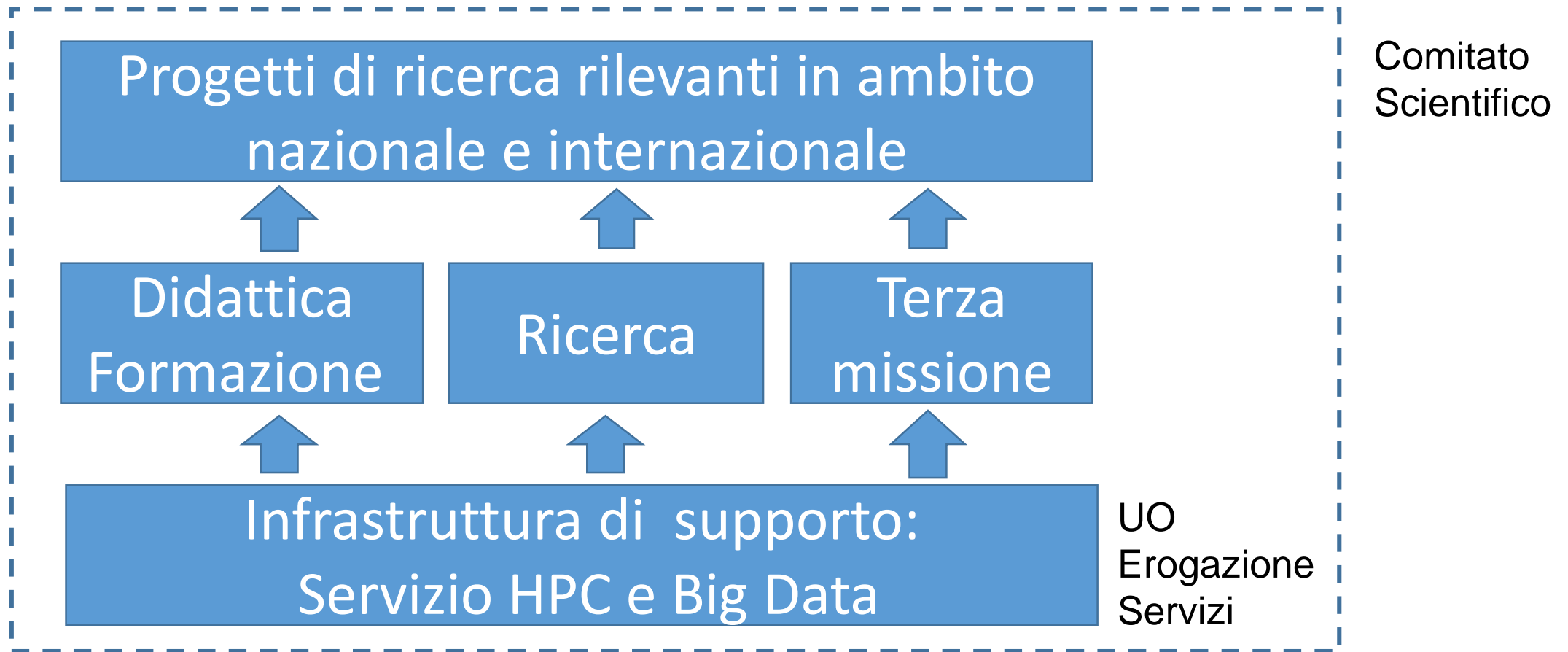
## Gestione Approvvigionamenti - Ciclo Acquisti

- |                                   |                            |
|-----------------------------------|----------------------------|
| 1)Pianificazione Budget           | 5)Gestione fornitori       |
| 2)Gestione e monitoraggio budget  | 6)Gestione contratti       |
| 3)Procedure negoziate sotto i 40K | 7)Analisi di mercato       |
| 4)Procedure negoziate sopra i 40K | 8)Monitoraggio contabilità |


13 FTE per 35 ambiti complessi  
di cui 1,5 FTE per il servizio di Calcolo



## ECOSISTEMA CALCOLO SCIENTIFICO



# I TEMPI DEL PROGETTO



<b>4 Giugno 2015</b>	<b>Workshop «Il Calcolo Scientifico in Ateneo»</b>
<b>20 Gennaio 2016</b>	<b>Presentazione Progetto allo Staff del Rettore</b>
<b>Aprile 2017</b>	<b>Installazione macchina HPC</b>
<b>Giugno 2017</b>	<b>Corso HPC per dottorandi e ricercatori (1<sup>^</sup> ed.)</b>
<b>Maggio 2018</b>	<b>Espansione macchina HPC e riallineamento software con CINECA</b>
<b>Giugno 2018</b>	<b>Corso HPC per dottorandi e ricercatori (2<sup>^</sup> ed.)</b>
<b>Luglio 2018</b>	<b>Inizio attività per supporto applicazioni Big Data</b>

# Il punto di partenza

**4 Giugno 2015**

## Workshop sul calcolo scientifico

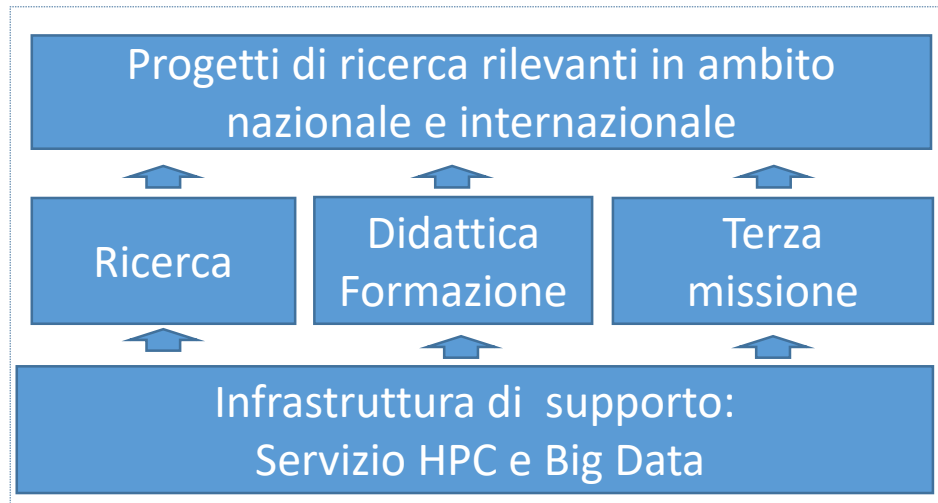
-- Analisi dello stato e delle necessità nei dipartimenti dell'Ateneo



**20 Gennaio 2016**

## Presentazione allo Staff del Rettore

-- Inserimento nel piano strategico di Ateneo, nomina del Comitato Scientifico e avvio del progetto



**UNIVERSITÀ DI PARMA**  
il mondo che ti aspetta

ATENEEO DIDATTICA RICERCA SERVIZI

### 4 giugno: workshop sul Calcolo Scientifico in Ateneo

Giovedì 4 Giugno, alle ore 14.30, nella Sala Congressi dell'edificio Q02 (Campus Universitario, ingresso da via Langhirano), si terrà un workshop sul [Calcolo Scientifico in Ateneo](#).

La recente riorganizzazione dei servizi informatici di Ateneo offre l'opportunità di analizzare lo stato del calcolo scientifico in Ateneo e valutarne i possibili sviluppi nel quadro delle politiche nazionali e regionali. In questo ambito verrà presentata la nuova Articolazione Organizzativa del Calcolo all'interno della UOS Erogazione Servizi dell'Area Informatica.

Verranno presentate le politiche di sviluppo delle infrastrutture nazionali e regionali, in particolare attraverso gli interventi di **Dario Menasce** (*Nuovi modelli per il calcolo scientifico: l'esperienza dell'INFN*) e **Carlo Cavazzoni** (*Prospettive del calcolo HPC al CINECA*).

E' previsto un breve intervento del prof. **Giovanni Franceschini**, Pro Rettore vicario dell'Ateneo e Delegato per l'Area Informatica. Seguiranno alcuni interventi illustrativi di diverse realtà già operanti e infine una discussione pubblica relativa alla costruzione di un progetto aperto "Calcolo Scientifico in Ateneo".

Per informazioni: [roberto.alfieri@unipr.it](mailto:roberto.alfieri@unipr.it), [roberto.derenzi@unipr.it](mailto:roberto.derenzi@unipr.it)



# INSTALLAZIONE E UTILIZZO DELLA MACCHINA HPC



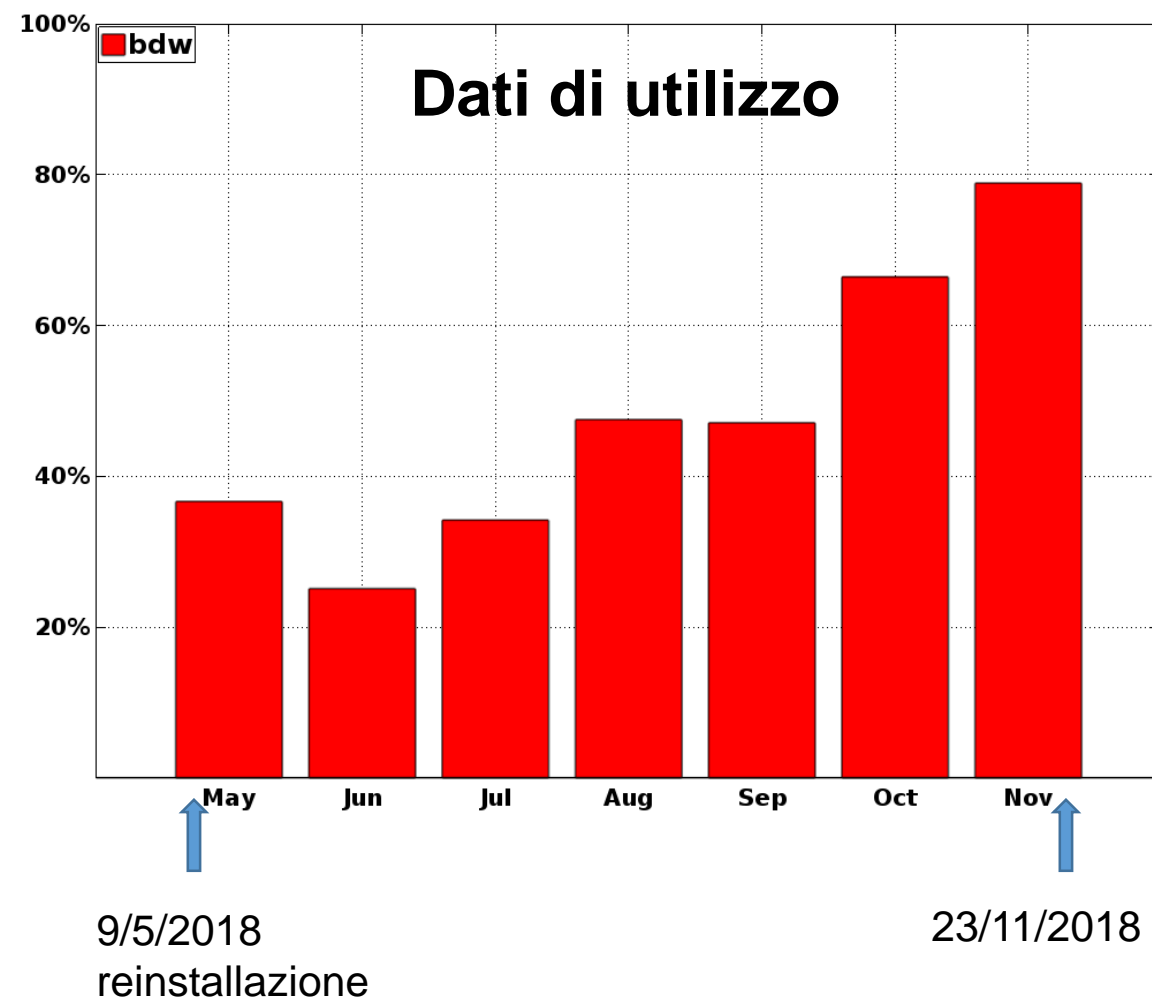
## Installazione:

04/2017: 20 nodi + 110 TB storage (INFN)

05/2018: 10 nodi + allineamento software con CINECA

## >50 installazioni Software custom

- modellistica molecolare (SCVSA, SAF)
- dinamica molecolare (SCVSA, SAF, SMFI)
- genomica (SCVSA, SAF, SMFI)
- fluidodinamica (DIA, SMFI)
- Computer-aided engineering (DIA)
- Density Functional Theory (SCVSA, SMFI)
- LatticeQCD, relatività numerica (SMFI)
- Matlab, R (SMFI, SEA, DIA)
- Intelligenza artificiale e Big Data (tutti)



## 47 GRUPPI DI RICERCA

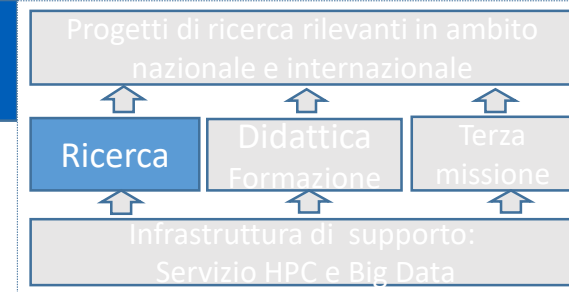
- 23 DIA
- 8 SCVSA
- 8 SMFI
- 5 SAF
- 2 MC
- 1 SEA

## 210 UTENTI

- 90 ricercatori
- 65 dottorandi/laureandi
- 55 studenti (didattica)

## TIPOLOGIE GRUPPI

- **Gruppi che già usano il CINECA:**  
sviluppo nuovi programmi, test di nuovo Hardware o Software, esperienze condivise con altri gruppi
- **Gruppi che hanno risorse locali:**  
possibilità di centralizzare in data-center le risorse e di condividerle, risorse e supporto specializzato, confronto con altri gruppi, accesso a formazione, passaggio a metodologie CINECA-like, possibilità di crescita verso CINECA
- **Gruppi con esigenze ma senza competenze computazionali:**  
Accesso a formazione, risorse e supporto



## I RISULTATI

- Il numero di pubblicazioni come indicatore della performance del servizio nel piano strategico di Ateneo.
- Richiesto Acknowledgement sulle pubblicazioni:  
*"This research benefits from the HPC facility of the University of Parma, Italy"*
- Ad oggi **41 pubblicazioni** segnalate

## Corso per dottorandi

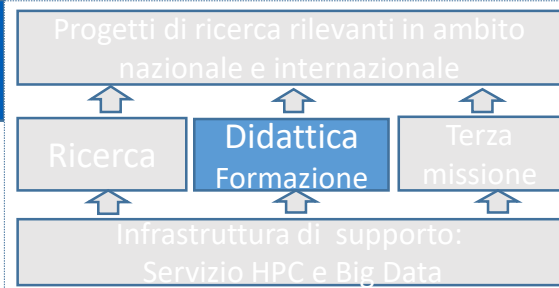
Organizzate 2 edizioni del corso (06/2017 e 06/2018) sul calcolo ad alte prestazioni per dottorandi e ricercatori.

Complessivamente 50 partecipanti:

- 21 DIA
- 19 SMFI
- 10 SCVSA
- 5 SAF
- 4 SMV
- 1 MC

## Corsi con esercitazioni sulla macchina HPC

Corso	Ambito	Docente	Codice	Periodo
Modellistica Molacolare	I.m. in Sc. e tecn. Alimentari	P. Cozzini	G_FOODMM	Nov-dic 2018
Chimica Computazionale	I.m. in Chimica	R. Cammi	T_2018_CHIMCOMP	Nov-Dic 2018
Corso HPC modulo base	Dottorato	Alfieri, DalPalu', Amoretti, DiRenzo, Covati	T_HPC18A	Giugno 2018
Reti Calcolatori	I.t. Informatica	R. Alfieri	T_RET11718	Maggio 2018
Sistemi di Elaborazione	I.m. Ingegneria Inf.	M. Amoretti	T_SISELAB1718	Aprile 2018
Chimica Computazionale	I.m. in Chimica	R. Cammi	T_CHIM5039	Nov-Dic 2017
Corso HPC modulo base	Dottorato	Alfieri, DalPalu', Amoretti, DiRenzo, Covati	T_HPC17A	Mag-Giu 2017
Sistemi di Elaborazione	I.m. Ingegneria Inf.	M. Amoretti	T_SISELAB1617	Maggio 2017
Reti Calcolatori	I.t. Informatica	R. Alfieri	T_RET11617	Maggio 2017



## Locandina 1<sup>a</sup> edizione

**UNIVERSITÀ DI PARMA**  
il mondo che ti aspetta

ATENEEO DIDATTICA RICERCA SERVIZI

Home

Al Campus il primo corso sul calcolo ad alte prestazioni per dottorandi e giovani ricercatori

Like Share in Share Tweet G+ Print

*Hanno partecipato oltre 30 dottorandi provenienti da diverse scuole*

Dal 30 maggio al 15 giugno 2017 il Campus Scienze e Tecnologie dell'Università di Parma ha ospitato il primo corso sul calcolo ad alte prestazioni (HPC) per dottorandi e giovani ricercatori. Al corso, tenuto da diversi docenti dell'Ateneo esperti del settore, hanno partecipato più di 30 dottorandi provenienti da diverse scuole.

## LM in Ingegneria Informatica a.a. 2018/2019

- (nuovo) corso «High Performance Computing»

## LT in Informatica a.a. 2018/2019

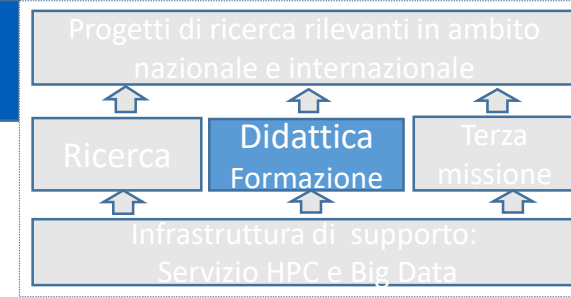
- (nuovo) corso «Programmazione parallela e High Performance Computing»

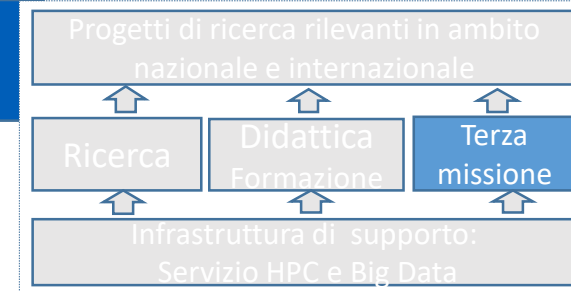
## LM in Informatica a.a. 2019/2020: proposta di attivazione

Incentrata sulla formazione in

- Calcolo Parallelo e Big Data
- Intelligenza Artificiale
- Metodologie di sviluppo software innovative

LM beneficia e valorizza l'infrastruttura HPC





## Principali attività svolte sul territorio che beneficiano dell'infrastruttura HPC:

### **Gruppo Costruzioni Idrauliche , Dip. IA**

2015-2020: simulazioni inondazioni, progetto Resilience Regione E.R. 250 K€

2015-2018: simulazioni numeriche per gestione rischio inondazioni, S.I.R., MIUR 383 K€

2018-2021: simulazioni idrodinamiche per Andritz Hydro SAS 102 K€

### **Gruppo di ricerca in Ingegneria dell'Informazione , Dip. IA**

2017-2018 : contratto di ricerca conto terzi (Adidas AG) ambito visione artificiale 72 K€

### **Gruppo di ricerca in chimica computazionale per il gruppo di medicinal chemistry, Dip. SAF**

2017-2018 : diversi contratti in ambito modellistica molecolare con aziende farmaceutiche 95 K€



## Principali progetti H2020 che beneficiano dell'infrastruttura HPC:

**SINE2020**, *World class science and innovation with neutrons in Europe 2020* (start 2016)

Coord. UniPR Prof De Renzi

**Budget totale 11.3 M€, UniPR 86 K€**

**ITN EuroPLEx**, *fisica delle particelle e fisica teorica, con forte componente di HPC ed enfasi su statistica avanzata/data science* (start 2018)

Coord. Prof Di Renzo

**Budget totale 4 M€, UniPR 523 K€ + 170 K€ (coordinamento)**

**BD2DECIDE**, *Big Data and models for personalized Head and Neck Cancer Decision support.* (start 2016)

Coord. Prof Poli

**Budget totale 4.8 M€ , UniPR 60 K€**

**EU-STANDS4PM**, *a European standardization framework for data integration and data-driven in silico models for personalized medicine.* (start 2019)

Coord. UniPR Prof Poli

**Budget totale 2 M€, UniPR 60 K€**



## Regione E.R.

- **Istituzione della «Associazione Big Data Emilia Romagna»** composta da Atenei ed enti di Ricerca (06/2018)
- **Individuati 14 domini applicativi;** formazione di tavoli di competenze per ogni dominio (in corso)
- **Bando per la formazione di neolaureati in discipline umanistiche, economiche, giuridiche e scientifiche**  
Assegnato nel maggio 2018 a cordata regionale (Incluso UniPR) **900 K€**
- **Bando su infrastruttura regionale** (in uscita)
- **2 Borse di dottorato** (DIA e SAF) e **1 Assegno di ricerca** (DIA), **~140 K€**

## Comunità Europea

- **4 bandi H2020** tematiche salute, cambiamenti climatici, energia, data economy (scad. 04/2019, da 30 a 48 M€)

Luglio 2018

**Attivato gruppo di lavoro del Comitato Scientifico per estendere il supporto anche alle applicazioni Big Data**

Grazie per l'attenzione!