

# HPCC

## Workflow Orchestration Low-Code per l'Accesso alle Infrastrutture HPC on cloud

*S.Giusepponi*<sup>1</sup>, G.D'Amato<sup>2</sup>, A.Spinelli<sup>2</sup>, M.Catillo<sup>1</sup>, L.Bucci<sup>1</sup>, A.Mariano<sup>1</sup>,  
F.Buonocore<sup>1</sup>, S.Marchio<sup>1</sup>, G.Ponti<sup>1</sup>, M.Celino<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>ENEA-TERIN-ICT

<sup>2</sup>Sysman progetti & servizi

# HPCC - High Performance Computing on Cloud

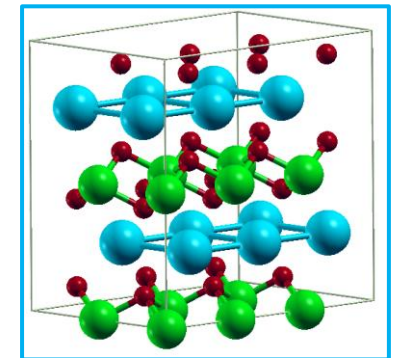
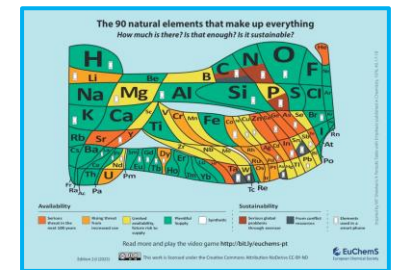
Collaborazione nasce con il progetto HPCC. Bando a cascata nell'ambito del progetto PNRR ICSC – Centro Nazionale per HPC, Big Data e Quantum Computing, SPOKE 7 MATERIALS & MOLECULAR SCIENCES



**L'obiettivo del progetto HPCC è l'implementazione di un modello innovativo di accesso ai servizi HPC, che coniughi le peculiarità del supercalcolo con un approccio “-as-a-Service” e un'immediatezza di fruizione tipica dei servizi del cloud computing.**

**Caso d'uso: identificare materiali catodici a base di sodio da utilizzare come alternative a quelli a base di litio mediante lo screening tra centinaia di migliaia/milioni di sistemi.**

**Ossido metallico lamellare  $\text{NaMnO}_2$  candidato promettente che può essere migliorato con la sostituzione del Mn con altri metalli di transizione come Ni, Ti, Fe, Zr....**



# HPCC - High Performance Computing on Cloud

Nuovo metodo AI + HPC per velocizzarne lo screening per la scoperta di materiali

~10<sup>5</sup>-10<sup>6</sup> configurazioni

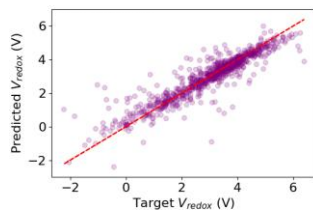
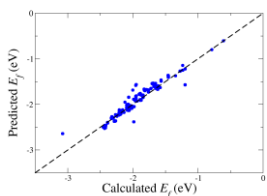
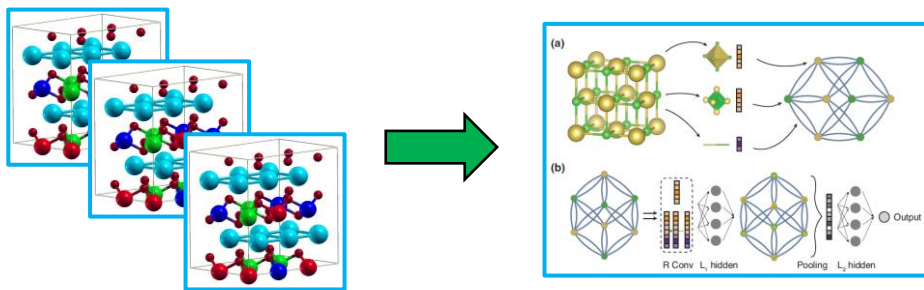
## Caratterizzazione fisico-chimica

- Energia di formazione
- Potenziale Redox

## Approcci computazionali

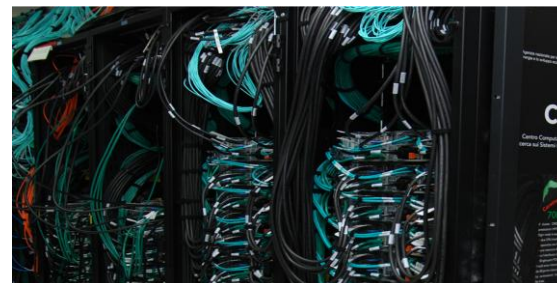
- Calcoli basati sul funzionale densità - DFT
- Tecniche AI/ML - GeoCGNN

Geometric Cristal Graph Neural Network



- M.Catillo et al. Machine learning for redox potential prediction and application on a Na-ion battery system. Solid State Sciences (2026) 177, 108336.
- C.Ronchetti et al. Study of Cathode Materials for Na-Ion Batteries: Comparison Between Machine Learning Predictions and Density Functional Theory Calculations. Batteries (2024) 10(12), 431.

ENEAGRID – CRESCO clusters  
Centri connessi rete GARR



9 centri di ricerca, 6 con servizi ICT e 4 con risorse HPC  
Cluster CRESCO Computational RESearch centre on COMplex systems

## Portici

- CRESCO8 (9 Pflops, ~800 nodi, ~100k core)  
**Posizione 228 nella TOP500 di giugno 2025**
- CRESCO7 (0,5 Pflops, 144 nodi, 6912 core)
- CRESCO6 (1,4 Pflops, 434 nodi, 20832 core)

## Frascati

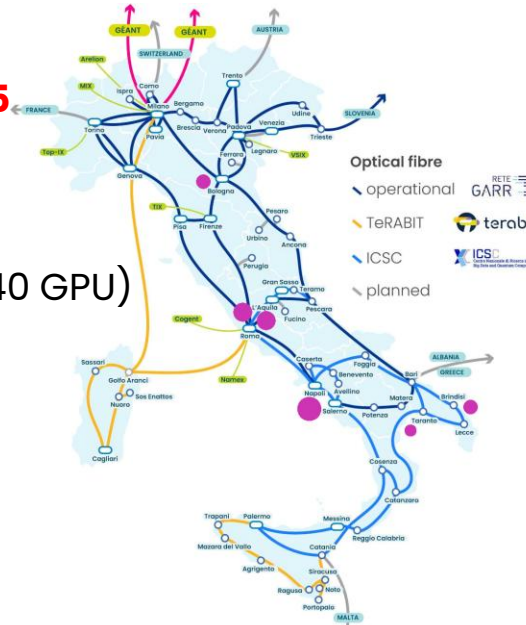
- XCRESO (1,9 Pflops, 60 nodi, 1920 cores, 240 GPU)
- CRESCO4F (20 Tflops, 64 nodi, 1024 core)

## Casaccia

- CRESCO4C (10 Tflops, 32 nodi, 512 core)

## Brindisi

- CRESCO8b (3 nodi, 192 core, 24 GPU)



# HPCC - High Performance Computing on Cloud

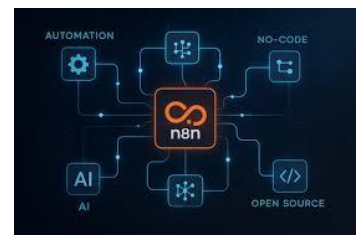
ENEAGRID – CRESCO clusters  
Centri connessi rete GARR

```

Terminal - giuseppi@crescob001-
File Edit View Terminal Tabs Help
For scp/sftp from NON ENEA networks please use cresco-io.portici.enea.it.
You are connected to cresco-in2.portici.enea.it.
Please select a frontend in the following list
Site HOST
-----
1) Portici: crescob001 (also for interactive jobs)
2) Portici: crescob002
3) Portici: cresco7x001
4) Portici: cresco7x002 (also for interactive jobs)
5) Portici: crescob001
6) Portici: crescob002
7) Portici: crescob001
Terminal - giuseppi@crescob001:~$ ssh -luser@heartest_PSP
File Edit View Terminal Tabs Help
total energy = -688.42031253 Ry
estimated scf accuracy < 2.50282056 Ry
total magnetization = 12.00 Bohr mag/cell
absolute magnetization = 12.12 Bohr mag/cell
iteration # 2 ecut= 100.00 Ry beta= 0.30
Davidson diagonalization with overlap
ethr = 4.32E-03, avg # of iterations = 4.0
negative rho (up, down): 9.320E-07 7.896E-07
total cpu time spent up to now is 19.2 secs
WARNING: integrated charge= 58.00247058, expected= 58.00000000
total energy = -688.31374920 Ry
estimated scf accuracy < 9.47347205 Ry
total magnetization = 6.34 Bohr mag/cell
absolute magnetization = 7.00 Bohr mag/cell
iteration # 3 ecut= 100.00 Ry beta= 0.30
479_8-1 16%
  
```



Terminale → GUI  
Utilizzo facilitato  
Contenitore unico  
Applicazioni grafiche



- S.Giusepponi et al. HPCC platform for materials discovery exploiting Machine Learning accettato per Journal of Physics: Conference Series.

- **Uso del cloud per HPC**
- **Approccio low-code**
- **Standardizzazione interfacce**
- **Workflow distribuito e trasportabile**
- **Uso facilitato codici HPC e AI**

**Grazie dell'attenzione**

[simone.giusepponi@enea.it](mailto:simone.giusepponi@enea.it)