



Il calcolo Scientifico in Ateneo

20/01/2016

Dott. Fabrizio Russo - Resp. UOS Erogazione Servizi, Area SI

Prof. Roberto De Renzi - Direttore Dipartimento DiFeST

Prof. Roberto Alfieri – Docente DiFeST



- ✓ Il calcolo scientifico in Ateneo
- ✓ Motivazione scientifica
- ✓ Progetto tecnico e budget



- E' uno strumento di **supporto alla ricerca** scientifica e lo sviluppo tecnologico
- Utilizzato da Università, laboratori di ricerca pubblici e privati
- Consente di sviluppare una **simulazione numerica** di un fenomeno che sia stato matematicamente modellizzato al fine di ottenere una soluzione quantitativa di un problema scientifico



- E' un insieme di tecnologie utilizzate da infrastrutture basate su **cluster** di computer in grado di generare sistemi di elaborazione a prestazioni elevate
- Generalmente ricorre al **calcolo parallelo**

Perché includerlo nell'Area SI

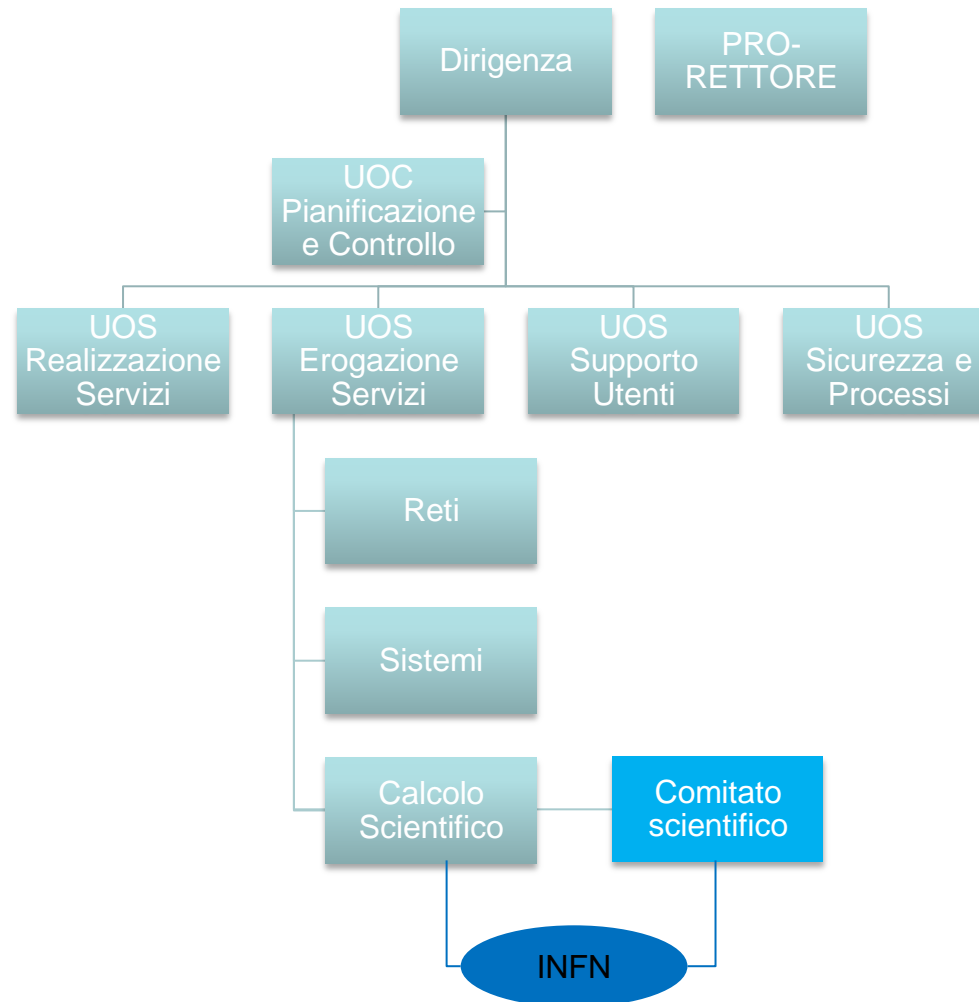


- L'Area SI, di recente costituzione, impronta i propri processi, attività e progetti verso un costante **allineamento alla strategia dell'Ateneo**
- **Cos'è mancato** in passato: un contributo significativo alla ricerca e un interesse alla terza missione.
- Evitare la **dispersione** sia in termini di sforzi che di risorse
- Affrancare i ricercatori dai problemi tecnici e gestionali



- **Consolidare** tutte le risorse di calcolo in un unico DC opportunamente predisposto.
- **Controllo e monitoraggio** centralizzati.
- **Problem Solving** centralizzato.
- Coordinamento degli **acquisti** con conseguente maggior risparmio.
- **Economie di scala** dovute alla modularità, all'utilizzo di risorse on-demand...

Organigramma



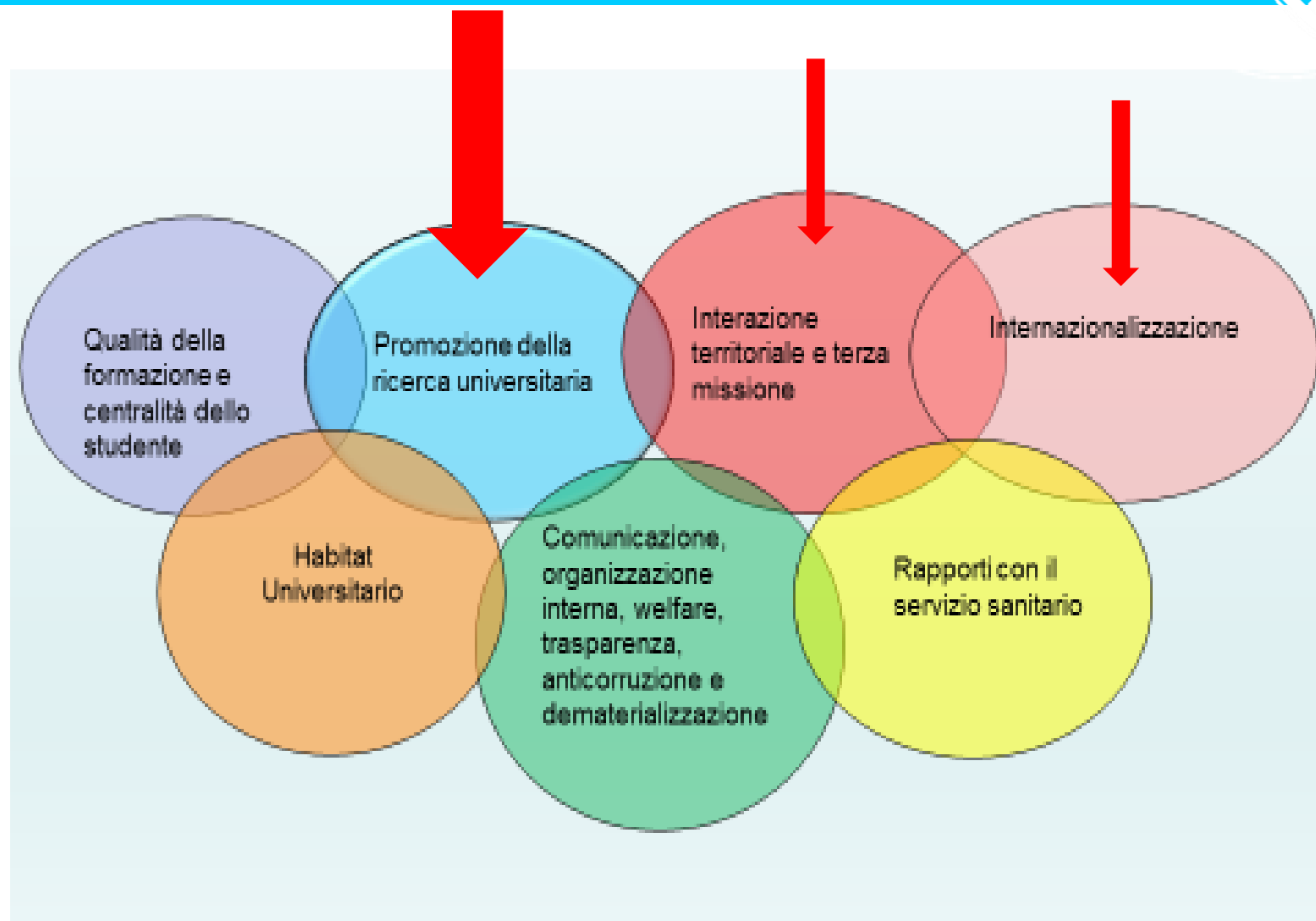


- Funzioni
 - **Indirizzo** sull'evoluzione dei servizi offerti
 - **Interfaccia** unica per il corretto instradamento delle esigenze/richieste
 - **Aspetti formativi** sulla programmazione orientata al calcolo (Seminari, Corsi, Master...)
 - **Coordinamento dei progetti** per i finanziamenti esterni (Bandi, gare...) con la nostra collaborazione sugli aspetti infrastrutturali
 - **Collaborazioni** con realtà extra unipr



- Centro di eccellenza
 - Calcolo sequenziale e parallelo (GRID computing)
 - Competenze sistemistiche (Cloud, virtualizzazione, middleware...)
 - Mondo Unix/Linux
- Competenze gestionali
 - Rapporti INFN/Cineca...
 - Gestione fornitori
 - Gestione licenze SW

Collocazione nel Piano Strategico 2016-2018

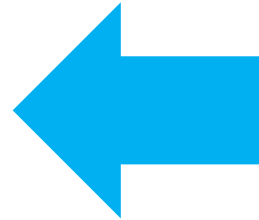


Area strategica «Promozione della ricerca universitaria»

Obiettivi strategici



Promozione della ricerca
universitaria



Sviluppo del calcolo
scientifico



Azione: Potenziamento dell'infrastruttura di calcolo scientifico di Ateneo

Risorse richieste per il triennio 2016-2018: € 600.000 TCO

Finanziamento iniziale per per la nuova infrastruttura di calcolo: 200.000

Ampliamento risorse di calcolo nel triennio: 100.000 (2016) + 100.000 (2017)

Costi di esercizio + SW + Storage: 200.000



Finanziamento INFN: 30.000 per il 2016



Progetti scientifici:...



Regione E-R:?

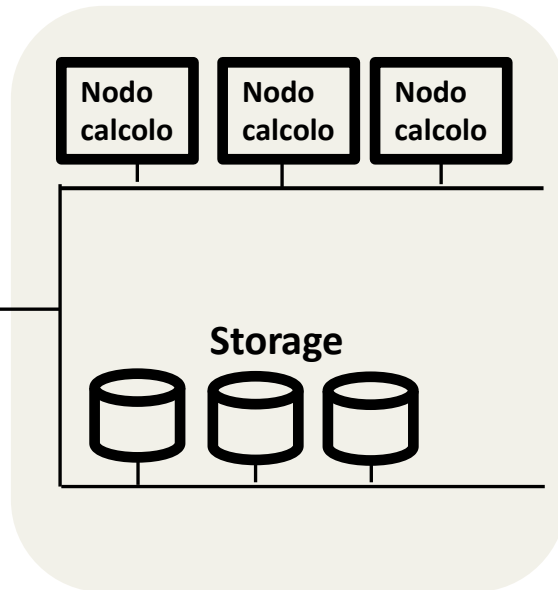


- Disponibilità di un **Data Center** che possa erogare servizi non solo all'interno dell'Ateneo ma anche all'esterno
- Elevata efficienza energetica
- Sostenibilità: economicità e basso impatto ambientale
- Scalabilità

Il Progetto tecnico - componenti



HARDWARE



SOFTWARE

Job Manager
Compilatori
Librerie Scientifiche
Tools

File system distribuito

INFRASTRUTTURA





WorkShop sul Calcolo Scientifico in Ateneo

chaired by Roberto De Renzi, Roberto Alfieri

Thursday, 4 June 2015 from **14:30** to **17:30** (Europe/Rome)
at **Campus Scientifico (Sala Congressi Q02)**

Contributi esterni

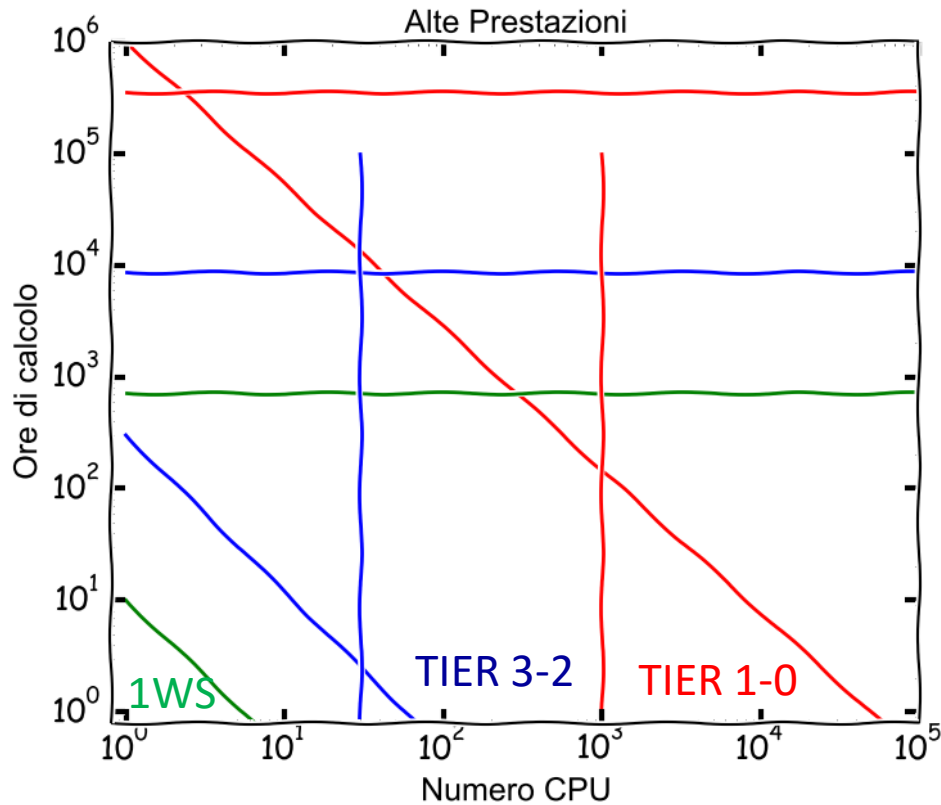
- INFN: Dario Menasce
- CINECA: Carlo Cavazzoni

Esperienza di Calcolo in Ateneo

- Dip. Difest
- Dip. Bioscienze
- Dip. Farmacia
- Dip. Scienze degli alimenti
- Dip. Matematica e informatica
- Dip. Dicatea
- Dip. Ing. Informazione
- Dip. Ing. Industriale
- Dip. Chimica



Calcolo ad Alte Prestazioni



vita lavorativa

anno

mese

- High Performance Computing e High Throughput Computing
- Big Data ...



Esempio di sinergia regionale

Iniziativa Regionale Big Data:

- Circa un terzo di 1000 anni/ricercatore
 - Quattro Università
 - CINECA
 - INFN-CNAF
 - INAF
 - Lepida
 - Istituti Ospedalieri Regionali
 - ...



Diagnosi personalizzata di cancro testa e collo: Strategie Big Data

Marco Vitale (*Dipartimento SBiBiT*)

L'approccio personalizzato alla terapia può sostituire quello attuale in cui tutti seguono un solo protocollo. Occorre progettare un sistema esperto integrando molte sorgenti esterne con capacità di analisi semantica. Il progetto finanziato prevede una Big Data Infrastructure

CALCOLO

Analisi di dati massivi.
Prevede acquisto di risorse di alte prestazioni.

CPU

STORAGE



PROGETTI

B2D2Decide (H2020) *Big Data and models for personalized head and neck cancer decision support*

- Addizione modulare di risorse
- Big Data regionale



Diagramma di fase di Quantum Chromo Dynamics

Francesco Di Renzo, *Dipartimento di Fisica e Scienze della Terra*

Simulazioni di cosa è successo e cosa sarebbe potuto succedere dopo il Big Bang. Richiedono onerose simulazioni oltre che lo sviluppo di nuove strategie di calcolo.

CALCOLO

intensivo parallelo

CPU

GPU

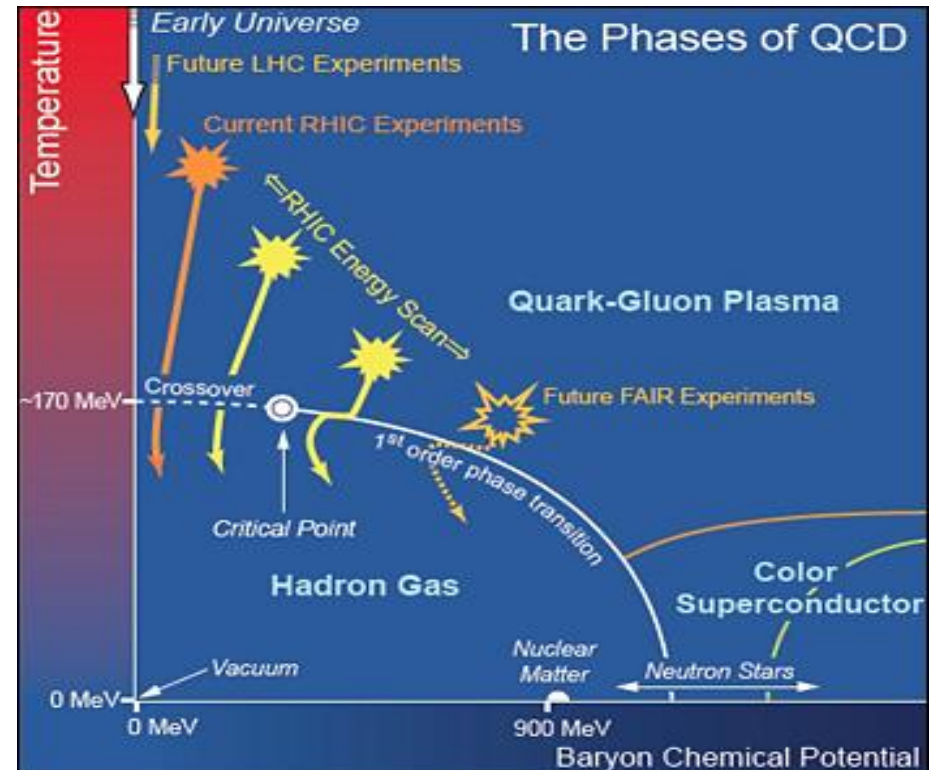
STORAGE

PROGETTI QCDLAT 2015, circa 2 milioni di CPU ora (Mch) su FERMI, 0.5 Mch su GALILEO (convenzione INFN-CINECA)

REFERENZE

M. Cristoforetti, F. Di Renzo, L. Scorzato, Phys. Rev. D 86, 074506 (2012)

M. Cristoforetti, F. Di Renzo, A. Mukherjee, L. Scorzato, Phys. Rev. D 88, 051501 (2013)



Il diagramma di fase della QCD secondo la teoria attuale



Geni inattivati e uso terapeutico delle corrispondenti proteine

Riccardo Percudani (*Dipartimento di Bioscienze*)

Mutazioni inattivanti nel genoma umano sono causa frequente di malattie genetiche. Alcune di queste mutazioni sono state fissate nella nostra specie durante l'evoluzione, come rivelato dall'analisi di dati massivi di sequenziamento. La somministrazione di proteine attive può surrogare la funzione dei geni inattivati e aiutare a correggere difetti del metabolismo.

CALCOLO

Analisi di dati massivi di sequenziamento genomico.

CPU

STORAGE

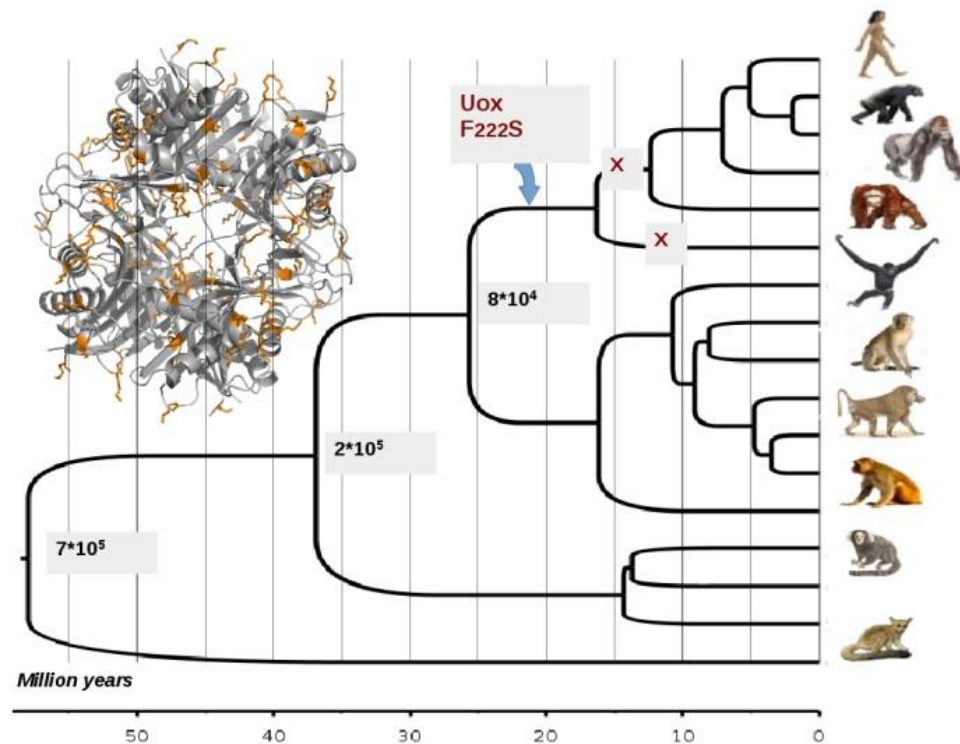
PROGETTI, BREVETTI

EU & USA patent PCT/IT2006/000778

Telethon GGP1349.

REFERENZE

Doniselli N, Monzeglio E, Dal Palù A, Merli A, Percudani R. Sci Rep. 8 (2015)



Struttura tridimensionale della proteina Uox e identificazione delle mutazioni inattivanti durante l'evoluzione degli ominidi



Inibitori irreversibili di chinasi per la cura di tumori resistenti

Marco Mor, Alessio Lodola (*Dipartimento di Farmacia*)

Nella terapia antitumorale si osservano fenomeni di resistenza a inibitori di chinasi. Farmaci di nuova generazione, progettati attraverso modellistica molecolare, inibiscono l'enzima bersaglio in modo irreversibile. Si può ottimizzare l'efficacia antitumorale, riducendone gli effetti collaterali.

Interesse specifico dell'industria farmaceutica anche alla modellizzazione.

CALCOLO

GPU e CPU in parallelo (8-32 cores),

CPU

GPU

STORAGE

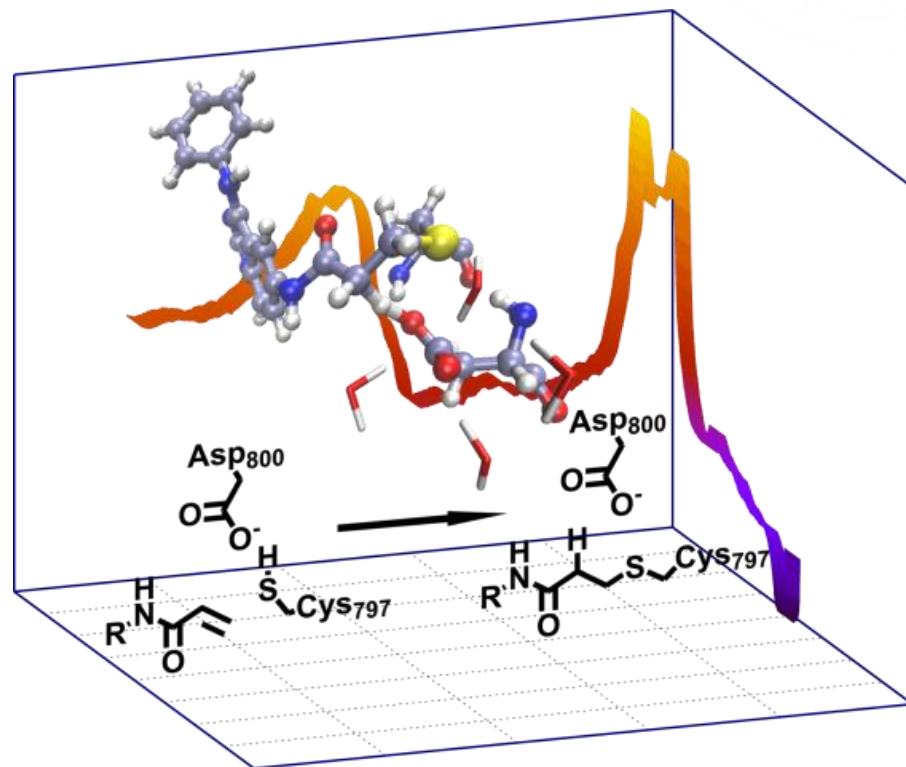
PROGETTI

AIRC (2012-2015) in partecipazione con Azienda Ospedaliera di Parma

REFERENZE

C. Carmi, E. Galvani, F. Vacondio, S. Rivara, A. Lodola, S. Russo, S. Aiello, F. Bordi, G. Costantino, A. Cavazzoni, R.R. Alfieri, A. Ardizzoni, P.G. Petronini, M. Mor, *J. Med. Chem.*, 55, 2251 (2012)

L. Capoferri, A. Lodola, S. Rivara, M. Mor, *J. Chem. Inf. Model.*, 55, 589 (2015).



Meccanismo dell'inibizione irreversibile della chinasi EGFR da parte di un farmaco di seconda generazione.

Metodi quantistici ab-initio



*Roberto Cammi, Dipartimento di Chimica
Carretta, De Renzi, Tribaudino DiFeST*

Strumento essenziale nello studio di sistemi molecolari, con applicazioni dalla biochimica alla scienza dei materiali.

A Parma il Prof. Roberto Cammi è leader in applicazione a processi molecolari in ambienti complessi (Chimica).

S. Carretta su molecole magnetiche per computer quantistici (Fisica), R. De Renzi, PP Lottici e M. Tribaudino in supporto all'interpretazione di dati spettroscopici

CALCOLO

CPU

GPU

STORAGE

Risorse Esterne Prace, A 2014 ISCRA C 2015 CINECA, Juropa Jülich D, SCARF Harwell UK

PROGETTI E TRASFERIMENTO TECNOLOGICO:

Dal 1998 contratto dell'Ateneo con Gaussian Inc., il software molecolare più utilizzato a livello internazionale.

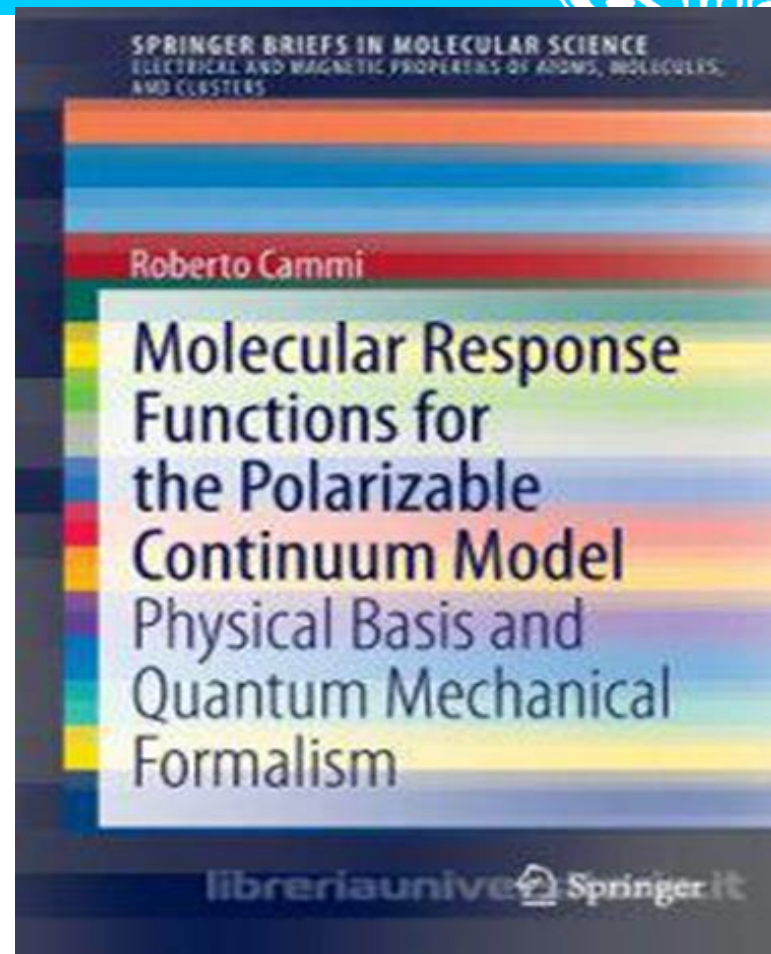
H2020 SINE2020 De Renzi, FIRB2012 Carretta

REFERENZE

J. Tomasi, B. Mennucci, R. Cammi, Chem. Rev. **2005**, 105, 2009 (**4752 citazioni** da ISI Web of Science, 23/11/2015)

A. Chiesa, S. Carretta, P. Santini, G. Amoretti and E. Pavarini, Phys. Rev. Lett. **110**, 157204 (2013)

F. Bernardini, P. Bonfà, S. Massidda, R. De Renzi, Phys. Rev. B **87**, 115148 (2013)





Cambiamento genetico delle popolazioni

Pietro Cozzini (Dip. di Scienze degli Alimenti)

Anna Maria Bruschini (Dip. Bioscienze)

Esplorazione con dinamica molecolare di molecole di farmaco Natalizumab in interazione con forme mutate di proteine coinvolte nelle terapie della sclerosi multipla e del morbo di Crohn.

Simulazioni di 150k atomi per tempi lunghi alla ricerca della mutazione che evita il legame con il farmaco.

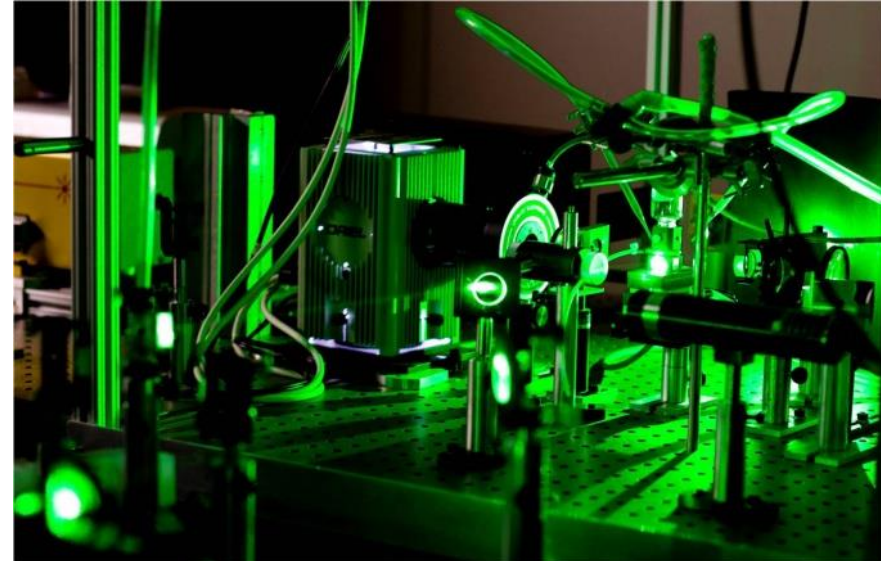
CALCOLO

Dinamica molecolare su software commerciale ottimizzato per machine CINECA

CPU

GPU

STORAGE



PROGETTI

CINECA ISCRA GALILEO 0.02 Mch

REFERENZE

Dellafiora L, Mena P, Del Rio D, Cozzini P. J Agric Food Chem. 2014

Ginex T, Spyarakis F, Cozzini P. Food Addit Contam Part A Chem Anal Control Expo Risk Assess. 2014



Simulazioni di fenomeni di allagamento

R. Vacondio (*Dipartimento di Ingegneria Civile, Dipartimento di Matematica e Inf.*)

La simulazione numerica di problemi di allagamento è una sfida scientifica di notevole impatto economico. I cambiamenti climatici e il notevole sviluppo delle grandi aree urbane richiedono nuovi sistemi di difesa dalle piene e l'aggiornamento delle mappe di rischio idraulico. Senza di ciò i danni per alluvioni in Europa nel 2050 sono stimati pari a 47 Miliardi di Euro per anno

CALCOLO

Codice sviluppato in CUDA in grado di sfruttare GPU TESLA NVIDIA®

CPU

GPU

STORAGE

PROGETTI

SIR 2015, Agenzia Regionale di Protezione Civile (Emilia – Romagna) – 2015 , Servizio Tecnico dei Bacini degli affluenti del Po (STB) della Regione Emilia-Romagna, Comune di Bompporto, Tetra Pak per esondazioni del fiume Secchia – 2013

REFERENZE

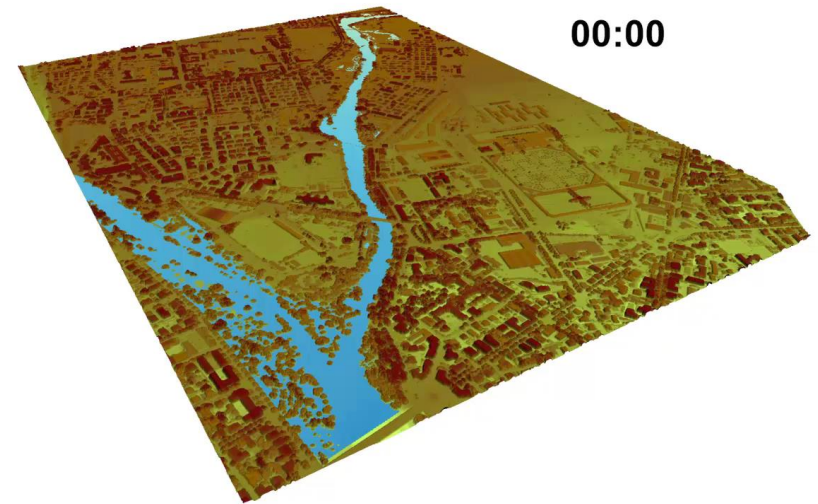
R. Vacondio, F. Aureli, A. Ferrari, P. Mignosa, A. Dal Palù, Nat. Hazard, doi: 10.1007/s11069-015-1959 (2015).

R. Vacondio, A. Dal Palù, P. Mignosa, Environ. Model. Softw. 57, 60-75 (2014).



Università degli Studi di Parma
DICATeA

Dipartimento di Ingegneria Civile, dell'Ambiente, del Territorio e Architettura



*Quote idriche della simulazione
dell'evento alluvionale del 14 ottobre
2014 nella città di Parma*



Simulazioni di onde gravitazionali

S. Bernuzzi DiFeST, INFN

La simulazione numerica di stelle di neutroni binarie è la sorgente attesa più rilevante di onde gravitazionali osservabili dalla nuova rete di Osservatori interferometrici, LIGO (Caltech, Washington, Luisiana), - VIRGO (Pisa)

CALCOLO

CPU

STORAGE

PROGETTI

Rita-Levi Montalcini 2013,

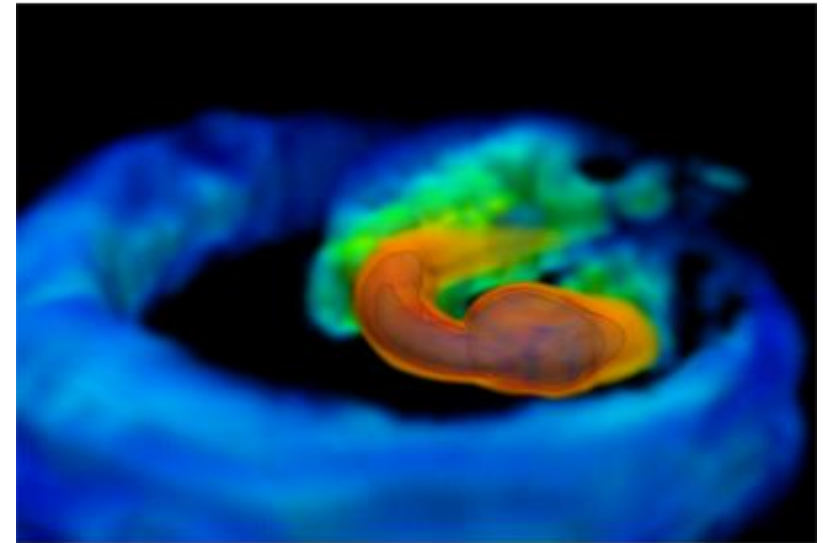
Caltech, Jena Supercomputers

H2020 BinGraSp **ERC Starting** Grant con INFN
proposto 1.5M€ di cui 0.25 M€ in progetto Calcolo Scientifico

REFERENZE

T. Dietrich, S. Bernuzzi, M. Ujevic, B. Brügmann Phys. Rev. D **91**, 124041 (2015)

S. Bernuzzi, T. Dietrich, A. Nagar Phys. Rev. Lett. **115**, 091101 (2015)



Simulazione relativistica dei resti di uno scontro tra due stelle di neutroni



Simulazioni di Reti e Sistemi Distribuiti

M. Amoretti, F. Zanichelli (*Dipartimento di Ingegneria dell'Informazione*)

Analisi delle prestazioni di sistemi Cloud, reti P2P e reti di sensori. In particolare vengono studiati protocolli di routing e algoritmi per il bilanciamento del carico.

Tipico esempio simulazione di sistemi di monitoraggio e controllo del traffico.

CALCOLO

Cluster Linux: 4 server, ciascuno con CPU Intel Xeon (8 core biprocessori) e 16GB di RAM;

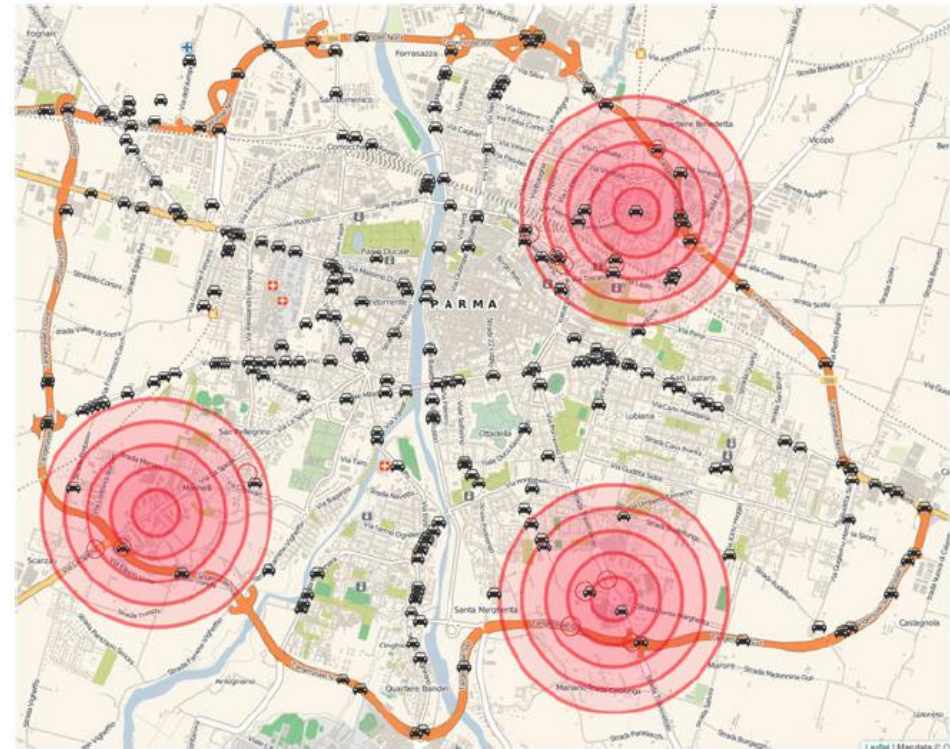
CPU

STORAGE

REFERENZE

M. Picone, M. Amoretti, M. Martalò, F. Zanichelli, G. Ferrari, *Concurrency Computat.: Pract. Exper.*, 27:3295–3315 (2015).

M. Amoretti, A. Grazioli, F. Zanichelli, *Simulation Modelling Practice and Theory*, 58:140–156 (2015).



Real-time monitoring of a simulated vehicular network



Dispositivi in fibra ottica

S. Selleri, (*Dipartimento di Ingegneria dell'Informazione*)

Progettazione di microstrutture che realizzano direttamente in fibra vari dispositivi (amplificatori, laser, sensori) per le telecomunicazioni.

Propagazione della luce, sua amplificazione ed eventuali effetti non-lineari. Si usano codici a elementi finiti (FEM)

CALCOLO

Simulazioni con solutori modali FEM e codici propagativi su workstation del gruppo (8 core, 3.4 GHz, 16 GB RAM).

CPU

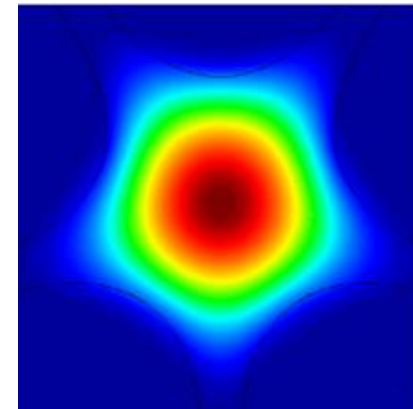
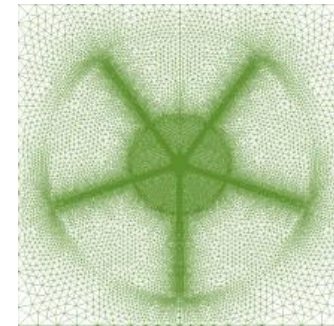
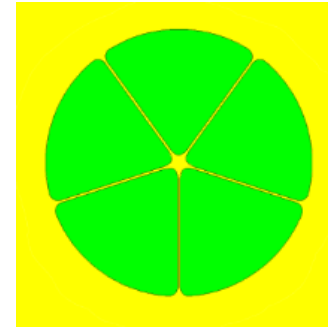
PROGETTI

FP7 IP project ALPINE - Advanced Lasers for Photovoltaic Industrial processing Enhancement, 2009-2012

REFERENZE

E. Coscelli, R. Dauliat, F. Poli, D. Darwich, A. Cucinotta, S. Selleri, K. Schuster, A. Benoit, R. Jamier, P. Roy, F. Salin, J. of Selected Topics in Quantum Electronics 22(2), article 4900808 (2016)

L. Rosa, E. Coscelli, F. Poli, A. Cucinotta, S. Selleri, Optics Express 23(14), 18638-18644 (2015)



In alto Sezione trasversa di una fibra ottica microstrutturata e modello corrispondente distribuzione di campo magnetico, calcolata mediante solutore modale FEM



Sistemi di comunicazione in Fibra Ottica

A. Bononi, (*Dipartimento di Ingegneria dell'Informazione*)

Studio di sistemi di comunicazione su lunga distanza in fibra ottica.

CALCOLO

Simulazioni tramite software Matlab in ambiente Linux



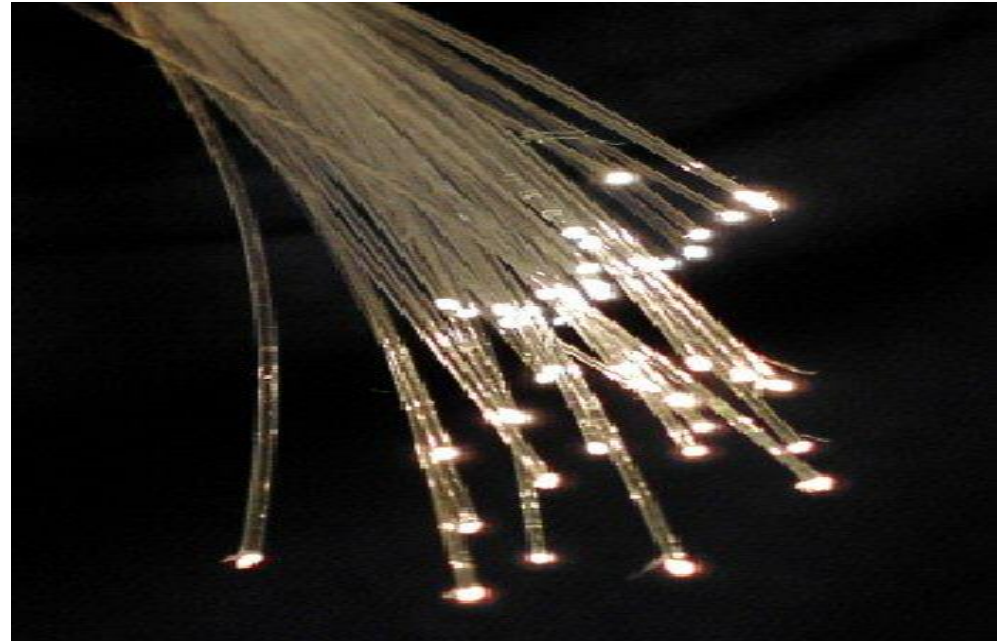
PROGETTI

14 contratti di ricerca con Alcatel-Lucent Bell Labs, Villarceaux, Paris, France

REFERENZE

A. Bononi, N. Rossi, and P. Serena, Opt. Express, vol. 20, no. 26, pp. B204–B216, Nov. 2012.

[2] P. Serena and A. Bononi, J. Lightw. Technol., vol. 31, no. 22, pp. 3489–3499, Nov. 2013.



Esempio di Fibre Ottiche



Satelliti per trasmissione video di nuova generazione

G. Colavolpe (*Dipartimento di Ingegneria dell'Informazione*)

La nuova generazione dei sistemi di trasmissione video via satellite richiede ottimizzazione dell'efficienza spettrale. I protocolli studiati hanno influenzato il nuovo standard DVB-S2X.

Simulazioni numeriche per il calcolo di probabilità d'errore ed efficienza spettrale.

CALCOLO

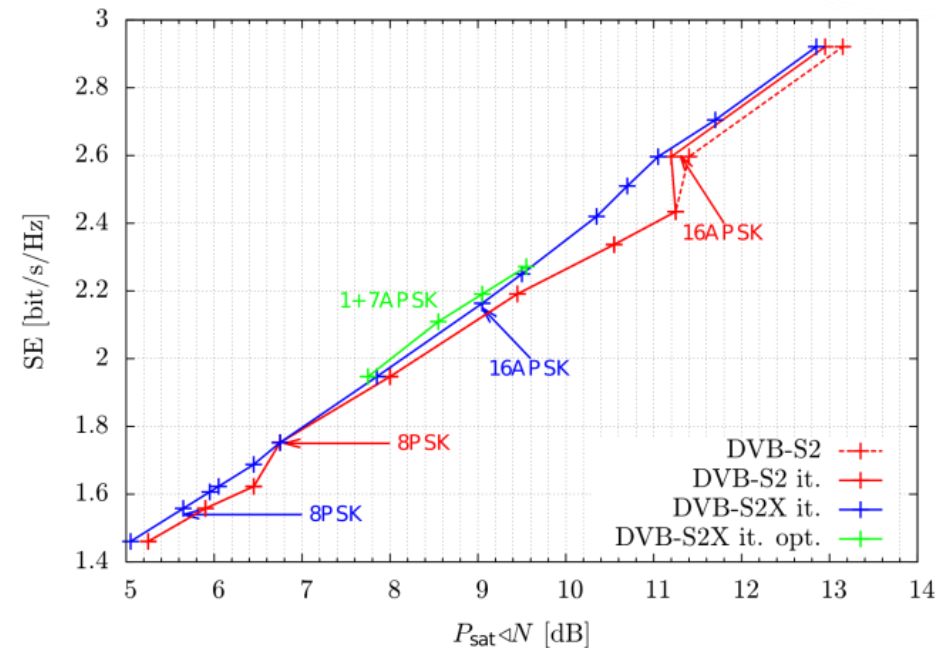
CPU

PROGETTI

3 grants Agenzia Spaziale Europea (ESA)

REFERENZE

ETSI EN 302 307-2 Digital Video Broadcasting (DVB). Second generation framing structure, channel coding and modulation systems for broadcasting, interactive services, news gathering and other broadband satellite applications, part II: S2-extensions (DVB-S2X)



Efficienza spettrale di formati di modulazione e codifica pratici.

Composizione del Comitato Scientifico

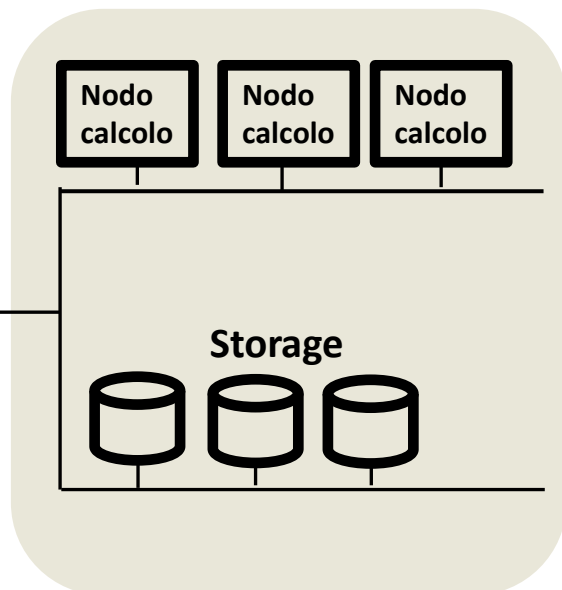


- Dip. Difest: Roberto Alfieri
- Dip. Scienze degli alimenti: Pietro Cozzini
- Dip. Ing. Informazione: Michele Amoretti
- Dip. Ing. Industriale: Alessandro Tasora
- Dip. Dicatea: Renato Vacondio
- Dip. Farmacia: Marco Mor
- Dip. Difest: Francesco Di Renzo
- INFN: Roberto De Pietri
- Dip. Bioscienze: Riccardo Percudani
- Dip. Chimica: Roberto Cammi
- Dip. Matematica e Informatica: Alessandro Dal Palù

Il Progetto tecnico - componenti



HARDWARE



SOFTWARE

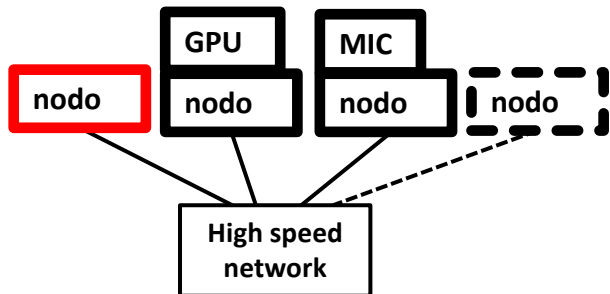
Job Manager
Compilatori
Librerie Scientifiche
Tools

File system distribuito

INFRASTRUTTURA



I Componenti HARDWARE per il calcolo HPC



COMPONENTI PRINCIPALI

1 NODO (es. con 16 cores, 5 K€)

1 GPU (es. NVIDIA K80, 5 K€)

1 MIC (es. Xeon PHI 7120p, 5 K€)

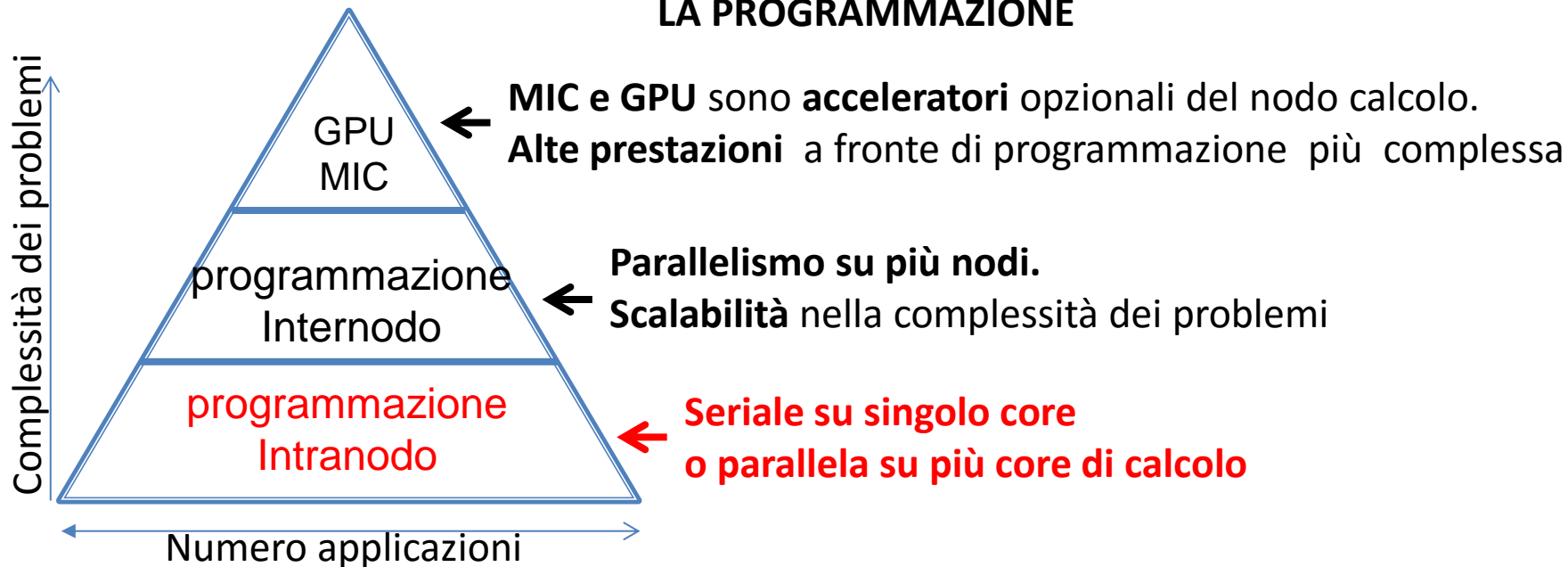
400 GFlops

2900 GFlops

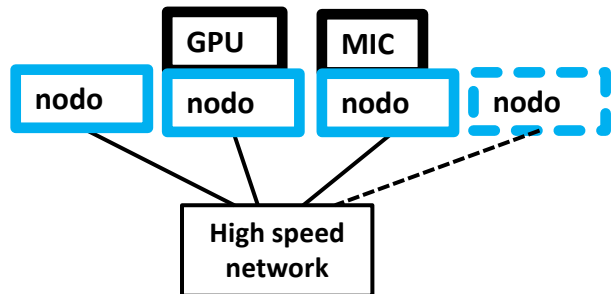
1200 GFlops

prestazioni di picco

LA PROGRAMMAZIONE



I Componenti HARDWARE per il calcolo HPC



COMPONENTI PRINCIPALI

1 NODO (es. con 16 cores, 5 K€)

1 GPU (es. NVIDIA K80, 5 K€)

1 MIC (es. Xeon PHI 7120p, 5 K€)

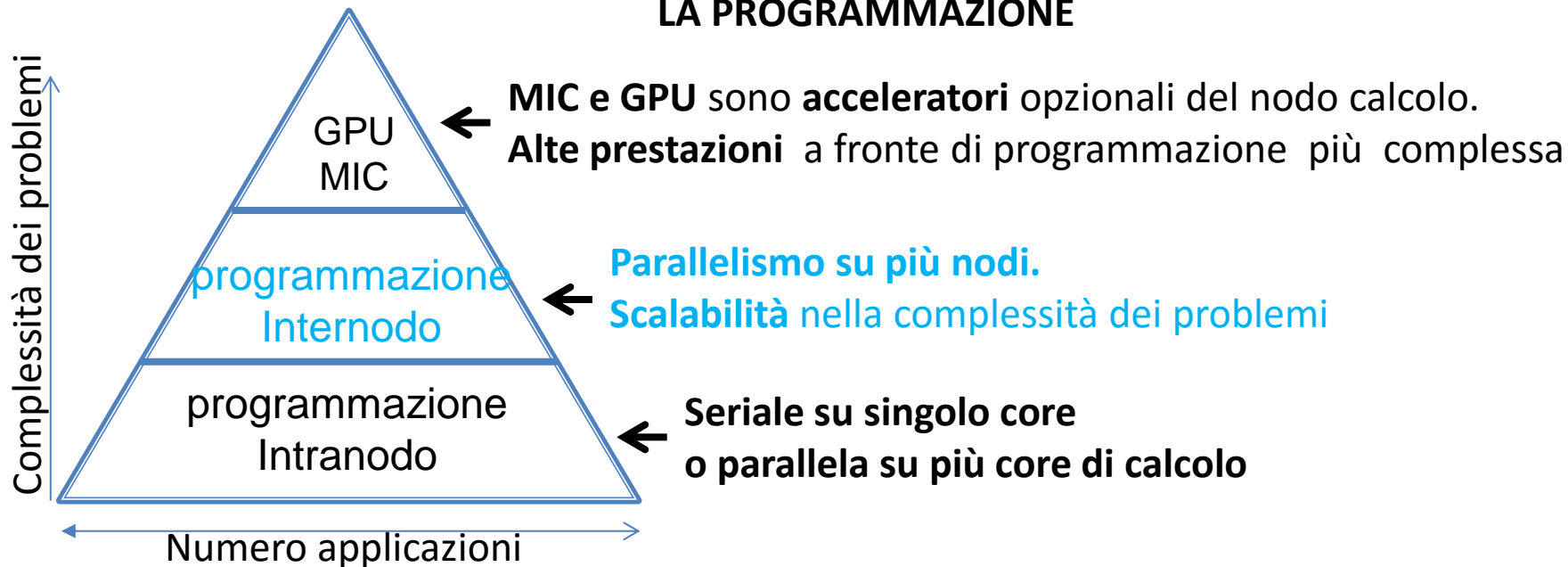
400 GFlops

2900 GFlops

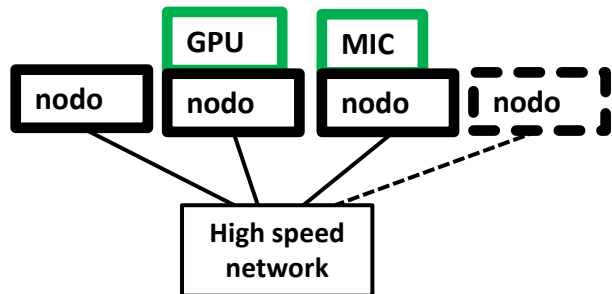
1200 GFlops

prestazioni di picco

LA PROGRAMMAZIONE



I Componenti HARDWARE per il calcolo HPC



COMPONENTI PRINCIPALI

1 NODO (es. con 16 cores, 5 K€)

1 GPU (es. NVIDIA K80, 5 K€)

1 MIC (es. Xeon PHI 7120p, 5 K€)

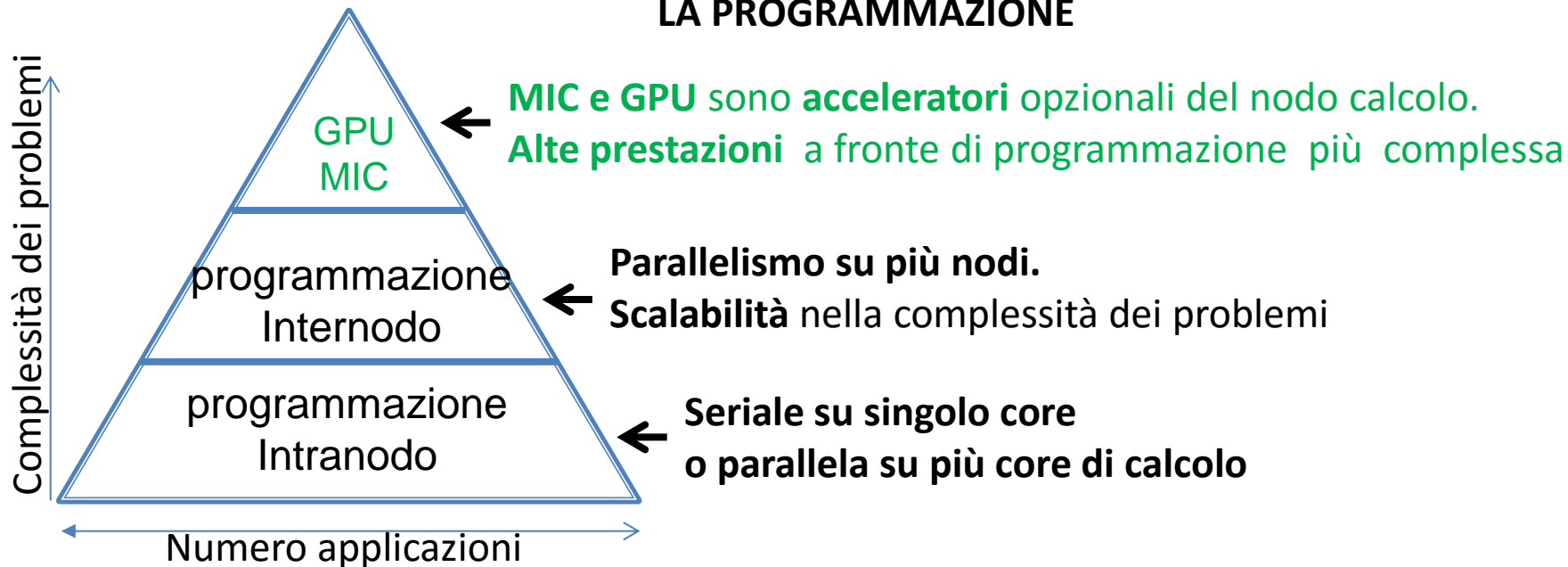
400 GFlops

2900 GFlops

1200 GFlops

prestazioni di picco

LA PROGRAMMAZIONE



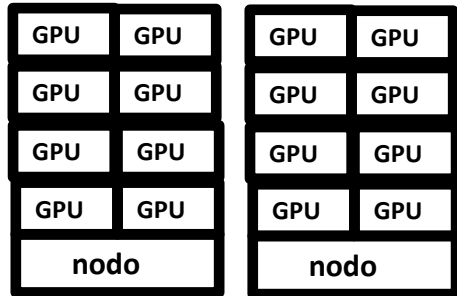
I Componenti **HARDWARE**: esempi di installazioni



ZEFIRO@INFN-PISA , senza acceleratori , 0.3 M€)

32 nodi (ogni nodo 64 core)

20 Tflops



COKA Cluster@UNIFE, fortemente accelerato con GPU (~ 0.2 M€)
(progetto sperimentale grandi attrezzature di Ateneo)

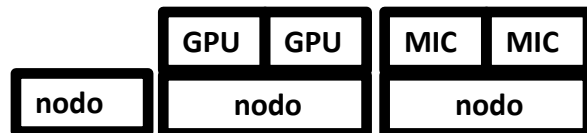
- 4 nodi (4 x 400 GFlops)
- 8 GPU x 4 nodi (8 x 4 x 2900 Gflops)

1.6 TFlops

92.8 TFlops



94.4 Tflops



GALILEO@CINECA , architettura eterogenea (2.5 M€)

- 516 nodi (516 x 400 GFlops)
- 2 MIC x 384 nodi (2 x 384 x 1200 GFlops)
- 2 GPU x 40 nodi (2 x 40 x 2900 GFlops)

200 TFlops

920 TFlops

232 TFlops

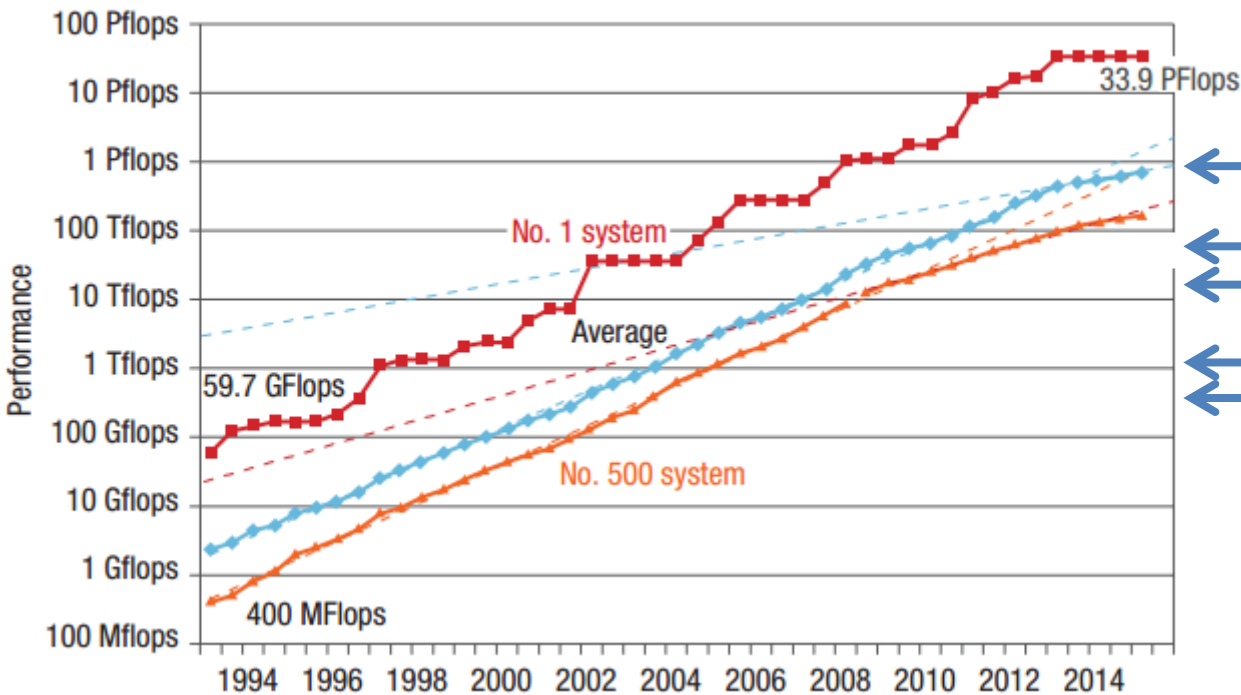


1352 TFlops

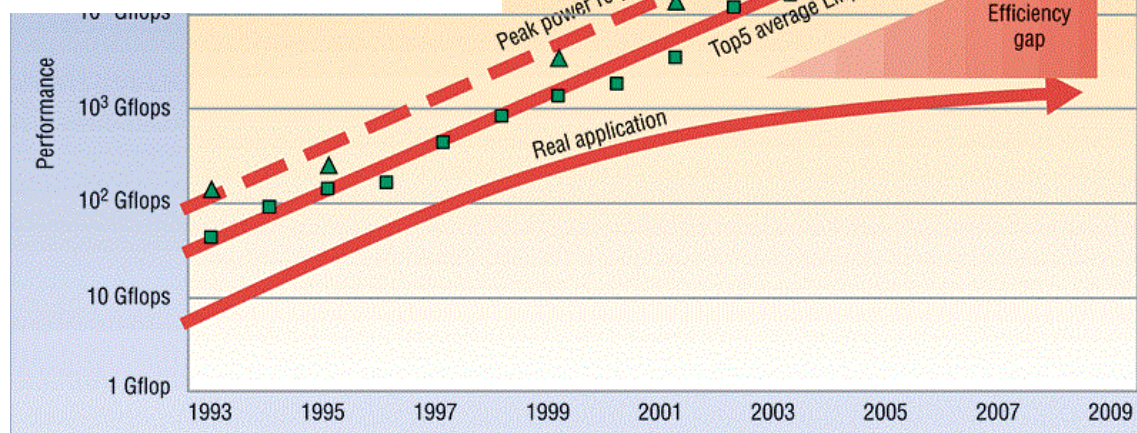
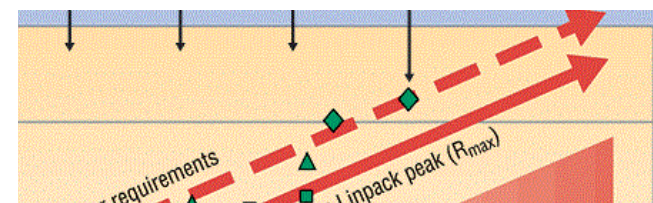
prestazioni di picco



Prestazioni ed efficienza



Big size
GALILEO CINECA (rank 130)
Medium size
UNIFE INFN-PISA
Small size
GPU K80 1 NODO



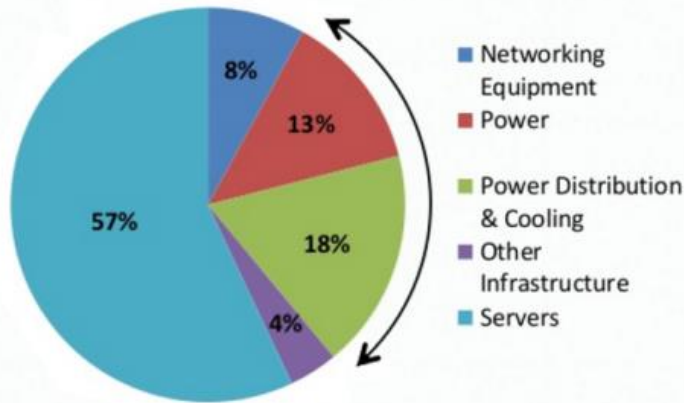
Al crescere dei gradi di parallelismo aumentano complessità e competenze necessarie per sfruttare al meglio le risorse disponibili.

Efficienza Energetica



Typical Data Center Operating Costs Profile

Power costs represent 25-40% of monthly operating expenses



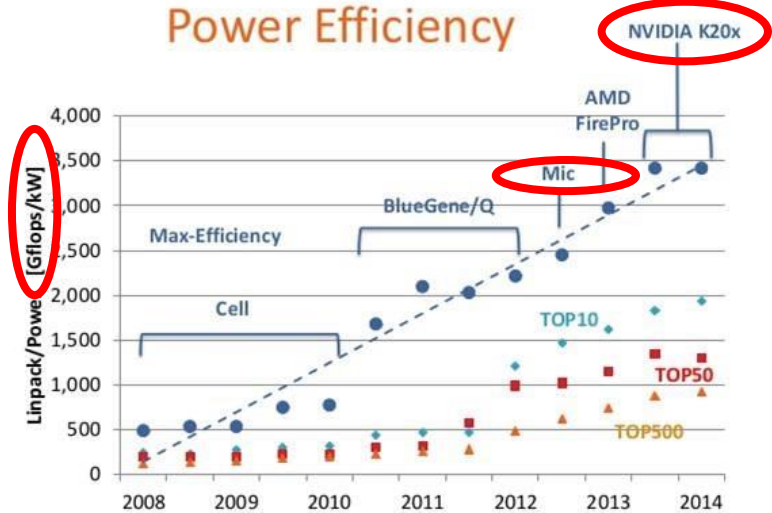
3 yr. Server; 10 yr. Infrastructure Amortization

©2013 IPC — Association Connecting Electronics Industries

Il costo dell'energia rappresenta il 25-40% del costo complessivo.

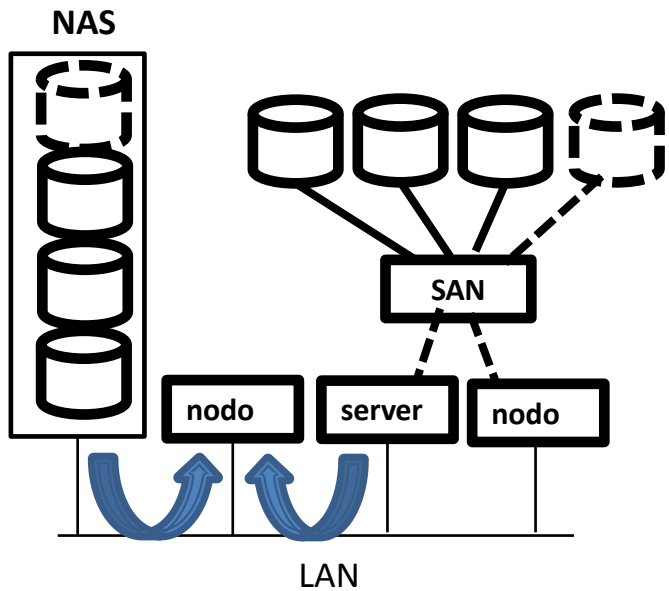
La crescita esponenziale delle prestazioni porterebbe ad una analoga crescita del consumo di energia.

Power Efficiency



I nuovi dispositivi per il calcolo (CPU, GPU, ecc) sono progettati con crescente attenzione all'efficienza energetica (GFlops/KW)

I componenti per i dati



SAN (Storage Area Network)

Interconnessione ad alte prestazioni di Dischi e server con tecnologia specifica (Fibre Channel o Infiniband)

Dischi più performanti ma capacità limitata
Adatto per l'accesso ai dati run-time.

NAS (Network Attached Storage)

Prestazioni e costi inferiori.

Adatto per l'archiviazione di dati.

I Componenti SOFTWARE per il calcolo



	Publico Dominio	Commerciali
Job manager	Torque/ Maui	PBS (in uso al CINECA) LSF (in uso all'INFN)
File-system	NFS GFS	GPFS (in uso all'INFN e al CINECA)
Compilatori	Gcc (previsto supporto MIC e NVIDIA GPU)	Intel Compiler (supporto MIC) Portland (supporto NVIDIA GPU)
Librerie scientifiche e Tools	Gnu Scientific Lib (GSL) , ..	NAG, Matlab, SPSS, ..

Il progetto tecnico : i criteri



Punto di Partenza

Esperienza e attrezzature DiFeST / INFN e ex. CCE di Ateneo



Linee di indirizzo

Dal Comitato Scientifico



Scelte Architettoniche

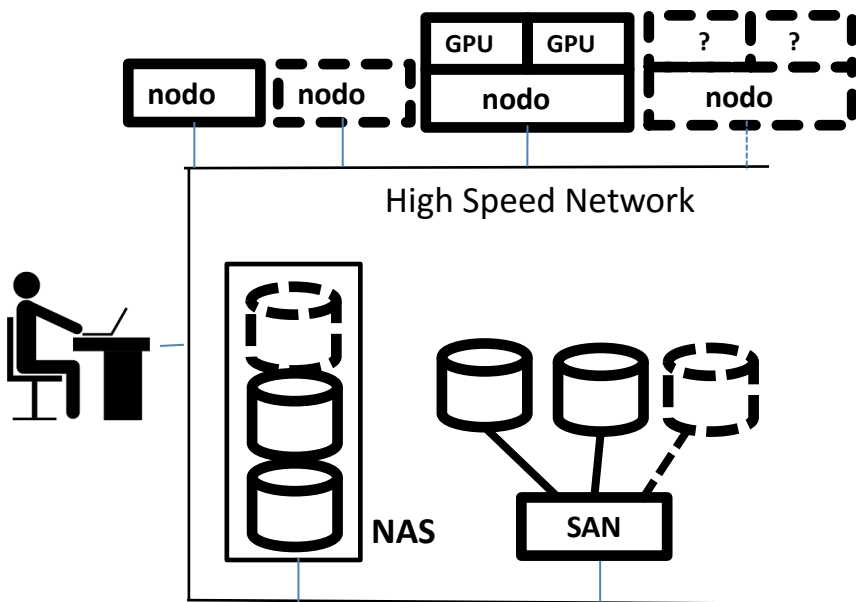
Uso multidisciplinare -> Risorse eterogenee (con e senza GPU)



Modularità / Scalabilità

- Estensione verticale: aumentare le prestazioni / capacità di risorse esistenti
- Estensione orizzontale: incorporare singoli nodi o subcluster

Il progetto tecnico : un esempio



NODI DI CALCOLO

NODI senza GPU	con 32 core	800 GFlops	5K€
NODI ACCELERATI	con 2 GPU (o MIC)	6000 GFlops	15K€

ESEMPIO DI PROPOSTA INIZIALE

Richiesta nel piano triennale di Ateneo per 2016: 200K€

16 NODI senza GPU	13000 GFlops	80K€
6 NODI CON GPU (o MIC)	36000 GFlops	90K€
TOTALE	50 TFlops	170K€ (+ iva)

CPU MIC GPU

ALTRI COSTI

HIGH SPEED NETWORK

Infiniband o 10 GigaBit Ethernet

SOFTWARE

Job Manager, Compilatori, ecc

STORAGE (situazione iniziale)

Contributo INFN

30K€ (2014/2015) + 30K€ (2016)

NAS: 200TB + 100 TB espansione

SAN: 100 TB