

Calcolo ad Alte Prestazioni in Italia

Workshop 18-19-20 novembre 1998: titoli e abstracts degli interventi

(La rassegna degli abstracts non è completa a causa della impossibilità di modificare i limiti imposti dai tempi richiesti per la messa in stampa del bollettino entro la fine del 1998)



S. Cittolin (CERN)

Data communication and data processing at the CERN Large Hadron Collider experiments

R. Tripiccione (INFN - Istituto Nazionale Fisica Nucleare)

Calcolo massicciamente parallelo in fisica teorica: l'esperienza del progetto APE dell'INFN

C.A. Marchi (Quadrics Supercomputer World)

EUROSTORE - High performance mass storage system

The massive explosion in data volumes represents one of the neglected areas of computing and is currently one providing severe restrictions for computational growth. Ever increasing computational performance, easier and high-bandwidth access to data from the Internet, sophisticated improvements in data handling methods and the issues regarding legacy storage systems are all contributory factors leading to the requirement to provide the capability to offer data repositories with high performance and high availability based on components driven by competitive markets. With this capability, organizations will be able to plan computational and data management capacities in line with their business growth.

S. Bonometto, A. Gardini (Università degli Studi di Milano)

Calcolo Parallelo in simulazioni cosmologiche

G. Bernasconi, G. Drufuca (Politecnico di Milano)

Wave propagation modelling for geophysical applications

S. Bandini, M. Magagnini (Università degli Studi di Milano)

HPCN: il progetto CAPP

(Cellular Automata for Percolation Processes)

P. Fantucci (Università degli Studi di Milano)

Il calcolo parallelo nelle simulazioni dei processi dinamici di proteine e di processi di docking intermolecolare

G.F. Tantardini (Università degli Studi di Milano)

Chemioadsorbimento e fasci molecolari: simulazioni dinamiche

Lo studio delle interazioni tra molecole in fase gassosa e superfici di solidi cristallini è di importanza fondamentale per la comprensione di fenomeni come l'adsorbimento, la diffusione, la catalisi eterogenea, i processi elettrochimici, la corrosione, la passivazione, la crescita epitassiale di cristalli. Negli ultimi 20 anni, sono state messe a punto nuove e sofisticate metodologie sperimentali che hanno impresso una svolta decisiva in questo settore di ricerca.

Parallelamente agli enormi progressi compiuti nel campo sperimentale, si sono verificati nel campo teorico considerevoli sviluppi che hanno portato alla realizzazione di nuovi metodi e di nuovi algoritmi. Sono stati costruiti codici di calcolo molto efficienti che, abbinati al rapidissimo aumento delle capacità dei computer (velocità, memoria RAM e dischi), soprattutto delle architetture parallele, e al sempre minor

costo del tempo di calcolo, hanno reso possibile lo studio di sistemi sempre più complessi, con standard di accuratezza sempre più elevati. In particolare, sono stati realizzati codici di calcolo per effettuare simulazioni della dinamica di interazione molecola-superficie, simulazioni che possono dare un supporto essenziale, impensabile fino a pochi anni fa, a questo straordinario avanzamento delle conoscenze sui sistemi gas-superficie.

Una descrizione della dinamica reattiva tra una molecola e una superficie, in cui si considerino anche i gradi di libertà degli atomi della superficie, è un problema estremamente complesso da affrontare che richiede notevoli risorse di calcolo, tanto che anche una potente workstation risulta del tutto inadeguata a risolvere il problema.

Vengono presentati i risultati di simulazioni della dinamica di adsorbimento per alcuni sistemi molecola-superficie metallica di interesse catalitico. Per questi calcoli è stata utilizzata una versione del nostro codice di calcolo (*TRAJ*), parallelizzata secondo uno schema *PVM* (*Parallel Virtual Machine*), di tipo *master-slave*.

E. Bon, G. Grassi, M. Meghella, L. Nigro, G. Sicurella (ENEL Ricerca Milano)

TOOLSHEd: un ambiente integrato per il calcolo ingegneristico ad alte prestazioni

In molti ambienti industriali, in cui il supercalcolo potrebbe trovare una significativa applicazione, l'introduzione di hardware e software parallelo incontra notevoli resistenze, dovute sia alla carenza di programmi applicativi efficienti, che alla difficoltà di gestione di macchine e programmi di questo tipo.

Questa situazione è particolarmente evidente nel settore specifico del calcolo parallelo a memoria distribuita, laddove occorre fare fronte a:

- l'esigenza di gestire dati e programmi residenti su nodi diversi;
- la necessità di integrare i risultati con post-processor disponibili su singole workstation e/o su personal computer ed, allo stesso tempo, gestire e visualizzare files di grandi dimensioni;
- il bisogno di fare coesistere sugli stessi nodi più utenti con differenti esigenze;
- la necessità di sfruttare al meglio la potenza di calcolo disponibile.

Per tentare di dare soluzione a questi problemi, nell'ambito del programma di ricerca ESPRIT è stato realizzato il progetto TOOLSHEd (Tools for High Productivity Engineering Design), volto ad integrare, su calcolatori paralleli, in un unico ambiente tutti gli strumenti necessari all'attività di simulazione.

Il gruppo di aziende che ha dato vita al progetto vede la presenza di società di ricerca industriale (Bertin, CISE), centri di ricerca pubblici (RAL, PAC), di software house specializzate (NUMECA, Viewtech) e di industrie manifatturiere e di servizi (Aerospaziale, Ruston e ENEL). L'obiettivo che i

partner del progetto si sono posti è stato quello di permettere ai progettisti delle tre realtà industriali di eseguire in modo integrato l'attività di simulazione all'interno delle più generali attività di progettazione e di verifica di progetto.

A questo scopo è stato sviluppato un ambiente interattivo aperto, che fa uso il più possibile di standard disponibili sul mercato per il calcolo distribuito (PVM, MPI, etc.) e la gestione di dati (STEP, EXPRESS), ed integra in modo trasparente all'utente tutti i componenti necessari all'attività di modellazione: geometria, generatore di mesh, programma di calcolo, visualizzatore, etc.

A. Matrone (CIRA)

RAMSYS: un codice parallelo per lo studio dell'aerodinamica interazionale ed in-comprimibile di configurazioni elicotteristiche. Esperienze e risultati

Il Calcolo ad Alte Prestazioni ancora oggi si rivela l'unica metodologia in grado di rendere la simulazione numerica competitiva e complementare a quella di tipo sperimentale, in special modo nell'ambito della progettazione aeronautica, automobilistica e meccanica. Questo articolo si pone l'obiettivo di illustrare un caso concreto di applicazione di tale metodologia mirato al miglioramento delle prestazioni di un codice di calcolo per l'analisi aerodinamica di configurazioni elicotteristiche nell'ipotesi di flusso potenziale. Tale attività ha riguardato sia la ricerca di algoritmi più efficienti che l'implementazione parallela. Per quantificare i benefici raggiunti si è fissato un significativo test-case di riferimento si è proceduto di volta in volta alla valutazione dei miglioramenti prestazionali ottenuti, che alla fine hanno consentito di abbassare i tempi di calcolo di un ordine di grandezza.

S. Sibilla (Politecnico di Milano)

Analisi numerica di strutture turbolente di parete nella corrente in condotti

Il presente lavoro illustra i risultati relativi alla Simulazione Numerica Diretta della corrente turbolenta a basso numero di Reynolds in un condotto circolare, discutendo gli aspetti di accuratezza, risoluzione e dimensioni del dominio di calcolo che hanno reso necessario il ricorso al calcolo parallelo.

Il calcolo parallelo ha permesso la generazione di un database di campi di moto che è stato successivamente utilizzato per l'analisi dettagliata delle proprietà della corrente turbolenta. In particolare, si sono edotte da ciascun campo simulato le "strutture coerenti" di interesse, mediandole opportunamente per definire strutture turbolente "medie" le cui proprietà sono state studiate. Si sono pertanto ricavati dati sulla forma, sull'inclinazione e sull'intensità dei vortici in vicinanza della parete, come anche sulla dimensione e sulle caratteristiche delle strisce a bassa e ad alta velocità.

Attraverso la sovrapposizione delle strutture mediate si è inoltre potuta approfondire l'interazione reciproca tra vortici e strisce nella generazione degli sforzi turbolenti.

C. Poloni (Univ. di Trieste), D. Spicer (British Aerospace Defence), J. Cook (Parallab), P. Sen (Università di Newcastle)

EP 20082 Frontier: Industrial multiobjective design optimisation

The FRONTIER Esprit IV project addresses design optimisation problems having multiple objectives. It provides tools for robust optimisation, and has decision support methods for tradeoff studies. It allows for off the shelf solvers on a distributed network of hardware platforms, by utilising the best features of CORBA and Java

S. Iarlori (Pirelli)

Modelling New Technological Materials by Ab-Initio Molecular Dynamics Simulations

M. Tommasini, C. Castiglioni, - M. Del Zoppo, G. Zerbi (Politecnico di Milano)

Calcoli quantistici ab-initio: metodologie e loro utilizzo per lo studio di molecole con elevata risposta ottica non lineare

I calcoli quantistici ab initio sono ormai utilizzati largamente nella ricerca scientifica allo scopo di studiare la struttura e le proprietà di molecole di particolare interesse.

Il calcolo, rispetto all'indagine sperimentale, permette spesso di ottenere descrizioni più dettagliate del sistema molecolare, a scapito però di approssimazioni necessarie per rendere il problema dell'equazione di Schroedinger a molti corpi trattabile numericamente. Nello studio dei meccanismi che sono alla base delle proprietà molecolari più intime è di grandissimo aiuto il poter calcolare soluzioni anche approssimate dell'equazione di Schroedinger. Per questa via, confrontando tra loro diverse grandezze e diverse molecole, risulta possibile comprendere quali sono le relazioni tra la struttura chimica e le proprietà di interesse.

Sono stati eseguiti su una macchina parallela di recente acquisizione del CILEA, l'Exemplar 2000, una serie di calcoli in approssimazione Hartree-Fock ristretta (RHF) utilizzando la base 3-21G. I risultati dei calcoli sono stati utilizzati per verificare un modello teorico che getta luce su alcuni aspetti spettroscopici della risposta ottica non lineare del primo ordine (\bullet) di composti organici coniugati push-pull.

Nel presente lavoro è stato chiarito come, per alcuni particolari moti vibrazionali delle molecole push-pull, sussista un legame tra l'intensità di assorbimento infrarosso, l'attività di scattering Raman e la risposta ottica non lineare \bullet . Tale legame dipende da parametri di struttura molecolare, ovvero la lunghezza del sistema coniugato e la differenza di elettronegatività tra i gruppi accettori e donatori di carica elettronica posti agli estremi del sistema coniugato stesso. Si prefigura quindi l'individuazione di una relazione tra la struttura chimica della molecola e le sue proprietà ottiche. Questo risultato può essere utile per guidare la sintesi di nuovi composti caratterizzati da risposte ottiche non lineari di punta, richiesti in svariate applicazioni di fotonica.



A. Machì, P. Spinnato (CNR-IFCAI - Istituto di Fisica Cosmica ed Applicazioni dell'Informatica)

Parallelizzazione MPI di un codice fluidodinamico SPH per applicazioni astrofisiche, ottimizzato e testato su varie architetture di calcolo

Il codice SPH (*Smoothed Particle Hydrodynamics*) è un metodo lagrangiano puro, sviluppato attorno alla fine degli anni '70, e che è stato adoperato in una vasta gamma di applicazioni, prevalentemente legate all'Astrofisica computazionale. La sua versatilità ne permette l'utilizzo per simulazioni di generici sistemi fluidodinamici caratterizzati da mancanza di simmetrie geometriche e presenza di larghi spazi vuoti all'interno del dominio di integrazione. I metodi a griglia fissa sono fortemente penalizzati da questo genere di problemi, che sono invece agevolmente superati da un codice lagrangiano quale l'SPH.

La strategia di parallelizzazione adottata è stata il Message Passing. L'implementazione di tale paradigma da noi utilizzata è L'MPI (*Message Passing Protocol*), che offre il vantaggio di essere portabile su uno svariato numero di architetture. La distribuzione dei dati ai processori avviene mediante una decomposizione geometrica del dominio, in celle rettangolari contenenti un numero intero di celle SPH, ed ogni processore opera sulle particelle contenute entro il proprio dominio.

Il problema più importante ai fini dell'ottimizzazione del codice parallelo è dovuto alla possibilità che si crei uno squilibrio del carico computazionale tra i processori a causa dell'evoluzione dinamica del sistema per cui, anche in presenza di una distribuzione iniziale bilanciata, le particelle possono accumularsi in corrispondenza dei domini di alcuni processori, causando uno sbilanciamento del carico computazionale. La strategia di ottimizzazione che si è rivelata più efficace prevede di ricalcolare periodicamente la suddivisione del dominio globale di integrazione, così da ripristinare la distribuzione

ottimale. Tale approccio migliora decisamente la performance del codice, e nel contempo offre alcuni interessanti spunti di riflessione sui quali la nostra ricerca è attualmente in corso, p.e. l'intervallo di tempo ottimale per il ricalcolo della partizione, che può essere anch'esso variabile.

I test sulla performance del nostro codice parallelo sono stati eseguiti su varie architetture:

- un multiprocessore SUN Enterprise 6000 a 24 processori UltraSparc 250 MHz a memoria condivisa, risiedente presso il CED dell'area della ricerca di Palermo, sul quale è stato anche sviluppato ed ottimizzato il codice

- una Meiko CS2 a 48 nodi UltraSparc 166 MHz a memoria distribuita, presso il C3P di Napoli

L. Colombo (Università degli Studi di Milano)

Studio dell'evoluzione microstrutturale del silicio tramite simulazioni quantistiche

T. Paccagnella, S. Tibaldi (Servizio Meteorologico Regionale - ARPA, Emilia Romagna)

Il ruolo del calcolo ad alte prestazioni (high performance computing) nella produzione di previsioni meteorologiche operative in ARPA-SMR

F. Tampieri (CNR-IMGA-Istituto per lo Studio delle Metodologie Geofisiche Ambientali)

Simulazioni numeriche della dispersione turbolenta mediante modelli stocastici

La dispersione di inquinanti in atmosfera e nell'oceano è un soggetto di grande interesse applicativo, per ovvi motivi di pianificazione territoriale, di controllo delle emissioni e della qualità dell'aria e dell'acqua. Lo studio e la modellazione numerica dei processi di dispersione turbolenta riveste inoltre un rilevante interesse teorico, per il contributo che tali studi possono dare al miglioramento delle conoscenze nella dinamica dei flussi geofisici ed alla parametrizzazione dei processi alle scale più piccole nei modelli di simulazione della circolazione atmosferica ed oceanica.

I modelli stocastici costituiscono uno strumento efficiente per la simulazione della dispersione turbolenta; la loro struttura algoritmica permette di sfruttare architetture parallele in modo semplice.

Scopo della presentazione è di illustrare la struttura matematica generale di tali modelli ed i problemi che si pongono nella loro applicazione in un contesto geofisico.

Verranno di conseguenza discussi alcuni esempi di utilizzo di modelli stocastici nello studio di problemi prototipo e di situazioni realistiche. I legami tra la descrizione lagrangiana e quella euleriana del fenomeno della dispersione sono messi in evidenza in questo contesto, e permettono di illustrare la applicazione dei modelli stocastici (lagrangiani) nella determinazione dei coefficienti di dispersione turbolenta (utilizzati in un contesto euleriano).

S. Masina (CNR-IMGA-Istituto per lo Studio delle Metodologie Geofisiche Ambientali)

Simulazioni numeriche della circolazione generale degli oceani

La modellistica numerica nell'ambito dell'oceanografia fisica e biogeochimica rappresenta una pedina fondamentale per la comprensione della circolazione generale degli oceani, dei processi fisici, chimici e biologici che caratterizzano l'ecosistema marino e, più in generale, per lo studio del clima e dei suoi cambiamenti.

Le attività del gruppo di oceanografia dell'Istituto IMGA affrontano gli aspetti interdisciplinari della ricerca marina attraverso la modellizzazione numerica del sistema idrodinamico e dei processi biochimici ad esso associati. Nel seguito si mostreranno alcuni esempi di modelli numerici oceanici e di ecosistema implementati nell'oceano globale e nel Mare Mediterraneo.

L'implementazione e la risoluzione del modello idrodinamico è ovviamente diversa nei due casi a causa dei limiti imposti dalle risorse di calcolo a disposizione. In entrambi i casi si tratta di un modello alle equazioni primitive risolte tramite il metodo delle differenze finite e forzato alla superficie con dati meteorologici anche ad alta frequenza (6 ore).

Il modello è in grado di simulare realisticamente i processi dinamici salienti che caratterizzano la variabilità annuale e interannuale dell'oceano globale e del Mare Mediterraneo.

Nel caso del modello applicato all'oceano globale si è inoltre effettuato un esperimento di assimilazione di dati di temperatura osservati. In particolare lo schema di assimilazione di dati utilizzato per questo studio si basa sul principio variazionale univariato che minimizza la differenza fra la stima numerica e il dato osservato.

Le simulazioni riguardanti il Mare Mediterraneo usano modelli di diversa generazione e configurazione numerica. Per il caso del Mediterraneo globale si sono condotti esperimenti sia con il modello alle differenze finite che con un modello di ultima generazione agli elementi finiti e metodi spettrali. Questi

modelli hanno ormai una risoluzione spaziale di pochi chilometri (5-10 km) e permettono di risolvere sia la scala di bacino che la mesoscala.

Un altro modello alle differenze finite è invece applicato allo studio della circolazione generale del Mare Adriatico vista la particolare configurazione numerica nella verticale, che permette di risolvere il rilievo topografico con maggiore accuratezza per le regioni costiere.

È stato inoltre sviluppato un modello di ecosistema derivante dall'accoppiamento del modello fisico dell'Adriatico con un modello ecologico basato sul calcolo delle biomasse che descrive i processi biogeochimici propri della colonna d'acqua e dei sedimenti marini in termini di flusso di carbonio, azoto, fosforo e silicio. Il sistema accoppiato è stato implementato in versioni progressivamente sempre più complesse in termini di numero di variabili e risoluzione numerica, fino ad arrivare al caso del modello idrodinamico alla massima risoluzione (3 km) accoppiato ad una cinquantina di variabili biogeochimiche prognostiche. Le simulazioni sono state condotte con forzanti atmosferici climatologici e mostrano il ciclo stagionale della produzione primaria nell'Adriatico.

G. Barone, P. D'Ambra, D. Di Serafino, G. Giunta, A. Murli, A. Riccio (CNR-CPS - Centro di ricerche per il Calcolo Parallelo e i Supercalcolatori)

Un software parallelo per la simulazione di modelli di qualità dell'aria

Nell'ambito del monitoraggio e della previsione dei fenomeni di inquinamento atmosferico vanno assumendo sempre maggiore rilevanza i software di simulazione, noti come modelli di qualità dell'aria. Essi possono risultare molto efficaci nello stabilire il legame che esiste tra tipici scenari di emissione di inquinanti e l'impatto che questi hanno sulle concentrazioni presenti in atmosfera, fornendo un supporto oggettivo nella pianificazione di strategie di riduzione o rilocalizzazione delle sorgenti di emissione di inquinanti.

La descrizione matematica dei fenomeni in esame è rappresentata da problemi ai valori iniziali e al contorno per sistemi di equazioni differenziali alle derivate parziali in tre dimensioni spaziali non lineari (equazioni di avvezione-diffusione-reazione), la cui risoluzione numerica è computazionalmente intensiva. La necessità di avere tempi di risposta dell'ordine dei minuti rende tali problemi una vera e propria sfida per il calcolo ad alte prestazioni.

In quest'ambito si colloca il progetto di ricerca Modelli Computazionali per le Scienze Ambientali del CPS, che coinvolge un gruppo di chimici dell'atmosfera e di matematici computazionali, con l'obiettivo finale di realizzare un software efficace nella simulazione dei fenomeni di inquinamento atmosferico sulla Regione Campania. Risultato delle attività svolte è PNAM, Parallel Naples Airshed Model, un software parallelo prototipale per la simulazione numerica di fenomeni di inquinamento atmosferico su scala urbana.

G. Polosa (RCI,Itid)

Calcolo ad Alte Prestazioni in Italia: possiamo ancora confrontarci con l'Europa?

L'intervento rappresenta una sorte di monito e di sollecitazione rivolta ai presenti perché facciano il possibile per modificare l'attuale tendenza forse ormai insanabile che sta portando l'Italia a perdere definitivamente contatto con le nazioni Europee (grandi ma non solo: Olanda, Svizzera, Inghilterra, Francia, Germania, Spagna), certo tecnologicamente più progredite, nell'ambito dell'utilizzo del calcolo ad alte prestazioni.

Viene elencata una serie di dati di fatto oggettivi a supporto della tesi che sembra essere pessimistica ma purtroppo fondata. Tra i tanti uno: l'essere il fanalino di coda tra le nazioni avanzate, per quanto riguarda il parco macchine classificabili come supercalcolatori. In base ai dati pubblicati dalla "Gunter List", uno strumento di rilevazione indipendente che elenca i siti di supercalcolo più potenti del mondo, nel settembre 1998 erano classificabili come di "supercalcolo" 210 siti nel mondo, di cui 58 in Europa. Dei 58, 20 sono Tedeschi, 13 sono Inglese, 7 Francesi, 17 fra Olanda, Spagna e Scandinavia ed 1 solo è italiano.

Come uscire da questa situazione non tanto solo umiliante quanto intrinsecamente pericolosa per la crescita tecnologica italiana:

- 1) Un approccio di tipo Inglese (identificazione delle risorse, attribuzione dei compiti, identificazione delle aree di ricerca, sostegno pluriennale delle strutture prescelte a supporto della qualità e quantità della Ricerca Pubblica, e dell'utilizzo industriale di tali risorse a sostegno della costante competitività dell'Industria)
- 2) Una politica di Trasferimento Tecnologico verso la piccola e media Industria, realtà pressochè essenziale della nostra Economia, mirante, finalmente a far considerare anche in Italia, il calcolo avanzato come uno strumento attuale e pienamente accessibile di innovazione e di progresso.



G. Serazzi, P. Cremonesi (Politecnico di Milano)

L'impatto dell'I/O sulle prestazioni dei sistemi di calcolo paralleli

V. Rosato, S. Adda, M. Celino, P. Palazzari, N. Pucello, S. Nicastro, F. Valentinotti (ENEA)

Scientific and technological applications on the PQE1 massively parallel MIMD/SIMD platform

The hybrid MIMD/SIMD platform called PQE1 has been realized by connecting a 8-twin nodes Meiko CS2 platform to 7 Quadrics/APE100 SIMD machines of different number of floating point units. The software tools, purposely realized to allow the concurrent cooperation of the MIMD and the SIMD parts of the platform, will be also briefly described. Different simulation activities have been ported, in the past years, on the PQE1 platform. A general summary will be given of the experiences performed in the following fields:

1. the simulation of atomic-scale models of technologically relevant materials (semiconductors) and complex molecules
2. the simulation of the dynamic behavior of the electromagnetic field produced by antennas for telecommunications
3. the high resolution forecast of the state of the Mediterranean Sea and the prediction of high water events in the Venice Lagoon

E. Munarini - N. Zagaglia (Politecnico di Milano)

Structural and Enumerative Properties of the Fibonacci Cubes

The Fibonacci cube represents a new topology for the interconnection of multicomputers. It is a bipartite graph which can be embedded in the Boolean cube and satisfies the recurrent equation of a Fibonacci Type. We prove it is a particular semilattice and determine structural properties such as the partite sets, the radius, the centre, the independence number of vertices. Furthermore we obtain enumerative properties as a new relation for the Fibonacci numbers and binomial coefficients.

G. Chiabrando (Intel)

Evoluzione delle architetture INTEL

N. Fornasari (Politecnico di Milano), P. Lanucara (CASPUR), S. Rovida (CNR - Univ. Pavia)

Performance analysis of the automatic parallelization of a block GMRES code

We discuss the performance of the automatic parallelization of a block GMRES algorithm, one of the most popular iterative solvers for multiple large non-symmetric linear systems. When the problem is large enough, the performance is quite satisfactory, due to the parallelization of the dense-to-dense matrix product.

The detailed analysis of the code structure shows that another time consuming step of the algorithm is the dense-to-sparse matrix product.

We test the explicit parallelization of this step by means of compiler directives, using GUIDE, a set of the standard OpenMP directives.

L. Formaggia (Politecnico di Losanna)

Calcolo scientifico intensivo per problemi di fluidodinamica

M.Eid (Blue Engineering)

Analisi stocastica, una nuova metodologia numerica per la progettazione

La necessità di ridurre il time to market di un prodotto ha spinto gli ingegneri a far ricorso a metodi di progettazione alternativi che si affidino nella fase di sviluppo, sempre meno ai prototipi ed ai test sperimentali e molto di più alla Prototipazione Virtuale. Negli ultimi anni grazie all'aumentata potenza dei calcolatori, si è assistito ad un incremento vertiginoso delle dimensioni dei modelli matematici con conseguente creazione di enormi quantità di dati ingegneristici (tensioni, spostamenti, accelerazione,...) sfruttati, poi in minima parte. Pertanto la percentuale dei dati utili che vengono esaminati è, in genere, in calo mentre le dimensioni del modello virtuale sono in rapida crescita. Al fine di garantirci un modello con elevato significato fisico dobbiamo invece considerare la dispersione dei dati ovvero lo scatter (proprietà dei materiali, tolleranze, condizioni al contorno, carichi); ciò significa, ingegneristicamente parlando che è meglio costruire un modello più piccolo ma considerare anche l'incertezza dei carichi. Per realizzare rilevanti progressi nell'Analisi Strutturale bisogna avere un buon bilanciamento di : - Dimensioni - Fisica del problema - Dispersione dei dati. L'analisi stocastica e la simulazione tramite il metodo Monte Carlo abbinate a tecnologie di meta-computing, riescono a combattere la crisi delle metodologie tenendo sotto controllo con modelli matematici contenuti i dati di interesse per il progettista. I grandi meriti dell'Analisi Stocastica sono, in ultima analisi, il controllo dell'influenza di ciascun parametro sul progetto e la conoscenza della probabilità di riuscita del progetto stesso.

W. Cucciati (CAP Gemini)

Applicazioni di calcolo ad alte prestazioni alla CAP Gemini Italia

Nel corso dell'intervento, dopo una breve panoramica sulla situazione attuale relativa alle metodologie CAE, verranno presentate tipiche applicazioni di Calcolo ad Alte Prestazioni sviluppate alla Cap Gemini Italia e le relative problematiche di base. Verrà brevemente descritta l'esperienza di Cap Gemini Italia nella modellazione e simulazione numerica nei settori dell'Analisi Strutturale Statica e Dinamica, lineare e non lineare, dell'Analisi CFD per problemi di varia natura e dell'Analisi di Crash in campo automobilistico. In particolare verrà discussa l'applicazione di un calcolo statico non lineare al modello di una boccia in materiale iperelastico; saranno illustrati i risultati ottenuti, nonché i problemi connessi alla gestione di materiali e forme innovative.

G. Frontini (Whirlpool)

Prototipazione Virtuale: un uso appropriato della Realtà Virtuale

Nell'ultimo decennio molte aziende del campo manifatturiero, Whirlpool inclusa, hanno vissuto una sorta di rivoluzione dei loro processi di sviluppo del prodotto, elettrodomestici nel caso Whirlpool, con l'introduzione dei sistemi C.A.D. (Computer Aided Design), C.A.M. (Computer Aided Manufacturing) e C.A.E. (Computer Aided Engineering), ovvero varie tecniche di progettazione e sviluppo con l'ausilio di tecniche di modellazione tri-dimensionale assistite da calcolatore.

Un passo avanti in questo continuo aggiornamento di tecnologie asservite dal colcolatore sta avvenendo nel campo della Prototipazione Virtuale, meglio conosciuta forse come "Realtà Virtuale".

Whirlpool, azienda per sua natura sensibile alle innovazioni tecnologiche, è tra le prime aziende ad aver implementato e posto in uso un sistema di Realtà Virtuale Industriale.

Si tratta di estendere la possibilità di visualizzazione e manipolazione degli attuali modelli ed assieme CAD tri-dimensionali ricreando, partendo da questi modelli, prototipi "funzionanti" con i quali è possibile interagire.

Per sua natura la realtà virtuale deve essere utilizzata con qualità dell'immagine molto elevata e con un' interazione, con l'ambiente sintetico, in tempo reale; tutto ciò richiede prestazioni dal calcolatore le più elevate possibile.

Tre semplici criteri, riteniamo, siano indispensabili per poter parlare di un uso appropriato e produttivo della realtà virtuale in azienda:

- la necessità di manipolare ed interagire con modelli complessi e di grandi dimensioni;
 - un movimento il più possibile fluido/continuo dell'ambiente e delle varie parti in movimento: con più il movimento si verifica " a scatti " con meno realismo viene percepita ed "immaginata" la realtà che si vuole rappresentare;
 - una qualità grafica eccellente (il più vicino possibile alla realtà che si vuole rappresentare) con componenti complesse quali ombreggiature, illuminazioni materiali e, non ultimo, "textures" personalizzate.
- Durante la presentazione sono stati mostrati alcuni esempi di prototipi (elettrodomestici) ed ambienti virtuali con l'uso di un calcolatore parallelo, con un uso gradualmente crescente di CPU sfruttate in modo parallelo per una verifica immediata, sul campo, della criticità dei criteri sopra elencati.

L. D'Amore, V. De Simone, A. Murli

(CNR-CPS - Centro di ricerche per il Calcolo Parallelo e i Supercalcolatori)

Software parallelo per l'elaborazione di immagini

Poichè la maggior parte delle applicazioni scientifiche ed industriali ormai richiede una fase di visualizzazione ed elaborazione di immagini, sono numerosissimi gli strumenti software di *Image Processing* disponibili per architetture sequenziali (ad es. Khoros, Megaware). Sfortunatamente, a parte alcuni progetti in corso (PIPT, PIPS, Khoros parallel extension), non si ha la stessa disponibilità per le architetture di calcolo ad alte prestazioni.

Il passaggio dal software sequenziale a quello parallelo non può avvenire in modo diretto ma deve tener conto di alcune strategie che permettono di individuare e valutare tra gli algoritmi (tradizionali) esistenti quelli più promettenti ad una implementazione in un ambiente di calcolo parallelo. A volte, si rende necessaria una rivisitazione dell'algoritmo che nella metodologia del *Problem Solving* conduce spesso alla riformulazione del modello matematico.

In questo intervento si intendono presentare alcune esperienze relative allo sviluppo di software matematico per l'elaborazione di immagini su architetture parallele a memoria distribuita. Prendendo in esame il problema della *ricostruzione* di un'immagine, verranno esaminate due diverse strategie per l'introduzione del parallelismo, la *parallelizzazione dei building blocks* e la *decomposizione del dominio*.

M. Adamo, M. Bernaschi, M. Prospero (CNR) P. Lanucara, F. Massaioli, C. Truini (CASPUR)

Controllo e debugging grafico via rete di simulazioni

Si presenta un modulo AVS per visualizzare in tempo reale dati prodotti da simulazioni in esecuzione (interattiva o batch) su macchine seriali o parallele.

Questo strumento permette di controllare ed analizzare in modo sistematico l'andamento della simulazione, visualizzando l'evoluzione temporale di qualche grandezza variabile, resa pubblica dalla simulazione mediante chiamate ad apposite funzioni di libreria e resa disponibile dal modulo AVS in forma di field. Il modulo sviluppato può essere eseguito sulla stessa macchina sulla quale gira la simulazione, o su una macchina connessa in rete, supporta connessioni e sconnessioni asincrone tra AVS e l'applicazione, e tollera interruzioni del collegamento in rete senza arrestare la simulazione.

Si descrive inoltre un'estensione ad AVS/Express, basata su questi concetti, ma che rende possibile utilizzare nello stesso network più moduli connessi a simulazioni differenti, sincronizzandone gli output. Questa funzionalità permette l'applicazione di questo tipo di visualizzazione a forme di metacomputing e calcolo cooperativo, e di realizzare una semplice forma di debugging referenziale.

Si illustra l'utilità di tale approccio nei casi di monitoraggio di simulazioni e di porting e parallelizzazione di codici preesistenti.

G. Meloni (CILEA)

Analisi delle prestazioni di alcuni codici applicativi su calcolatori paralleli

Our work deals with the performance, on several parallel machines, of some structural analysis application codes. We focus attention both on the performance of each test problem running in dedicated mode and on the throughput of the available machines, in order to evaluate the influence of the workload on the performance of each systems. Furthermore, we present the scalability results which are achieved when exploiting parallel processing.

D. Maric (CSCS Centro Svizzero Calcolo Scientifico - Manno)

Obtaining very high sustained performance of real-life applications at CSC-ETH

C. P. Riley, R. C. F. McLatchie, R. Janssen, A. Longo, T. Gutiérrez, J. Simkin, P. Brochet, C. Furmaniak, G. Molinari, P. Alotto, J-F. Lemoine, G. Drago
(Vector Fields Ltd, Oxford Parallel, Philips, Labein, Bilbao, École Centrale Lille, Dip. Ing. Elettrica - Univ. di Genova, Moulinex, Ansaldo Energia)

An Environment for Electromagnetic Design Optimisation

In this paper a description of the EPOCH design optimisation environment will be given and results on a 2d Thin Film Recording Head test case will be presented

R. Guarracino, G. Laccetti, U. Scafuri

(CNR - CPS - centro di Ricerche per il Calcolo Parallelo e i Supercalcolatori)

Realizzazione e valutazione delle prestazioni di un'architettura parallela a basso costo

L'idea di utilizzare tecnologia off the shelf per realizzare un'architettura parallela ha portato alla realizzazione di una classe di sistemi, noti come macchine Beowulf. Beowulf è un'iniziativa della NASA nata nel 1994 con l'obiettivo di investigare l'impiego di "pile di PC" per applicazioni computational intensive.

Nel dicembre 1997 è stato realizzato presso il CPS-XCNR di Napoli un tale sistema basato su 16 Pentium Pro 200 MHz collegati mediante uno switch fast ethernet. Prime sperimentazioni hanno già consentito di raggiungere prestazioni di 1.6 Gflops (Linpack MMP). Nel presente lavoro verranno illustrate le prestazioni del sistema su differenti e ben noti benchmark così come su alcune altre applicazioni; verranno infine effettuati alcuni confronti con calcolatori commerciali.

S. Baragetti (Politecnico di Milano)

Metodo di calcolo esplicito e simulazione numerica della pallinatura: analisi ed accuratezza dei risultati

Tra i trattamenti superficiali che permettono di incrementare la resistenza a fatica dei componenti strutturali sollecitati con carichi ciclici, la pallinatura è molto diffusa anche perché non necessita lo smaltimento di rifiuti tossici ed è di facile applicazione. Il trattamento consiste nel bombardare la superficie del componente da trattare con piccole sfere (aventi diametro variabile tra qualche decimo di millimetro e due millimetri) al fine di indurre un campo di tensioni residue di compressione ed incrudire la superficie stessa. È infatti noto che le cricche di fatica non propagano, o comunque la loro propagazione è rallentata, se nel materiale sono presenti tensioni residue di compressione.

La simulazione numerica della pallinatura, che richiede la modellazione dell'impatto di una o più sfere su un componente avente determinate caratteristiche fisiche, è stata affrontata utilizzando un codice di calcolo commerciale.

Dato che lo scopo è realizzare un modello facilmente riproducibile che fornisca risultati sufficientemente accurati in breve tempo si è impiegato un solutore esplicito.

La simulazione dell'impatto a medie velocità di una o più sfere deformabili sulla superficie di un componente anch'esso deformabile, presenta non linearità sia dovute al problema del contatto, sia legate alla schematizzazione del comportamento del materiale ad alte velocità di deformazione. La correttezza dei risultati è legata anche alle limitazioni proprie del metodo di calcolo esplicito che restringe la gamma di elementi finiti utilizzabili e non consente di fissare ad arbitrio i parametri dell'analisi stessa (si ricorda, per esempio, che con il metodo di calcolo esplicito l'incremento di tempo è fissato dal solutore e dipende sostanzialmente dal tipo di suddivisione in elementi finiti). Obiettivo di questo lavoro è evidenziare i problemi incontrati nella simulazione della pallinatura, ovvero nello studio dell'impatto reattivo a medie velocità al fine di indicare vantaggi e limiti legati all'impiego del metodo di calcolo esplicito per la modellazione numerica del trattamento.

G. Benedek (Università degli Studi di Milano e presidente del Comitato Scientifico del CMC, Centro di Modellistica Computazionale, del CILEA)

Considerazioni conclusive



Coloro che fossero interessati all'acquisto degli atti del convegno, devono farne richiesta scritta, anche tramite fax (02-2135520) al CILEA - Segreteria Tecnica
Il costo degli atti è di L. 100.000.=