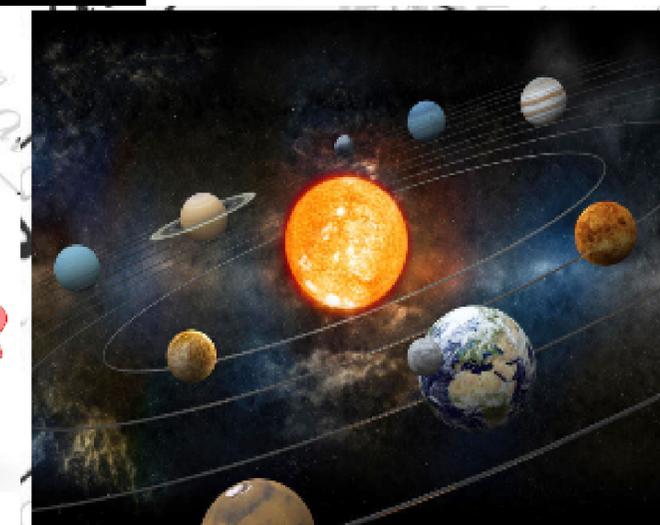
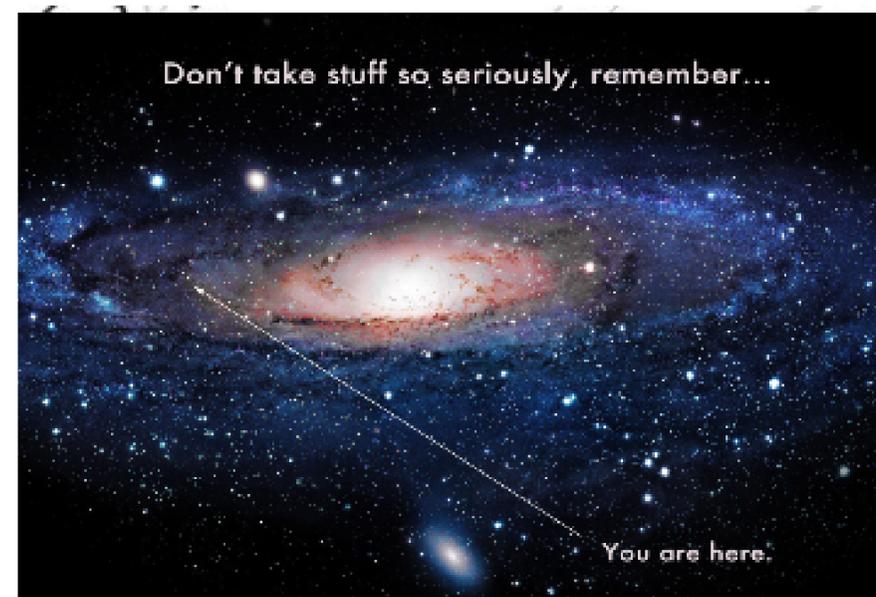


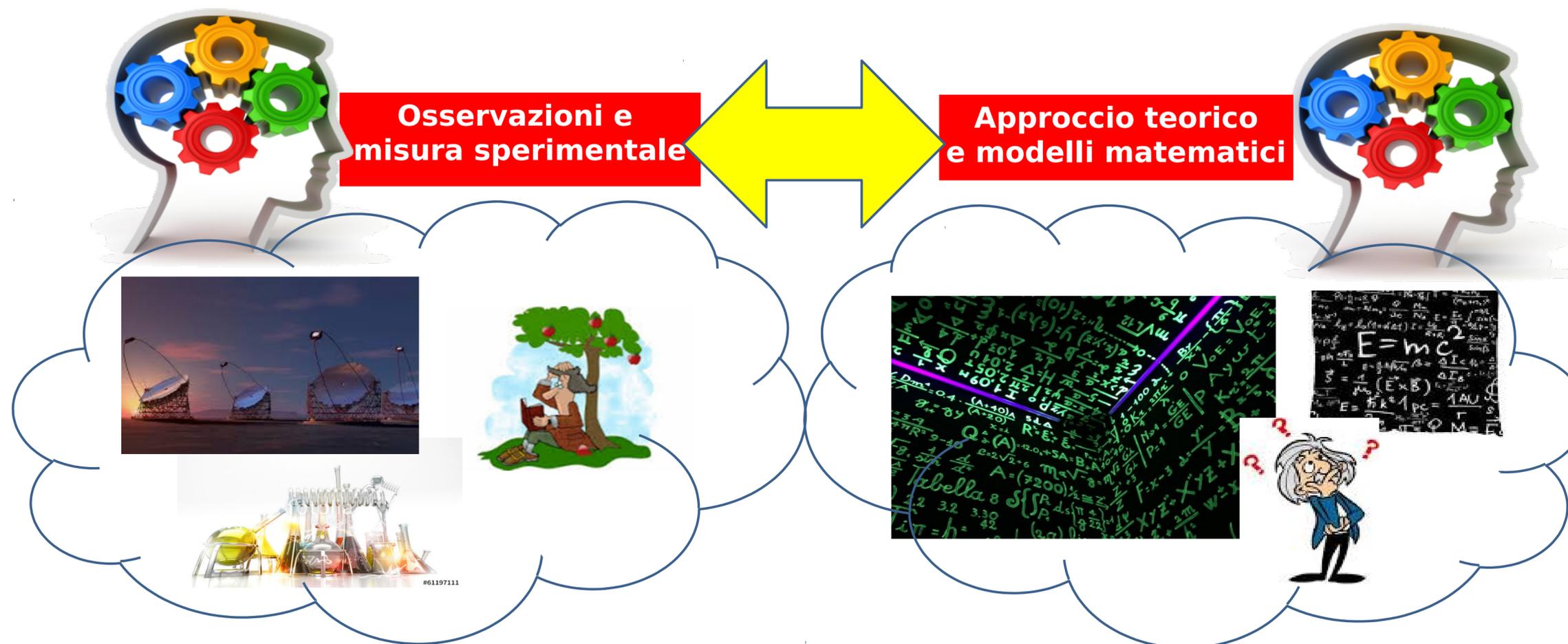


Da sempre l'uomo si è servito, e si serve, degli strumenti della **matematica** e del **calcolo** per comprendere, e gestire, la realtà nella quale vive





Quindi l'osservazione e l'approccio teorico possono essere considerati i due paradigmi tradizionali sul quale si basa la conoscenza scientifica.



Non sempre è però possibile effettuare un esperimento, o realizzare un prototipo, per verificare la correttezza di un approccio alla soluzione di un problema scientifico o tecnologico perchè ...

... è troppo **difficile** o **costoso**: ad esempio quando è necessario utilizzare gallerie del vento molto grandi per testare i velivoli

... è troppo **protratto nel tempo**: ad esempio nell'analisi dell'evoluzione del clima o delle galassie

... è troppo **pericoloso**: ad esempio nella progettazione di nuove medicine

L'uso dei computer diventa l'unico modo per simulare e analizzare i fenomeni grazie al fatto che tali fenomeni ...

... possono essere descritti mediante strumenti della matematica (**modelli**) ...

... “traducibili”, mediante **metodi numerici**, in **algoritmi** ...

... implementabili in **strumenti software** ...

... eseguibili su **infrastrutture di (super)calcolo**

**Calcolo Scientifico**

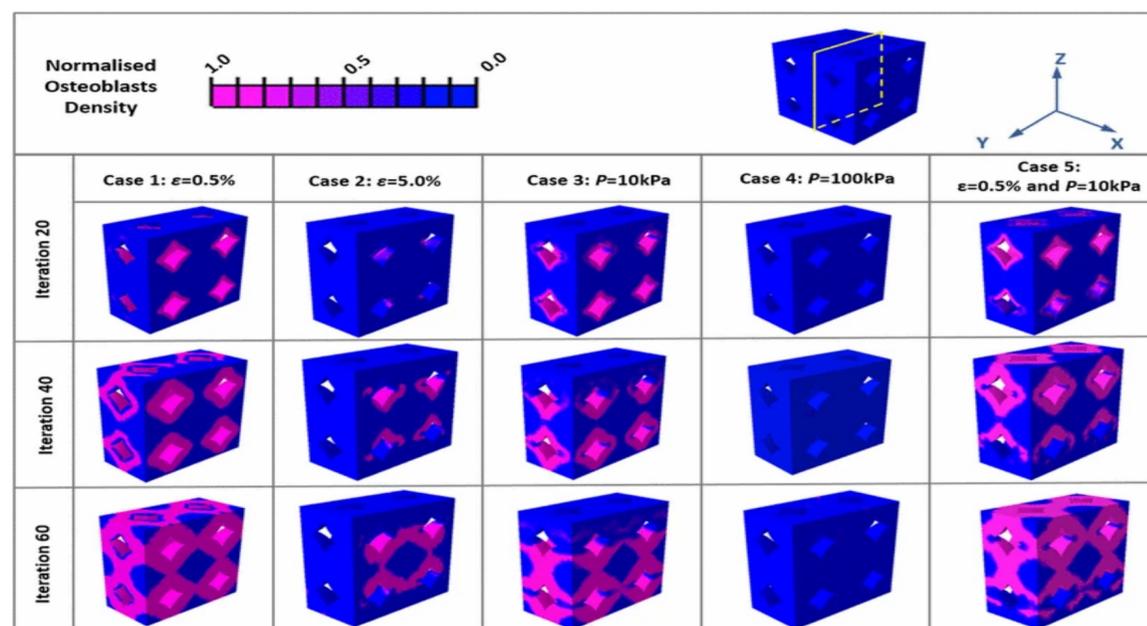
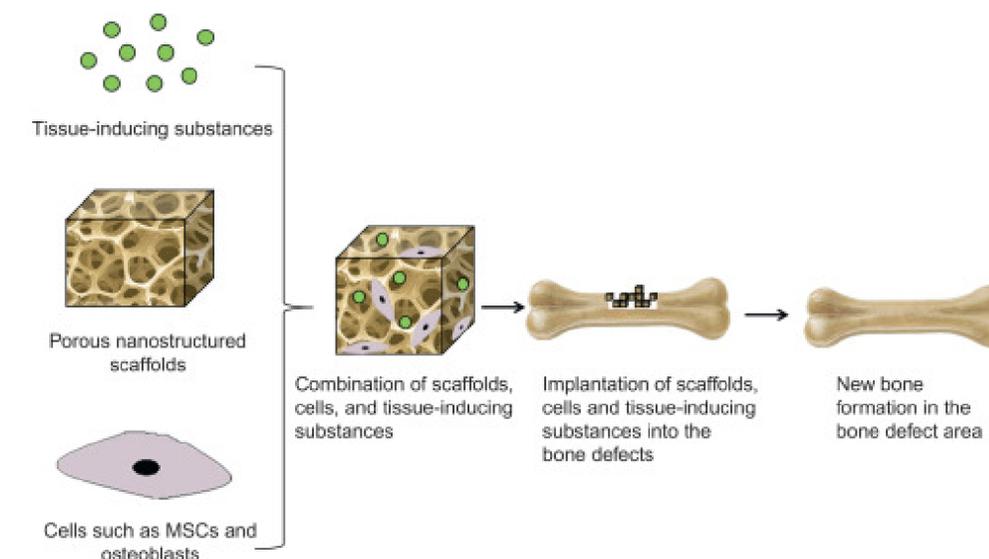


## Un esempio relativo alla rigenerazione dei tessuti ossei

L'ingegneria del tessuto osseo (ITO) mira a favorire la rigenerazione del tessuto osseo (come ad esempio nel caso di malattie come l'osteoporosi) o l'accelerazione del processo di guarigione (come ad esempio nel caso di fratture).

Al fine di imitare il processo di guarigione ossea naturale, la metodologia ITO prevede l'uso di supporti porosi (gli scaffold) realizzati con materiali ad-hoc, che servono a coprire temporaneamente il difetto osseo oltre a fornire lo spazio all'interno del quale possono proliferare le specifiche cellule che formeranno il nuovo osso

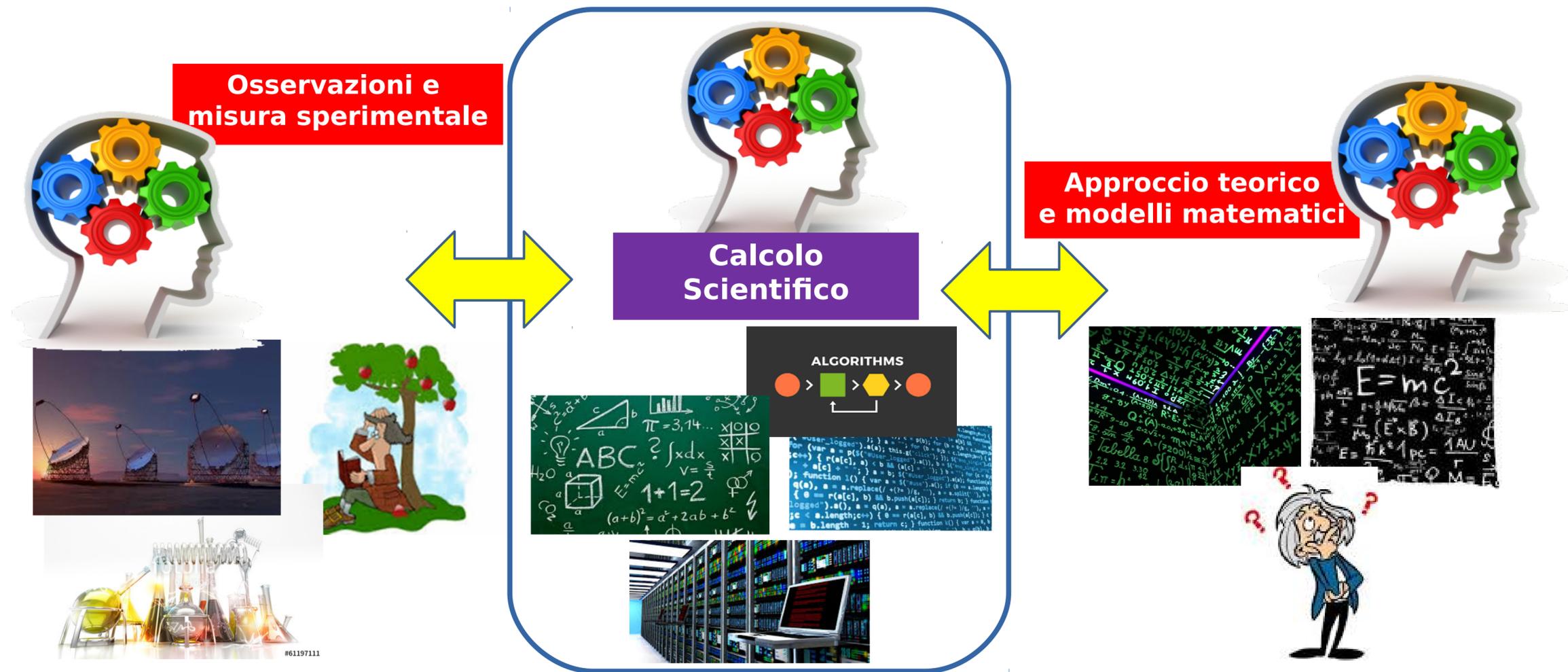
Lo sviluppo di protocolli per la crescita di tessuto osseo **"in vitro"** che siano di successo e riproducibili dipende da molte variabili come ad esempio il tipo di cellula o la forma dello scaffold. Tale sviluppo, che si basa in gran parte su un approccio per tentativi, è impegnativo, lungo e costoso.



La simulazione computazionale (sperimentazione **"in silico"**) può semplificare il processo di costruzione di tali protocolli identificando, in maniera "semi-automatica", i migliori valori per le variabili che li definiscono. I modelli possono inoltre esplorare l'impatto, sui processi di ricostruzione, di grandezze quali, ad esempio,

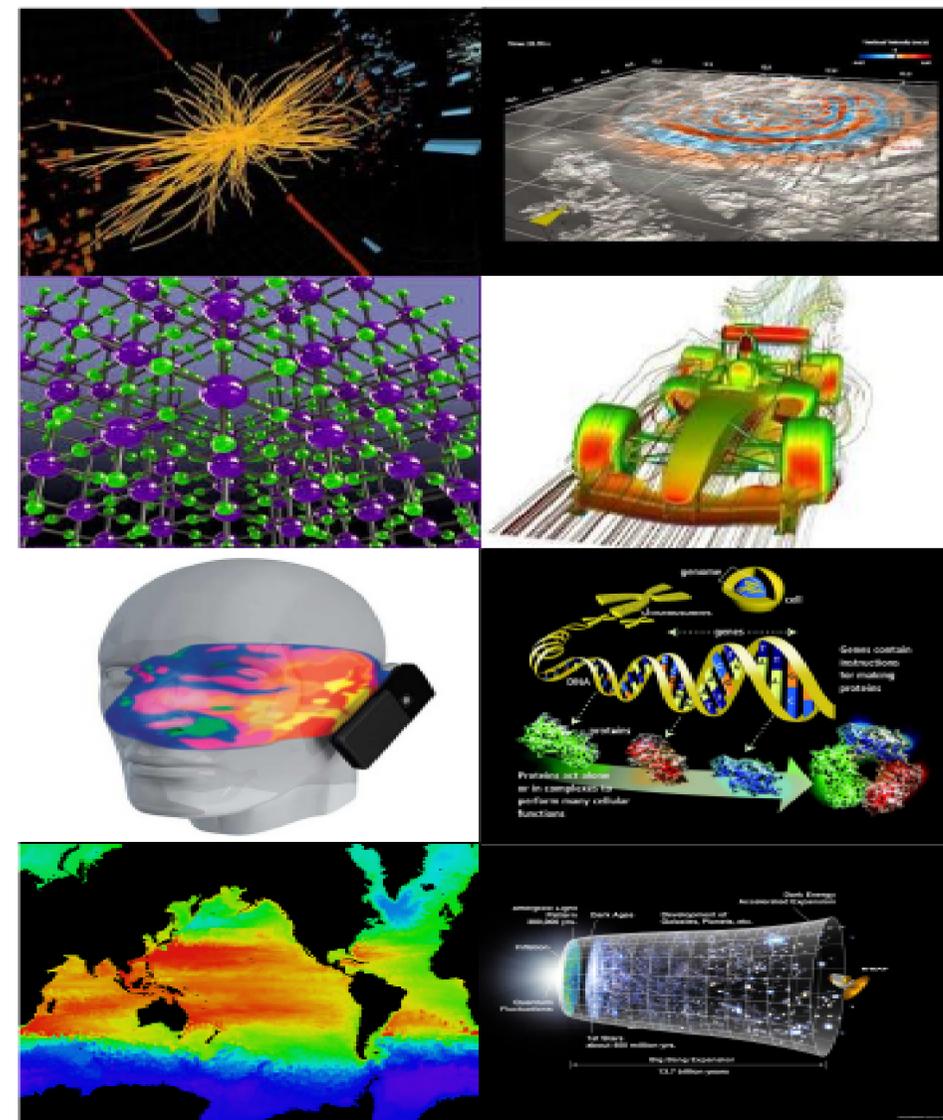
- la velocità del flusso sanguigno
- le concentrazioni di nutrienti quali l'ossigeno

L'uso del calcolo scientifico è ormai universalmente considerato essere il terzo paradigma nel processo di conoscenza



Esempi di problemi scientifici e dell'ingegneria che sono attualmente affrontati con l'utilizzo del calcolatori

- Fluidodinamica: per la progettazione di velivoli e veicoli
- Previsioni metereologiche e climatiche
- Progettazione di nuovi materiali (ad es. i superconduttori)
- Studio dei processi fisici alla base della fusione nucleare
- Studio della natura della materia (ad es. le nanostrutture, nanoparticelle)
- Fenomeni cosmologici ed astrofisica
- Studio del genoma umano, vegetale e realizzazione di nuovi farmaci
- Studio dei modelli finanziari ed economici
- Studio dei terremoti e di altri fenomeni naturali quali ad esempio gli Tsunami



## Come sono evolute le machine calcolatrici



colossus era un computer  
*special purpose*

### Il calcolatore Colossus

Dicembre 1943: diviene operativo il primo calcolatore elettronico, denominato «Colossus» nato dalla collaborazione di Alan Turing (matematico), Tom Flowers (matematico) e Max Newman (ingegnere)

Colossus fu in grado di forzare i codici sviluppati dalla cifratrice Lorenz SZ 40/42 (Enigma) usata dai tedeschi per proteggere la corrispondenza fra Adolf Hitler e i suoi capi di stato maggiore

Colossus fu sviluppato per decifrare i messaggi codificati. La macchina, programmabile, comparava due flussi di dati: Un flusso era il messaggio da decifrare, mentre il secondo era generato dalla macchina che cercava di individuare la chiave di codifica effettuando delle prove e confrontando i risultati.

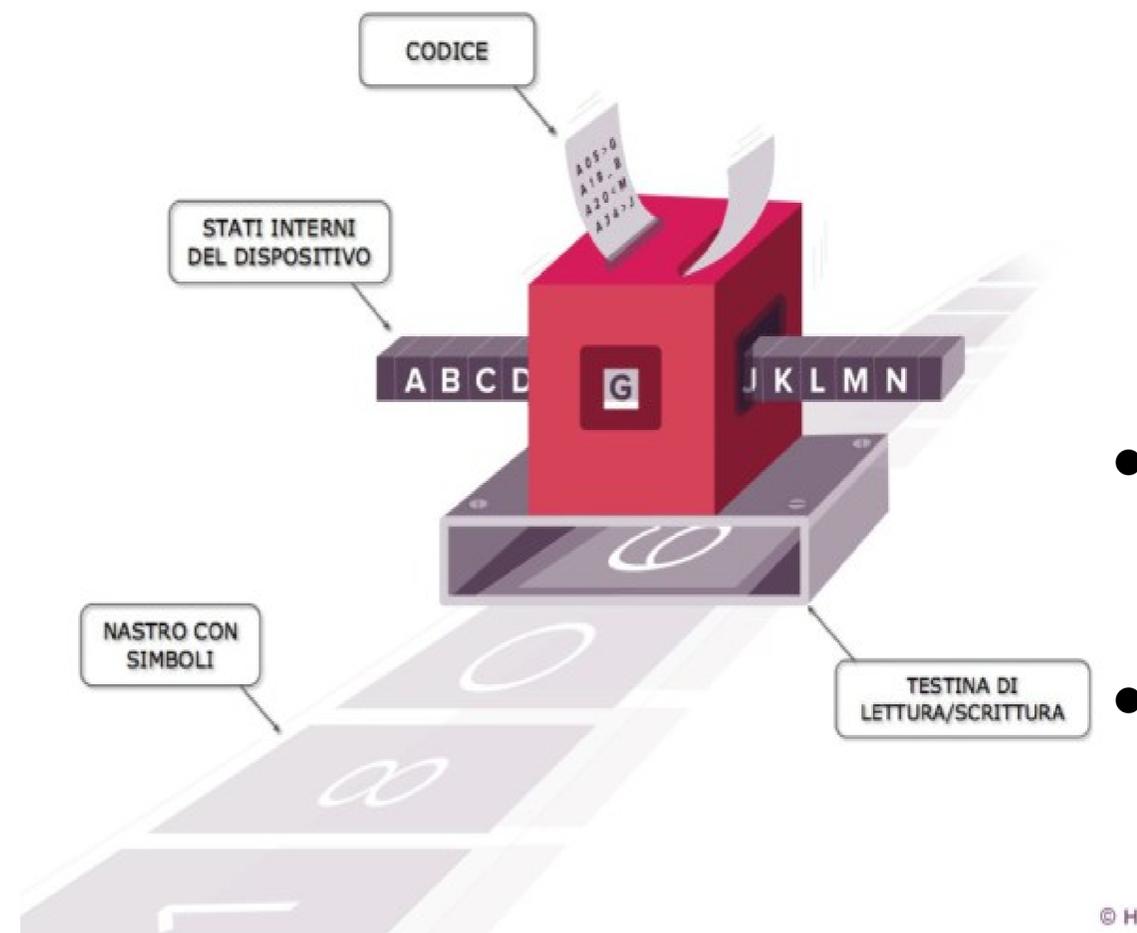
## Come sono evolute le macchine calcolatrici

### Alan Turing



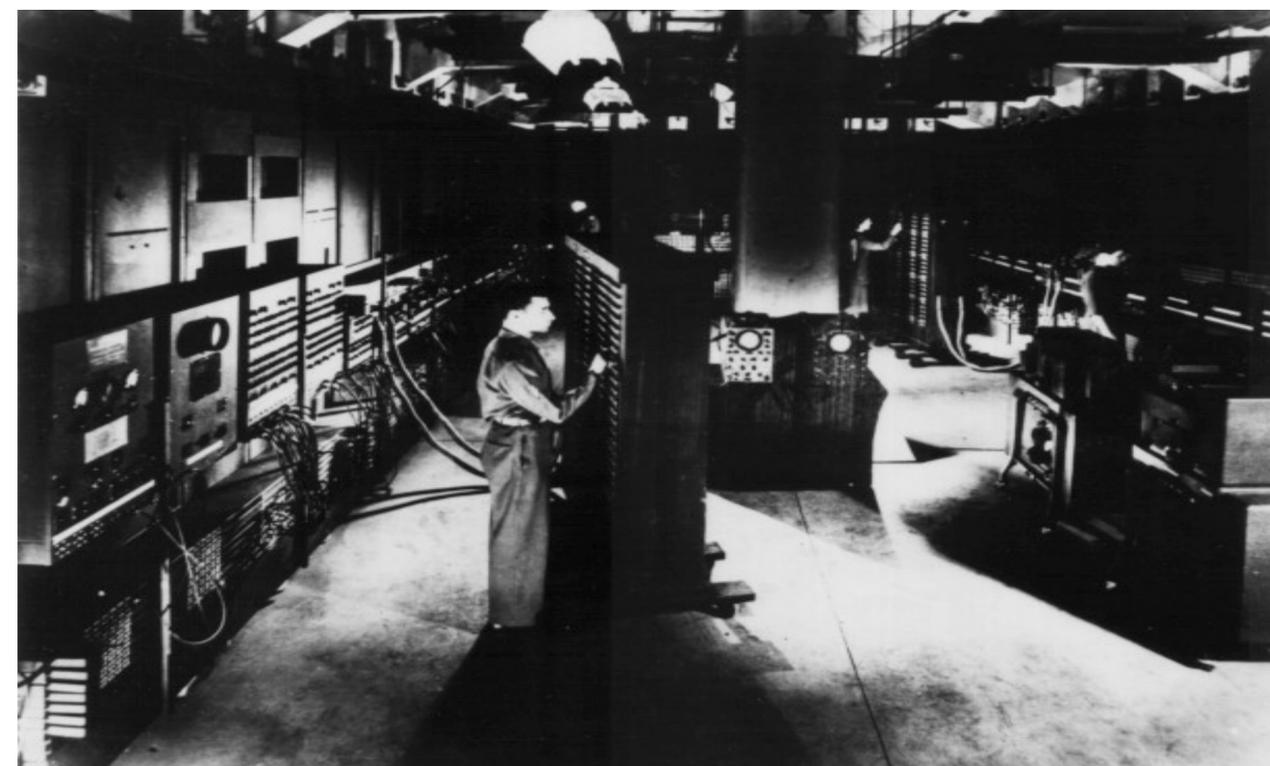
Nel 1936 il logico Alan Turing (1912-1954) enuncia il modello del calcolatore moderno, la cosiddetta "Macchina di Turing":

- è in grado di eseguire «atti primitivi» (non solo conti!) secondo uno schema che consente di risolvere ogni tipo di problema di logica simbolica in un numero finito di passi
- è un modello astratto che definisce una macchina in grado di eseguire algoritmi e dotata di un nastro potenzialmente infinito su cui può leggere e/o scrivere dei simboli



## Come sono evolute le machine calcolatrici

L'Electronic Numerical Integrator and Computer (ENIAC), 1946, è il primo computer elettronico general purpose della storia.



## ENIAC è l'antenato dei supercalcolatori moderni

- inizialmente realizzato ed utilizzato per scopi militari (calcolo delle traiettorie balistiche), era in grado di risolvere molti altri problemi basati sulla risoluzione di alcune equazioni differenziali (da ciò deriva il nome di integratore numerico)
- venne usato anche:
  - per scopi civili, come l'analisi dei dati dei censimenti
  - per **applicazioni scientifiche**, ad esempio John von Neumann se ne servì per realizzare la **prima previsione meteorologica al computer** (ENIAC fu in grado di processare **250000 operazioni in virgola mobile in circa 24 ore** e realizzare una previsione di 24 ore)

ENIAC era un computer  
**general purpose**

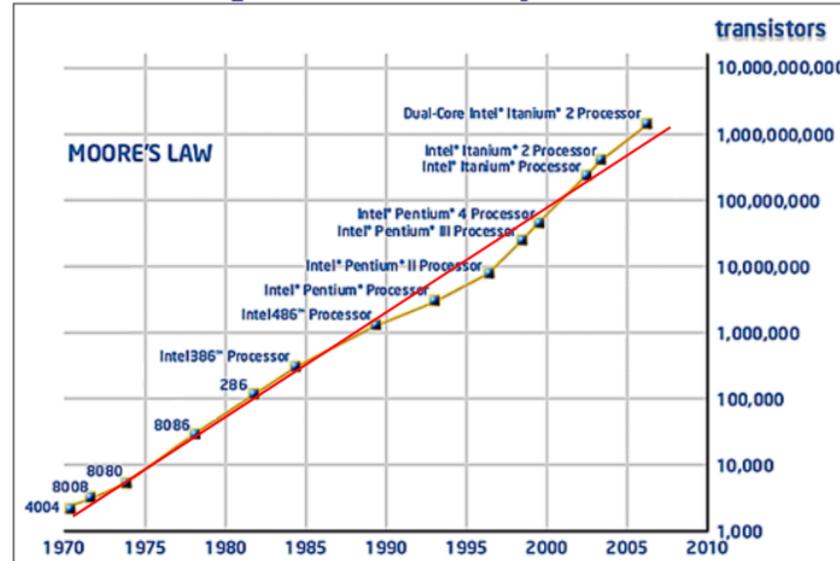
Era in grado di eseguire  
**250000/86400 ~ 3**  
operazioni *floating point* al  
secondo (flops)

## I calcolatori moderni

Nel 1965 Gordon Moore, uno dei fondatori di INTEL e dei pionieri della microelettronica, osservando l'evoluzione dell'hardware dei calcolatori, enunciò quella che va sotto il nome di 1° legge di Moore



Increasing Transistor Density -- Moore's Law



*"The number of transistors in a dense integrated circuit doubles approximately every two years"*

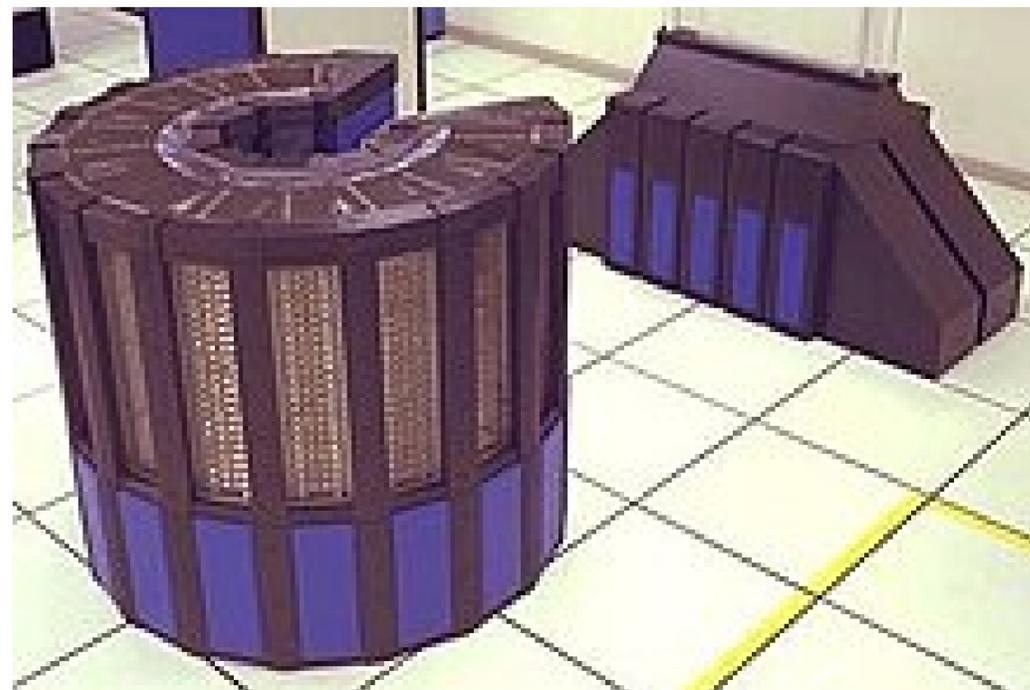
Per circa 20 anni questa legge empirica ha saputo descrivere abbastanza correttamente la realtà, ma qualcosa, ad un certo punto, l'ha resa inadatta a dare indicazioni sulla futura potenza computazionale dei processori

*la riduzione delle dimensioni dei transistor, e quindi della scala di integrazione, esponeva i circuiti ad effetti fisici di natura fortemente non deterministica minando alla base l'affidabilità dei processori con questi realizzati*

**Un limite fisico era stato raggiunto!**

## Nasce l'idea di "parallelismo"

Se la potenza computazionale di un unico processore non può più crescere, si può pensare di realizzare maggiore potenza di calcolo "aggregando" le capacità elaborative di più processori (o "unità processanti")

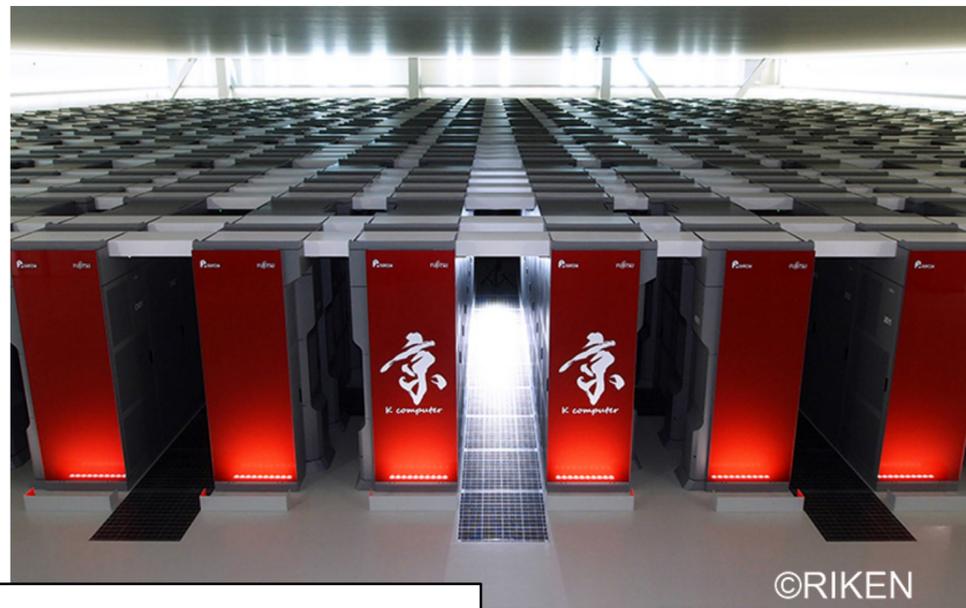


**Il supercomputer Cray-2**

- tra i primi esempi di calcolatore parallelo commerciale
- montava 4 cpu vettoriali ed è stato prodotto da Cray Research nel 1985
- era in grado di eseguire circa **2 GigaFlops (circa  $2 \cdot 10^9$  operazioni al secondo)**

## I'Era dello "EXASCALE COMPUTING"

... quando un calcolatore sarà capace di effettuare 10,000,000,000,000,000,000 (10<sup>18</sup>) operazioni floating point al secondo ...



#	Site	Manufacturer	Computer	Country	Cores	Rmax [Pflops]	Power [MW]
1	RIKEN Center for Computational Science	Fujitsu	Fugaku Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D	Japan	7,299,072	415.5	28.3
2	Oak Ridge National Laboratory	IBM	Summit IBM Power System, P9 22C 3.07GHz, Mellanox EDR, NVIDIA GV100	USA	2,414,592	148.6	10.1
3	Lawrence Livermore National Laboratory	IBM	Sierra IBM Power System, P9 22C 3.1GHz, Mellanox EDR, NVIDIA GV100	USA	1,572,480	94.6	7.4
4	National Supercomputing Center in Wuxi	NRCPC	Sunway TaihuLight NRCPC Sunway SW26010, 260C 1.45GHz	China	10,649,600	93.0	15.4
5	National University of Defense Technology	NUDT	Tianhe-2A ANUdT TH-IVB-FEP, Xeon 12C 2.2GHz, Matrix-2000	China	4,981,760	61.4	18.5
6	Eni S.p.A	Dell EMC	HPC5 PowerEdge C4140, Xeon 24C 2.1GHz, NVIDIA T. V100, Mellanox HDR	Italy	669,760	35.5	2.25



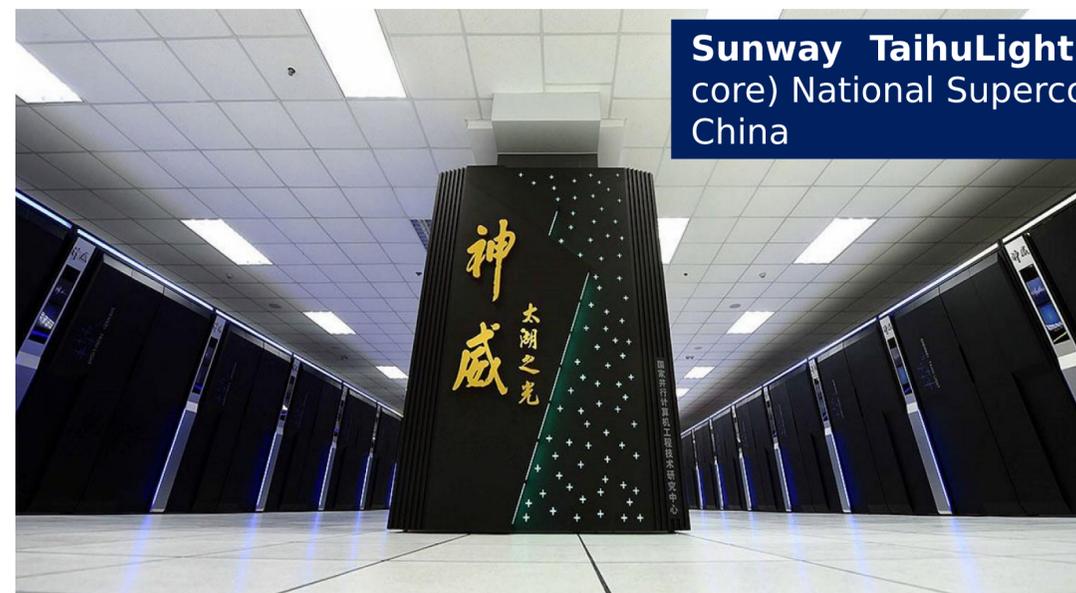
Le prime 6 posizioni della 55-sima TOP500 List  
<https://www.top500.org>

## Che aspetto hanno i supercalcolatori più potenti del mondo?

**Summit** (circa 2.5 milioni di core)  
DOE/SC/Oak Ridge National  
Laboratory  
United States



**Sunway TaihuLight** (circa 10,5 milioni di core)  
National Supercomputing Center in Wuxi  
China



**Tianhe-2°** (circa 5 milioni di core)  
National Super Computer Center in  
Guangzhou  
China

Ciascuno di questi  
calcolatori è in grado di  
eseguire centinaia di  
PetaFlops  
(circa  $10^{17}$  operazioni  
al secondo)



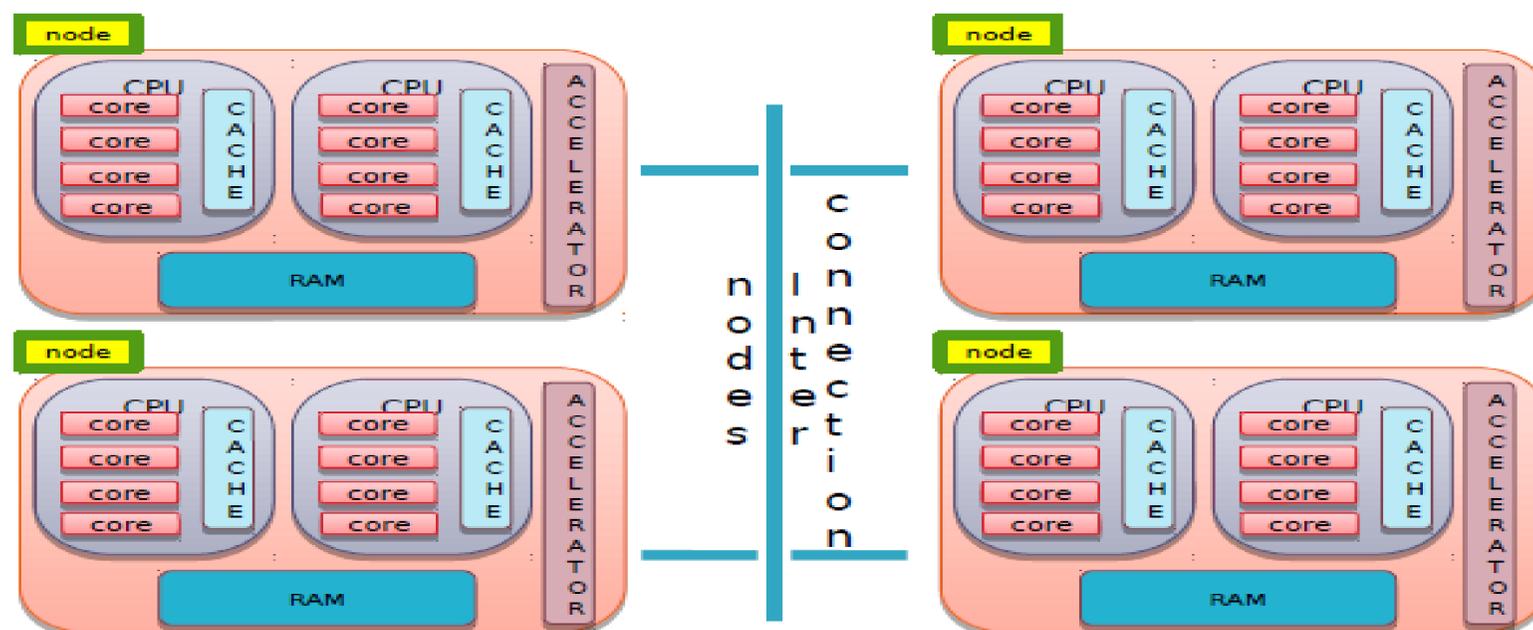
**Sierra** circa (1,5 milioni di core)  
DOE/NNSA/LLNL  
United States

## Che aspetto hanno i supercalcolatori più potenti del mondo “visti dall’interno”?

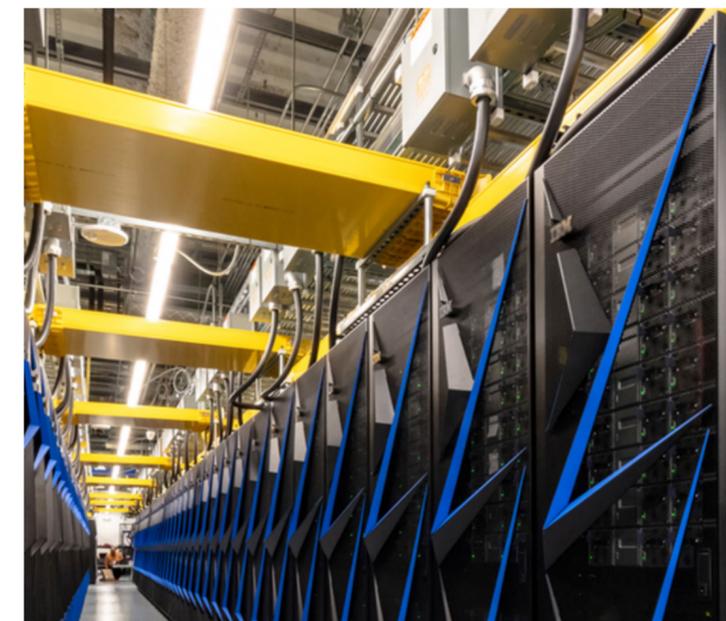
A very particular type of processing unit: the accelerators which mount thousands of cores

Memory is organized into levels

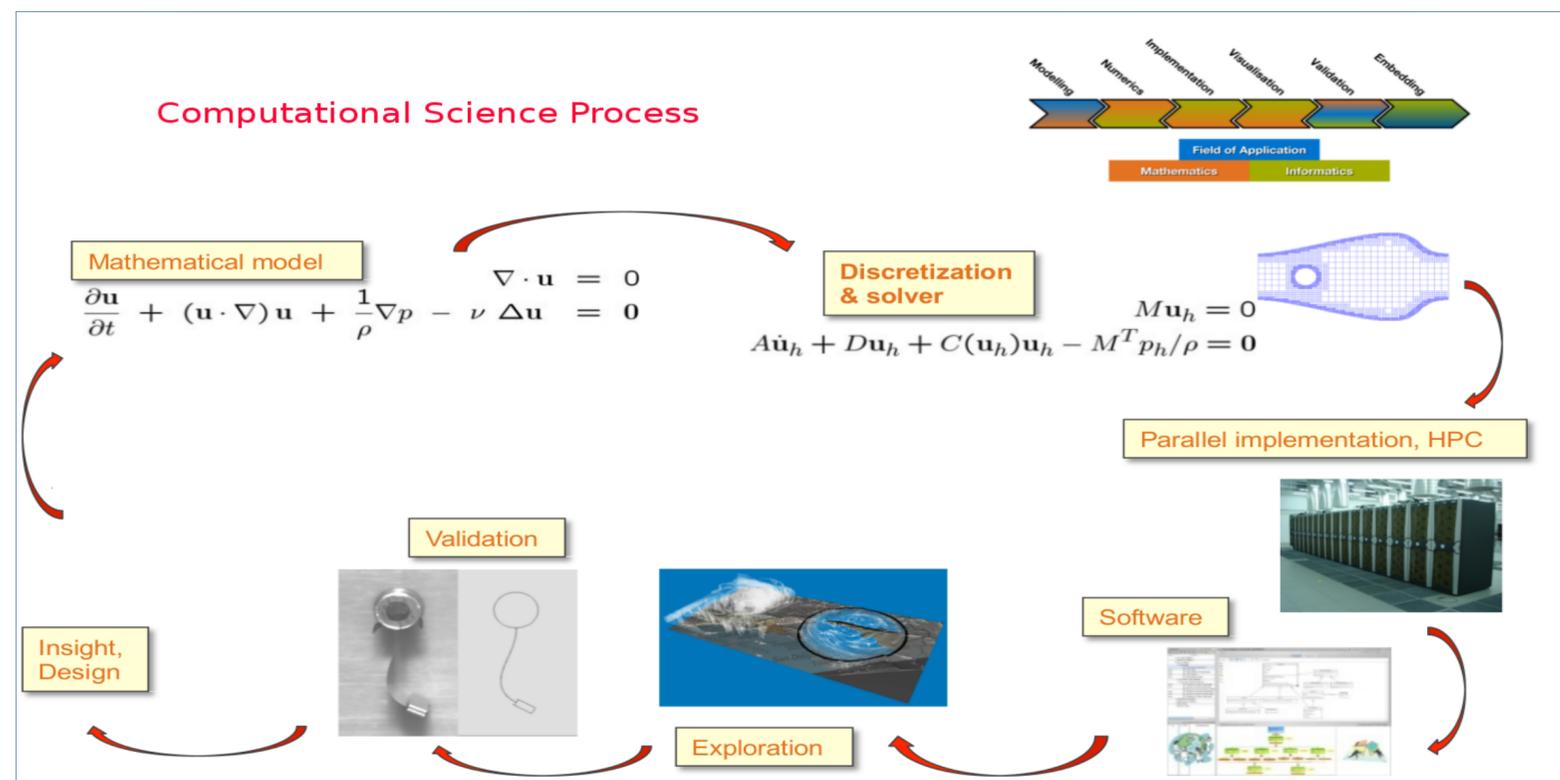
- Speed is inversely proportional to size
- The memory closest to the processing units is faster



- Several processing units (core/cpu) aggregate in a cpu/node sharing some memory devices
- Access to "remote" memory devices (on other nodes) is called "*communication*" and takes place thanks to an interconnection network

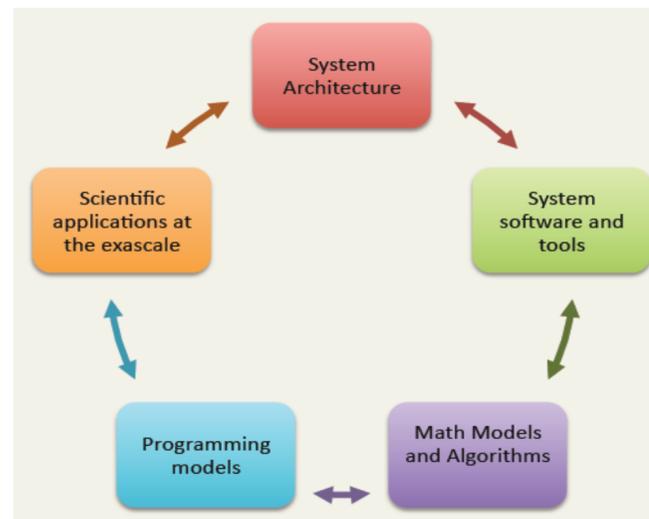


Il protocollo che è alla base del Calcolo Scientifico può essere considerato un archetipo del processo che la Scienza usa per consolidare la conoscenza e affermare la verità: gli scienziati lavorano con un approccio basato su una **forte interazione e integrazione di competenze in un flusso operativo che include continui adattamenti e correzioni.**



Il Calcolo Scientifico può abituarci a guardare **questioni complesse in termini di “pezzi” più semplici e interconnessi.** Tale “sguardo” genera negli individui ciò che J.Wing dice essere “l’attitudine” di saper guardare ai problemi usando la prospettiva “più giusta” per elaborare soluzioni che siano “abbastanza buone” per tutti.

Per supportare l'uomo nell'affrontare le grandi sfide della scienza e della tecnologia, risorse computazionali dovranno essere sempre più potenti, efficaci ed efficienti ...



... ciò sarà possibile se tutte le forze coinvolte nella progettazione e realizzazione di tali risorse, da chi formula i modelli a chi progetta gli algoritmi, da chi li implementa in un software a chi costruisce l'hardware, sapranno coordinarsi in un approccio **multidisciplinare e interdisciplinare**

Al momento, l'unico approccio possibile, per vincere le sfide del presente e del futuro, sembra essere quello basato sul principio che **“L'unione fa la forza!”** soprattutto se l'unione è quella di intelligenze e competenze differenti

