

Servizi CILEA per il Calcolo ad Alte Prestazioni

Claudio Arlandini

Servizi per il Calcolo ad Alte Prestazioni

Abstract

La simulazione e il calcolo numerico nella scienza e nella tecnologia sono diventati negli ultimi decenni strumenti e risorse imprescindibili. Il gruppo di competenza per il Calcolo ad Alte Prestazioni del CILEA può offrire supporto sia ai ricercatori, che cercano un ambiente ad alta efficienza e produttività per le proprie attività di ricerca *in silico*, sia alle industrie che cercano infrastrutture e competenze che non possiedono *in house*.

Simulation and numerical computation are now essential instruments and methods of science and technology. The CILEA High Performance Computing (HPC) competence group is able to support both researchers, who look for a high efficiency and productivity environment for their *in silico* research activities, and industries who need infrastructures and competences they do not own in house.

Keywords: Supercalcolo, Iniziativa LISA, GPGPU.



Fig. 1 – Il cluster Lagrange, la più potente infrastruttura di calcolo del CILEA.

Il Calcolo ad Alte Prestazioni al CILEA

La simulazione e il calcolo numerico nella scienza e nella tecnologia sono diventati negli ultimi decenni strumenti e risorse imprescindibili.

Questo vale sia per la ricerca accademica e industriale che per la produzione.

CILEA vanta oltre 30 anni di esperienza nella gestione di hardware e software per il calcolo tecnico-scientifico, e può offrire supporto sia ai

ricercatori, che cercano un ambiente ad alta efficienza e produttività per le proprie attività di ricerca *in silico*, sia alle industrie che cercano infrastrutture e competenze che non possiedono al loro interno.

Risorse

Le piattaforme di calcolo di cui CILEA è dotato vengono regolarmente aggiornate e potenziate seguendo la rapida evoluzione tecnologica del settore (Fig. 1). Ne è testimonianza la presenza continuativa del Consorzio nella *Top500* [1], la classifica semestrale dei 500 supercalcolatori più potenti al mondo.

Ricercatori di università, centri di ricerca e industria possono quindi contare su architetture sempre allineate allo stato dell'arte, e su ambienti di sviluppo tra i più adatti alla soluzione di problemi (anche complessi) di simulazione numerica.

Presso il Consorzio sono anche disponibili e installati i più noti codici e librerie di calcolo e di simulazione prodotti da terze parti, sia di tipo *open source* che proprietario. I codici coprono ad ampio spettro diverse aree applicative quali l'analisi meccanica e strutturale, la fluidodinamica, la chimica computazionale e la bioinformatica.

La principale infrastruttura di calcolo attualmente è il *cluster Lagrange*, composto di nodi *blade Hewlett Packard* (Fig. 2). La prima installazione [2] risale al 2008, a cui ha fatto seguito un aggiornamento tecnologico ed un'espansione nel 2010, nell'ambito dell'iniziativa *LISA* [3], [4], accordo di collaborazione con Regione Lombardia.

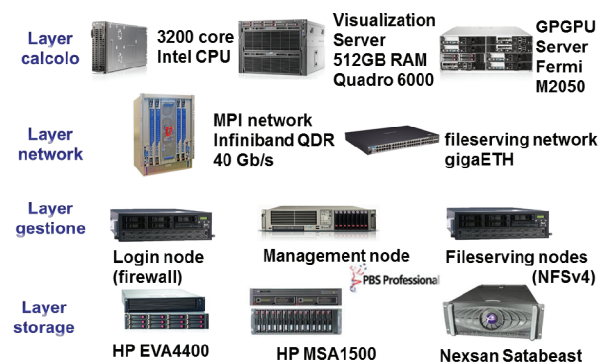


Fig. 2 – Schema dei componenti del sistema di calcolo Lagrange.

Possiamo riassumere le caratteristiche salienti del cluster nella seguente *Tabella 1*.

Num. Totale di nodi	336
Num. Totale di core	3200
Potenza totale di picco	40 TFlops/s ¹
Storage complessivo	40 TB
RAM complessiva	6.4 TB
Interconnessione	Infiniband QDR 40 Gb/s
Architettura cluster	17 enclosure HP cluster platform c7000

Tabella 1: caratteristiche cluster Lagrange

Al cluster di calcolo sono integrati due sistemi dedicati a servizi accessori.

Il primo è una piattaforma di sviluppo *HP SL390s G7* per applicazioni in linguaggio *CUDA* dotato delle più recenti schede acceleratrici *GPGPU NVIDIA Fermi M2050* (Fig. 3). Le schede *GPGPU* vengono impiegate per elaborazioni estremamente esigenti in termini di potenza di elaborazione che, per loro natura, siano di tipo altamente parallelo, e in grado quindi di beneficiare ampiamente dell'architettura tipica di questi processori. La scheda *M2050* possiede 448 core computazionali, è capace di una potenza di picco di 1,03 TFlops/s in singola precisione e 515 GFlops/s in doppia precisione².

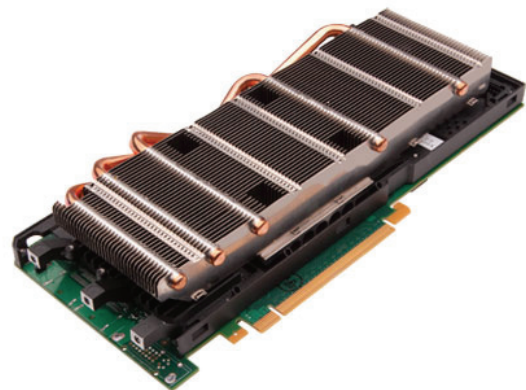


Fig. 3– Le schede acceleratrici GPGPU NVIDIA di seconda generazione che equipaggiano i sistemi CILEA.

¹ 1 TFlops/s = 10^{12} operazioni in virgola mobile al secondo.

² 1 GFlops/s = 10^9 operazioni in virgola mobile al secondo.

Il secondo è un sistema di visualizzazione ad alte prestazioni, ideale per operazioni di *pre- e post-processing* e servizi di *rendering*, basato su un sistema *HP DL980* a 8 CPU quad-core, 512 GB di RAM e scheda grafica *NVIDIA Quadro 6000*. Il server è dotato di sistemi di compressione del flusso grafico, che permettono una fruizione fluida anche all'utente connesso attraverso una banda passante di rete non particolarmente performante.

Servizi

Nel campo del calcolo ad alte prestazioni, CILEA è in grado di affiancare la semplice offerta di ore di calcolo su piattaforme all'avanguardia ad una serie completa di servizi a valore aggiunto, che fanno leva sull'elevata professionalità e competenza dei tecnici del consorzio.

Personale esperto è in grado di fornire servizi di supporto di varie tipologie: assistenza *on-line* di primo e secondo livello per i propri utenti, installazione ottimizzata e *benchmarking* di codici e librerie per estrarre il massimo delle prestazioni sui propri sistemi di calcolo o presso il cliente che lo richiedesse, sviluppo e ottimizzazione di software in ambiente di calcolo parallelo basato su processori standard (con linguaggi *Fortran* o *C++*) o su schede acceleratrici di tipo *NVIDIA GPGPU* (con *CUDA*), inclusa la realizzazione di interfacce utente ad alta efficacia realizzate in linguaggio *Python*.

Nei settori di eccellenza del gruppo, quelli in cui si ha una forte competenza applicativa, possono essere offerti servizi verticali di supporto alla simulazione di prodotti e di processi.

Le eccellenze, testimoniate ad esempio dall'elevato numero di pubblicazioni scientifiche prodotte annualmente, si trovano in particolare in settori quali la fluidodinamica computazionale e l'analisi strutturale.

La struttura di Consorzio (inter)universitario e le molte collaborazioni in corso rendono semplice e veloce l'integrazione nel gruppo di lavoro di competenze accademiche, qualora specifiche richieste da parte della committenza non potessero essere soddisfatte solo con risorse interne.

Al cliente industriale vengono garantiti adeguati livelli di qualità di servizio, tempi di risposta, e sicurezza informatica.

Per un maggiore approfondimento e dettaglio del servizio, consultare le pagine dedicate sul portale CILEA [5].

Formazione e promozione

In virtù della sua missione di servizio e di promozione dell'utilizzo del calcolo ad alte prestazioni, CILEA ha un vasto catalogo di corsi per l'apprendimento di strumenti, tecniche di programmazione e applicazioni legati al calcolo intensivo. I corsi possono essere tenuti da personale CILEA o avvalersi di personale esperto proveniente dalle università consorziate, o da enti di ricerca e industrie con le quali sono attive collaborazioni, al fine di garantire che i docenti possiedano sempre un'elevata competenza della materia, maturata sul campo.

I corsi vengono normalmente tenuti presso le sale formazione del Consorzio, dotate di moderne infrastrutture, ma su richiesta possono venire erogati presso le sedi degli enti interessati.

Grazie alla collaborazione del gruppo di competenza sulla Formazione a distanza del CILEA, i corsi vengono erogati in modalità "*blended*", combinando i benefici della formazione frontale in aula e dell'*e-learning* per una maggiore efficacia nell'apprendimento. Su richiesta potranno essere approntati corsi o moduli formativi in completa modalità *e-learning*.

Per il 2011 sono in arrivo importanti novità. Tenuto conto del grande successo avuto nel 2010, il corso di "*GPU Programming*", tenuto in collaborazione con il Consorzio *CASPUR* e *NVIDIA* è stato potenziato, portandolo a 3 giorni. Anche il corso di "Tecniche di calcolo parallelo" è stato fortemente rinnovato, aggiornandone e incrementandone i contenuti, così da dividerlo in un corso base di tre giorni ed uno avanzato di due, dedicato a ottimizzazione, *profiling* e *debugging*.

Ma la novità principale è la scuola estiva dedicata a "*Strumenti computazionali per applicazioni di emodinamica*" [6], che si terrà dal 12 al 15 settembre 2011. Applicazioni ingegneristiche che trattino fluidi biologici hanno requisiti molto trasversali in termini di definizione del dominio, condizioni e proprietà reologiche del flusso, movimenti della struttura, visualizzazione e *post-processing* dei risultati. Per queste ragioni, e grazie all'enorme sviluppo delle scienze computazionali, un *workflow* basato su tecniche di *computer-aided-engineering* sembra essere l'ambiente di elezione per effettuare studi di emodinamica e progettazione di apparecchi medicali.

Per un maggiore approfondimento e dettaglio sui corsi di formazione, consultare le pagine dedicate sul portale CILEA [7].

Progetti

CILEA si propone come partner in progetti di ricerca nazionali e internazionali, a cui partecipa mettendo a disposizione risorse e competenze. Tra i progetti in corso o sviluppati negli ultimi anni ricordiamo:



Fig. 4 – Il logo dell'iniziativa LISA.

LISA (Laboratorio Interdisciplinare per la Simulazione Avanzata) (Fig. 4) è un accordo di collaborazione biennale (2010-2012) tra CILEA e Regione Lombardia [3], [4], che si concretizza attraverso:

- il sostegno a programmi di rafforzamento e potenziamento dei sistemi di calcolo e espansione delle attività di centro di assistenza del Consorzio CILEA;
- la promozione di progetti di ricerca ad alto valore innovativo;
- la diffusione della cultura scientifica e tecnologica, l'orientamento alla formazione e la condivisione del sistema di calcolo con gli organismi di ricerca presenti in Lombardia, anche attraverso la formazione di competenze sulla simulazione avanzata, sulle tecniche di modellizzazione, sull'utilizzo efficiente di risorse di calcolo ad alte prestazioni e l'attivazione di un numero significativo di borse di studio e di stage rivolti a giovani da affiancare ai tecnici del CILEA.

L'obiettivo generale dell'iniziativa *LISA* è quella di attivare progetti sperimentali finalizzati ad incrementare e migliorare l'attrattività e l'integrazione nazionale ed internazionale del territorio lombardo in settori avanzati della ricerca e sviluppo, allo scopo di contribuire a migliorare le eccellenze del territorio e rafforzare la capacità di produrre innovazione tramite uno stretto raccordo con le riconosciute eccellenze regionali e nazionali che la rete del Consorzio CILEA mette a disposizione.

Il bando per la presentazione dei progetti di ricerca per il secondo anno dell'Iniziativa si aprirà nel mese di giugno 2011. I ricercatori afferenti a tutti gli atenei lombardi sono invitati a presentare delle proposte. I dettagli saranno pubblicati sul sito web [3].

LITBIO (Laboratory for Interdisciplinary Technologies in Bioinformatics).

Il ruolo di CILEA nel progetto *LITBIO* [8], [9] è quello di fornire alla comunità bioinformatica internazionale risorse di calcolo affidabili, le competenze e le conoscenze del proprio personale più qualificato.

A questo riguardo è stato installato presso CILEA un supercomputer progettato specificamente per applicazioni di bioinformatica.

LITBIO è un laboratorio finanziato dal Ministero dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca attraverso una borsa *FIRB2003* per il periodo dal 2005 al 2010.

Conclusioni

CILEA è in grado di offrire un'adeguata infrastruttura di calcolo scientifico e tecnico a utenze sia di tipo accademico che industriale, abbinata ad una vasta gamma di servizi di supporto e customizzazione in base alle esigenze del cliente.

Bibliografia

- [1] TOP500, URL: <http://www.top500.org>
- [2] C. Arlandini, A. Invernizzi, "LAGRANGE: un nuovo server per il calcolo ad alte prestazioni", *Bollettino del CILEA*, n. 108, aprile 2008.
- [3] Iniziativa LISA, URL: <http://lisa.cilea.it>
- [4] C. Arlandini, "Lagrange Fase 2: un supercalcolatore da Top500 per la ricerca in Lombardia", *Bollettino del CILEA*, n. 115, agosto 2010.
- [5] HPC al CILEA.
URL: <http://www.cilea.it/hpc/>
- [6] Summer School CILEA 2011.
URL: <http://www.cilea.it/summerschool-2011/>
- [7] Alta formazione al CILEA,
URL: <http://www.cilea.it/formazione/>
- [8] LITBIO, URL: <http://www.litbio.org>
- [9] C. Arlandini, "Michelangelo, un sistema ad alte prestazioni per la bioinformatica italiana", *Bollettino del CILEA*, n. 103, ottobre 2006.