



Secondo Workshop Nazionale
"Simulazione del Sistema Energetico e della sua Sostenibilità"
5-6 Luglio 2016
ENEA, Via Giulio Romano, 41 \u2013 Roma

Infrastrutture di Super-Calcolo a supporto della simulazione

F.Iannone, S.Migliori, G.Bracco, A.Quintiliani, R.Guadagni, M.Celino
F.Ambrosino, A.Funel, G.Guarnieri, G.Ponti, F.Palombi, S.Pierattini,
A.Mariano, M.Mongelli, P.Ornelli, A.Perozziello, G.Furini, G.Aprea, S.Podda,
D.Giammattei, M.DeRosa, B.Calosso, M.Chinnici, C.Ferrelli, S.Pecoraro,
F.Simoni, D.De Mattia, R.Bertini, A.Scalise, M.Marano, L. Bucci, S.Pagnutti,
G.Ferro, M.Galli, D.Visparelli, S.Giusepponi, A.Colavincenzo,
I.Bellagamba, G.Santomauro.

<http://www.ict.enea.it>, <http://www.eneagrid.enea.it>, <http://www.cresco.enea.it>

La presentazione



- Infrastruttura HPC: cluster CRESCO in ENEAGRID
- Utenza e settori applicativi: **modellistica per il settore energetico è il settore applicativo dominante**
- L'evoluzione delle risorse prevista nel 2016/2017

Il laboratorio HPC [High Performance Computing] in ENEA è nel Dipartimento delle Tecnologie Energetiche, divisione ICT e le risorse di calcolo, rilevanti a livello nazionale, sono dedicate all'Agenzia e alle sue collaborazioni progettuali.

HPC invecchiamento rapido → evoluzione continua:

Lo sviluppo: ==> progetti PON(?) / Accordo CINECA!

Progetti europei: EoCoE [Energy oriented Centre of Excellence in computing applications] (3 anni iniziato 2015/10)

L'infrastruttura HPC di ENEA: **ENEAGRID** risorse di calcolo e storage distribuite

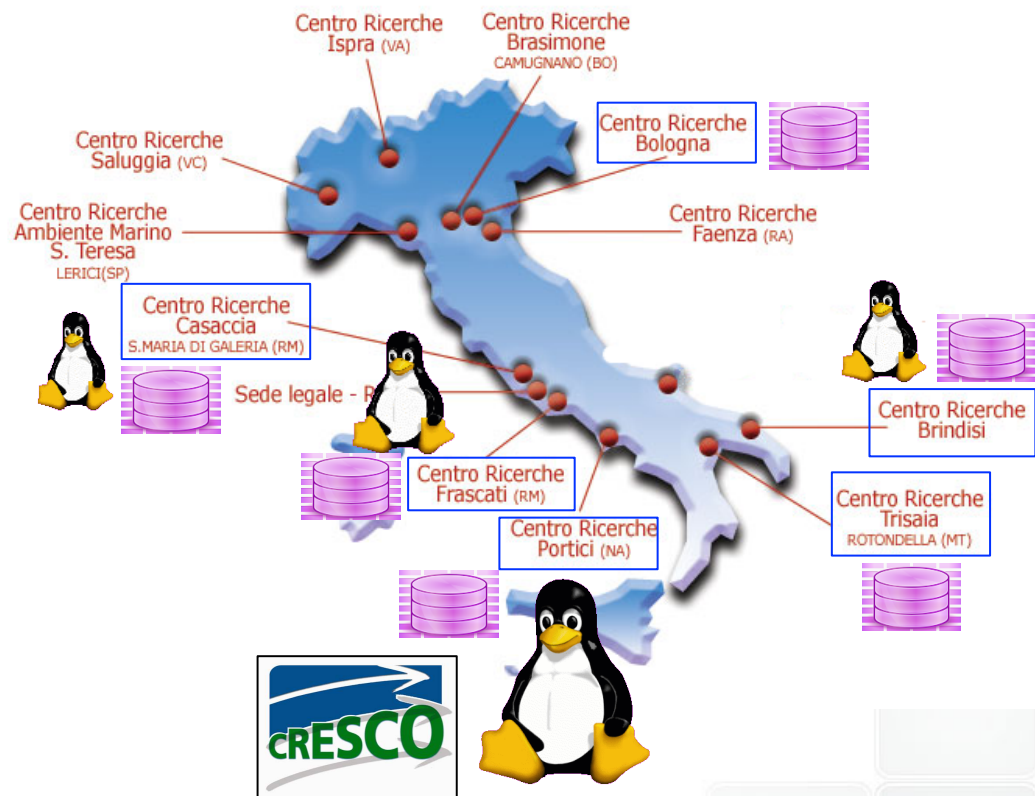


Le risorse di calcolo offerte all'utenza sono i sistemi Linux  x86_64 (cluster CRESCO ~8000 cores ~150 Tflops) e sistemi speciali dedicati (ad es. GPU/PHI). Storage  AFS e GPFS.

Le risorse sono distribuite su 6 Centri di Ricerca ENEA, **Portici** è il sito principale.

Le risorse distribuite:
possibilità di HPC
“ad alta affidabilità”

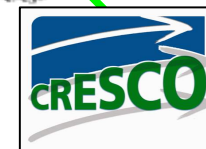
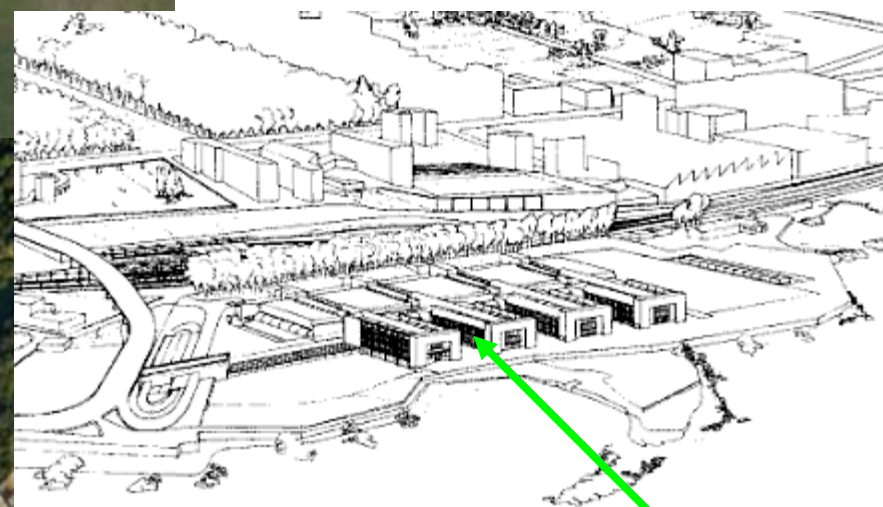
*sviluppo in corso
per applicazioni del
Dipartimento SSPT*



ENEAGRID: CRESCO a Portici dal 2008



CR ENEA Portici
edifici progettati da
Vittorio Gregotti,
1982/86



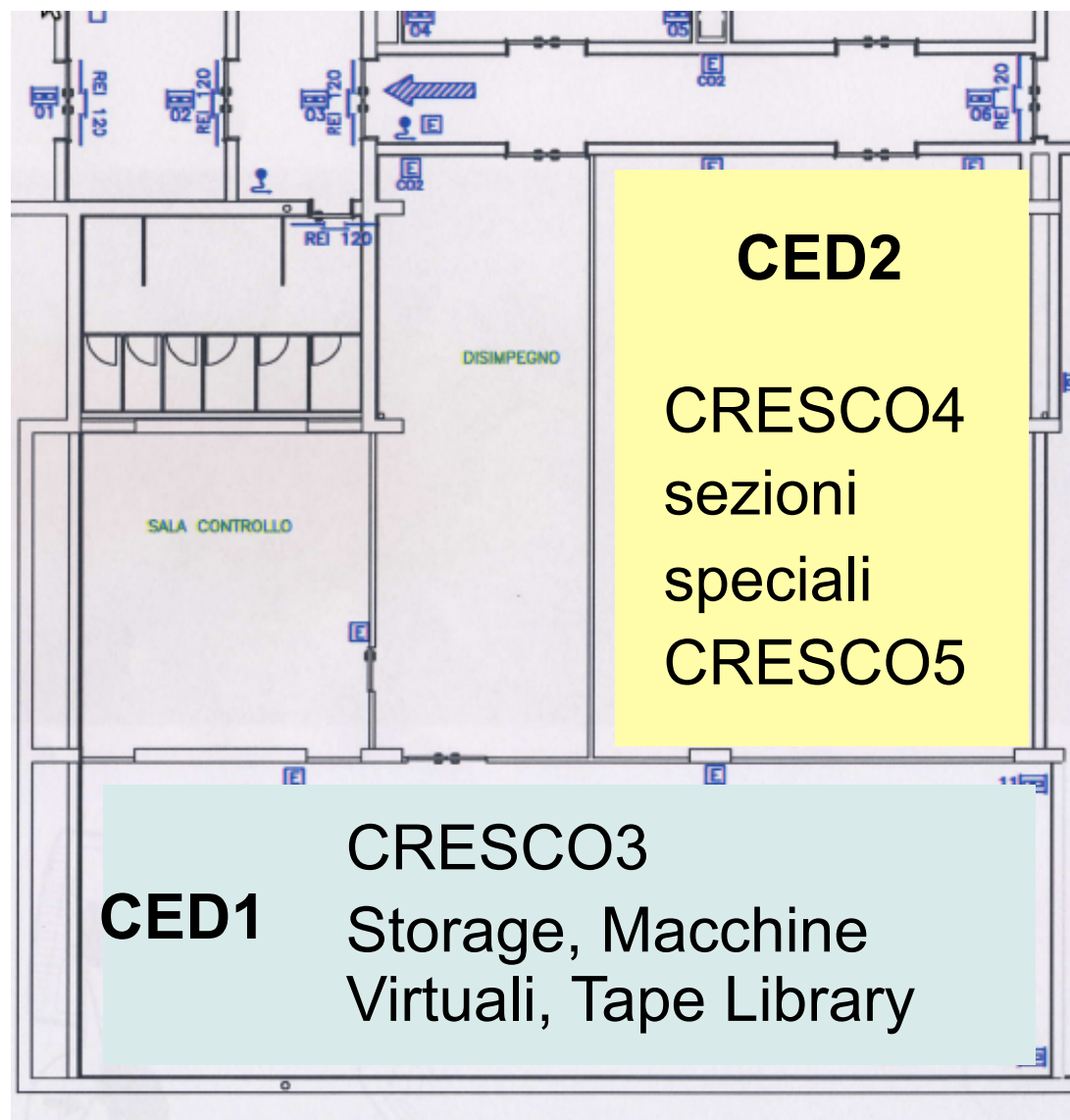
CRESCO4 (PON TEDAT et al) rilasciato 2014/01



CRESCO4
100 TFlops

Cluster CRESCO a Portici: stato 2016/Q2

- **CRESCO3**, 76 nodi 1824 cores AMD Interlagos, 64 GB RAM
- **CRESCO4**, 304 nodi, 4864 cores Intel SandyBridge, 64 GB RAM
- **CRESCO5**, 40 nodi, 640 cores Intel Haswel, 64 GB RAM
- **Sezioni speciale:**
 - 5 nodi a grande memoria 768 GB RAM, IvyBridge 3.5GHz
 - 4 nodi con coprocessori Intel PHI e Nvidia K40
 - 2 nodi GPU S2050
 - 1 stazione grafica cresco4-nvi1
- **Le dismissioni effettuate:**
 - CRESCO1 CRESCO2 256 nodi Clovertown, DDN 9550
 - Qualche nodo CRESCO3 x VM



2015: la sezione speciale e CRESCO5

5 nodi a grande RAM/Ivybridge

- **768 GB**, dual E5-2643v2, **3.5 GHz**, 6c
- 4 dei nodi con PHI 3120P (57 c, 1TF)

4 nodi Intel PHI & Nvidia K40M

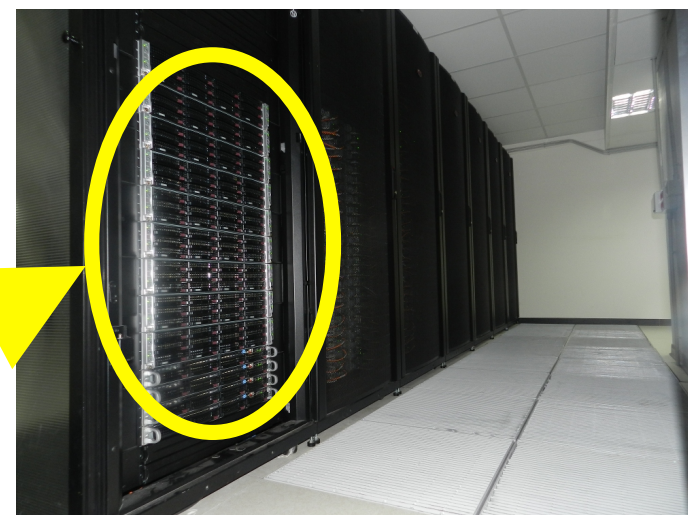
- 64 GB, dual E5-2680v2, 2.8 GHz
- 5 schede PHI 5110P (60 c, 1TF)
- 3 schede Nvidia K40M (1.43 TFlops)

Potenza di picco: 16.4 Tflops (di cui 13.2 Tflops negli acceleratori)

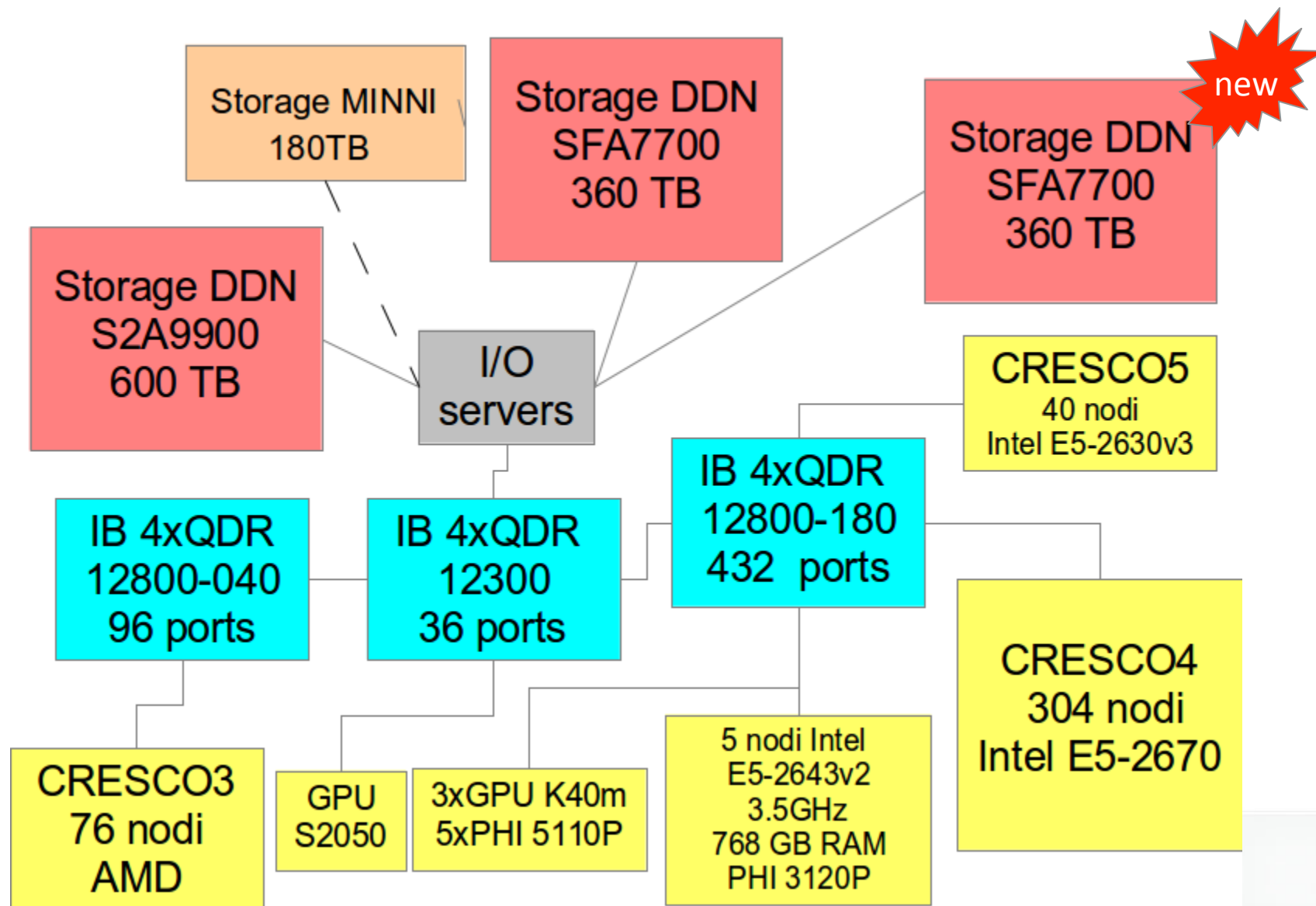


CRESCO5: nuovo piccolo cluster cpu HASWELL per applicazioni licenziate (ANSYS!)

- 40 nodi, 640 cores **24.6 Tflops!**
- 64 GB**, 2x E5-2630v3, 2.4 GHz, 8c



Cluster CRESCO Portici, rete IB, Storage 2016

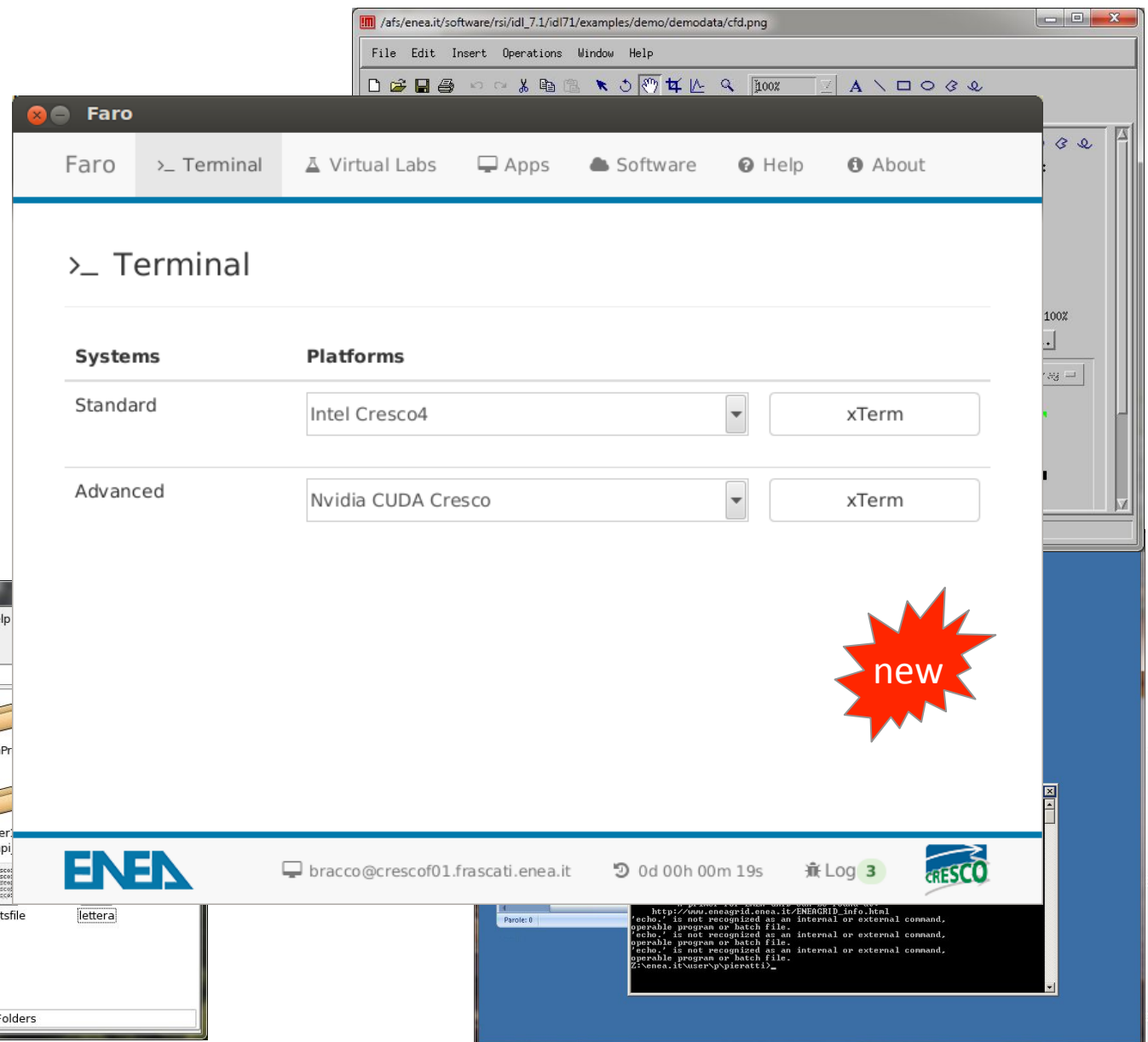
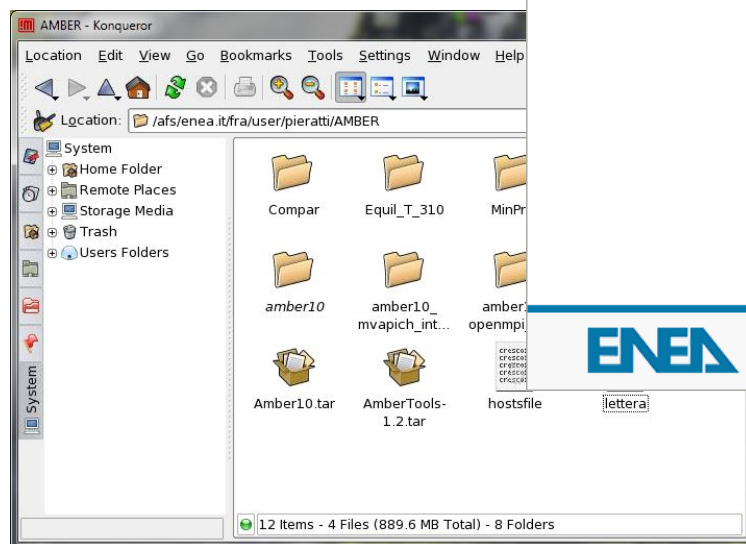


Componenti strutturali “maturi” per garanzia di affidabilità e semplicità di gestione, interfacce Web sviluppate/customizzate per un ambiente utente amichevole:

- Autenticazione Kerberos 5
- File systems:
 - AFS/OpenAFS: file system geografico
 - GPFS: file system parallelo, anche su WAN
- Gestore delle risorse: LSF
- Interfacce grafiche Web per l'utente:
 - NX/FARO2
 - Jobrama: Stato dei job & Accounting
- Sistema di monitoring: Zabbix
- Gestione Web utenze e progetti: WARC

Strumenti x l'utenza: Interfaccia grafica FARO2

Accesso anche
WEB alle
applicazioni,
realizzato con una
integrazione di NX
e applicazioni java



L'utenza e le applicazioni

~450 utenti attivi: ~200 sottomettono job seriali o a parallelismo contenuto e ~70 utenti che sottomettono job HPC altamente paralleli.

Le aree applicative:

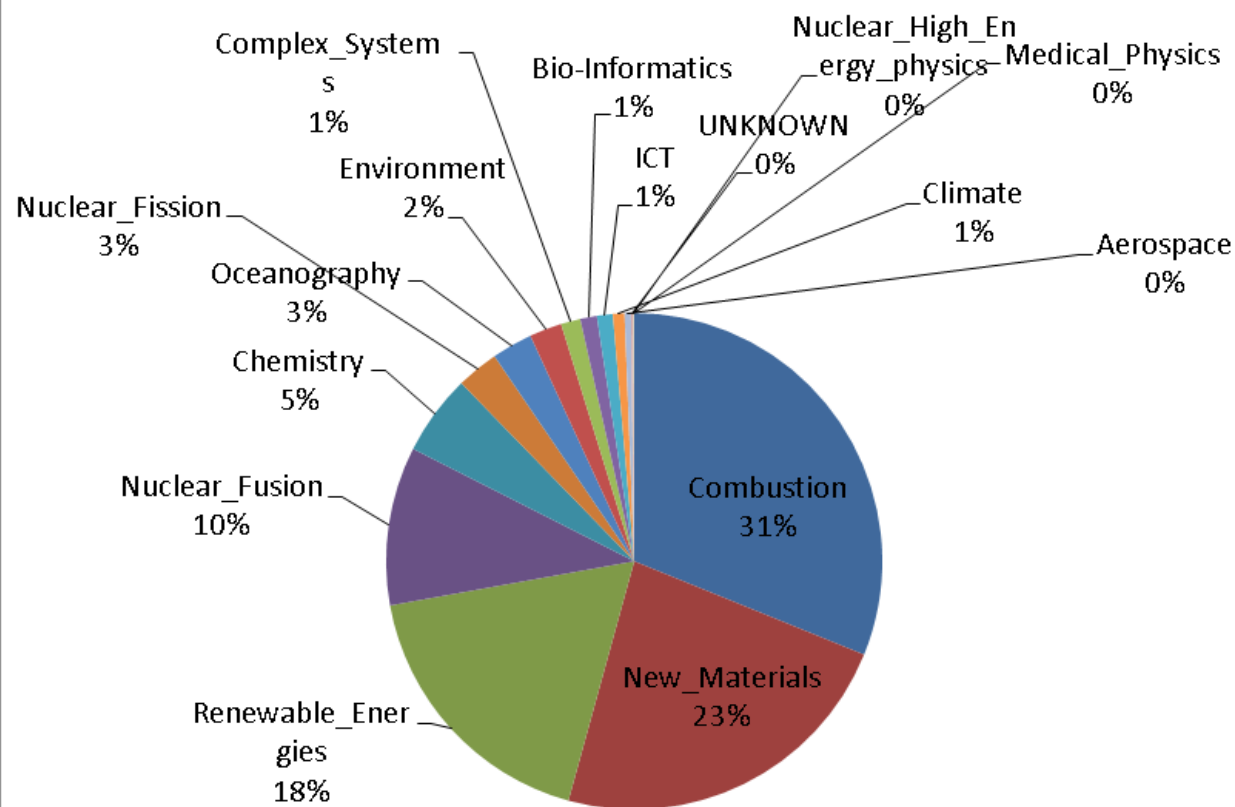
- fluidodinamica combustione
- chimica computazionale
- simulazioni climatiche
- analisi della diffusione degli inquinanti nell'atmosfera
- tecnologie nucleari
- fluidodinamica per l'aerospazio
- fisica/tecnologie fusione nucleare
- bioinformatica
- sistemi complessi
-



Ripartizione tempo di calcolo($WCT=core*hrs$) per aree di ricerca 2015

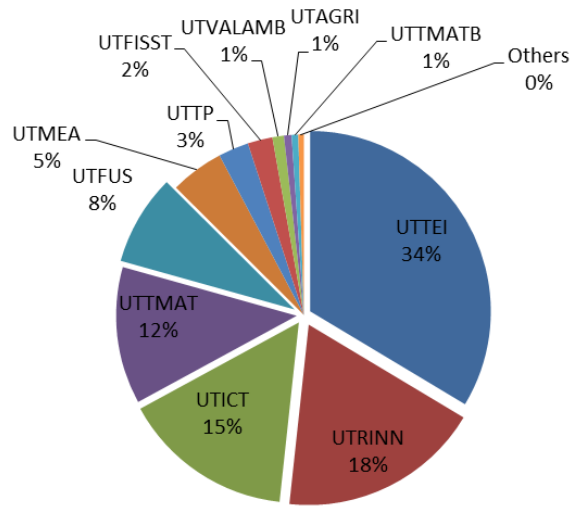
Rapporto annuale CRESCO arrivato alla VI° edizione 2014, è in preparazione della versione 2015. [http://www.cresco.enea.it/CRESCO_reports/]

WCT R&D Domains 2015

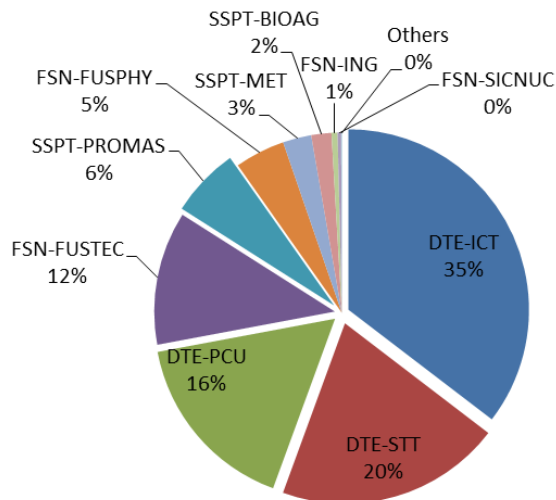


R & D Domain	WCT y
Combustion	1654.72
New_Materials	1229.91
Renewable_Energies	950.13
Nuclear_Fusion	548.78
Chemistry	279.08
Nuclear_Fission	145.64
Oceanography	141.24
Environment	112.21
Complex_Systems	67.44
Bio-Informatics	57.56
ICT	54.71
Climate	40.28
Aerospace	21.98
UNKNOWN	8.72
Nuclear_High_Energy_Physics	2.37
Medical_Physics	0.00
Total	5314.78

Ripartizione tempo di calcolo ($WCT = core * yrs$) per unità/divisioni 2015



WCT ENEA Units 2015



WCT ENEA Divisions 2015

ENEA Units	WCT y
UTTEI	1034.23
UTRINN	557.35
UTICT	472.71
UTTMAT	377.89
UTFUS	250.00
UTMEA	147.39
UTTP	83.81
UTFISST	68.39
UTVALAMB	31.71
UTAGRI	20.77
UTTMATB	18.25
Others	15.38
Total	3077.87

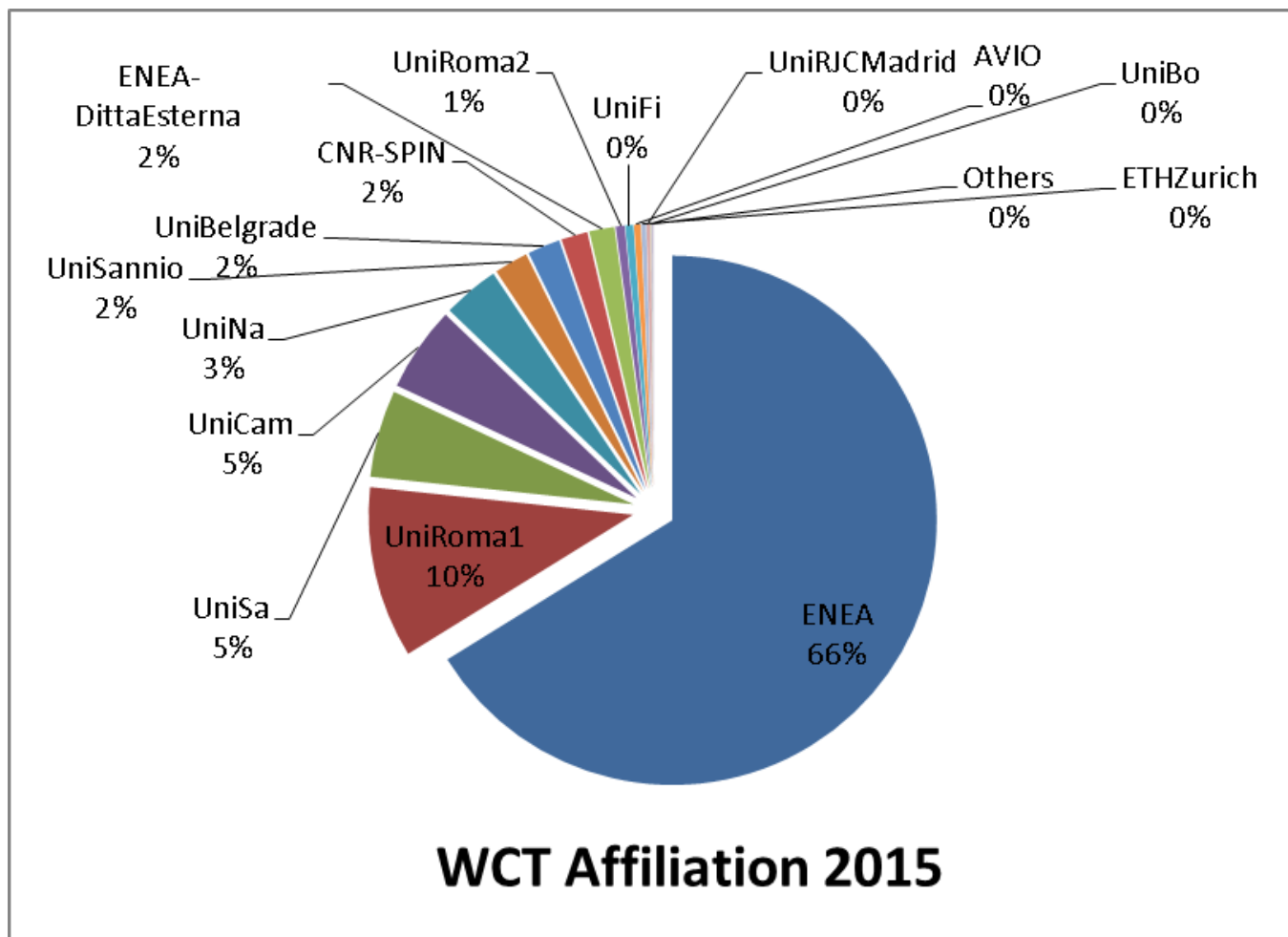
From Jan.1st to Jun. 30th 2015

ENEA Divisions	WCT y
DTE-ICT	791.82
DTE-STT	451.39
DTE-PCU	368.44
FSN-FUSTEC	267.54
SSPT-PROMAS	139.23
FSN-FUSPHY	100.35
SSPT-MET	57.20
SSPT-BIOAG	40.28
FSN-ING	12.01
FSN-SICNUC	7.18
Others	1.46
Total	2236.91

From Jul.1st to Dec. 31th 2015

Ripartizione tempo di calcolo ($WCT = core \cdot yrs$) per istituzioni 2015

Affiliation	WCT y
ENEA	3517.71
UniRoma1	556.75
UniSa	282.80
UniCam	276.17
UniNa	183.28
UniSannio	110.30
UniBelgrade	106.21
CNR-SPIN	85.77
ENEA-DittaEsterna	81.35
UniRoma2	28.83
UniFi	26.04
AVIO	21.98
ETHZurich	15.73
UniRJCMadrid	12.99
UniBo	3.14
Others	5.74
Total	5314.78



Il progetto H2020 **EoCoE**, è un Centro di Eccellenza per lo sviluppo dell'High Performance Computing (HPC) per **applicazioni numeriche avanzate nel settore dell'Energia**: il clima, i nuovi materiali, l'acqua e la fusione nucleare.

Partner principali:

Julich Supercomputer Center (Germania)

Maison de la Simulation (CEA-Francia).



Attività ENEA: [<http://www.ict.enea.it/it/progetti/utict-e-i-progetti/eocoe>]

- Coordinamento work-package Materials4energy (WP3, **M.Celino**)
- Simulazione atomistica di materiali per il fotovoltaico
- Analisi delle performance I/O di codici applicativi su computer HPC
- Attività di dissemination e collegamento con le istituzioni italiane ed europee nel settore dell'energia

CINECA è il centro di riferimento per l'Italia nel programma europeo PRACE (TIER0): la sua tabella di marcia prevede >10 Pflops nel 2016 (MARCONI) poi 50 Pflops nel 2018.

Nel 2015 Eurofusion ha lanciato un bando per un sistema da 1 Pflops(1/7/2016) e poi 5 Pflops(1/7/2017-31/12/2018). ENEA e CINECA hanno partecipato insieme vincendolo.

Il nuovo sistema CINECA [MARCONI, 2 Pflops] è entrato in produzione 4/7/2016, inclusa la sezione MARCONI-FUSION.

L'accordo ENEA-CINECA nato in tale quadro prevede tra l'altro la fornitura in comodato d'uso nel 2017 a Portici di un sistema da 0.5 Pflops con il ruolo di uno dei TIER1 italiani. I lavori di preparazione nelle sale calcolo a Portici sono in corso.

MARCONI: New Tier-0 system

Technical Features:

- Fabric: Intel OmniPath
- Architecture: Lenovo NeXtScale



A1

BRD 2x18 cores, 2.3GHz
1500 nodes, 2PFs

A2

KNL 68cores, 1.4 GHz;
3600 nodes, 11 PFs

A3

SKL 2x20 cores, 2.3 GHz;
1500 nodes, 5 PFs

2017/Q3 a Portici un sistema Tier1 da

~170 nodi SKL

~6800 core

~0.5 PFlops



**CRESCO4
x 5**

I sistemi di supercalcolo di ENEA sviluppati e gestiti da DTE-ICT sono significativi a livello nazionale e sono uno strumento essenziale per le attività ENEA di modellistica e simulazione.

Il sistema energetico e la sua sostenibilità sono già oggi il settore che domina l'utilizzo delle risorse di calcolo disponibili in ENEA.

Il settore HPC è caratterizzato da rapida evoluzione.

Le risorse di ENEA verranno potenziate l'anno prossimo nel quadro della collaborazione con CINECA (fattore 5 nella potenza di calcolo) e le attività preliminari per il potenziamento sono già in corso.