



CSCS

Centro Svizzero di Calcolo Scientifico
Swiss National Supercomputing Centre

ETH

Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
Swiss Federal Institute of Technology Zurich

FACT SHEET

HP2C – un’iniziativa che mira a una maggiore efficienza nel supercalcolo

Le simulazioni basate su modelli matematici costituiscono una parte essenziale della metodica scientifica. A fronte di una crescente complessità dei modelli è quindi necessario migliorare gli algoritmi e potenziare i supercomputer. La Svizzera si è prefissa di affrontare il problema del software.

La ricerca di punta necessita di supercomputer come quelli che il Centro Svizzero di Calcolo Scientifico (CSCS) con sede a Lugano mette a disposizione dei ricercatori elvetici. A causa del continuo aumento della complessità dei modelli, il calcolo ad alta potenza è divenuto uno strumento chiave della ricerca moderna. Le simulazioni per risolvere quesiti scientifici sono pertanto diventate, accanto ad esperimento e teoria, parte integrante del metodo scientifico. Le simulazioni che oggi vengono eseguite sfruttando supercomputer massivamente paralleli consentono di acquisire conoscenze scientifiche del tutto nuove e stimolano la creatività degli ingegneri. Inoltre rendono visibile ciò che rimane celato all'occhio umano, nonostante l'uso di microscopi e telescopi ad alta risoluzione. Le simulazioni aiutano, per esempio, a scoprire materiali sconosciuti con caratteristiche e funzionalità completamente nuove.

Potenze sempre più elevate

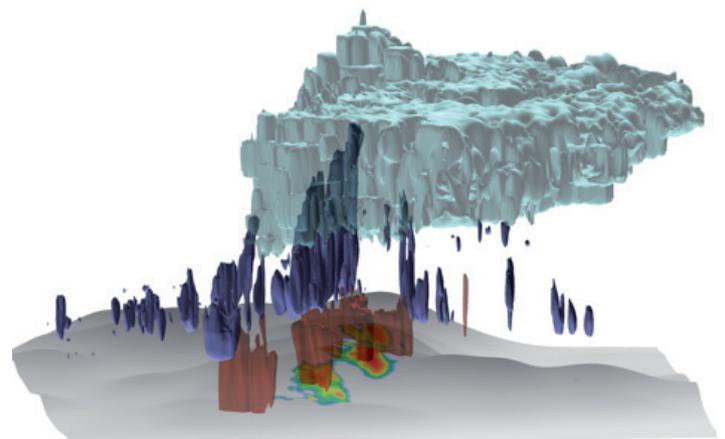
Vent'anni fa i supercomputer raggiungevano la potenza che oggi troviamo nei notebook: nella cosiddetta classe di potenza gigaflops, un calcolatore ad alta potenza svolgeva, all'epoca, pochi miliardi di operazioni di calcolo al secondo. Gli odierni supercomputer della classe di potenza petaflops svolgono diversi miliardi, ovvero diversi milioni moltiplicati per un miliardo, di operazioni di calcolo al secondo. Siccome le normali tecnologie basate sul chip hanno raggiunto il limite delle attuali capacità, i calcolatori della classe di potenza petaflops devono contenere da diverse migliaia fino a decine di migliaia di processori interconnessi, con un conseguente massiccio aumento del consumo energetico. I supercomputer più potenti al mondo consumano all'incirca 10 megawatt di corrente elettrica. Un centro di calcolo spende per un megawatt ben 1.5 milioni di franchi svizzeri all'anno.

Gli esperti sono pertanto concordi sulla necessità di sfruttare meglio i supercomputer. Concretamente ciò significa che bisogna rivedere i programmi applicativi per calcolatori massivamente paralleli. Nel 2009 Thomas Schulthess, direttore del CSCS, insieme a Piero Martinoli, presidente dell'Università della

Svizzera italiana, ha lanciato nell'ambito della strategia nazionale High Performance Computing and Networking (strategia HPCN) decisa dalla Confederazione, l'iniziativa «High Performance and High Productivity Computing» (HP2C). All'interno di essa gli sviluppatori di software applicativi per simulazioni scientifiche in diverse discipline collaborano in maniera interdisciplinare con esperti di matematica pura, matematica applicata e di informatica.

Migliorare algoritmi e software

Al progetto HP2C partecipano complessivamente 13 gruppi di ricerca nei campi della chimica, delle scienze dei materiali, della fisica, dell'astrofisica, della medicina, dell'antropologia, delle scienze climatiche e della terra. Questi gruppi di ricerca lavorano tutti con modelli aventi un diverso grado di comples-



I modelli «Cloud-resolving» così come sono utilizzati dal gruppo di ricerca sul clima dell'ETH Zurigo calcolano su una griglia orizzontale le cui maglie sono ad una distanza di circa un chilometro e permettono la simulazione piuttosto dettagliata delle nuvole dei temporali estivi, come mostrato qui. In blu scuro sono rappresentate le nuvole costituite da gocce d'acqua, mentre in rosso sono quelle costituite da cristalli di ghiaccio. I colori dell'arcobaleno indicano la risultante intensità delle precipitazioni (rosso=elevata, blu=bassa). (Immagine: Wolfgang Langhans, ETH Zurigo).



CSCS

Centro Svizzero di Calcolo Scientifico
Swiss National Supercomputing Centre

sità e condividono lo stesso problema incontrato in molte delle scienze computazionali, vale a dire i loro codici usati finora sull'hardware dei calcolatori massivamente paralleli con il loro numero di processori in costante aumento non sono più efficienti, o per usare un termine del gergo tecnico non «scalano» più. L'obiettivo è che i software applicativi utilizzati nelle simulazioni computazionali sfruttino appieno le potenzialità di calcolo delle moderne architetture dei computer. A tale riguardo, in ambito HP2C, i metodi di calcolo vengono adattati in modo tale da sfruttare ottimamente l'hardware dei processori. Inoltre, i programmi di simulazione sono strutturati in maniera tale che i movimenti dei dati sul processore, tra il processore e la memoria principale nonché tra i processori del supercomputer massivamente parallelo vengano ridotti al minimo.

Test di nuovi software e hardware

I codici per i diversi problemi scientifici vanno modificati singolarmente: al fine di testarli su hardware di ultima generazione, nell'ottobre del 2011 al CSCS è stato installato il supercomputer «Tödi», un Cray XK6. «Tödi» si basa su una tecnologia che consente il cosiddetto calcolo ibrido massivamente parallelo, in cui si utilizzano processori sia tradizionali che grafici. Gli esperti lo considerano un approccio molto promettente per le tecnologie future nel supercomputing. Rispetto ai normali processori per computer, sui processori grafici vengono effettuate parallelamente centinaia fino a migliaia di operazioni di calcolo, consentendo ai ricercatori di trovare più rapidamente le risposte ai loro quesiti.

Laurent Villard, promotore principale del progetto HP2C «Gyrokinetic», parla dell'iniziativa HP2C:



Laurent Villard, Professore di Fisica del Plasma all' EPF Losanna.

Perché si è candidato per un progetto HP2C?

Laurent Villard: La simulazione di turbolenze del plasma in un campo magnetico rappresenta una grande sfida poiché comprende differenti parametri temporali e di scala di lunghezza. È pertanto essenziale che i nostri codici vengano rielaborati e, se necessario, riscritti interamente, per poter sfruttare appieno le possibilità dei più evoluti sistemi HPC. Lo sviluppo dei nostri codici deve

avvenire in una prospettiva a lungo termine: si prendono in considerazione un numero sempre maggiore di effetti fisici, i quali richiedono, a loro volta, risorse computazionali in costante aumento. Per tale ragione è fondamentale tenere il passo con gli sviluppi più recenti e monitorare gli aspetti dell'HPC con uno sguardo al futuro.

In quali ambiti dell'HP2C lei e il suo team traete i maggiori vantaggi?

La cosa bella dell'iniziativa HP2C è che investe finanziariamente in enti di ricerca, i quali portano avanti speciali applicazioni scientifiche e, allo stesso tempo, ci mette in contatto con un team di esperti di spicco del CSCS. Grazie all'HP2C abbiamo aumentato la scalabilità dei nostri codici su calcolatori paralleli. Nei casi di applicazioni più impegnative con diversi miliardi di punti di calcolo, la potenza è stata più che raddoppiata. Inoltre, l'HP2C ci ha spinto a percorrere nuove vie per lo sviluppo futuro di codici. Un «effetto secondario» dell'HP2C da tenere in debita considerazione è stato il fatto che, dall'inizio del 2012, siamo riusciti ad ottenere l'accesso a un supercomputer della classe petaflops in Giappone.

Come completerebbe la seguente frase: HP2C è per la Svizzera...

... un'opportunità unica, ben studiata e ben gestita per condurci e mantenerci ai vertici delle scienze in quei numerosi settori che richiedono potenze di calcolo sempre maggiori.

Uno sguardo su alcuni progetti

I seguenti esempi mostrano gli effetti diretti del successo dei progetti HP2C sulla nostra quotidianità:

Accelerare la ricerca sui terremoti

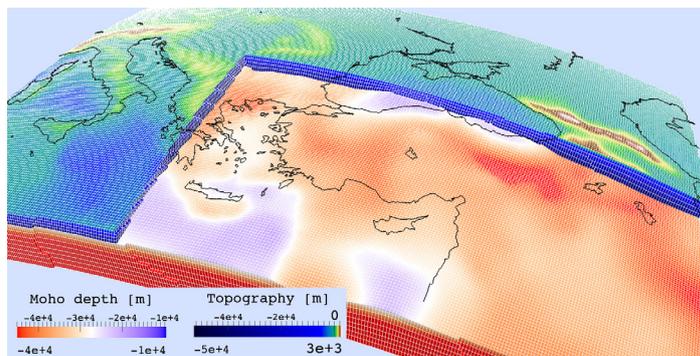
Lo scopo del progetto «Petaquake» è quello di chiarire quesiti centrali nelle scienze della Terra, per esempio capire in dettaglio la struttura interna della terra, quali processi avvengono al suo interno e come hanno origine precisamente i terremoti. Uno sguardo all'interno della terra, analogo a quello eseguito attraverso la tomografia computerizzata sull'uomo, potrebbe fornire le risposte. I codici e gli algoritmi sviluppati nel progetto devono poter permettere di calcolare immagini tomografiche ad alta risoluzione di processi in corso all'interno della terra nella fascia dei dieci chilometri. Queste immagini possono essere utili per ridurre le incertezze esistenti nella valutazione dei pericoli e per migliorare le mappe delle zone a rischio. «Petaquake» riveste un'utilità pratica diretta per aree a rischio sismico come la Svizzera e l'Europa.

PETAQUAKE – Large-Scale Parallel Nonlinear Optimization for High Resolution 3D-Seismic Imaging; Olaf Schenk, professore presso l'Università della Svizzera italiana

Risolvere problemi energetici con i supercomputer

Le simulazioni possono fornire validi contributi allo studio di farmaci o di fonti energetiche alternative, combustibili o celle solari innovativi. Speciali codici di calcolo permettono di simulare nuovi materiali e le corrispondenti proprietà molecolari altamente complesse. Uno dei codici più importanti per simulazioni di questo tipo è rappresentato da CP2K (progetto «Car-Parri-nello 2000»). Con CP2K possono essere simulati grandi e complessi sistemi chimici come per esempio le superfici interfacciali dove avvengono le transizioni di materiali dallo stato solido a liquido oppure da liquido a gassoso. Le celle solari, come le celle di Grätzel, sono un tipico esempio di una simile interfaccia: un corpo solido e un solvente separati da un colorante. Questa cella solare elettrochimica a colorante funziona secondo un principio simile a quello della fotosintesi e raggiunge attualmente un grado di rendimento del 12.3 %. Per riuscire a costruire celle più efficienti, i ricercatori hanno bisogno di conoscerne il funzionamento nel modo più preciso possibile, perciò usano le simulazioni. Quanto meglio si comprende il funzionamento delle celle solari attraverso le simulazioni, tanto più efficienti si rendono i relativi esperimenti in laboratorio e, di conseguenza, maggiore è la possibilità di aumentare il grado di rendimento delle celle. CP2K impiega numerosi algoritmi e possiede complesse strutture numeriche che in ambito HP2C bisogna riprodurre sulle nuove architetture dei calcolatori.

CP2K – New Frontiers in Ab Initio Molecular Dynamics; Jürg Hutter, professore presso l'Università di Zurigo



Un modello realistico della propagazione delle onde sismiche in Europa. La griglia è costituita da 2 miliardi di punti, dalla superficie topografica e dalla struttura tridimensionale dell'interno della Terra. Il modello è stato sviluppato dai sismologi dell'ETH Zurigo sui supercomputers del CSCS per simulare possibili scenari di terremoti. La rappresentazione realistica delle strutture che caratterizzano l'interno della Terra è di fondamentale importanza per quantificare i rischi di terremoti, come per esempio nell'area di Istanbul in Turchia. I modelli possono addirittura essere utilizzati per valutare la solidità delle strutture di costruzioni locali critiche. (Immagine: Rietmann et al., *Supercomputing 2012*, accettato)

Simulazioni basate su agenti – imparare a comprendere i comportamenti

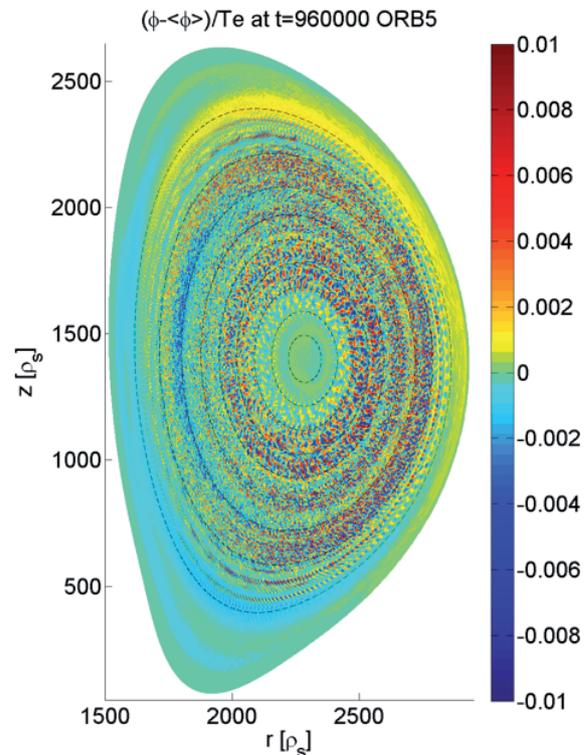
Dai 20 000 fino ai 200 000 anni prima della nostra era sulla terra vivevano contemporaneamente almeno due specie di ominidi: l'uomo di Neanderthal e l'uomo moderno. Mentre l'uomo moderno in Africa e l'uomo di Neanderthal in Europa vissero sulla terra separati gli uni dagli altri, nel Vicino Oriente l'Homo sapiens e l'Homo neanderthalensis coabitavano per circa 100 000 anni. Rimane tuttavia ancora da spiegare l'improvvisa estinzione dell'uomo di Neanderthal avvenuta oltre 20 000 anni fa. Attraverso un cosiddetto modello basato su agenti, i ricercatori intendono ripercorrere diversi scenari comportamentali tra l'uomo di Neanderthal e l'essere umano considerando la fauna, le condizioni climatiche, la topografia e la vegetazione, al fine di studiare con maggiore precisione le possibili cause dell'estinzione dell'uomo di Neanderthal. Questa è una complessa tecnica di modellazione nella quale ogni individuo, dotato di caratteristiche specifiche, viene rappresentato come soggetto singolo. Modelli di questo genere acquisiscono un'importanza sempre maggiore per simulare per esempio il comportamento degli esseri umani in situazioni come un panico di massa.

NEANDERTHAL EXTINCTION – Individual-Based Modeling of Humans Under Climate Stress; Christoph P. E. Zollikofer, professore presso l'Università di Zurigo

**CSCS**Centro Svizzero di Calcolo Scientifico
Swiss National Supercomputing CentreEidgenössische Technische Hochschule Zürich
Swiss Federal Institute of Technology Zurich**Energia elettrica ricavata dalla fusione nucleare**

Attraverso il progetto HP2C «Gyrokinetic», i fisici del plasma del Politecnico federale di Losanna mirano allo sviluppo di nuovi codici numerici per la simulazione di turbolenze nei plasmi all'interno di campi magnetici, fornendo un importante contributo all'ITER, il più vasto progetto internazionale nel campo della ricerca sulla fusione termonucleare. Con ITER (che in latino significa «via, percorso») si vuole dimostrare che la produzione di energia attraverso la fusione nucleare di deuterio e trizio è realizzabile sia dal punto di vista fisico che tecnologico. ITER si basa sul principio del Tokamak e confina il plasma di fusione caldo in campi magnetici creati da bobine superconduttive. È importante riuscire a controllare la turbolenza del plasma poiché è responsabile di un elevato trasporto termico e pregiudica quindi il tempo di confinamento dell'energia nel reattore. I lavori di Laurent Villard e del suo team in ambito HP2C riscontrano grande interesse a livello internazionale. Ciò viene, tra l'altro, dimostrato dal fatto che per lo studio della fusione è stato messo a disposizione degli scienziati un quarto di tutte le risorse di calcolo disponibili su un supercomputer da 1,5 petaflops in Giappone, per poter testare i nuovi codici da loro creati.

GYROKINETIC – Advanced Gyrokinetic Numerical Simulations of Turbulence in Fusion Plasmas; Laurent Villard, professore presso l'EPF Losanna



L'immagine mostra le fluttuazioni della densità del plasma turbolento in un reattore ITER. La simulazione è stata possibile grazie al codice ORB5 e al calcolatore IFERC-CSC-HELIOS (1.5 PetaFlops), utilizzando una griglia costituita da 1 miliardo di punti e 2 miliardi di particelle numeriche. «Il nostro progetto HP2C è stato un grande successo» dice Laurent Villard. «La performance e la scalabilità del codice ORB5 sono migliorate enormemente permettendoci di fare simulazioni di turbolenze su ampia scala che prima erano praticamente impossibili da realizzare. Il nuovo codice ha inoltre reso possibile l'accesso a supercomputers di classe petaflops» (Immagine: Gruppo Gyrocinetico di Laurent Villard, EPF Losanna)

HP2C High Performance and High Productivity Computing

Nel 2008, Thomas Schulthess ha messo a punto un progetto per la Conferenza dei Rettori delle Università Svizzere (CRUS). Obiettivo del progetto era quello di rafforzare la collaborazione tra CSCS e USI, e affrontare in maniera strutturata i problemi di base nel supercomputing. L'entità del progetto HP2C era originariamente più limitata contando su circa 4 milioni di franchi sviz-

zeri. La CRUS spinse invece affinché la piattaforma venisse ampliata a livello nazionale assicurando ca. l'80% del finanziamento pari a 14.5 milioni di franchi svizzeri. HP2C costituisce un elemento centrale della strategia nazionale per il supercomputing promossa nel 2009 dalla Confederazione.

www.hp2c.ch