



scientifica

presenta le LEZIONI DI SCIENZA
gli eventi di approfondimento sulle materie scientifiche

 **MONDADORI**
EDUCATION

CINECA



Genomi, turbine, galassie: il Supercalcolo, alleato della ricerca

Alessandro Marani

Perché nasce il SUPERCALCOLO?

Spesso i ricercatori scientifici si trovano ad affrontare **problemi troppo grandi per i tempi e le modalità di calcolo umani** ...e persino per i **COMPUTER ORDINARI!**



Perché nasce il SUPERCALCOLO?

Occorre l'**aiuto di uno strumento molto potente** ottimizzato al meglio per eseguire un gran numero di **CALCOLI COMPLESSI**.

Questo è il **Super-calcolatore!!!**

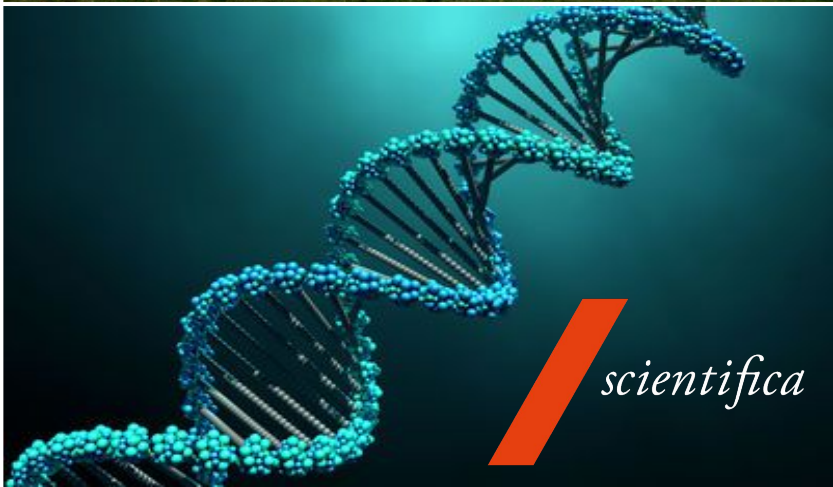
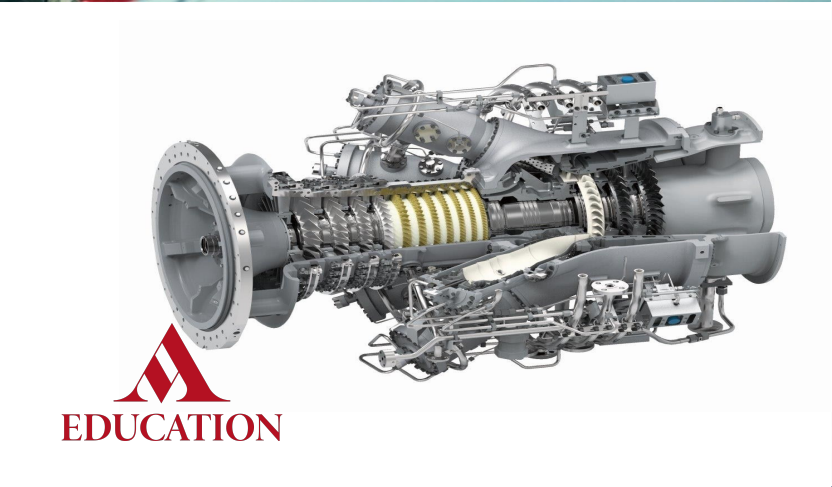
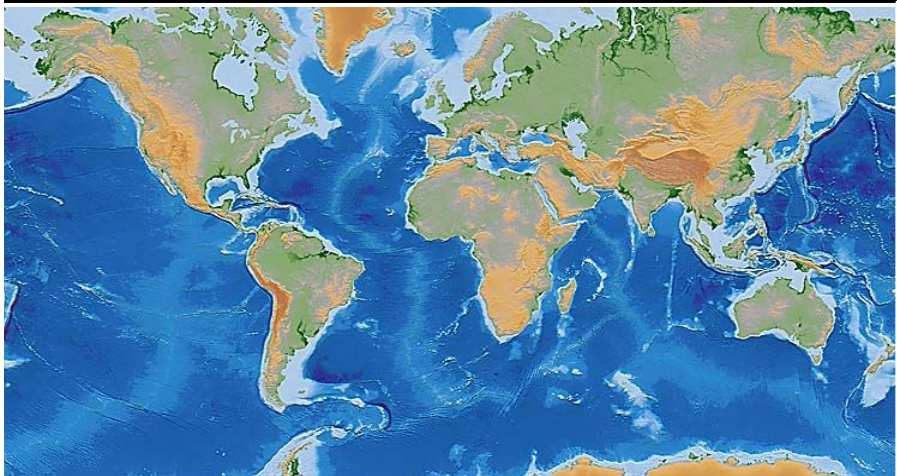


A cosa serve il SUPERCALCOLO?

La finalità del Supercalcolo
(**H**igh **P**erformance **C**omputing) è di

- **SIMULARE FENOMENI**
- **MOLTO COMPLESSI**

che avvengono nel mondo, per progredirne la
conoscenza o fare **previsioni**.





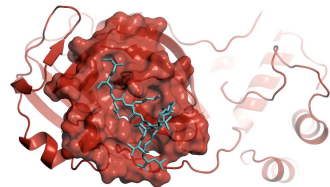
Facciamo un esempio...

Cura per il COVID-19

Una cura per il COVID-19

Database di molecole

Dinamica molecolare



Interazione tra proteina e farmaco



Test in laboratorio



Trial clinici

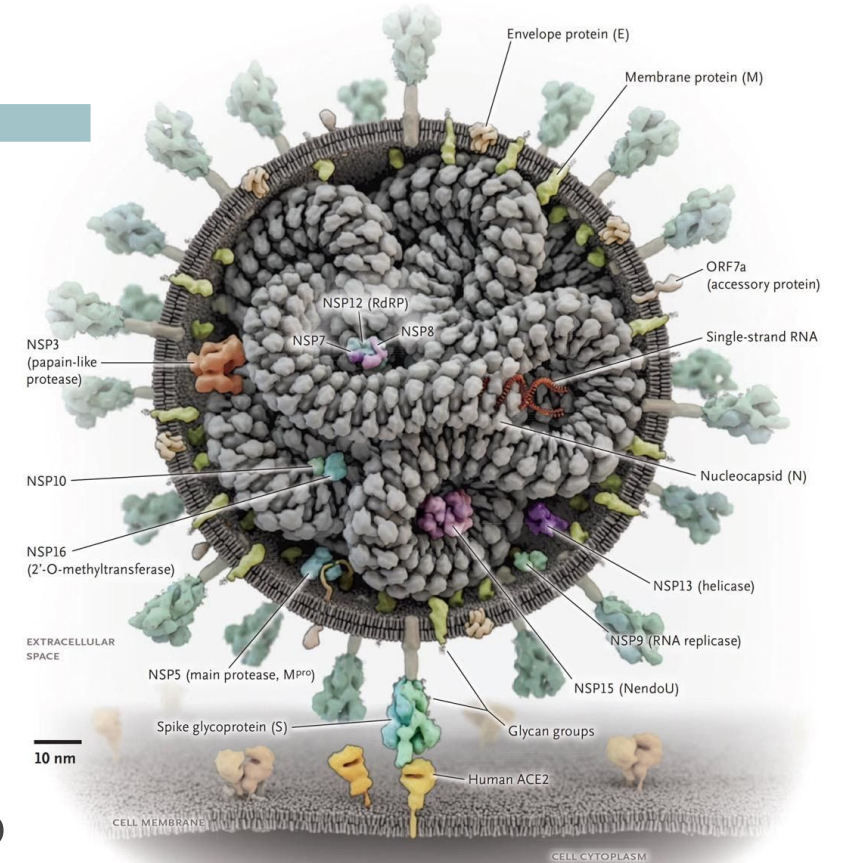


Figure 1. The SARS-CoV-2 Virion and Its Proteins.

Una cura per il COVID-19

- 400.000+ molecole testate
 - 7.000 molecole promettenti
 - 100 molecole attive in vitro
 - 40 abili a contrastare il virus in vitro
 - 1 appartiene ad un farmaco già in commercio
-



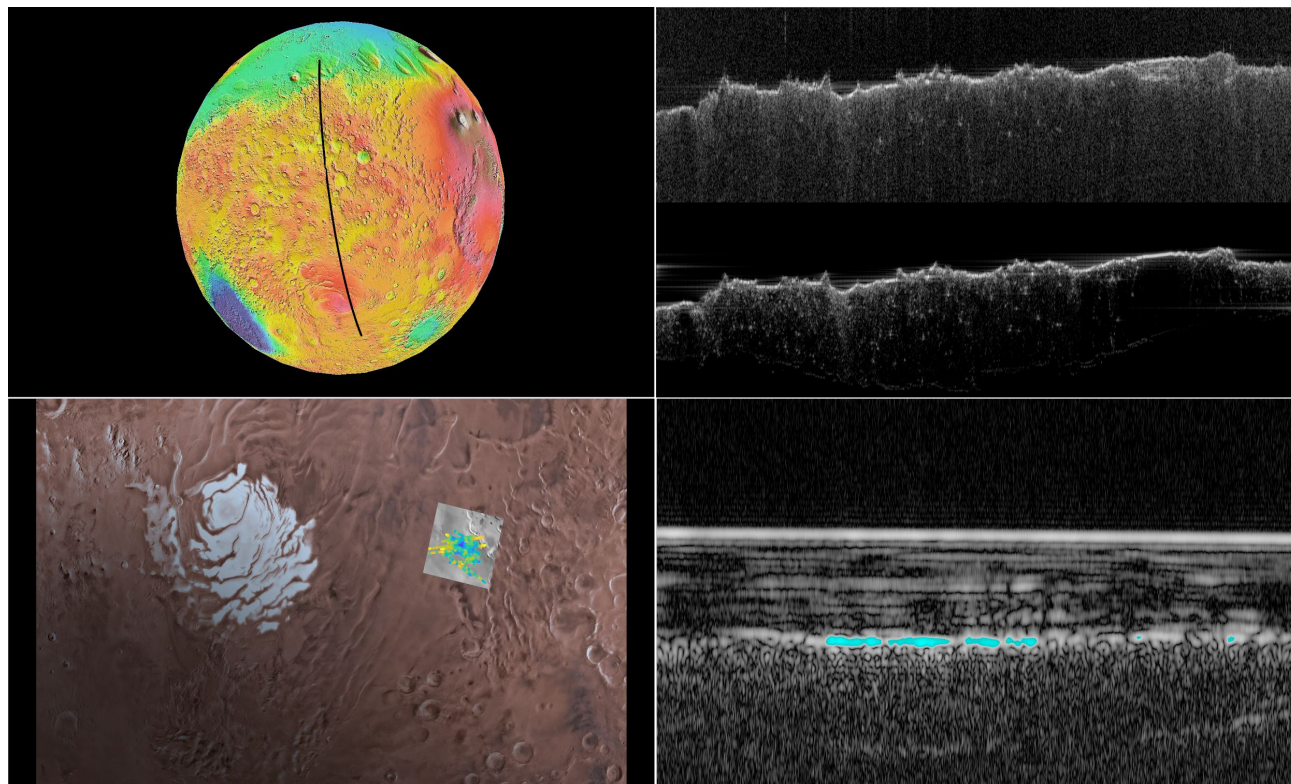
Facciamo un altro esempio...

Acqua su Marte

Acqua su Marte

Recentemente è stato scoperto che sotto il suolo di Marte esistono **fonti di acqua liquida!**

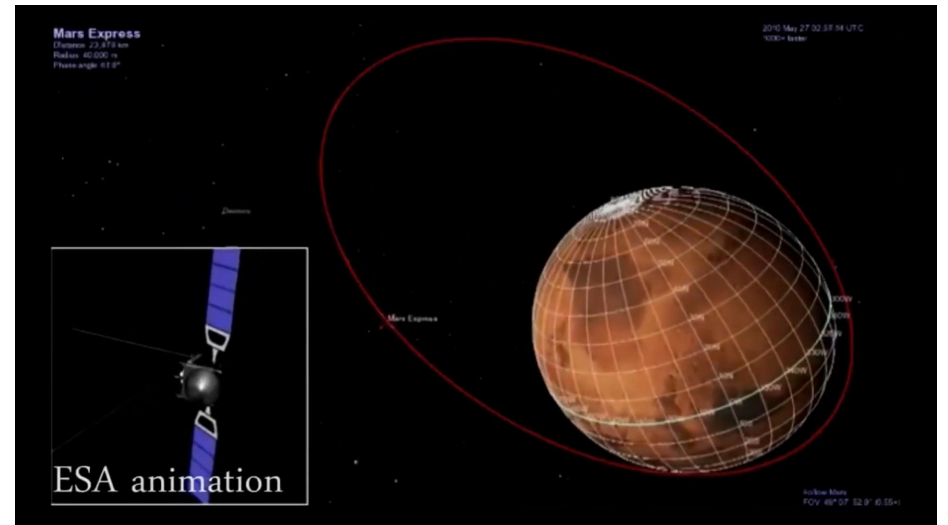
Ma che c'entra il Supercalcolo?



Acqua su Marte

Delle immagini elaborate dai Supercomputer sono state confrontate con altre immagini provenienti da un radar in orbita
Dove c'erano differenze... **c'era l'acqua!**

Dai computer di **CINECA** sono state prodotte alcune mappe usate per questo studio.





Facciamo un altro esempio...

Terremoto In Emilia

Maggio 2012

Una forte scossa di terremoto ha attraversato le **regioni emiliane della pianura padana**



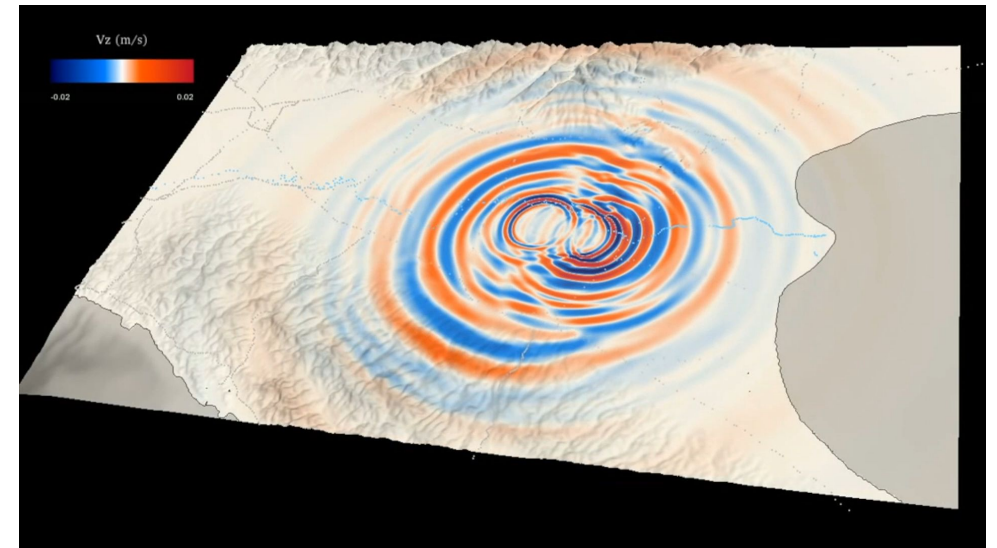
MAGNITUDO 5,9

Terremoto in Emilia

Un filmato, realizzato da VERCE e INGV attraverso gli strumenti CINECA, mostra il propagarsi dell'intensità delle scosse

È interessante notare come le caratteristiche del terreno deformano le onde sismiche.

Inoltre, il profilo sedimentario della Valle del Po ha permesso alle onde di viaggiare più lentamente, causando scosse lunghe.



https://www.youtube.com/watch?v=f_PnhhalAVE



Storia di un successo **ONDASOLARE**

ONDASOLARE

Attraverso la progettazione e la realizzazione di un **innovativo ed efficiente veicolo** ad alto contenuto tecnologico **intende dimostrare come il solare possa diventare la più importante fonte di energia per la mobilità urbana ed extraurbana** in grado di contrastare l'inquinamento ed il riscaldamento globale, migliorando la vita di tutti noi. **CINECA** è partner di progetto insieme all'**Università di Bologna, Ciri** e **SCM**, e con i suoi supercalcolatori ha aiutato ad ottimizzare il disegno di un nuovo veicolo ad energia solare veloce e competitivo.

Onda Solare



Fonte: ondasolare.com



Museo Ferrari
MARANELLO



ESTATE 2018

**Il nuovo veicolo EMILIA
4 vince la AMERICAN
SOLAR CHALLENGE!**

*2800 Km senza ricarica
portando 4 passeggeri!*

CINECA E SUPERCALCOLO

A CINECA esiste un **dipartimento dedicato a SuperCalcolo, Applicazioni e Innovazione (SCAI)**

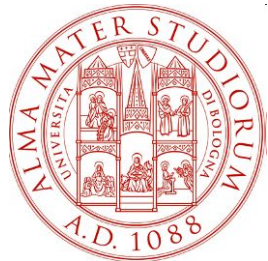
È formato da esperti di campi scientifici diversi (Chimica, Fisica, Matematica, Informatica, Biologia, Ingegneria...) e fornisce le strutture e le competenze per assistere chi ha bisogno di risorse di Supercalcolo



I nostri utenti

ACCADEMIA

- **Università**
- **Centri di ricerca**
- **Comunità scientifiche**

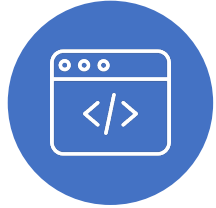


INDUSTRIA

- **Eni** (geofisica)
- **Arpae** (meteo)
- **Dompé** (farmacologia)
- **Ondasolare** (fluidodinamica)



Cosa facciamo?



**Sviluppo / Parallelizzazione
/ Ottimizzazione codice**
(scrittura di programmi)



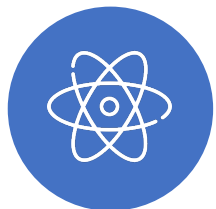
**Hosting macchine
private**



**Supporto utilizzo
software già esistenti**



**Gestione di sistemi di
storage per contenere
grandi quantità di dati**



**Visualizzazione grafica
in ambito scientifico**



**Organizzazione di scuole
e corsi di formazione**

Che cos'è un **Supercomputer**?

Il supercomputer è un tipo di **sistema di elaborazione** progettato per ottenere **potenze di calcolo estremamente elevate**, dedicato ad eseguire calcoli particolarmente onerosi (calcolo ad elevate prestazioni).



VELOCITÀ
DI ESECUZIONE



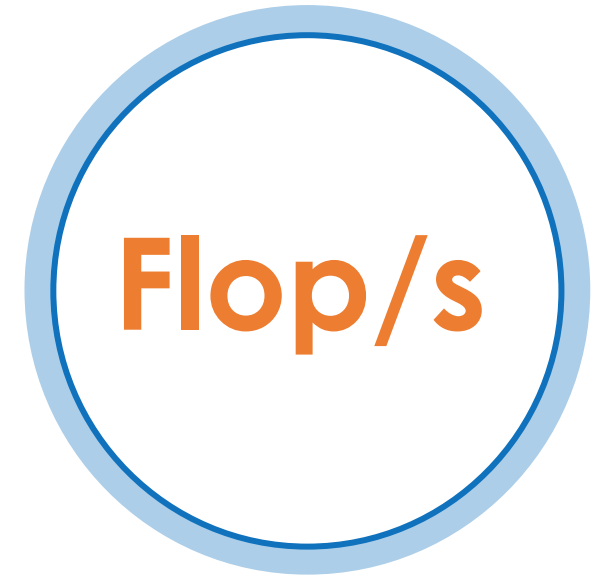
CAPACITÀ DI
MEMORIA



PRECISIONE
DI MACCHINA

Che cos'è un **Supercomputer**?

Il supercomputer è un tipo di **sistema di elaborazione** progettato per ottenere **potenze di calcolo estremamente elevate**, dedicato ad eseguire calcoli particolarmente onerosi (calcolo ad elevate prestazioni).



(**F**loating Point **O**perations per **S**econd)

Storia dei Supercomputer

-
- **1963**: primo supercalcolatore Cray (CDC 6000)
= 1 **Mflop/s** (1 milione di operazioni al secondo)
-



Storia dei Supercomputer

-
- **1963**: primo supercalcolatore Cray (CDC 6000) = 1 **Mflop/s** (1 milione di operazioni al secondo)
 - **1985**: Cray-2 = 1.9 **Gflop/s** (1.9 miliardi di operazioni al secondo)
-



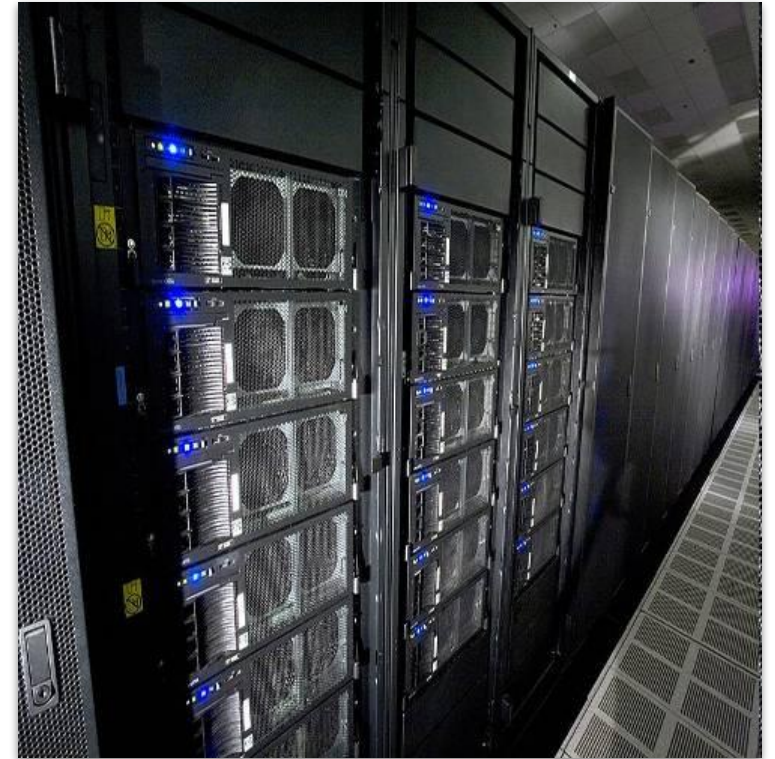
Storia dei Supercomputer

- **1963**: primo supercalcolatore Cray (CDC 6000) = 1 **Mflop/s** (1 milione di operazioni al secondo)
 - **1985**: Cray-2 = 1.9 **Gflop/s** (1.9 miliardi di operazioni al secondo)
 - **1995**: Cray T3E = 1 **Tflop/s** (1000 miliardi di operazioni al secondo)
-



Storia dei Supercomputer

- **1963**: primo supercalcolatore Cray (CDC 6000) = 1 **Mflop/s** (1 milione di operazioni al secondo)
 - **1985**: Cray-2 = 1.9 **Gflop/s** (1.9 miliardi di operazioni al secondo)
 - **1995**: Cray T3E = 1 **Tflop/s** (1000 miliardi di operazioni al secondo)
 - **2008**: IBM RoadRunner = 1.7 **Pflop/s** (1.7 milioni di miliardi di operazioni al secondo)
-



Per creare calcolatori sempre più potenti...

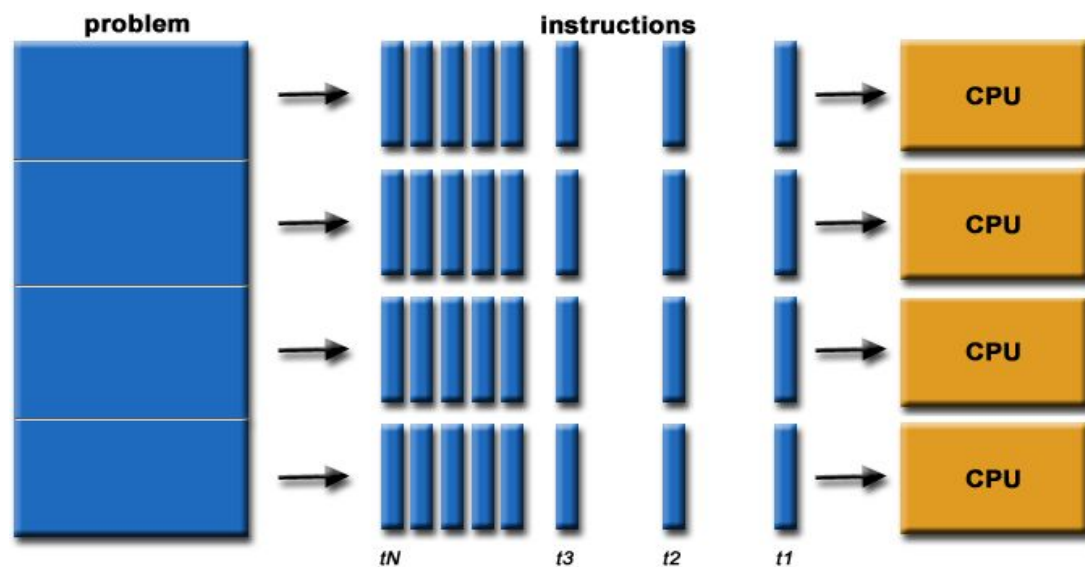
Si potrebbe pensare che basti creare
processori sempre più veloci...

ma ci sono dei **limiti imposti dalla natura:**

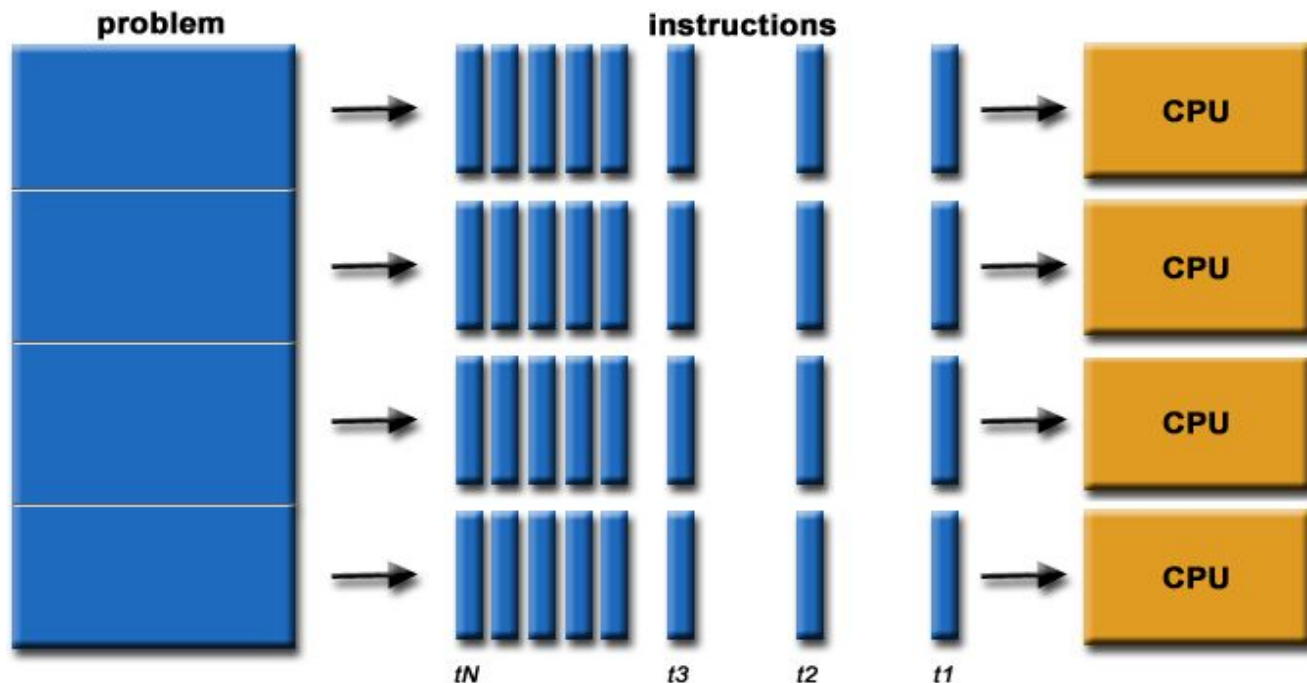
- VELOCITÀ DELLA LUCE
 - DISSIPAZIONE DEL CALORE
-

Nuova idea: il calcolo parallelo

Far lavorare simultaneamente più CPU o più calcolatori (cluster) a un unico problema, in modo che ciascuno si occupi di una sua parte



Nuova idea: il calcolo parallelo

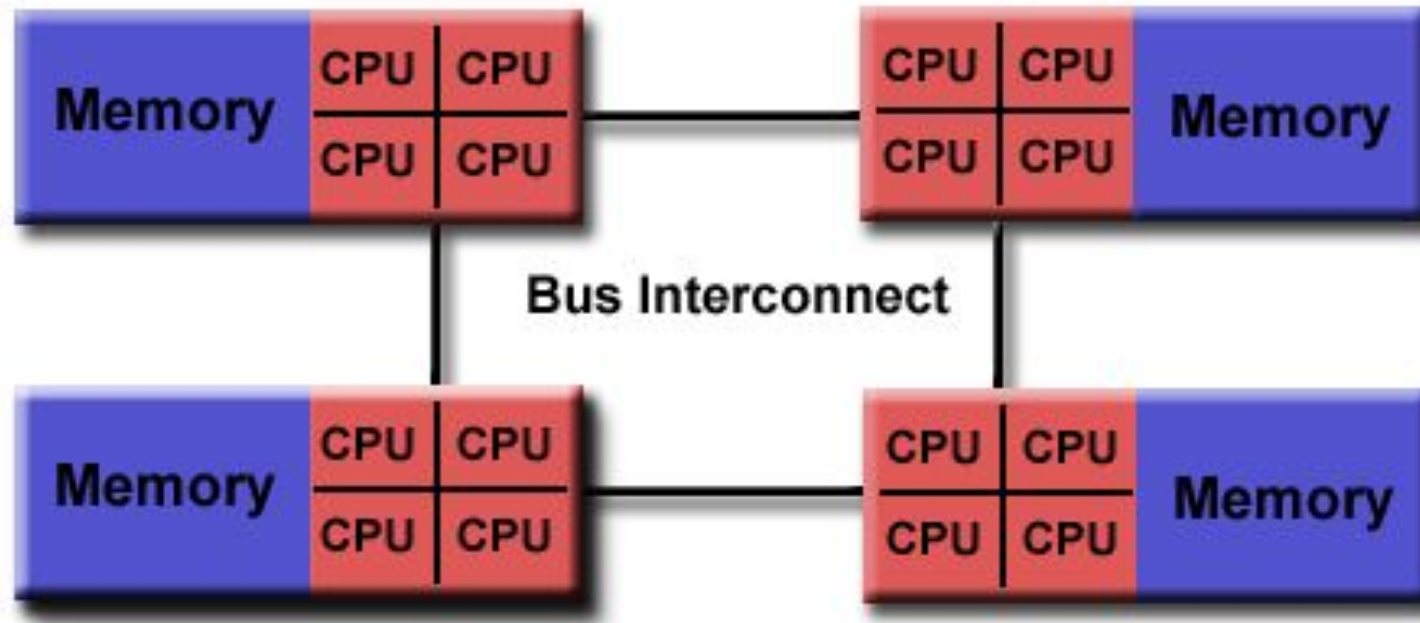


È NECESSARIO FARE
IN MODO CHE I PROCESSORI
POSSANO **COMUNICARE FRA
LORO** con reti di
interconnessione e librerie di
programmazione specifiche

Far lavorare simultaneamente più CPU o più calcolatori (cluster) a un unico problema, in modo che ciascuno si occupi di una sua parte

Il sistema di calcolo IBRIDO

Un supercalcolatore è diviso in “**nodi di calcolo**” dove alcune CPU condividono una **memoria locale**



Acceleratori: GPU

Una **GPU** (**G**raphical **P**rocessing **U**nit) è un **microprocessore** specializzato nell'**elaborazione di immagini grafiche**.

Si possono trovare nei **PC, smartphone, game console...**

Recentemente è stato osservato che le GPU possono essere utili anche in **ambito HPC** ed in molti casi **con performance nettamente superiori alle classiche CPU!**



TOP 500

È un progetto che intende classificare **i più potenti sistemi di supercalcolo a livello mondiale.**

*Ogni 6 mesi i centri di calcolo che intendono partecipare **fanno girare nei loro sistemi un programma (Linpack)** e vengono classificati in base alla **potenza di calcolo espressa.***



www.top500.org

TOP 500 OGGI

E' la lista dei **più potenti sistemi di supercalcolo del mondo.**
I **10 più potenti del mondo sono:**

- 4 dagli Stati Uniti
- 2 dalla Cina
- 1 dal Giappone
- 1 dalla Germania
- 1 dall'Arabia Saudita
- 1 dall'**Italia**

<u>Supercomputer</u>	Nazione	Potenza (TFlops/s)	Consumo elettrico (kW)
Fugaku	Giappone	442.010	29.899
Summit	USA	148.600	10.096
Sierra	USA	94.640	7.438
Sunway TaihuLight	Cina	93.015	15.371
Selene	USA	63.460	2.646
Tianhe-2A	Cina	61.445	18.482
JUWELS	Germania	44.120	1.764
HPC5	Italia	35.450	2.252
Frontera	USA	23.516	-
Dammam-7	Ar. Saudita	22.400	-

www.top500.org/lists/2020/11

TOP 500 IN CINECA

System	Year	Vendor	Cores	(GFlop/s)	(GFlop/s)	Best placement
Marconi-100 - IBM Power System AC922, IBM POWER9 16C 3GHz, Nvidia Volta V100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband	2019		347,776	21,848,000	29,354,000	9
Marconi Intel Xeon Phi - CINECA Cluster, Lenovo SD530/S720AP, Intel Xeon Phi 7250 68C 1.4GHz/Platinum 8160, Intel Omni-Path	2016		348,000	10,384,900	18,816,000	12
Fermi - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom	2012		163,840	1,788,878	2,097,152	7
Marconi Intel Xeon - Lenovo NeXtScale nx360M5, Xeon E5-2697v4 18C 2.3GHz, Omni-Path	2016		54,432	1,723,890	2,003,098	46
GALILEO - IBM NeXtScale nx360M4, Xeon E5-2630v3 8C 2.4GHz, Infiniband QDR, Intel Xeon Phi 7120P	2015		50,232	684,252	1,103,066	105
Eurora - Eurotech Aurora HPC 10-20, Xeon E5-2687W 8C 3.100GHz, Infiniband QDR, NVIDIA K20	2013		2,688	100,900	175,667	467

Note:

- Attualmente **MARCONI100** è l' **11° supercomputer più potente al Mondo** ma è stato **9°** al suo debutto nel giugno 2020
- **EURORA** (ora dismesso) era arrivato solo al **467° posto, però...**

GREEN 500

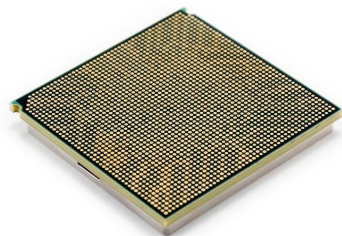
... era primo nella lista "sorella" della Top 500 che classifica i più potenti supercomputer in termini di potenza sostenuta (miglior rapporto efficienza / consumo energetico)



www.green500.org

Green500 Rank	MFLOPS/W	Site*	Computer*	Total Power (kW)
1	3,208.83	CINECA	Eurora - Eurotech Aurora HPC 10-20, Xeon E5-2687W 8C 3.100GHz, Infiniband QDR, NVIDIA K20	30.70
2	3,179.88	Selex ES Chieti	Aurora Tigon - Eurotech Aurora HPC 10-20, Xeon E5-2687W 8C 3.100GHz, Infiniband QDR, NVIDIA K20	31.02
3	2,449.57	National Institute for Computational Sciences/University of Tennessee	Beacon - Appro GreenBlade GB824M, Xeon E5-2670 8C 2.600GHz, Infiniband FDR, Intel Xeon Phi 5110P	45.11
4	2,351.10	King Abdulaziz City for Science and Technology	SANAM - Adtech, ASUS ESC4000/FDR G2, Xeon E5-2650 8C 2.000GHz, Infiniband FDR, AMD FirePro S10000	179.15
5	2,299.15	IBM Thomas J. Watson Research Center	BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom	82.19
6	2,299.15	DOE/SC/Argonne National Laboratory	Cetus - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.600GHz, Custom Interconnect	82.19
7	2,299.15	Ecole Polytechnique Federale de Lausanne	CADMOS BG/Q - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.600GHz, Custom Interconnect	82.19

MARCONI 100



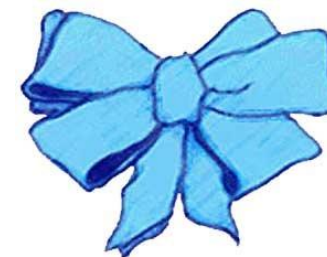
Processore:
IBM Power 9, 3.1 GHz



GPU:
NVIDIA Volta V100



Numero di processori (cores): 31360
Numero di nodi: 980 (32 cores/node)
Numero di GPU: 3920
RAM: 245 TB (8 GB/core)
Rete di interconnessione: Mellanox Infiniband
Spazio disco: 8 PB
Consumo: 2 MW
Potenza di picco: 32 PFlop/s
Compilatori: C, C++, Fortran, Cuda
Librerie parallele: MPI, OpenMP



**Arrivato a
Marzo 2020!**



Facciamo qualche...
CONFRONTO

Smartphone

- Frequenza di un Core: 2.9 Ghz
- Numero di CPU: 8
- Numero di GPU: 1
- Potenza di picco: 6 Gflop/s (Apple Iphone X)
- Memoria RAM: 8 GB
- Spazio disco: 256 GB
- Consumo: 25 W
- Prezzo: 650 €



Playstation 5

- Frequenza di un Core: 3.5 Ghz
- Numero di CPU: 8
- Numero di GPU: 1
- Potenza di picco: 10.3 Tflop/s
- Memoria RAM: 16 GB
- Spazio disco: 825 GB
- Consumo: 200 W
- Prezzo: 499 €

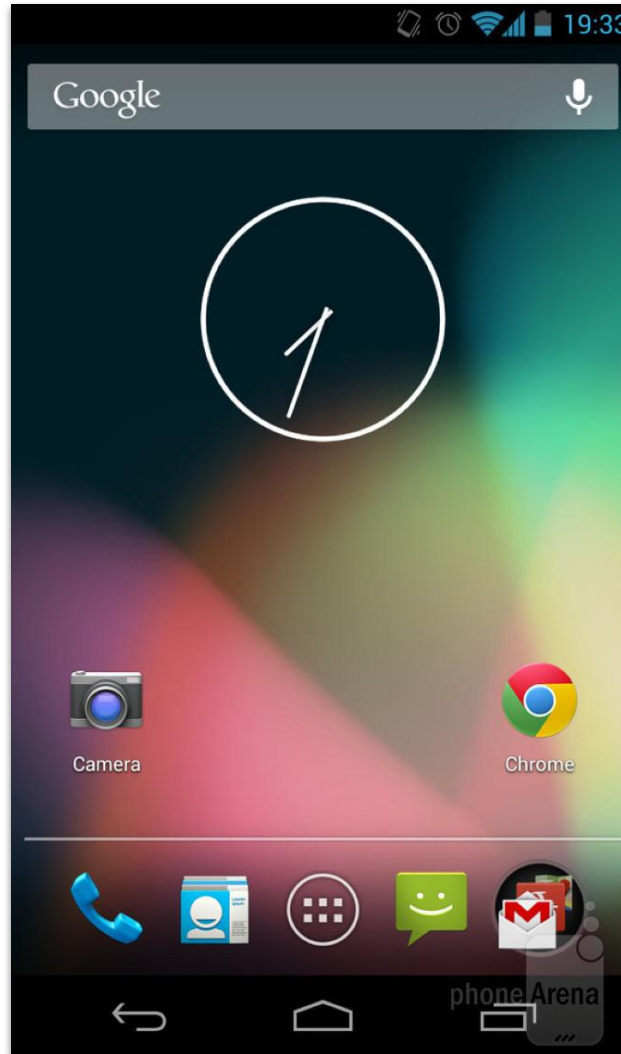
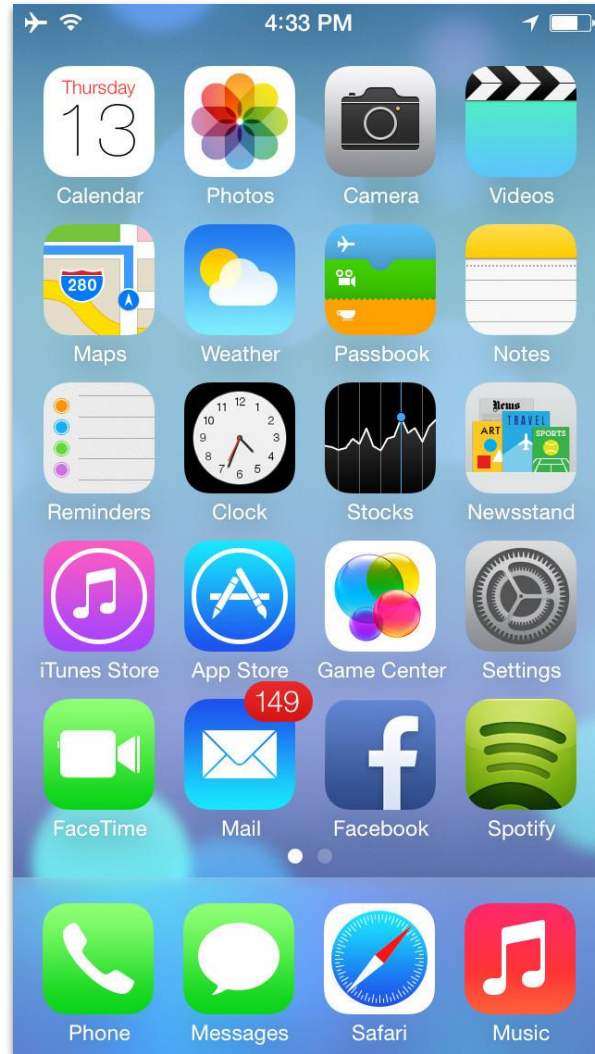


MARCONI 100

- Frequenza di un Core: 3.1 Ghz
- Numero di CPU: 31360
- Numero di GPU: 3920
- Potenza di picco: 32 Pflop/s (32'000 Tflop/s)
- Memoria RAM: 245 TB
- Spazio disco: 7 PB
- Consumo: 2 MW (2'000'000 W)
- Prezzo: 25'000'000 €



SCHERMATA TIPO: SMARTPHONE



SCHERMATA TIPO: PLAYSTATION 5



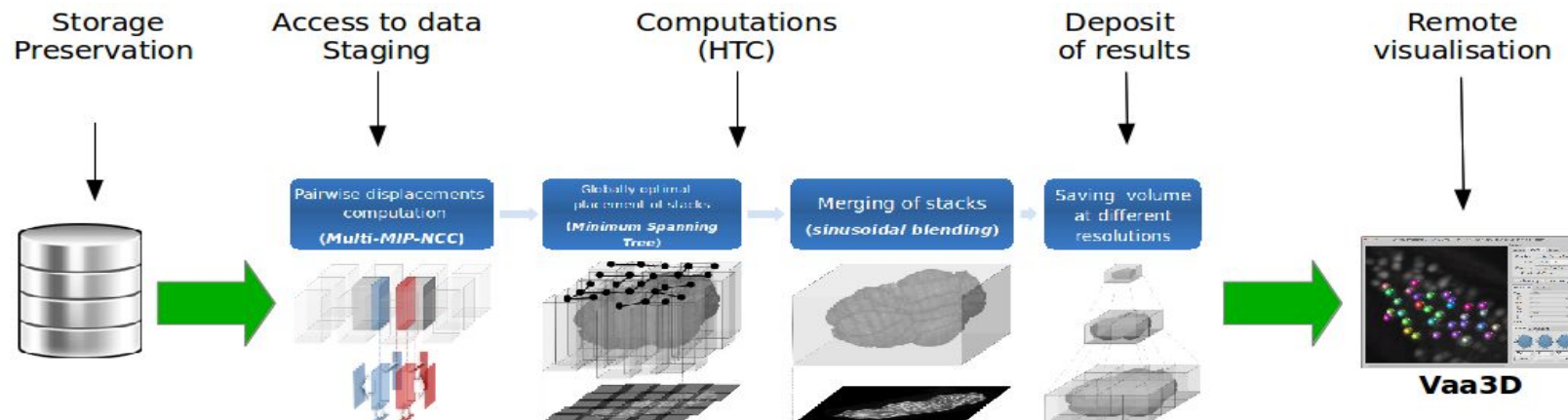
SCHERMATA TIPO: MARCONI 100

```
*****
* Welcome to MARCONI100 Cluster /
* IBM Power AC922 (Whiterspoon) -
* Red Hat Enterprise Linux Server release 7.6 (Maipo)
*
* 980 compute nodes with:
*   - 2x16 cores IBM POWER9 AC922 at 3.1 GHz
*   - 4 x NVIDIA Volta V100 GPUs, Nvlink 2.0, 16GB
*   - 256 GB RAM
*
* Disk Space: 8PB GPFS storage
*
* Internal Network: Mellanox Infiniband EDR DragonFly+
* SLURM 20.02
*
* For a guide on Marconi100:
* https://wiki.u-gov.it/confluence/pages/viewpage.action?pageId=336727645
* For support: superc@cineca.it
*****
* This system is in its complete configuration and is in full-production
=====
IN EVIDENCE:
- You can find the installed software on modules organized with different
  profiles. Use the "modmap" command to identify the correct profile for
  your module ("modmap -h" for help)
- spack/0.14.2 is installed. Spack is a package management tool designed to
  support multiple versions and configurations of software on a wide variety
  of platforms and environments.
- Accounting of jobs is active starting from 00:00 am of 12th May 2020
=====
```

IL POST-PROCESSING

Un team del nostro dipartimento si occupa di gestire infrastrutture adatte ad ospitare grandi quantità di dati, e a **ricercare nuove tecnologie per affrontare la situazione.**

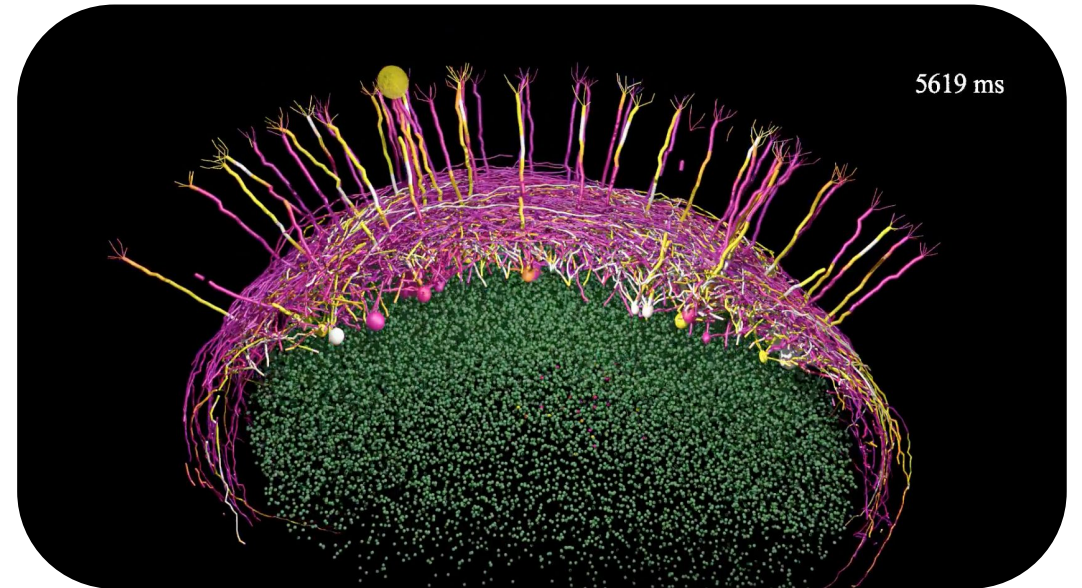
Risponde alle esigenze del **post-processing**, ovvero il processo che trasforma i dati grezzi prodotti da una simulazione in qualcosa con **valore scientifico o divulgativo.**





Visualizzazione scientifica **IL BULBO OLFATTIVO**

Mostra la **composizione del circuito neurale** che circonda il **bulbo olfattivo** dell'uomo. È stato realizzato elaborando le simulazioni svolte nei **supercalcolatori**, attraverso strumenti software adatti per la visualizzazione scientifica. Oltre ad essere bello da vedere, è un **filmato utile per il proseguimento della ricerca**. Poter "vedere" come è fatto un bulbo olfattivo aiuta chi lo studia a notare dettagli interessanti su cui lavorare.



<https://www.youtube.com/watch?v=jaPzNflqswg>



La nuova sfida: **EXASCALE**

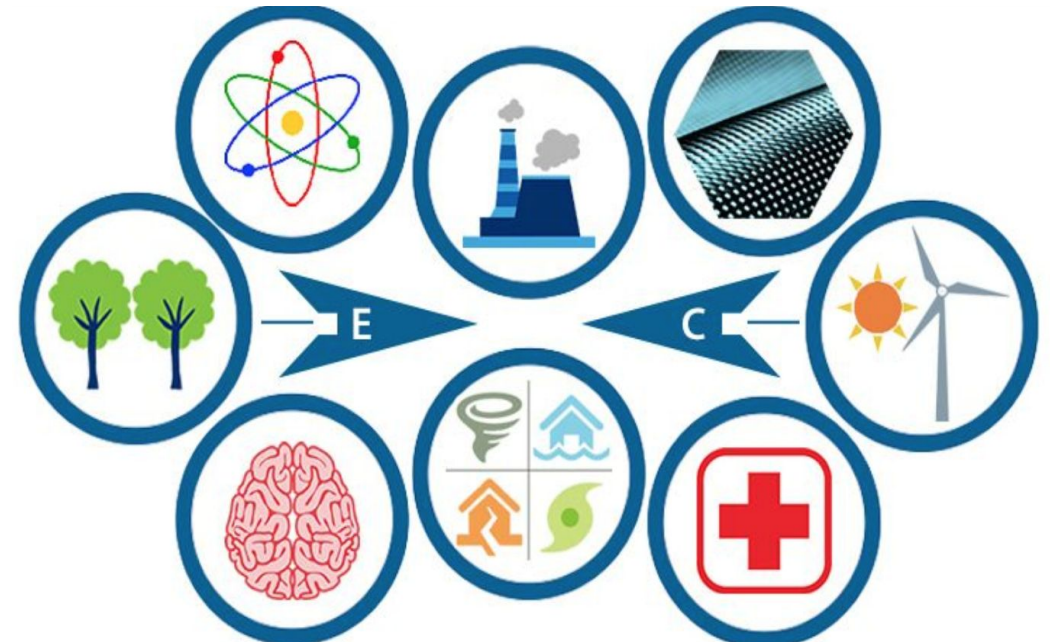
EXASCALE CHALLENGE

È la sfida a livello mondiale per realizzare supercalcolatori con potenza dell'ordine dell'**Exaflop/s** (miliardi di miliardi di operazioni al secondo).

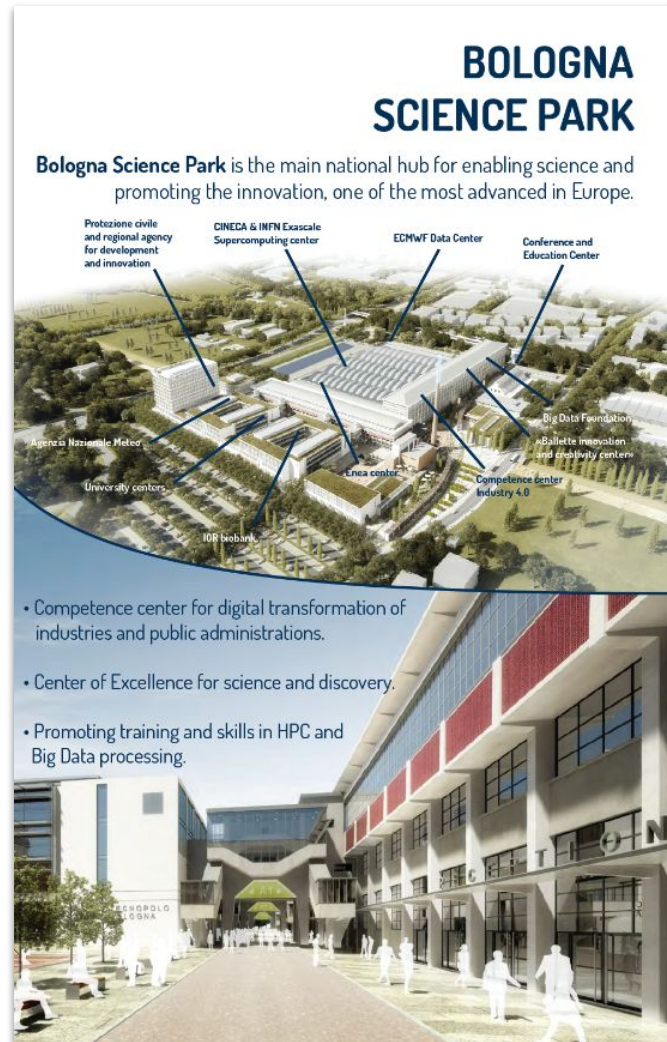
È la **velocità con cui si crede il cervello umano elabori le informazioni.**



Human Brain Project



CINETECA E EXASCALE



Un **nuovo polo tecnologico** sta sorgendo a Bologna, per ospitare tutti i centri di ricerca che puntano all'**avanguardia** su sviluppo, innovazione e tecnologia. In questo centro, **CINECA e INFN** sono in collaborazione per costruire il primo supercalcolatore italiano con l'obiettivo dell'**Exascale!**

LEONARDO

LEONARDO sarà il nuovo cluster che traghetterà CINECA verso i traguardi dell'Exascale.

Una commissione europea ha finanziato tre di questi progetti in tutta Europa (gli altri due saranno costruiti ad Helsinki e Barcellona) **all'avanguardia su sviluppo, innovazione e tecnologia.**

Obiettivo: classificarsi nei primi 5 posti della Top500!



LEONARDO

200+ PFlop/s di potenza,
3+ PB di memoria,
150 PB di larghezza di banda
150PB di Hard Disk

 **MONDADORI**
EDUCATION

Rizzoli
EDUCATION



FORMAZIONE SU MISURA



WWW.FORMAZIONESUMISURA.IT



MONDADORI

EDUCATION