

Le novità della infrastruttura ICT ENEA per il calcolo scientifico e il supporto alle attività progettuali

G.Bracco
bracco@enea.it

S.Migliori, A.Quintiliani, R.Guadagni, F.Ambrosino, G.Aprea, F.Beone, M.Caporicci, P.D'Angelo, A.Funel, G.Guarnieri, S.Podda, G.Ponti, F.Palombi, G.Furini, A.Mariano, G.Mencuccini, P.Ornelli, A.Perozziello, S.Pierattini, F.Poggi, D.Giammattei, M.DeRosa, B.Calosso, M.Chinnici, C.Ferrelli, S.Pecoraro, F.Simoni, R.Bertini, S.Magagnino, D.Abate, P.DeMichele, S.Giusepponi, A.Italiano, A.Colavincenzo, B.Mastroianni

La presentazione



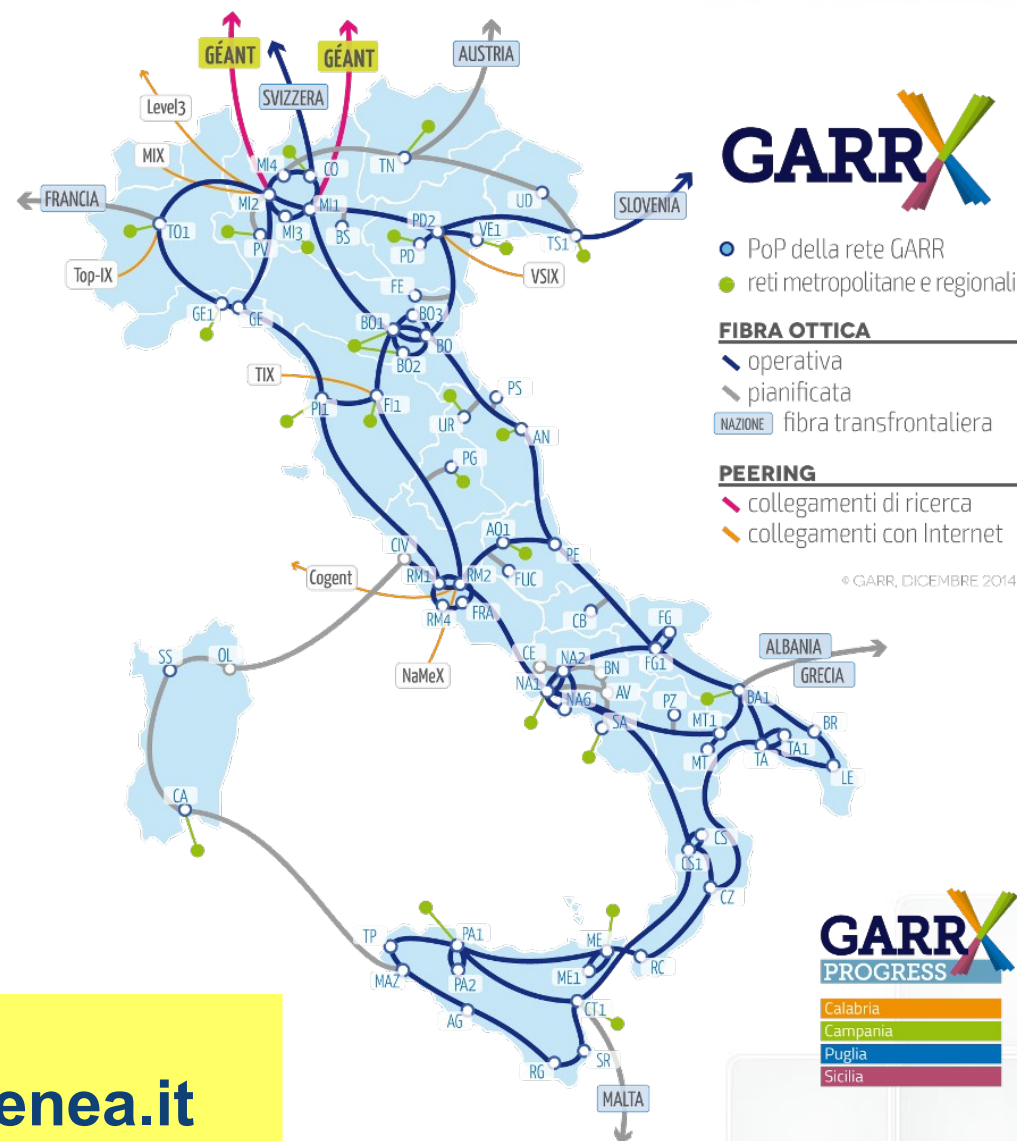
- Le risorse informatiche sono uno strumento essenziale per le attività di ricerca scientifica e di sviluppo tecnologico di ENEA e delle sue collaborazioni con università, enti di ricerca, amministrazioni pubbliche ed imprese.
- La **disponibilità** di strumenti software ed hardware allo stato dell'arte è una base solida di supporto nella ideazione, nella valorizzazione e nella realizzazione di accordi di programma e attività progettuali.
- La presentazione descrive lo stato e le novità delle risorse per il calcolo scientifico di ENEA UTICT inquadrandole nel contesto generale dello sviluppo del calcolo ad alte prestazioni (HPC) e del loro utilizzo in ENEA.
- Ma UTICT non è solo HPC, ma un insieme integrato di risorse ICT (rete, servizi di base, servizi cloud, strumenti di comunicazione..) e l'integrazione è garanzia di economia di scala e qualità di servizio.

I servizi ICT

- I servizi ICT di UTICT
 - La rete (→ GARR)
 - Servizi di base
 - Servizi cloud
 - Macchine virtuali
 - Storage (ENEABOX)
 - Strumenti di comunicazione
 - videoconferenze, voip
 - teleconferenze
 - E-Learning
 - Teleoperazione esperimenti

ex
CRESCO

<http://www.utict.enea.it>



I sistemi HPC (1)

Negli ultimi 50 anni l'evoluzione esponenziale delle tecnologie informatiche ha messo a disposizione sistemi di calcolo sempre più potente e complessi, **largamente paralleli**.

- Un sistema HPC si caratterizza per una interconnessione tra i nodi ad alta banda bassa latenza (40-56 Gbps, $<1\mu\text{s}$) e da risorse adeguate di storage ($\sim\text{PB}$) accessibili attraverso file system paralleli
- Nel mondo il sistema più potente è cinese (Tianhe-2) ~ 34 Pflops (10^{15}), Italia #23 CINECA 1.8 Pflops (FERMI, 2012) e 1 Pflops (GALILEO, 2015)
- Il sistema più potente di ENEA: CRESCO4 0.1 Pflops in operazione da gennaio 2014 con 300 nodi e processori Intel SandyBridge
- Sembrerebbe che CRESCO4 sia quindi un sistema “piccolo” ma in realtà c'è un altro elemento cruciale:

Il software: i codici

I sistemi HPC (2)



- La competizione internazionale nel mondo HPC è dettata sia da obiettivi strategici di alto profilo che da esigenze di dimostrazione di supremazia tecnologica
- Per ragioni di costo di acquisto e di gestione i sistemi di punta utilizzano tecnologie estreme che richiedono lo sviluppo di applicazioni dedicate. La soluzione attuale
 - processori standard + acceleratori GPU e/o coprocessori PHI
- I sistemi HPC di produzione invece sono più simili a quelli di grande mercato e permettono il riuso dei codici disponibili siano essi commerciali o sviluppati dai ricercatori
- **In ENEA CRESCO2 e poi CRESCO4 sono sistemi di produzione.**
 - In CINECA il cluster GALILEO da 1. PFlops ha 0.35 PFlops standard Intel e 0.65 PFlops di acceleratori, il fattore di margine con CRESCO4 è 3.5 non 10 e include l'evoluzione tecnologica.

I sistemi HPC (3)

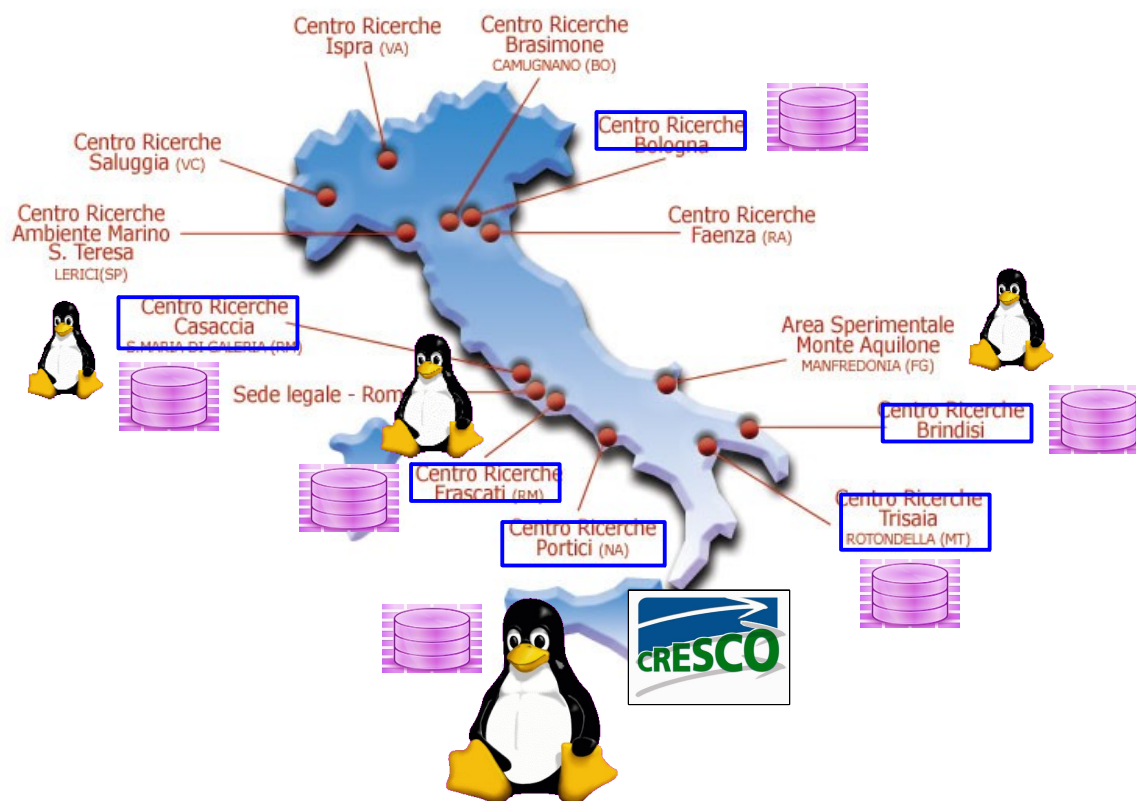


- CINECA ha il ruolo di sito di riferimento per l'Italia all'interno del programma europeo PRACE (TIER0) e come tale ha la sua tabella di marcia che prevede 10 Pflops nel 2016 e 50 Pflops nel 2018.
- Che c'è in Italia nell'HPC oltre CINECA?
 - ENI: sistema dedicato ad analisi dei dati delle prospezioni petrolifere (3.1 Pflops #12 top500) ampio uso di GPU.
 - CMCC (Lecce) 0.16 Pflops (2012)
 - **ENEA (Portici) 0.10 Pflops (2013)**
 - SISSA (Trieste) 0.10 Pflops (2014)
 - ...
- Dunque ENEA con i suoi cluster attuali è uno dei sistemi di rincalzo (TIER1) destinato ad una utenza con codici standard siano essi commerciali o sviluppati dai ricercatori. Alcuni acceleratori sono messi a disposizione come sistemi sperimentali.

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



Le risorse di calcolo offerte all'utenza sono attualmente i sistemi Linux x86_64 (i cluster CRESCO ~8000 cores) e sistemi speciali dedicati (ad es. GPU/PHI). Storage AFS e GPFS. Le risorse sono distribuite su 6 Centri di Ricerca ENEA.



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

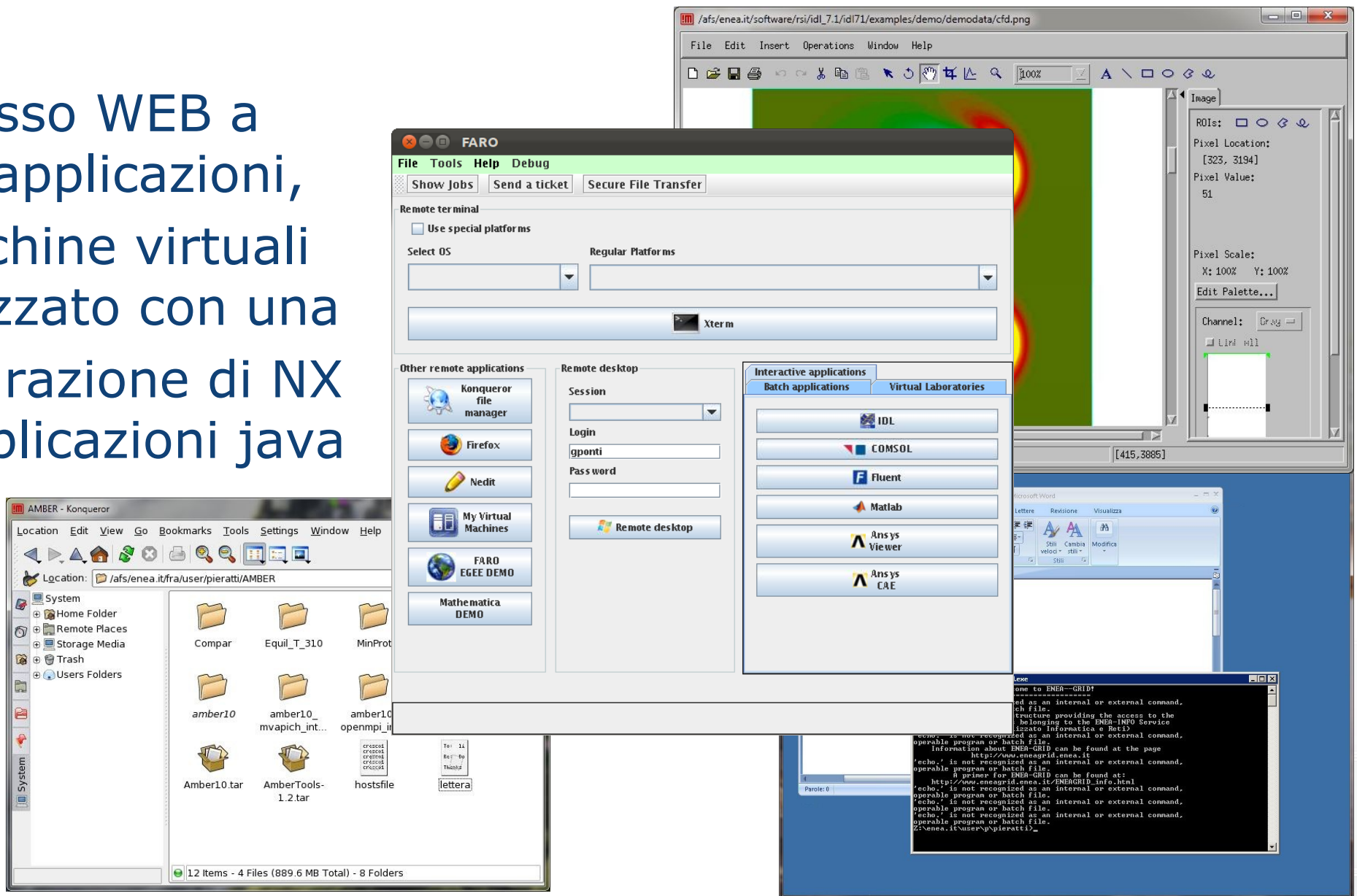
- Autenticazione Kerberos 5
- File systems:
 - AFS/OpenAFS: file system geografico
 - GPFS: file system parallelo, anche su WAN
- Gestore delle risorse: LSF Multicluster
- Interfacce grafiche Web per l'utente:
 - NX/FARO
 - Jobrama: Stato dei job & Accounting
- Sistema di monitoring: Zabbix
- Gestione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



CLOUD
dal ..1999!

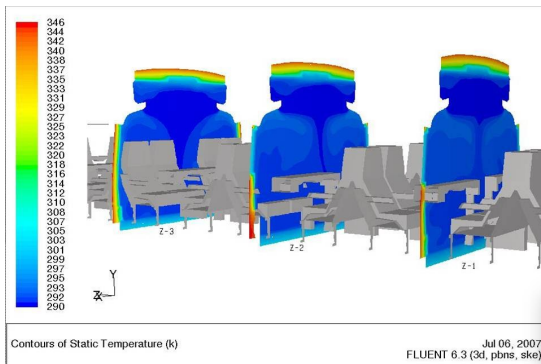
FARO – Fast Access to Remote Objects

Accesso WEB a
dati, applicazioni,
macchine virtuali
realizzato con una
integrazione di NX
e applicazioni java

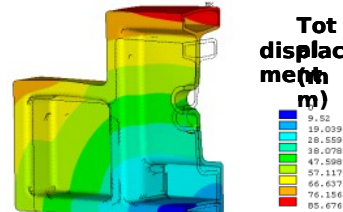


FARO: la visualizzazione 3D

Rendering 3D Remoto



P **Proce**
OS **ssor**
t



Introduction

Today it should be possible for an end-user to exploit web resources to view high-definition 3D models of cultural heritage artefacts and monuments and to query relational databases to access metadata and documentation related to them. Ideally, this should be possible online and in real time without a browser plug-in. But to date, this goal has not been reached. Instead, distributing a high-definition 3D model on the Internet means:

- either to give the model itself to the user who needs to download the whole file, have sufficiently powerful hardware and appropriate navigation software as well as a high-speed Internet connection;
- or to accept a compromise solution where the

Supported by

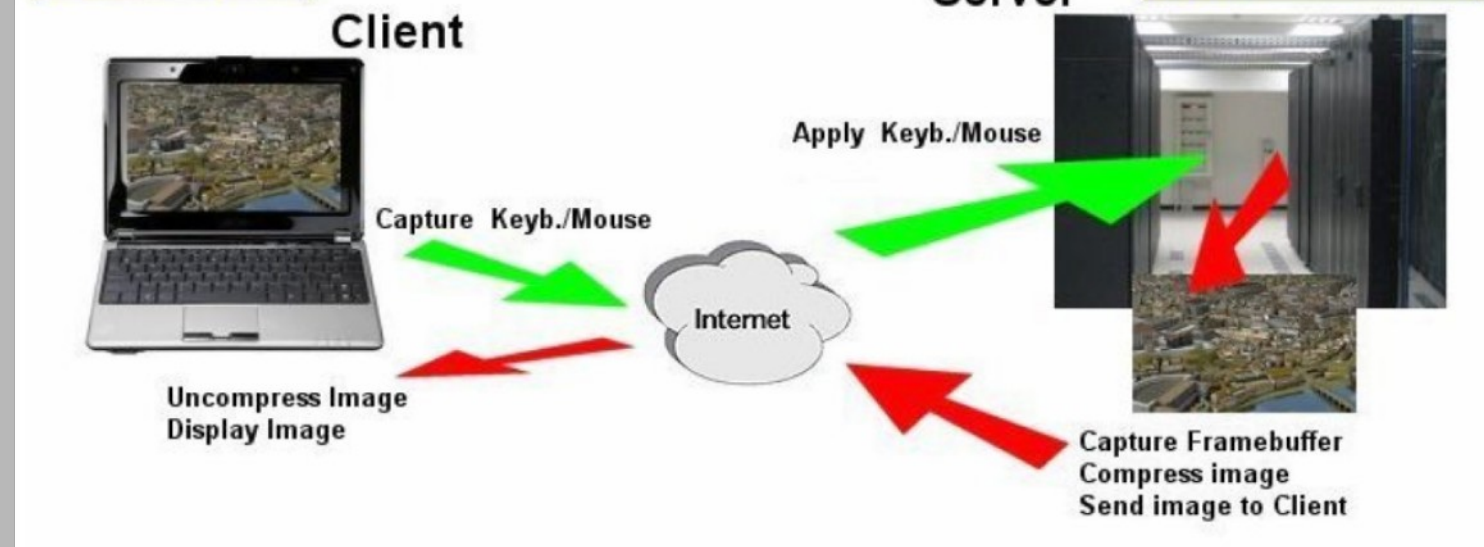
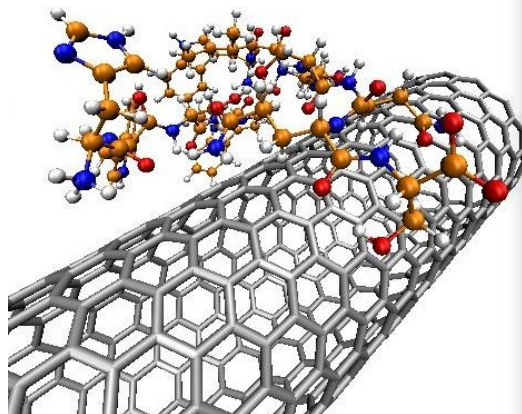


Local Computer:

- Keyboard / Mouse
- Display
- Remote 3D Client

Visualization server:

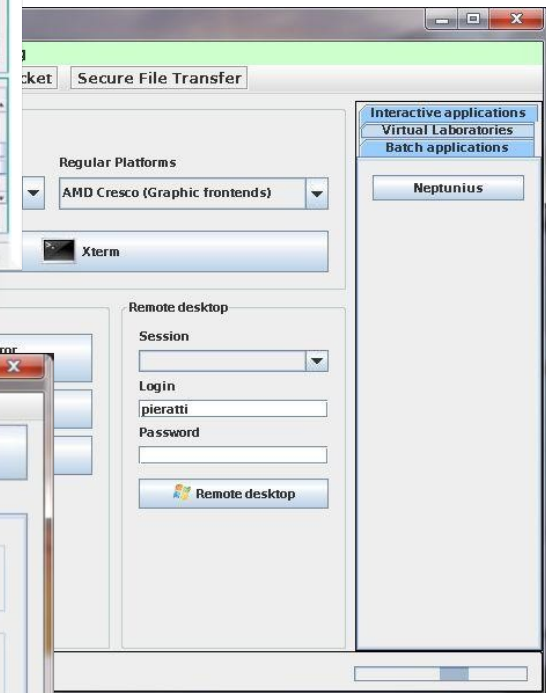
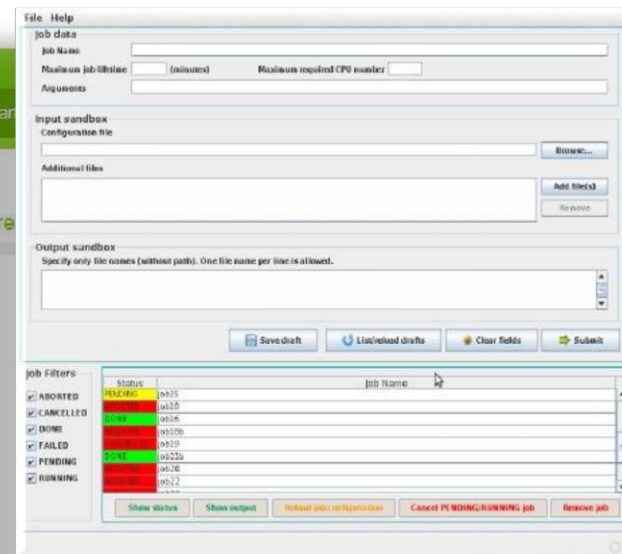
- 3-D-Software (OpenGL)
- Remote 3D-Server
- Data



FARO e Laboratori Virtuali



Portali tematici che integrano l'accesso ai dati e alle applicazioni specifici del settore



Laboratori Virtuali



ENEA | CONTATTI | ACCESSIBILITÀ | MAPPADEL SITO

FATTIRICONOSCERE

ENEA
Agenzia nazionale per le nuove tecnologie, l'energia
e lo sviluppo economico sostenibile

Cerca nel sito

Unità tecnica Sviluppo Sistemi per l'Informatica e l'Ict

Home | Chi siamo | La Tecnologia che ti serve | Utictinforma | Progetti | Lavoro | Glossario | Links

Tu sei qui: Home - Laboratori Virtuali - Virtual Labs

Virtual Labs

L'Unità Tecnica Sviluppo Sistemi per l'Informatica e l'ICT ha sviluppato una metodologia per consentire l'utilizzo remoto di servizi di ricerca e caratterizzazione erogati da gradi impianti e/o apparecchiature, unici per caratteristiche e/o costo, battezzando il servizio con il nome di Laboratori Virtuali.

- NEPTUNIUS: Numerical codes for computational fluid dynamics and fluid structure interactionS
- TEDAT - HPC: High Performance Computing per il progetto TEDAT (Tecnologie e Diagnostica Avanzata nel settore dei Trasporti)
- Madia: Multi Approach to Data Integrity Activities
- CMAST: Scienza dei materiali computazionale
- Fissione Nucleare (Ambienti di lavoro per sviluppo, progettazione e sicurezza dei reattori nucleari e applicazioni mediche)
- DySCo - Laboratorio Tavole Vibranti
- Sophia - Software Infrastructure
- It@cha - Tecnologie per i Beni Culturali
- Smartcities - ICT per i sistemi urbani
- Tigris - Virtual Lab per l'Assiologia
- Graphlab - Applicazioni Grafiche 3D
- Lamrecor - Innovazioni tecnologiche per il sistema merci e smistamento della corrispondenza
- VIS4Factory - Sistemi Informativi Visuali per i processi di fabbrica nel settore dei trasporti
- GIS - Sistema per la gestione e la condivisione delle informazioni geografiche
- ICTARC - ICT per i Beni Architettonici e Archeologici
- SIMON.A - Sistema Integrato di competenze per il MONitoraggio, la protezione e il controllo delle infrastrutture idriche, fognarie ed Ambientali
- EERA-JPNM European Energy Research Alliance - Joint Programme on Nuclear Materials

SERVIZI DI RETE	CALCOLO SCIENTIFICO	LAVORO COLLABORATIVO	E-LEARNING	SERVIZI GESTIONALI	PROGETTI
ASIE			Catalogo	IT@CHA	
Helpdesk / Ticketing	Enea-GRID	Web Conference	ECOL	LobusNotes	LAMRECOR
VPN	FARO	Web Conference rooms	Formazione Interna	Elenco Telefonico	CRESO
FTP	AFS	Phone Conference		Convenzioni alberghiere	VIS4FACTORY
OK BOX	FTP su AFS	Posta Elettronica		Sale riunioni	SIMON.A
	Job Monitor	GigaMail		Curriculum Vitae	
	Grid Ticket	OK BOX			
	Scientific software				

<http://utict.enea.it/it/laboratori-virtuali/virtual-labs>

Laboratori Virtuali



- **NEPTUNIUS: Numerical codEs for comPuTational fIUId dyNamics and fluid strUcture interactionS**
- **TEDAT - HPC: High Performance Computing per il progetto TEDAT (Tecnologie e Diagnostica Avanzata nel settore dei Trasporti)**
- **Madia: Multi Approach to Data Integrity Activities**
- **CMAST: Scienza dei materiali computazionale**
- **Fissione Nucleare (Ambienti di lavoro per sviluppo, progetto e sicurezza dei reattori nucleari e applicazioni mediche)**
- **DySCo - Laboratorio Tavole Vibranti**
- **Sophia - Software Infrastructure**
- **It@cha - Tecnologie per i Beni Culturali**
- **Smartcities - ICT per i sistemi urbani**
- **Tigris - Virtual Lab per l'Assiriologia**
- **Graphlab - Applicazioni Grafiche 3D**
- **Lamrecor - Innovazioni tecnologiche per il sistema merci e smistamento della corrispondenza**
- **VIS4Factory - Sistemi Informativi Visuali per i processi di fabbrica nel settore dei trasporti**
- **GIS - Sistema per la gestione e la condivisione delle informazioni geografiche**
- **ICTARC - ICT per i Beni Architettonici e Archeologici**
- **S.I.MON.A - Sistema Integrato di competenze per il MONitoraggio, la protezione e il controllo delle infrastrutture idriche, fognarie ed Ambientali**
- **EERA-JPNM European Energy Research Alliance - Joint Programme on Nuclear Materials**
- **Aquasystem - Gestione pianificata risorse idriche, ottimizzazione energetica e controllo qualità**
- **HER.M.ES - Heritage Management Experience: piattaforma web per il patrimonio culturale e l'offerta turistica**
- **Genomics Lab**

**CMAST
Workshop
ENEA Sede
13/4/2015**

<http://utict.enea.it/it/laboratori-virtuali/virtual-labs>

La richiesta di utenza si effettua sul portale CRESCO

<http://www.cresco.enea.it> → “Richiesta Utenza”

2013

E' richiesta l'accettazione di clausole per l'uso dei sistemi, il riconoscimento sulle pubblicazioni, il contributo al rapporto CRESCO..

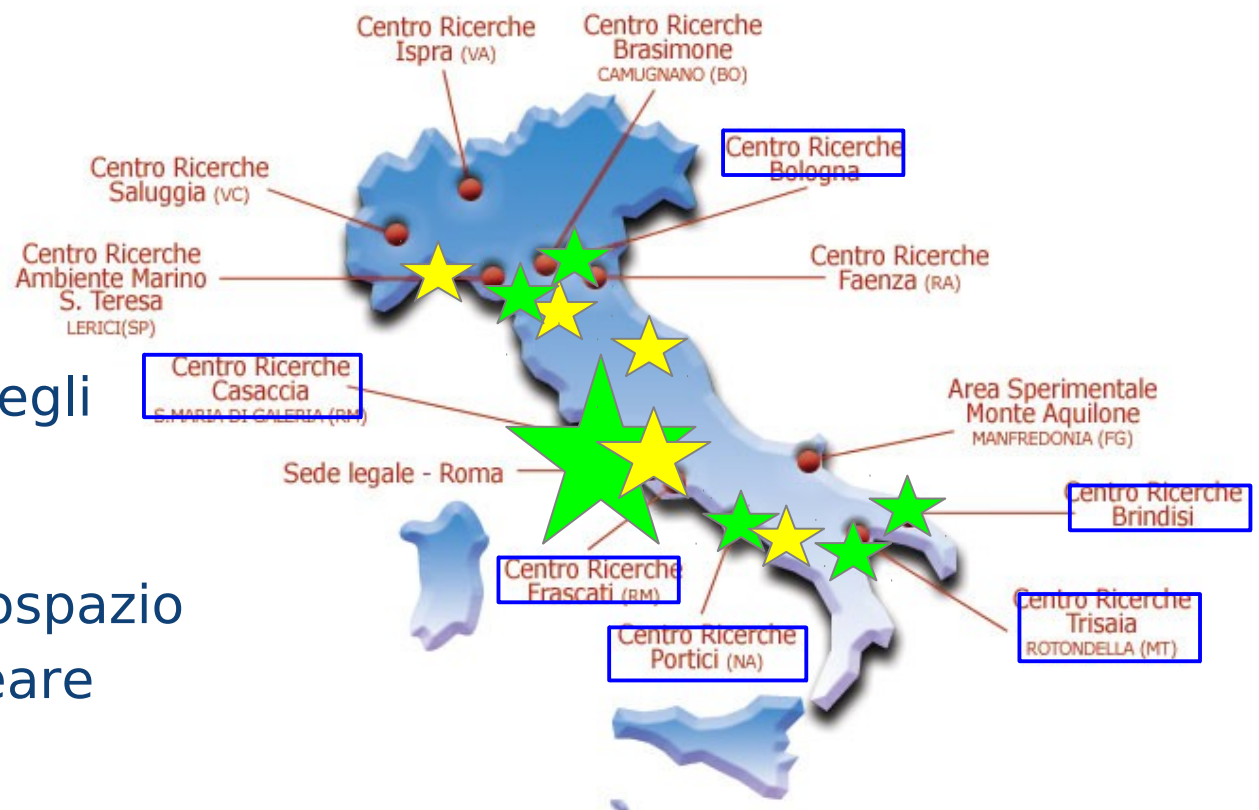
- Per i dipendenti ENEA l'utenza viene concessa immediatamente, per i “precari” è richiesto un dipendente ENEA di riferimento.
- Per gli esterni ENEA si richiede di avere un dipendente ENEA di riferimento e l'accettazione delle condizioni di utilizzo richiede un documento formale firmato ed inviato a UTICT.
- se le risorse richieste sono significative: si concorda un progetto globale di attività
- CRESCO4: accordo specifico con varie Unità: **“progetti numerici CRESCO 2014”** (UTVALAMB, UTTEI, UTMEA, UTFUS, METR, UTRINN)

L'utenza e le applicazioni

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

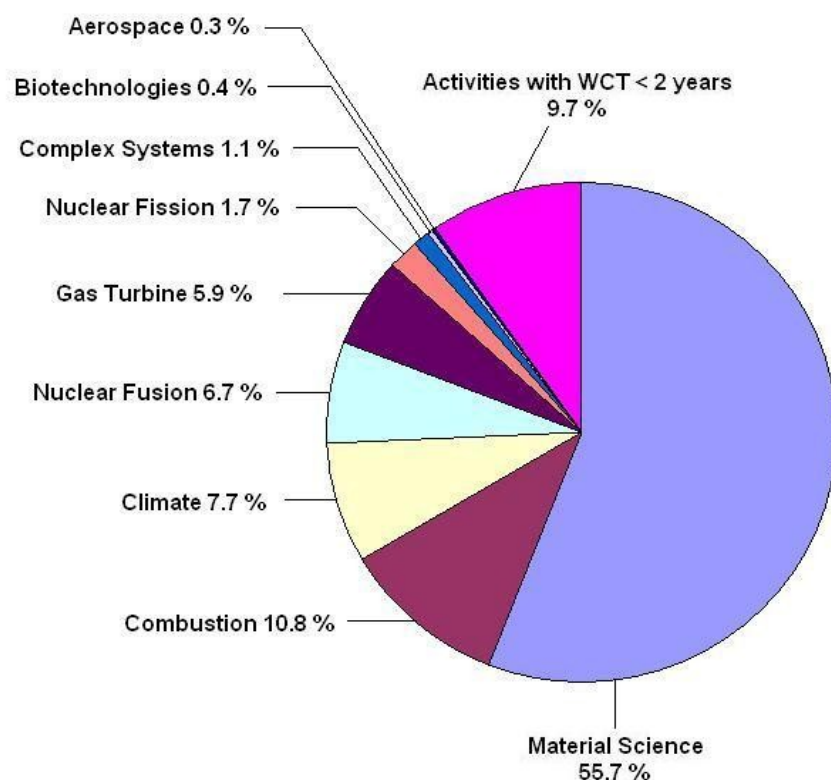
Le aree applicative:

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



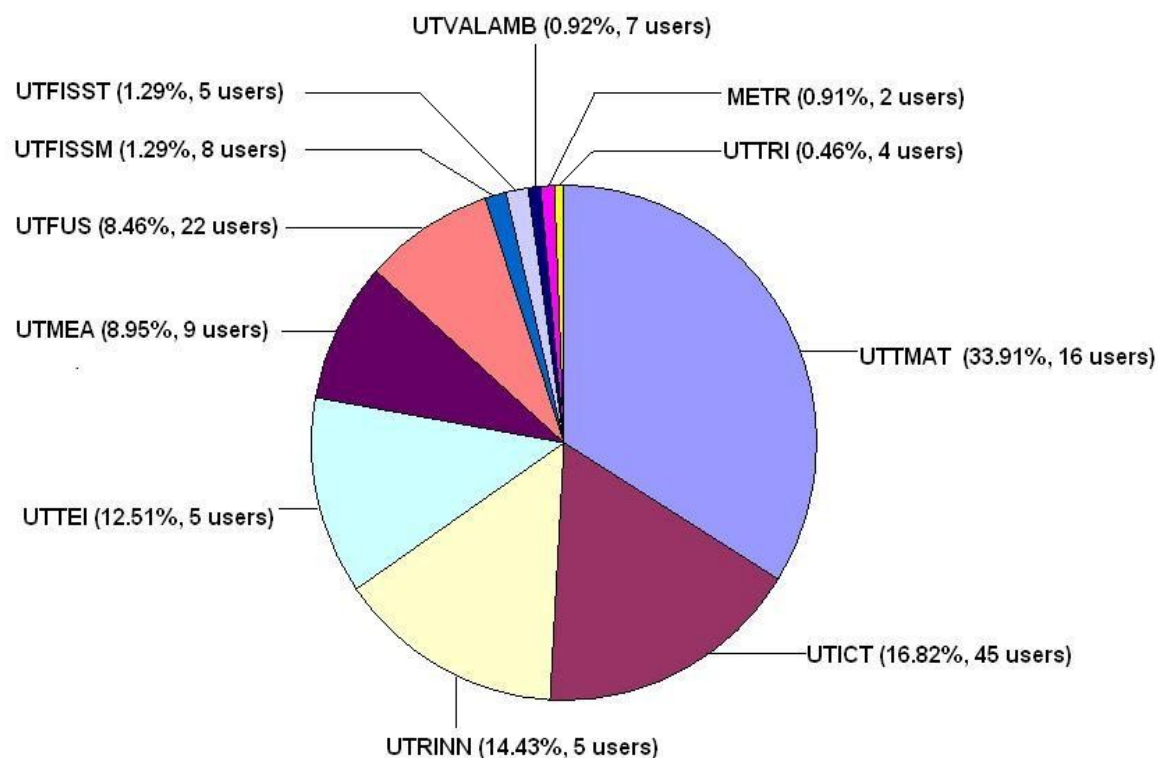
ENEA ★ ESTERNI ★

Ripartizione per aree applicative 2013



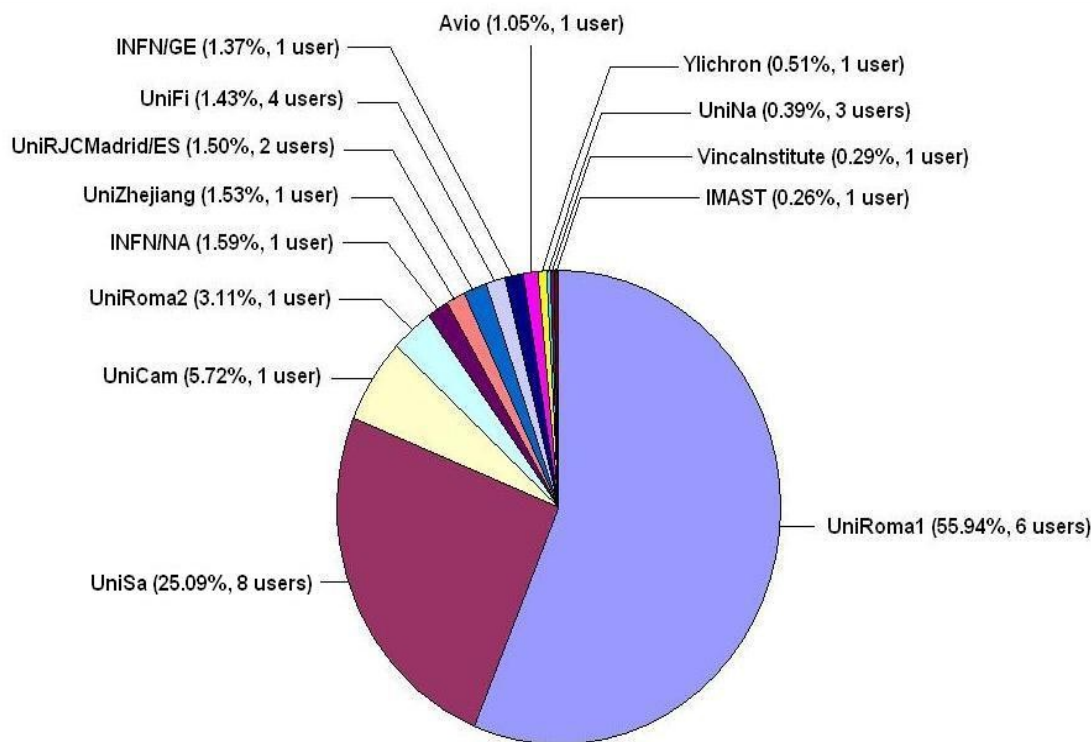
Research Area	WCT (hours) x 10 ⁶	WCT (years)	Percentage (%) of total WCT
Material Science	15.411	1759.3	55.7
Combustion	2.991	341.5	10.8
Climate	2.140	244.3	7.7
Nuclear Fusion	1.845	210.7	6.7
Gas Turbine	1.635	186.6	5.9
Nuclear Fission	0.471	53.7	1.7
Complex Systems	0.302	34.5	1.1
Biotechnologies	0.099	11.3	0.4
Aerospace	0.081	9.2	0.3
WCT < 2 years	2.683	306.3	9.7
Total	27.658	3157.4	100

Ripartizione per unità ENEA 2013



Technical Unit	WCT (years)	Percentage (%) of total WCT	Number of users
UTMMAT	1078.16	33.91	16
UTICT	534.88	16.82	45
UTRINN	458.84	14.43	5
UTTEI	397.80	12.51	5
UTMEA	284.46	8.95	9
UTFUS	268.91	8.46	22
UTFISSM	41.03	1.29	8
UTFISST	40.98	1.29	5
UTVALAMB	29.36	0.92	7
METR	28.90	0.91	2
UTTRI	14.51	0.46	4
Total	3177.83	99.95	128
	1.59	0.05	10
Total	3179.42	100	138

Ripartizione utenza esterna 2013 (27%)

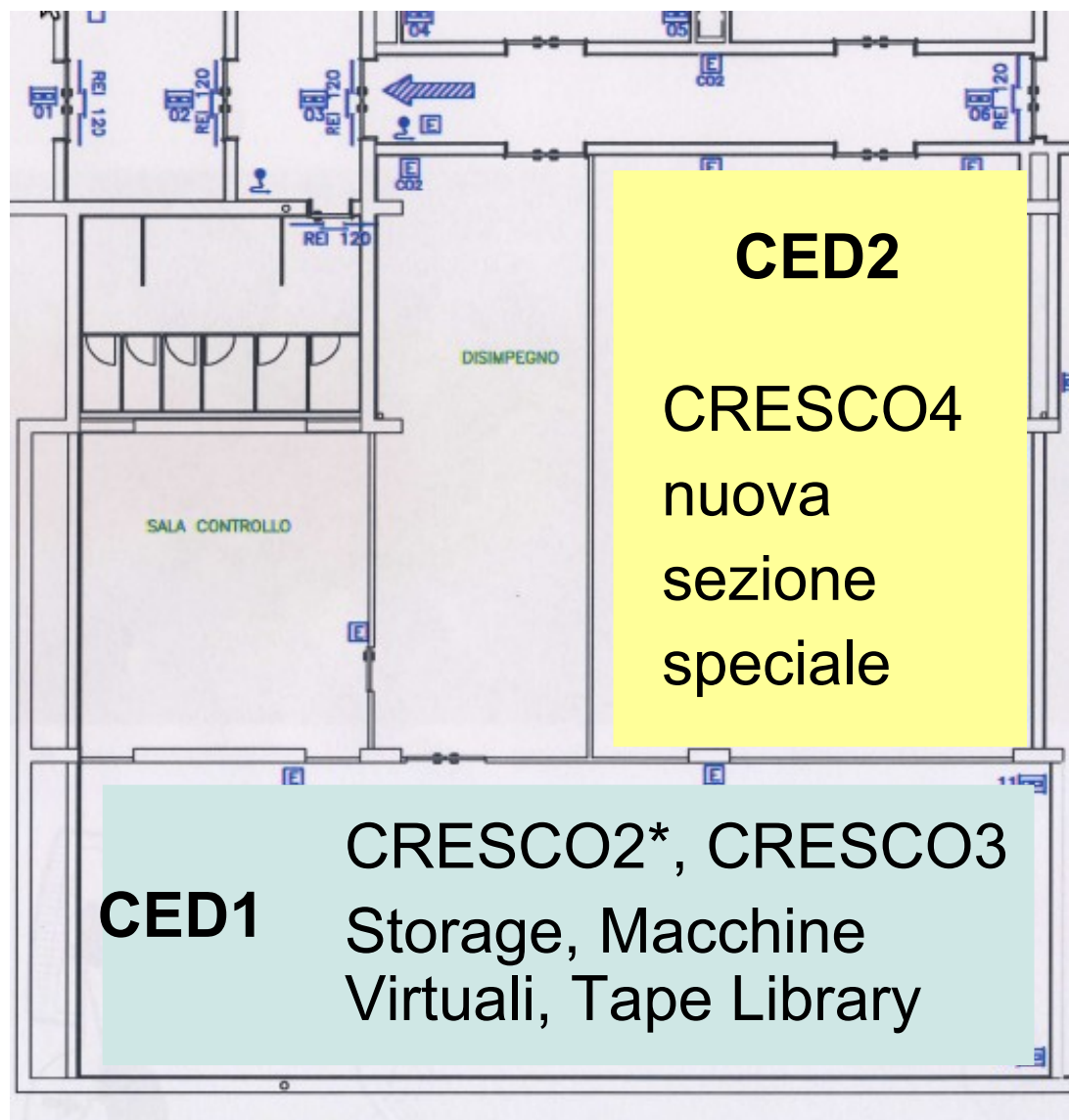


Organization	WCT (years)	Percentage (%) of total WCT	Number of users
UniRoma1	491.01	55.94	6
UniSa	220.21	25.09	8
UniCam	50.25	5.72	1
UniRoma2	27.34	3.11	1
INFN/NA	14.00	1.59	1
UniZhejiang	13.46	1.53	1
UniRJCMadrid/ES	13.18	1.50	2
UniFi	12.58	1.43	4
INFN/GE	12.04	1.37	1
Avio	9.21	1.05	1
Ylichron	4.47	0.51	1
UniNa	3.46	0.39	3
VincalInstitute	2.51	0.29	1
IMAST	2.32	0.26	1
Total	876.04	99.78	32
	1.73	0.22	7
Total	877.77	100	39

Cluster CRESCO a Portici

I cluster CRESCO a Portici

- **CRESCO2**, 84 nodi, 672 cores Intel Nehalem, Westmere 16GB
- **CRESCO3**, 84 nodi 2016 cores AMD Interlagos, 64 GB RAM
- **CRESCO4**, 304 nodi, 4864 cores Intel SandyBridge, 64 GB RAM
- **La novità:**
 - 5 nodi a grande memoria 768 GB RAM
 - 4 nodi con coprocessori Intel PHI e Nvidia K40
 - Storage DDN SFA7700
 - TapeLibrary estesa a ~2 PB
- **Le dismissioni:**
 - CRESCO1 CRESCO2 256 nodi Clovertown, DDN 9550



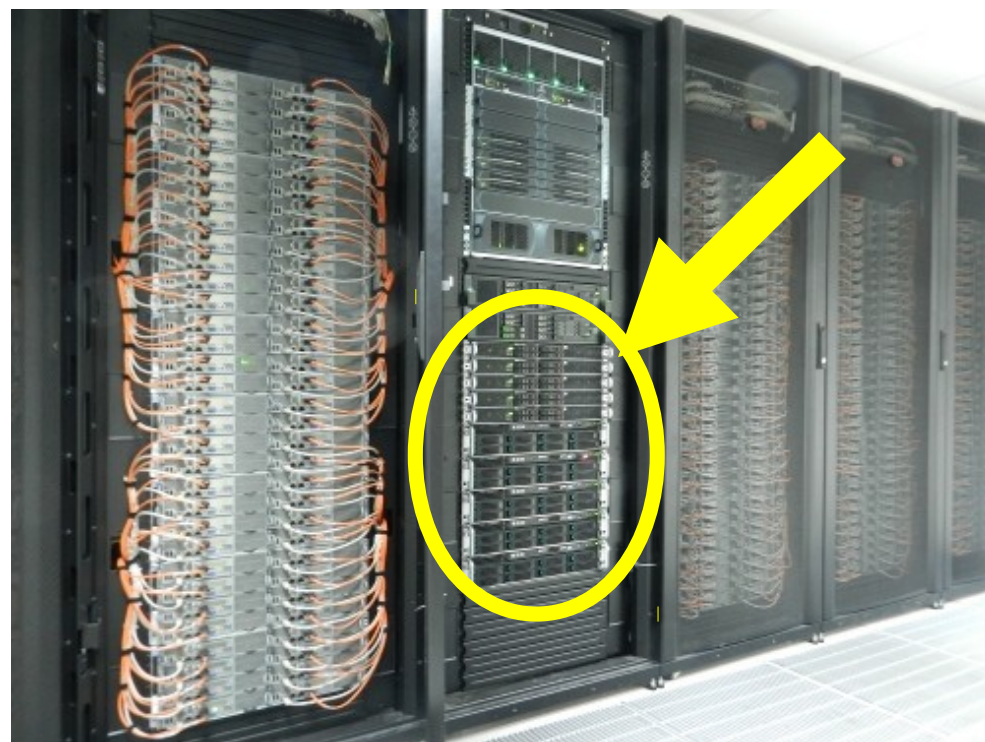
Il nuovo arrivo : la sezione speciale

5 nodi a grande RAM

- **768 GB**, dual E5-2643v2, **3.5 GHz**, 6 cores IvyBridge
- 4 dei nodi con PHI 3120P (57 cores, 1 TFlop, 6 GB, 300W)

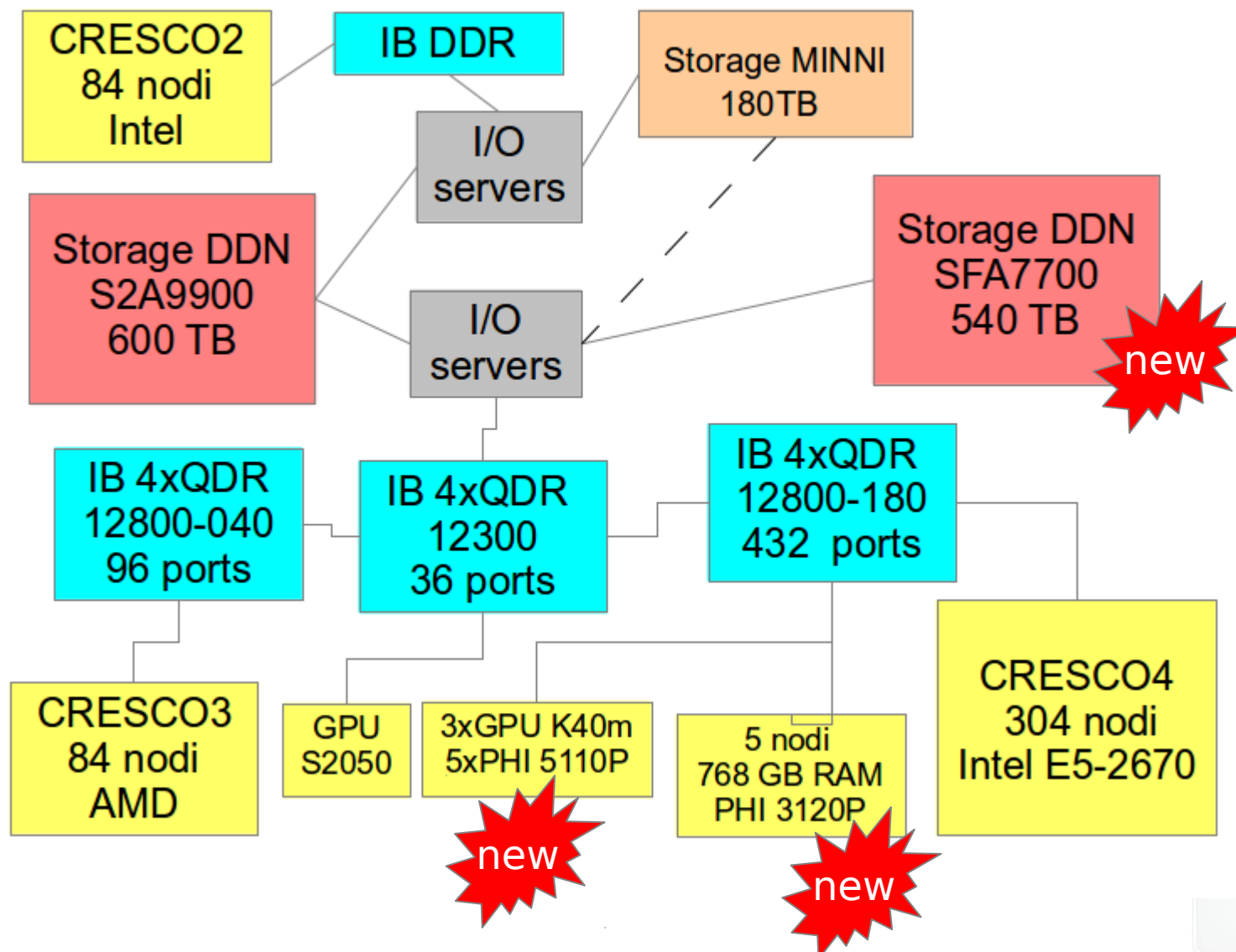
4 nodi Intel PHI & Nvidia K40M

- 64 GB, dual E5-2680v2, 2.8 GHz
- 5 schede PHI 5110P (60 cores, 1 TFlop, 8GB, 225W)
- 3 schede Nvidia K40M (1.43 TFlops(D), 2880 cuda cores, 12 GB)
 - 2 nodi dual PHI
 - 1 nodo dual K40M
 - 1 nodo K40M+PHI

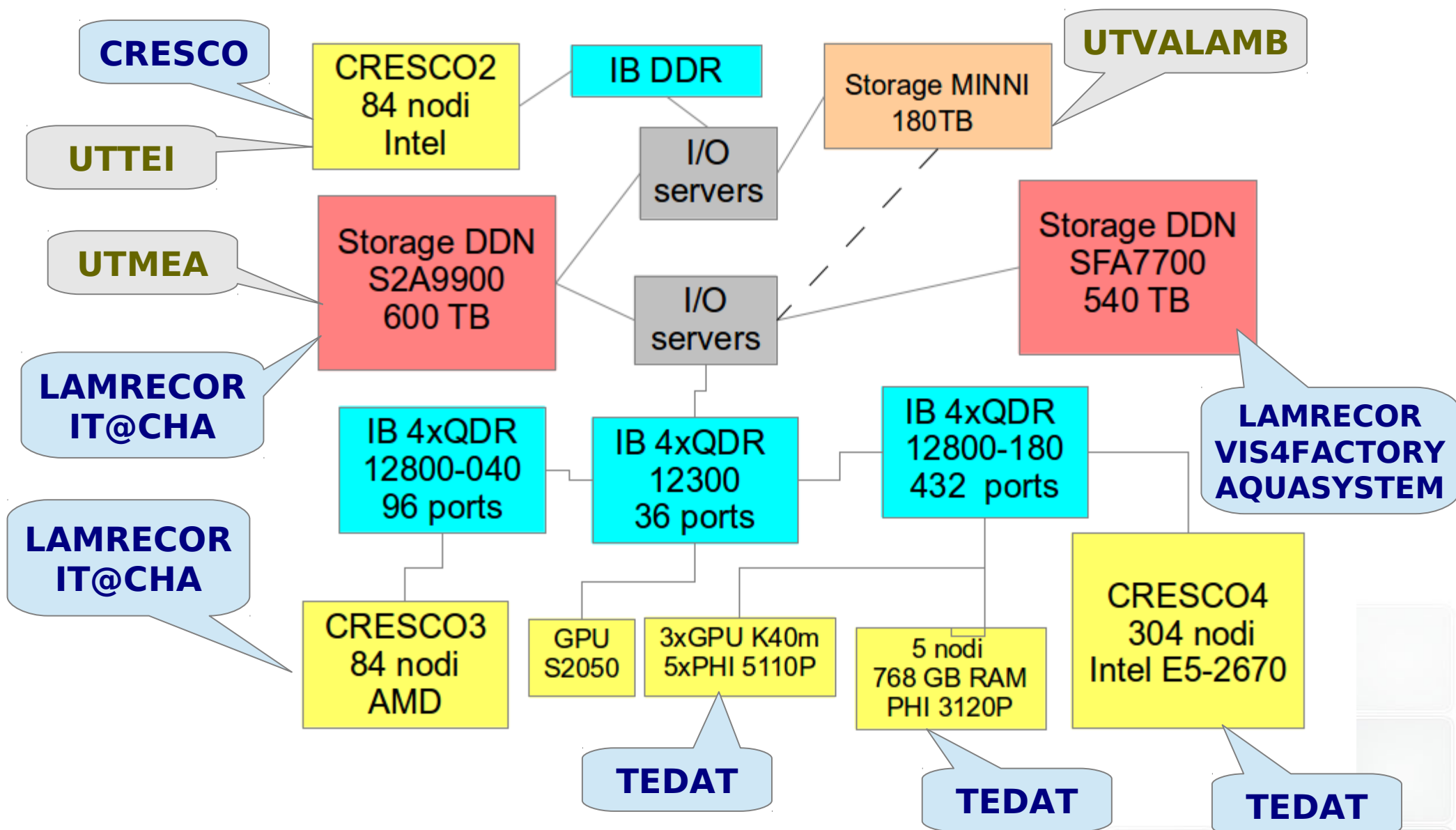


Potenza di picco: 16.4 Tflops (di cui 13.2 Tflops negli acceleratori)

Cluster CRESCO, rete IB, Storage (1)



Cluster CRESCO, rete IB e Storage (2)



Le risorse : i progetti

TEDAT (*materiali e settore dei trasporti*)

IT@CHA (*beni culturali*)

LAMRECOR (*logistica avanzata con Poste*)

VIS4Factory (*tecnologie visuali nei processi di fabbrica*)

DIRECTFOOD (*logistica settore agroalimentare*)

AQUASYSTEM (*gestione risorse idriche*)

SIMONA (*gestione acque reflue*)

- **EDOC@WORK3.0** (*nuove tecnologie per la didattica, HP*)

- CRESCOEDU
- riorganizzazione del cluster di Brindisi con macchine virtualizzate anche per applicazioni HPC
- Reingegnerizzazione middleware ENEAGRID

- **DC4CITIES**: gestione ecosostenibile dei data center

14:10

Le conclusioni



- Le risorse ICT & HPC di ENEA, significative a livello nazionale, sono a disposizione per le attività dell'Agenzia
- Il salto di qualità avvenuto con CRESCO nel 2008 è stato consolidato:
 - con la formazione di un nucleo stabile di giovani esperti di HPC, non solo dei sistemi ma anche delle applicazioni
 - con l'aggiornamento costante dei sistemi hardware (il mondo HPC: raddoppio delle prestazioni ogni 18 mesi!)
- La **collaborazione con l'utenza** è essenziale per **ottimizzare** l'utilizzo delle risorse, per **orientare le scelte** tecnologiche e per promuovere lo **sviluppo delle competenze** (sia dell'utenza che degli esperti HPC! -> es. Proposta Progetto H2020 **EoCoE**)
- L'estensione della mutua collaborazione anche alla fase di **reperimento delle risorse** è sempre più necessaria!

Slides di supporto

I cluster CRESCO pre 2013



I cluster CRESCO x86_64 in produzione realizzati nell'ambito di PON 2000-2006 (Portici, Brindisi) o con risorse interne negli anni 2011-2012 (Casaccia, Frascati)

> **Portici** CRESCO1 (672 cores) CRESCO2 (2720 cores)

IB CISCO 70xx, DDR Intel Clovertown, Tigerton, Nehalem, Westmere

> **Casaccia** CRESCOC (192 cores, twin 1U)

IB Qlogic Silverstorm DDR, AMD 2427 Istanbul

> **Frascati** CRESCOF (480 cores twin square 2U, GPFS)

IB Qlogic 12300 QDR, AMD 6172 Magnycours

> **Brindisi** CRESCOB (80 cores, 4 U, GPFS)

GEthernet, Intel Tigerton

Attualmente i nodi di CRESCO1 e CRESCO2 sono parte in dismissione e riuso per i servizi ICT di base

CRESCO4 : in produzione dal 20/1/2014



Utenza CRESCO4: le applicazioni di area TEDAT (scienza dei materiali/CFD) e progetti numerici concordati con alcune unità ENEA: **UTTEI, UTMEA, UTFUS, METR, UTVALAMB**

CRESCO3 : in produzione estate 2013

Dai progetti LAMRECOR e IT@CHA:

84 nodi dual
CPU AMD
Interlagos 6234
2.4 GHz
64 GB RAM
24 cores
Totale:
2016 cores
20 TFlops
Storage:
DDN S2A9900
600 TB



Le risorse del progetto TEDAT sono le più rilevanti e hanno permesso di acquisire il cluster CRESCO4, 100 Tflops

- 5 Rack di nodi di calcolo per un totale di 304 nodi (4864 cores Intel) 1 rack di servizio per switch IB
- Processore Intel E5-2670, 2.6 GHz, 8 cores
- 64 GB RAM/nodo 4 GB RAM/Core
- Nodi di tipo Fat Twin (Chassis 4U con 8 nodi)
- Storage: DDN S2A9900 ~600 TB condiviso con CRESCO3
- Infiniband QDR QLogic/Intel 12800-180 (432 porte)
- Nuova sala CED; UPS, nuove batterie
- Sistema di condizionamento con free-cooling
- ~100KW potenza elettrica assorbita a pieno carico (HPL)

CED CRESCO : CRESCO3, Storage, Backup



CRESCO4 collaudato ottobre 2013

