

Simulazioni MHD di plasmi astrofisici: attività di HPC in INAF-OATo:

G. Bodo, P. Rossi, C. Zanni (OATo)

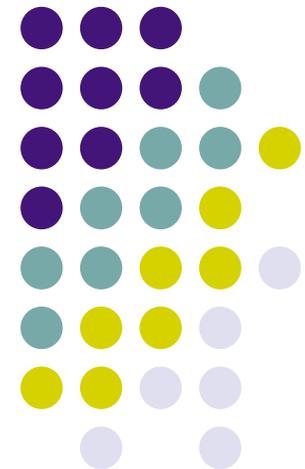
A. Mignone, S. Massaglia, A. Ferrari (UniTo)

INAF

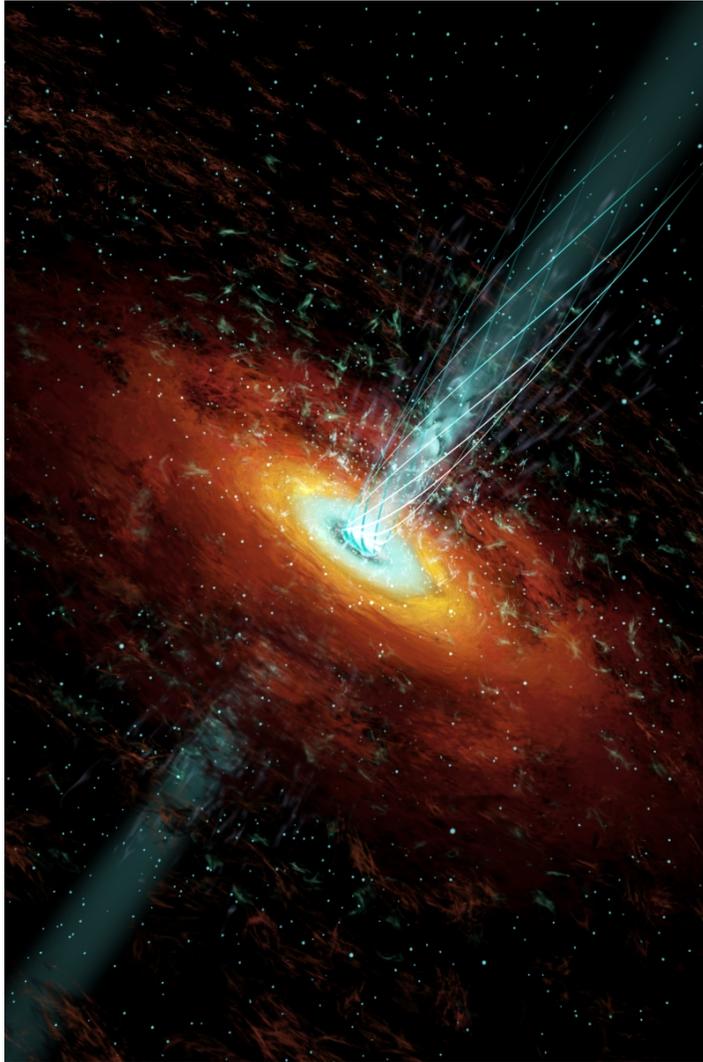
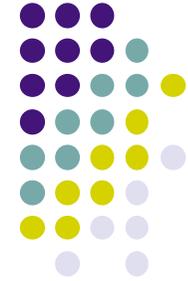


ISTITUTO NAZIONALE DI ASTROFISICA
OSSERVATORIO ASTROFISICO DI TORINO

UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI TORINO
ALMA UNIVERSITAS
TAURINENSIS

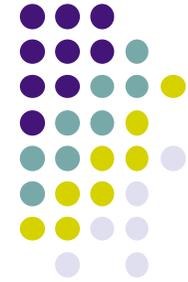


Tematiche di ricerca



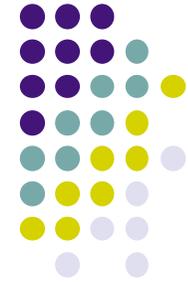
- Ricerca volta allo studio di fenomeni di accrescimento (**dischi**, **magnetosfere stellari**) ed eiezione (**venti**, **getti**)
- Trasporto turbolento del momento angolare
- Accrescimento magnetosferico
- Meccanismi di accelerazione di getti astrofisici
- Propagazione/stabilità dei getti
- Proprietà radiative
- Applicazioni sia ad alte energie (**AGN**) che a stelle in formazione (**YSO**)
- Sviluppo ed implementazione di **metodi numerici**

Strumenti di ricerca: il codice PLUTO



- PLUTO è un codice **modulare** multidimensionale per la modellizzazione di plasmi astrofisici (e non) sviluppato a partire da metà anni '90 in collaborazione tra OATo e UniTo (P.I. A. Mignone, UniTo)
- Modularità permette di studiare sia **gasdinamica** che **plasmi magnetizzati** in approssimazione fluida (MHD) e/o cinetica (work in progress), in **regime classico o relativistico**, includendo effetti dissipativi (conduzione termica, viscosità, resistività) e radiativi.
- **Ampia scelta di algoritmi** sia ai volumi che alle differenze finite, anche ad alto ordine.
- Supporta differenti sistemi di coordinate ortogonali curvilinee sia su **griglia statica** che **adattiva** (AMR) (funzionalità fornita dalla libreria CHOMBO – LBNL).
- Requisiti minimi: C, Python (interfaccia utente), (GNU) make.
Requisiti supplementari: MPI (parallelizzazione), Fortran, C++ (AMR), HDF5 (I/O)
- Articoli di riferimento:
 - ***“PLUTO: a numerical code for computational astrophysics”***, Mignone et al. ApJS, 170 (2007)
 - ***“The PLUTO code for AMR computations in astrophysical fluid dynamics”***, Mignone et al. ApJS, 198 (2012)

PLUTO: parallelizzazione e performance

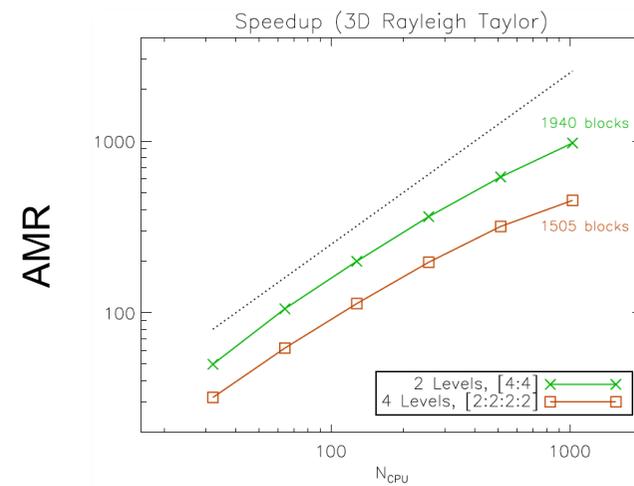
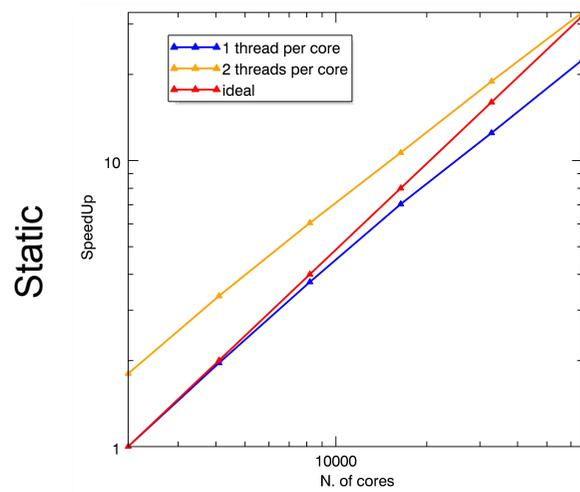


- **Parallelizzazione MPI**, basata su una libreria anni '90 sviluppata presso U. of Chicago.
- Testato su differenti sistemi: IBM SP4/SP5/SP6 – Blue Gene/P-Q – BCX/CLX – Linux / Mac G5 / Beowulf clusters - SGI Irix – Linux/ Mac OS multicore workstations – Windows (Cygwin)

- Parallelizzazione recentemente ottimizzata in **collaborazione con SCAI – Cineca**



- **Ottima scalabilità** su griglia statica, limiti intrinseci dell'AMR

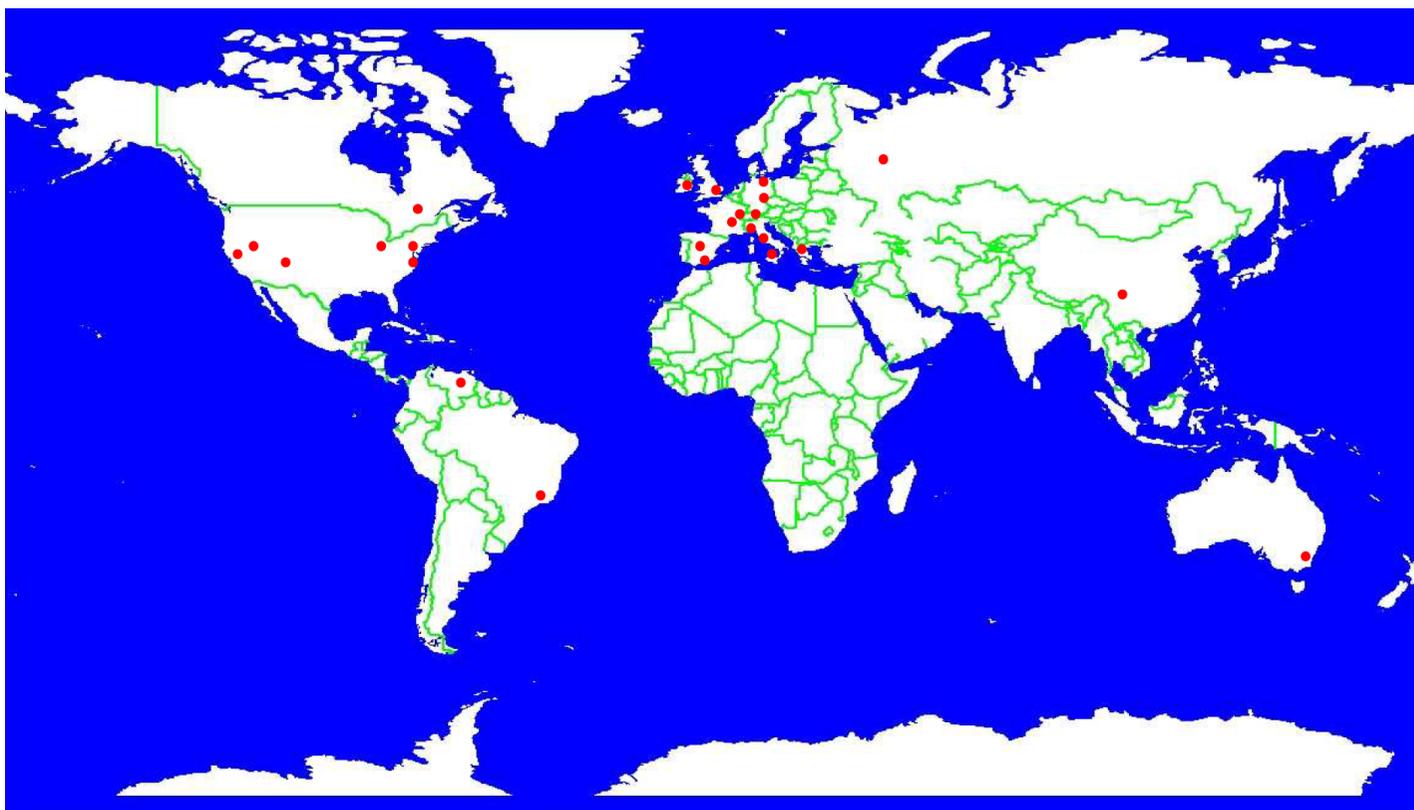


- Versione ridotta del codice con **supporto per GPU** (CUDA). Collaborazione con Univ. Tubingen



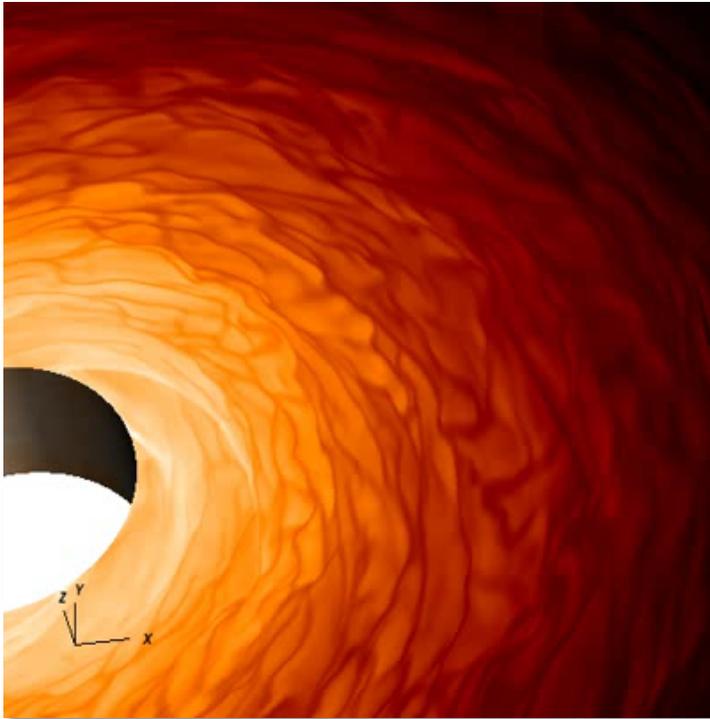
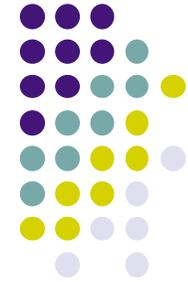
La comunità di PLUTO

Software pubblico scaricabile da <http://plutocode.ph.unito.it>
sotto GNU General Public License



Più di 300 downloads / utenti in più di 20 istituzioni scientifiche ...

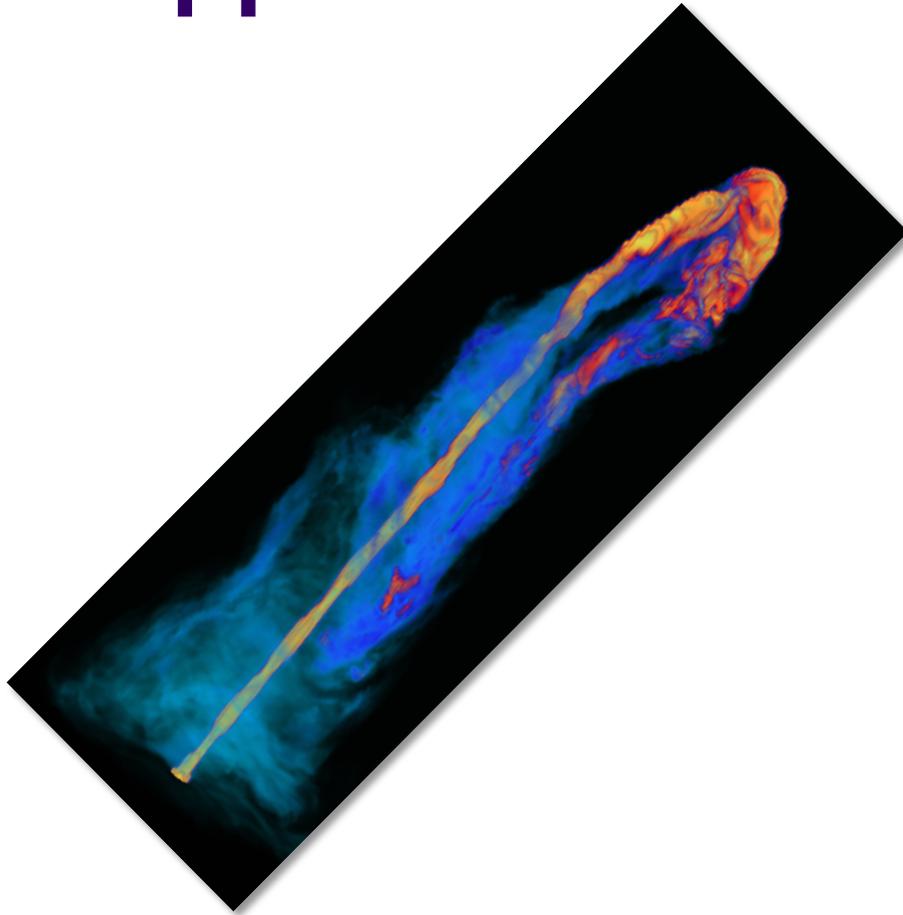
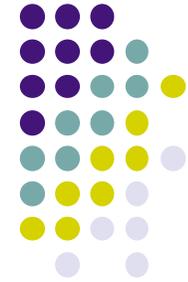
Applicazioni HPC (1)



- Simulazione MHD del trasporto turbolento di momento angolare in dischi di accrescimento innescato dall'instabilità magneto-rotazionale (MRI)
- $\sim 10^7$ punti griglia, fino a qualche milione di timestep (per coprire centinaia di orbite)

- Simulazioni di turbolenza adatte a Petascale HPC (fenomeno gerarchico, ampio range dinamico)
- Ricerca sviluppata grazie ad iniziative nazionali ed internazionali: **PRACE, 28 Mhrs** (2012) + **29 Mhrs** (2014) + ISCRA (8 Mhrs) + XSEDE 2011 (2.5 Mhrs, CrayXT5)

Applicazioni HPC (2)



- Simulazioni MHD di propagazione di getti relativistici
- $\approx 10^{7-8}$ punti griglia, centinaia di migliaia di timestep
- Simulazioni di propagazione su griglia statica “ideali” per architetture Petaflop: tempi dinamici e di integrazione più brevi rispetto a simulazioni MRI
- Ricerca sviluppata grazie ad iniziative nazionali (ISCRA).
CPU time su 4 anni ~ 20 Mhrs.

Risorse ed esigenze HPC



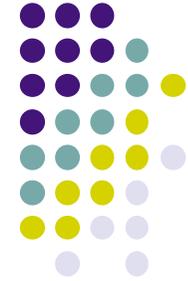
- Come plasmi@OATo consumiamo circa **30 Mhrs/anno** grazie ad iniziative internazionali tipo **PRACE** e **10 Mhrs/anno** su iniziative nazionali (**ISCRA**). Centinaia di TB di risultati.

- Risorse di calcolo sono sufficienti e appropriate?
 - **Scalabilità limitata di applicazioni (es. griglia adattiva)** oltre il migliaio di cores
 - Bisogno di un sistema flessibile (accesso rapido) per **sviluppo e testing su centinaia di cores.**

MA:

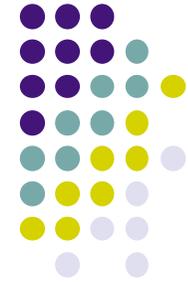
- **Risorse HPC del CINECA orientate a calcolo Tier-0:** tempi lunghi (mesi) tra sottomissione ed approvazione dei proposal; numero minimo di cores (2048, coda smallpar); durata simulazioni di debug limitata (30 min.)
- **Risorse locali in OATo non sufficienti:** attualmente sistema di calcolo più performante 16 CPU cores, 2496 GPU cores (N-Vidia K20)

Risorse di classe Tier-2



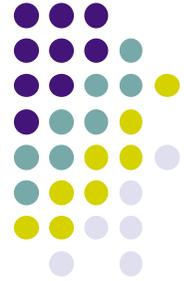
- **Sentito bisogno di risorse di classe Tier-2** (performance $\approx 10 - 10^2$ Tflops)
- Tier-2 @ CINECA
 - GALILEO (Tier-1): Intel Xeon 2630 (2.4 GHz), 8384 cores/524 nodes, 128 GB/node, 768 Intel Phi
 - PICO (BigData): Intel Xeon 2670 (2.5 GHz), 1480 cores/74 nodes, 128 GB/node
 - Quale utilizzo è possibile?
- Tier-2 @ UNITo
 - C3S: Intel Xeon 2680 (2.5 GHz), 960 cores/40 nodes, 128-768 GB/node, 8 N-Vidia K40
- Tier-2 @ altrove ...
 - Esempio. Froggy: Bull – 3184 cores, cpu Intel 2.6 GHz (82 Tflops) @ Università di Grenoble
- **Tier-2 @ INAF?**
 - Possibilità di avere risorse di calcolo di istituto? Con quali modalità di utilizzo?

Nuove architetture ed ingegnerizzazione



- **In vista di Exascale-level computing, le architetture di calcolo stanno rapidamente evolvendo** (vedi progetti Mont-Blanc@BSC o ExaNeSt): numero elevatissimo di cores poco performanti a basso consumo (es. ARM), moltissima memoria condivisa, acceleratori (GPUs, Intel Xeon-Phi, FPGAs).
- **In OATo: sviluppo versione ridotta di PLUTO con supporto per GPUs (CUDA).** In collaborazione con l'Università di Tubingen. Acquisto (2014) di piccola piattaforma (1 scheda N-Vidia K20, 2496 GPU cores) per sviluppo e testing.
- **Necessità di re-ingegnerizzazione dei codici numerici:**
 - appoggiarsi ai centri di supercalcolo?
 - personale qualificato esterno (es. Dipartimenti di Informatica dell'Università)?
 - formare ed assumere personale in INAF?

... riassumendo



- Come sviluppatori ed utilizzatori siamo **molto presenti e competitivi nell'HPC europeo**, vedi quantità di risorse assegnate (PRACE, Iscra).
- Forniamo un codice numerico (**PLUTO**) che ha **ottime proprietà di scalabilità** su architetture di classe Petaflop (Blue-Gene), almeno su griglia statica.
- Alcune applicazioni (ad esempio l'AMR) e lo sviluppo ed il testing del codice richiedono **risorse più limitate (calcolatori di classe Tier-2) con modalità di accesso più flessibili rispetto ai centri di supercalcolo**
- **Le architetture dei sistemi di calcolo stanno diventando sempre più complesse** ed i codici numerici, compreso PLUTO, richiedono un lavoro di **re-ingegnerizzazione**.

Quali sono le possibilità in INAF per accedere e/o dotarsi di risorse di calcolo HPC di classe Tier-2?

Quali le possibili strategie per adeguare i codici alle nuove architetture?