

# ISTITUTO NAZIONALE DI FISICA NUCLEARE

## CONSIGLIO DIRETTIVO

### DELIBERAZIONE N. 12439

Il Consiglio Direttivo dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, riunito in Roma in data 26 luglio 2012 alla presenza di n. 33 dei suoi componenti su un totale di n. 34;

- premesso che, in base all'art. 2 del proprio Statuto, l'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, promuove, coordina ed effettua la ricerca scientifica nel campo della fisica nucleare, subnucleare, astroparticellare e delle interazioni fondamentali, nonché la ricerca e lo sviluppo tecnologico pertinenti all'attività in tali settori, avvalendosi in via prioritaria della collaborazione delle Università regolata con apposite convenzioni;
- premesso che, nel perseguimento della propria missione, l'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare promuove e partecipa a collaborazioni, stipula convenzioni in materia di studio, ricerca e servizi, favorisce l'innovazione promuovendo il trasferimento al mondo produttivo e alla società delle conoscenze e delle tecnologie acquisite, promuove e provvede alla formazione scientifica e alla diffusione della cultura nei settori istituzionali;
- premesso che il CINECA è un Consorzio interuniversitario senza scopo di lucro vigilato dal MIUR che, in particolare, offre supporto alle attività di ricerca della comunità scientifica tramite il supercalcolo e le sue applicazioni, grazie a un ambiente di calcolo al massimo livello delle architetture e delle tecnologie disponibili;
- premesso che le Parti, in data 27 giugno 2012, hanno sottoscritto un Accordo Quadro di collaborazione per lo svolgimento di attività di ricerca e sviluppo nel settore del calcolo scientifico ad alte prestazioni (HPC) in ambito di Fisica delle Alte Energie, Fisica Astroparticellare, Fisica Nucleare;
- visto l'articolo 3 del suddetto Accordo secondo cui "La collaborazione tra le Parti negli ambiti citati nel precedente articolo potrà costituire oggetto di specifici Accordi Attuativi, approvati dai rispettivi organi di governo, nei quali saranno indicati l'oggetto della collaborazione, le risorse rese disponibili, i referenti delle Parti e le Strutture della Parti coinvolte.";
- visto l'articolo 4 del citato Accordo che prevede la costituzione di un apposito comitato paritetico con il compito, in particolare, di formulare proposte di attività in comune da recepire negli Accordi attuativi di cui al precedente articolo 3;

- vista la nota del Responsabile INFN del suddetto Comitato dell'11 luglio 2012 e relativa allo svolgimento in comune di una attività di ricerca e sviluppo nel settore delle simulazioni numeriche e sviluppo di algoritmi e applicazioni di fisica teorica;
- premesso che l'onere finanziario derivante all'Istituto dalla bozza di Accordo Attuativo di cui alla presente deliberazione trova copertura con le assegnazioni per il funzionamento attribuite alle Strutture coinvolte negli esercizi interessati;
- su proposta della Giunta Esecutiva;
- con n. 33 voti favorevoli;

#### DELIBERA

Di approvare lo schema di “Accordo Attuativo tra l'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare e il CINECA per lo svolgimento di attività di ricerca e sviluppo nel settore delle simulazioni numeriche e sviluppo di algoritmi e applicazioni di fisica teorica”, allegato e che fa parte integrante della presente deliberazione. Il Presidente o persona da lui delegata, è autorizzato a negoziarlo e firmarlo.

ACCORDO ATTUATIVO TRA L'ISTITUTO NAZIONALE DI FISICA NUCLEARE E IL CINECA PER LO SVOLGIMENTO DI ATTIVITA' DI RICERCA E SVILUPPO NEL SETTORE DELLE SIMULAZIONI NUMERICHE E SVILUPPO DI ALGORITMI E APPLICAZIONI DI FISICA TEORICA

L'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (di seguito INFN), con sede in Frascati, Via Enrico Fermi n. 40, in persona del suo Presidente ..... a ciò autorizzato con deliberazione del Consiglio Direttivo n. .... del .....

E

Il CINECA – Consorzio Interuniversitario – Via Magnanelli 6/3, 40033, Casalecchi di Reno (Bologna), Codice Fiscale 00317740371, Partita IVA 00502591209, in persona del suo Presidente, prof. Emilio Ferrari

PREMESSO CHE

- l'INFN, in base al proprio Statuto, promuove, coordina ed effettua la ricerca scientifica nel campo della fisica nucleare, subnucleare, astroparticellare e delle interazioni fondamentali, nonché la ricerca e lo sviluppo tecnologico pertinenti all'attività in tali settori e nello svolgimento delle sue attività ha sviluppato e dispone di conoscenze, competenze, mezzi strumentali e infrastrutture digitali nel settore del supercalcolo;
- il CINECA ha come missione statutaria la promozione dell'utilizzo dei più avanzati sistemi di calcolo scientifico ad alte prestazioni a beneficio del sistema pubblico e privato della ricerca, anche applicata, nonché di favorire il trasferimento tecnologico verso il sistema nazionale delle industrie e delle imprese;
- l'INFN e il CINECA in data 27 giugno 2012 hanno stipulato un Accordo Quadro di collaborazione per lo svolgimento in comune di attività di ricerca e sviluppo nel settore del calcolo scientifico ad alte prestazioni (HPC) in ambito di Fisica delle Alte Energie, Fisica Astroparticellare, Fisica Nucleare;
- l'articolo 3 del suddetto Accordo Quadro prevede che la collaborazione tra le Parti potrà costituire oggetto di specifici Accordi Attuativi approvati dai rispettivi Organi di governo nei quali saranno indicati l'oggetto della collaborazione, le risorse rese disponibili, i referenti delle Parti e le Strutture delle Parti coinvolte;
- in successivi contatti i rappresentanti nominati dalle Parti per il coordinamento delle attività da svolgersi nell'ambito del citato Accordo Quadro hanno definito una proposta di attività di ricerca e sviluppo nel settore delle Simulazioni numeriche e sviluppo di algoritmi e applicazioni di fisica teorica;

CONVENGONO E STIPULANO QUANTO SEGUE

#### Art.1

Le premesse costituiscono parte integrante e sostanziale del presente Accordo.

#### Art.2

Con il presente Accordo l'INFN e il CINECA concordano di cooperare congiuntamente per lo svolgimento di attività di R&D nel settore dell'elaborazione di simulazioni numeriche e lo sviluppo di algoritmi e applicazioni nell'ambito del dominio della fisica teorica, secondo quanto più precisamente definito nell'Allegato Tecnico (All. 1) al presente Accordo di cui costituisce parte integrante e sostanziale.

#### Art. 3

L'esecuzione del Presente Accordo è affidata, per quanto riguarda l'INFN, al Prof. R. Tripiccione e, per quanto riguarda il CINECA al Dott. S. Bassini

#### Art. 4

Le attività di cui al presente Accordo Attuativo si svolgeranno presso le Sezioni di Bari, Ferrara, Milano (incluso il gruppo collegato di Parma), Pisa, Roma II, Roma III dell'INFN, il Centro Nazionale CNAF dell'INFN e presso il Dipartimento di Supercalcolo, Applicazioni e Innovazione del CINECA.

#### Art. 5

L'INFN si impegna a:

- a) sviluppare e mantenere presso il CINECA un sistema di simulazioni numeriche nell'ambito delle discipline della fisica teorica della particelle elementari, della fisica astroparticellare e della fisica dei sistemi complessi;
- b) collaborare col personale tecnico scientifico del CINECA alla sperimentazione preliminare del sistema Blue Gene /Q;
- c) collaborare col personale tecnico scientifico del CINECA alla realizzazione di un exascale computing lab nazionale;
- d) svolgere attività di sperimentazione, valutazione e sviluppo di piattaforme prototipali per il supercalcolo scientifico;
- e) collaborare con il personale tecnico scientifico del CINECA per l'implementazione dell'infrastruttura e delle procedure che permettano il trasferimento, con adeguate prestazioni, dei dati prodotti al CINECA verso il CNAF.

Il CINECA si impegna a:

- a) garantire a INFN l'utilizzo di 100 Milioni di core hours all'anno di calcolo sul sistema Blue Gene /Q;
- b) garantire l'accesso ai sistemi prototipali per il supercalcolo che saranno via via resi disponibili dal CINECA per attività di sperimentazione e sviluppo;
- c) assistere il personale tecnico scientifico dell'INFN nell'ottimizzazione dell'utilizzo delle risorse di calcolo rese disponibili;
- d) fornire l'utilizzo dei sistemi periferici, adeguate risorse di mass storage, e di archiviazione dati;
- e) collaborare con il personale tecnico scientifico del CNAF per l'implementazione dell'infrastruttura e delle procedure che permettano il trasferimento, con adeguate prestazioni, dei dati prodotti al CINECA verso il CNAF;
- f) ospitare, negli appartamenti situati a Casalecchio di Reno (BO) adibiti ad uso foresteria, nei limiti della disponibilità e previa opportuna programmazione, ricercatori INFN coinvolti nella attività relativa al presente Accordo Attuativo.

La quantità annua di core/hours di cui alla precedente lettera a) potrà essere rivista d'intesa tra le parti, qualora intervengano esigenze sovraordinate determinate dagli obblighi istituzionali del CINECA relativi al ruolo di Centro Nazionale di Supercalcolo e di PRACE tier0 Hosting Member in base a specifica delega Ministeriale.

#### Art. 6

Ciascuna Parte sostiene la parte di spese relativa al proprio personale utilizzato nelle attività di cui al presente Accordo nonché a quelle relative alle attrezzature di cui è proprietaria. Le Parti prendono atto che qualsiasi altro impegno non esplicitamente previsto dal presente Accordo sarà oggetto di eventuali ulteriori accordi tra le Parti.

#### Art. 7

Per quanto non espressamente previsto nel presente Accordo Attuativo le Parti rinviano all'Accordo Quadro del 27 giugno 2012 indicato in premessa.

#### Art. 8

L'Accordo avrà la durata di 1 anno dalla data della stipula. Al termine di tale periodo, le Parti si impegnano, di comune accordo, a provvedere ad una valutazione dei risultati conseguiti e delle ulteriori attività realizzabili allo scopo di prorogare eventualmente la durata dell'Accordo per un ulteriore anno.

Le Parti, qualora i risultati dell'attività fossero tali da sconsigliarne il proseguimento, potranno, consensualmente, risolvere il presente Accordo.

#### Art. 9

Il presente Accordo è redatto in due originali, uno per Parte, e sarà soggetto a registrazione solo in caso d'uso a cura e spese della Parte interessata.

**Proposta di attività di collaborazione scientifica e tecnica comune tra INFN e CINECA  
nell'ambito dell' "Accordo quadro di collaborazione per lo svolgimento di attività di ricerca e  
sviluppo nel settore del calcolo scientifico ad alte prestazioni in ambito di fisica delle alte  
energie, astroparticellare e nucleare"**

### **Introduzione**

Questo documento costituisce una prima proposta di attività comune tra INFN e CINECA, da realizzarsi per un primo periodo di circa nove mesi con inizio dal 1 settembre 2012, da svolgersi nell'ambito dell'accordo quadro di collaborazione tra INFN e CINECA; le attività proposte valorizzano e rinforzano sinergicamente le competenze presenti nei due Enti e utilizzano in maniera estremamente efficiente le risorse di calcolo disponibili. Il programma qui proposto vuole utilizzare al meglio un certo numero di opportunità disponibili immediatamente, e costituisce una prima fase di un'attività comune più ampia e coordinata, che potrà essere anche inquadrata e supportata (per quanto riguarda l'INFN) nell'ambito del progetto Suma.

Le attività proposte si basano sulle seguenti premesse scientifiche e tecnologiche:

- l'INFN svolge da anni una significativa attività di fisica computazionale, relativa alla simulazione Monte Carlo di teorie di gauge sul reticolo e allo studio con tecniche numeriche di fluidi in regime turbolento e di sistemi in interazione gravitazionale; l'INFN ha anche in corso una significativa attività di sperimentazione per l'utilizzo di processori e di reti di comunicazione di nuova generazione per i problemi computazionali sopra descritti.
- Il CINECA sta avviando in produzione il supercalcolatore Fermi-Blue Gene/Q, con una potenza di calcolo di circa 2 PetaFlops. Il CINECA ha inoltre a sua disposizione alcuni nodi di calcolo sperimentali della famiglia Intel/MIC e prevede di installare entro la fine del corrente anno, un cluster di calcolo di nuova generazione (Eurora) basato appunto sui processori many-core MIC.

### **Consolidamento della produzione del supercomputer Fermi-BlueGene/Q.**

Un primo insieme di attività comuni riguarda un "early access" al sistema di calcolo Fermi installato presso il CINECA della comunità INFN di ambito teorie del reticolo e dei sistemi complessi. Tale attività si basa sul fatto che la comunità teorica dell'INFN ha una significativa esperienza nell'utilizzo dei sistemi BlueGene di generazione precedente e dispone di programmi di calcolo già ottimizzati per questa architettura. E' quindi possibile una messa in produzione immediata dei relativi programmi di calcolo, con gli ovvi benefici per l'INFN di una forte crescita della disponibilità di calcolo e per il CINECA di test significativi sull'utilizzo intensivo della nuova macchina, utili per migliorare la qualità complessiva del servizio di calcolo e per condividere esperienze relative alla ottimizzazione dei codici di produzione da trasferire rapidamente alle altre comunità scientifiche.

Questa attività potranno iniziare immediatamente, non appena, la macchina BG/Q sarà avviata in produzione (orientativamente, a fine luglio 2012) e potranno continuare speditamente con la stabilizzazione del funzionamento della macchina. Si stima che sia possibile ottenere un significativo risultato utilizzando risorse di calcolo dell'ordine di 100 Mcore-hours, da utilizzare cumulativamente dai vari gruppi INFN. E' già stato costituito un gruppo di lavoro congiunto tra rappresentanti delle iniziative specifiche INFN di gruppo IV che saranno direttamente coinvolte e i responsabili CINECA della gestione della macchina, per discutere e concordare le modalità operative di inizio lavori.

Si stima che questa azione di accesso collaborativo possa completarsi entro la fine di marzo 2013.

### **Attività di sperimentazione dei processori Intel MIC per la fisica computazionale.**

Un secondo insieme di attività comuni riguarda la sperimentazione dei processori multi-core Intel MIC. I processori MIC sono caratterizzati dalla presenza di un numero molto elevato di core di calcolo per socket (attualmente 32, molti di più nelle versioni successive); ogni core è a sua volta dotato di un data path SIMD ad alta molteplicità. Queste caratteristiche permettono di raggiungere potenze di picco estremamente elevate (dell'ordine del Tflops/core) ma implicano un accurato lavoro di adattamento e di ottimizzazione dei codici di calcolo, basato su una valutazione attenta degli strumenti software più adeguati da utilizzare. Un'attività preliminare comune è in atto già da alcuni mesi (nell'ambito del progetto COKA dell'INFN), limitata per il momento alla migrazione sui processori MIC di prima generazione di alcuni specifici kernel di calcolo.

E' opportuno quindi continuare tale attività, sviluppandola in due direzioni diverse, sia considerando l'utilizzo di processori MIC di seconda generazione (che saranno disponibili al CINECA dalla fine di luglio), sia prevedendo la migrazione sui processori MIC di programmi di calcolo completi; il risultato finale di questo lavoro sarà una valutazione accurata delle prestazioni ottenibili grazie ai nuovi processori e dell'impegno richiesto per la conversione dei codici di calcolo. Il lavoro sarà focalizzato sui programmi di fondamentale utilizzo da parte dei gruppi teorici, e cioè i programmi di simulazione Monte Carlo di teorie di gauge su reticolo e di sistemi di spin e lo studio numerico della dinamica dei fluidi in regime turbolento e dei sistemi gravitazionali in forte interazione tra di loro. Potranno inoltre essere coinvolti nella sperimentazione anche altri gruppi INFN interessati all'impiego dei processori MIC in ambiti di simulazione di rivelatori e di elaborazione e analisi di dati sperimentali.

Si può stimare che questo programma di lavoro, a livello di singolo processore MIC, possa portare a risultati significativi in un periodo di circa 6 mesi, e quindi si concluda anch'esso a fine marzo 2013.

### **Attività di sperimentazione su cluster di calcolo basati su processori MIC.**

Il terzo insieme di attività riguarda la sperimentazione su cluster di calcolo basati sui processori MIC. Mentre l'attività descritta al punto precedente riguarda per l'ambito della fisica computazionale l'utilizzo di singoli processori MIC, il passo successivo, necessario per ottenere potenze di calcolo in grado di soddisfare le necessità previste per i prossimi anni, è di sviluppare programmi di calcolo massicciamente paralleli, che utilizzino migliaia di core di calcolo MIC necessariamente distribuiti su un grande numero di nodi.

L'attività in questo campo riguarda essenzialmente il partizionamento di un programma di calcolo sui vari nodi disponibili e l'ottimizzazione dello scambio dei dati sulla rete di interconnessione, in modo da evitare colli di bottiglia legati alla insufficiente banda di comunicazione disponibile o alla elevata latenza di comunicazione. Si tratta di un problema ben noto e studiato da tempo dai gruppi coinvolti, ma per il quale ci si aspetta un ulteriore livello di complessità dovuto alle alte prestazioni ottenibili su ogni singolo nodo.

Questo lavoro parte necessariamente da quello svolto al punto precedente e può basarsi su un programma di early access alla macchina Eurora, che sarà installata al CINECA entro la fine del 2012. Tale sistema è particolarmente indicato per questo scopo, in quanto dotato di nodi di calcolo accelerati con processori MIC e con due reti di comunicazione, una di tipo Infiniband ed una costituita da una topologia di comunicazione toroidale. In questo contesto sarà importante studiare e ottimizzare i metodi di accesso veloci alle due reti e – elemento fortemente innovativo – studiare le opportunità offerte da un utilizzo congiunto di entrambe le reti.

Questo programma di lavoro potrà iniziare intorno a Dicembre 2012, quando da una parte il sistema Eurora sarà disponibile al CINECA e d'altra parte sarà stata completata una frazione significativa dell'attività del punto precedente. E' ragionevole aspettarsi che questo programma possa concludersi per la fine di giugno 2013.