

OPORTUNIDADES DE UTILIZAÇÃO HPC

Unidade de Computação Científica Nacional (FCCN) da FCT
João Pagaime, Elana Araújo, Catarina Guerreiro

IST - Programa para estudantes de mestrado
19 de maio de 2022



AGENDA

- 1) Centros operacionais nacionais**
- 2) Sistemas europeus**
- 3) Formas de acesso**

Aviso: tentámos representar o mais corretamente possível as características de cada centro, mas as arquiteturas tem evoluções constantes e cada centro não está obrigado a reportar à FCT-FCCN as capacidades em cada momento. Para confirmar dados e obter informações atualizadas contacte a RNCA

REDE NACIONAL DE COMPUTAÇÃO AVANÇADA

4 Centros Operacionais:

- Minho Advanced Computing Center
- Laboratório de Computação Avançada da Universidade de Coimbra
- *High Performance Computing* da Universidade de Évora
- Infraestrutura Nacional de Computação Distribuída

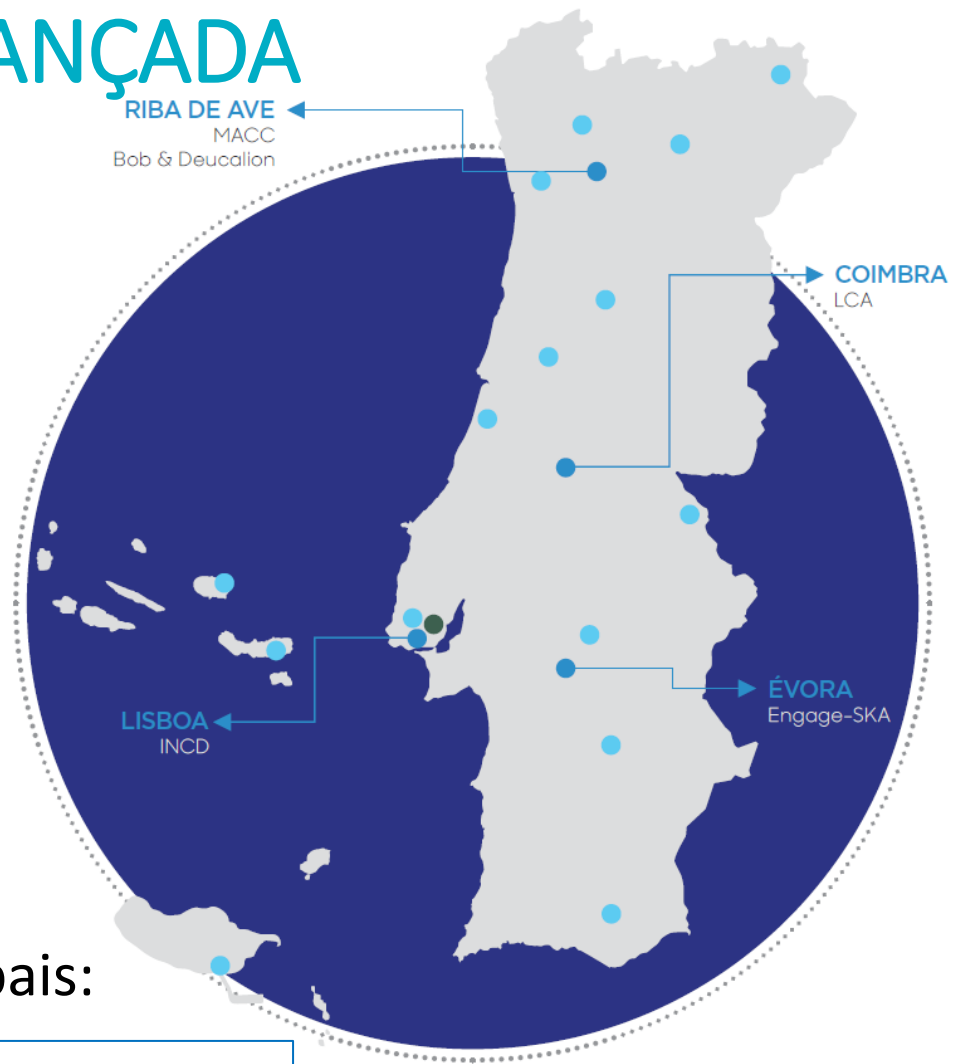
6 Centros de Competência e Visualização:

- Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro
- Universidade do Porto
- Universidade de Aveiro
- Universidade da Beira Interior
- IST – Universidade de Lisboa
- Universidade do Algarve

Parcerias principais:



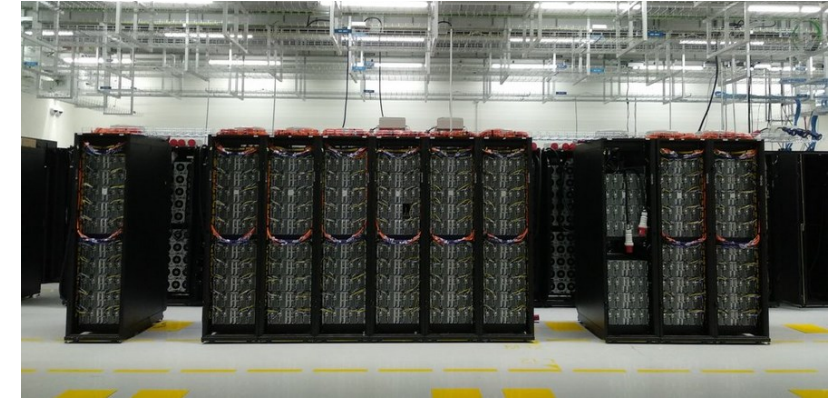
**Barcelona
Supercomputing
Center**
Centro Nacional de Supercomputación



MINHO ADVANCED COMPUTING CENTER



- Total de 600 nós computacionais (ligados: $200=5 \times 40 \Rightarrow \sim 70$ Tflops)
- Cada um com:
 - 2x Intel 8-core “Sandy Bridge” generation Xeon processors at 2.7Ghz
 - Com 32GB of RAM $\Rightarrow 2$ GB_RAM/CPU_core
- Armazenamento dados com 115 TB (Lustre), até 1,5PB (partilhado com outro centro)
- Mellanox FDR 56 Gb/s InfiniBand
- 2 nós com GPU: Nvidia Tesla T4
- Software disponível:
- <https://docs.macc.fcn.pt/en/macc/environment-modules>



Software stack

Some of the most relevant scientific software publicly available at bob are:

- FFTW
- GROMACS
- NLOpt
- OpenBLAS
- OpenFOAM & OpenFOAM-Extend
- PETSc
- ScaLAPACK
- Trilinos
- Mesa
- Mesquite
- NetCDF
- Octave
- Xbeach
- etc.

Lista parcial

Instalado num
cento de dados
comercial em Riba
d'Ave



- Sistema Navigator/Navigator+ (3.936 + 1.280 cores_CPU)
- 4 nós com GPU, cada um com 2 x NVIDIA Tesla V100 16 GB (~5.000 CUDA_core por cada v100)
- 1 nó de muito alta capacidade / "fat node":
 - 4 x Intel Xeon Gold 6154 (18-core) @ 3.00 GHz com 3 TB_RAM
- Interligação: EP Mellanox EDR ConnectX-4 100 Gbps
- Armazenamento dados (220 TB + 1,27 PB)

Software disponível -

<https://www.uc.pt/lca/ClusterResources/Navigator/programs>

Programs

- **Amber** (18) *

Amber (for Assisted Model Building with Energy Refinement) is a software package for performing molecular dynamics and structure prediction.

- **AmberTools** (18)

AmberTools is a free and open source software package for performing molecular dynamics.

- **CP2K** (6.1)

CP2K is a freely available (GPL) program, written in Fortran 95, to perform atomistic and molecular simulations of solid state, liquid, molecular and biological systems. It provides a general framework for different methods such as e.g. density functional theory (DFT) using a mixed Gaussian and plane waves approach (GPW), and classical pair and many-body potentials.

- **FDS** (6.7.3)

Fire Dynamics Simulator (FDS) is a large-eddy simulation (LES) code for low-speed flows, with an emphasis on smoke and heat transport from fires.

- **FreeSurfer** (6)

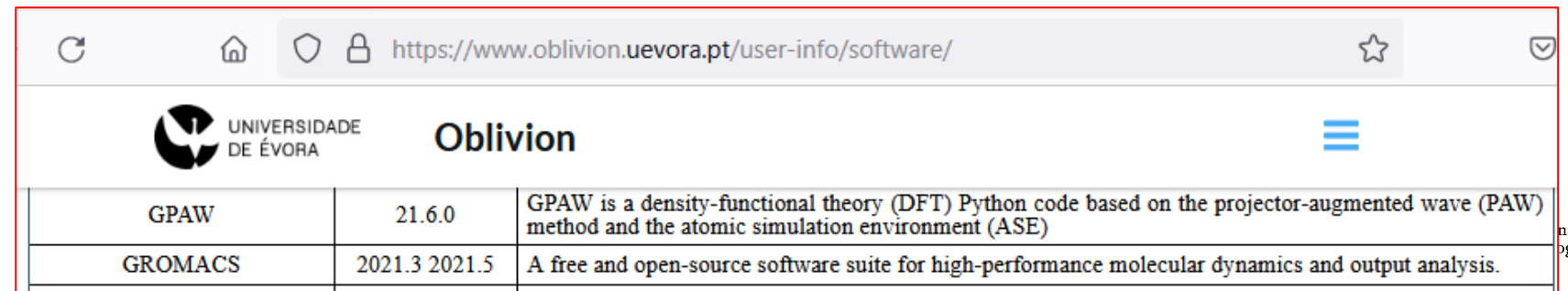
FreeSurfer is an open source software package for processing MRI images of the brain.

Lista parcial



- <https://hpc-portal.eu/node/659> - (HPC_UE) - High Performance Computing Center - University of Évora
- Oblivion - <https://rnca.fccn.pt/hpc-ue/>
 - Instalado em 2020 (*)
 - 68 nós com 2.492 cores
 - Cada nó tem 2x Intel Xeon Gold 6154 (36-core) @ 3GHz
 - Infiniband EDR (100G)
 - 239 TFlops de capacidade máxima de processamento
- Vision - <https://www.uevora.pt/ue-media/noticias?item=31200>
 - 2 nós do tipo (capacidade global de 2x5 petaflops):
 - NVIDIA DGX A100,
 - de 16 GPUs A100, 640GB de memória das GPUs e
 - 2 TB de memória RAM
- Armazenamento dados: ~1PB paralelo (BeeGFS)

Software disponível - <https://www.oblivion.uevora.pt/user-info/software/>



 UNIVERSIDADE DE ÉVORA Oblivion 		
GPAW	21.6.0	GPAW is a density-functional theory (DFT) Python code based on the projector-augmented wave (PAW) method and the atomic simulation environment (ASE)
GROMACS	2021.3 2021.5	A free and open-source software suite for high-performance molecular dynamics and output analysis.

(*) Entretanto terá havido upgrade



CPU	RAM	Net	#cores	Local
AMD Epyc 96 CORE	512 GB & 1TB	IB200 + 10GbE	4.992	Norte (*)
AMD Epyc 96 CORE (1)	512 GB & 1TB	IB56 + 10GbE	2.304	Lisboa
AMD Epyc 96 CORE (2)	256 GB & 512 GB	IB56 + 10GbE	2.112	Lisboa
INTEL Xeon 24 CORE	64 GB	1GbE	2.088	Lisboa
INTEL Xeon 16 CORE	32 GB	IB56 + 1GbE	2.560	Norte (**)

(1) Nvidia A100 (2 placas)

(2) Nvidia V100 (2 placas) e Nvidia T4 (8 placas)

(*) Futuro 2022

(**) Limitações potencia

Storage Type	Capacity (RAW)	Place
Lustre	4.680 TB	Lisbon
Lustre	1.920 TB	North
Lustre	824 TB	North
Ceph (block + object)	1.392 TB	Lisbon
Ceph (block + object)	2.880 TB	North

Software disponível -

<https://wiki.incd.pt/books/software/page/software-list>

```
15
16 ----- /etc/modulefiles/cirrus -----
17 aster-13.1.0          intel/gromacs/2019.3-fftw3
18 blat-36.2             intel/gromacs/2019.4
19 boost-1.55            intel/openfoam/1906
20 bowtie2-2.3.0         intel/openmpi/1.10.7
21 clang/7.0.0           intel/openmpi/4.0.1
```

Lista parcial

CAPACIDADE DISPONÍVEL EM CONCURSO



- Capacidade disponível em concurso $\neq$ Capacidade nos sistemas!

5 Dotação de recursos computacionais

A dotação de recursos computacionais do presente concurso é a constante da tabela seguinte e suas anotações, podendo a FCT reforçar os recursos disponíveis, se justificável. A soma da capacidade total disponível é de **36 milhões de CPU core.horas ou vCPU.horas e 105 mil GPU.horas.**

SISTEMAS EUROPEUS



- Novos sistemas europeus

System	Architecture	Site (Country)	Total Core Hours	Minimum request core hours
Vega CPU	BullSequana XH2000	IZUM Maribor (SI)	150 million	15 million
Vega GPU	BullSequana XH2000	IZUM Maribor (SI)	4.1 million	1 million
MeluXina CPU	BullSequana XH2000	LuxProvide (LU)	65.5 million	10 million
MeluXina GPU	BullSequana XH2000	LuxProvide (LU)	11.1 million	2 million
Karolina CPU	HPE Apollo 2000Gen10 Plus and HPE Apollo 6500	VSB-TUO, IT4Innovations, (CZ)	60 million	10 million
Karolina GPU	HPE Apollo 2000Gen10 Plus and HPE Apollo 6500	VSB-TUO, IT4Innovations, (CZ)	6 million	1 million
Discoverer CPU	BullSequana XH2000	Sofiatech, (BG)	104 million	10 million
LUMI-C	HPE Cray EX	CSC (FI)	262.8 million	20 million

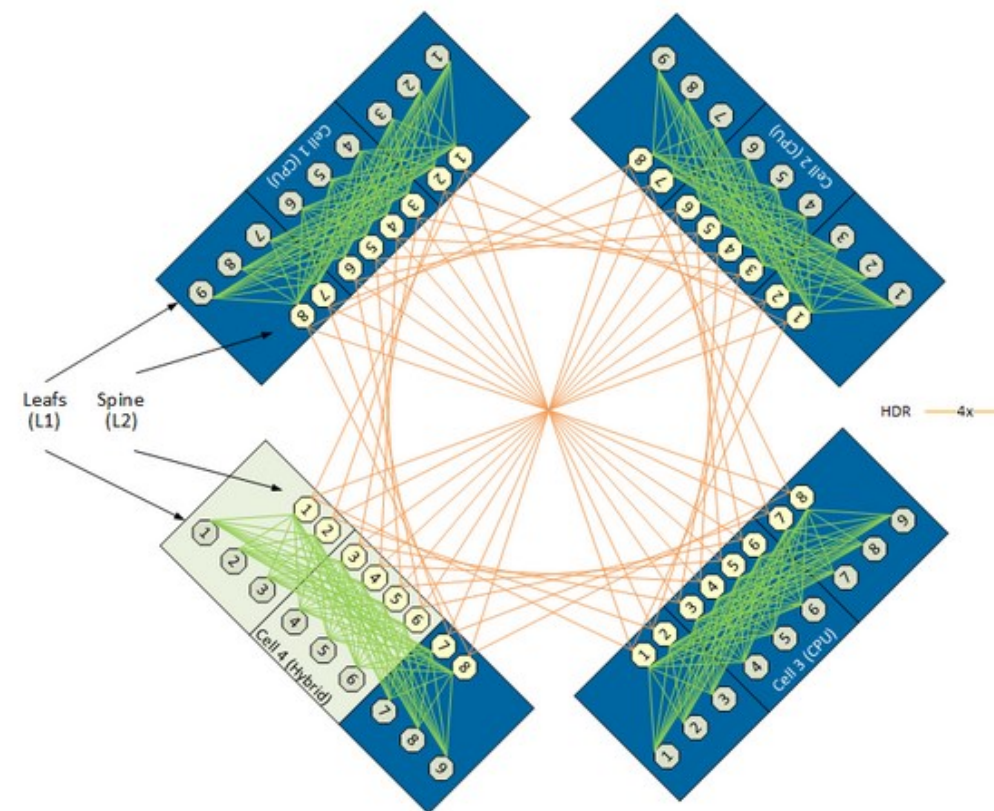
- PT/Deucalion: planeado para 2022

SISTEMAS EUROPEUS “VEGA” - ESLOVÉNIA



- <https://www.izum.si/en/vega-en/>
- 960 nós computacionais
 - (overall 1.920 CPUs AMD Epyc 7H12 – 122.000 cores) and
- 60 nós acelerados com GPU
 - (overall 240 GPUs NVidia A100)
- Débito de cálculo: *the sustained performance of HPC Vega is 6,9 PFLOPS*
- Armazenamento de dados
 - ~100 TB paralelo
 - ~12 PB normal

Interconnect Network consist of 68 x 40-port Mellanox HDR switch with Dragonfly+ topology:



SISTEMAS EUROPEUS “MELUXINA” - LUXEMBURGO

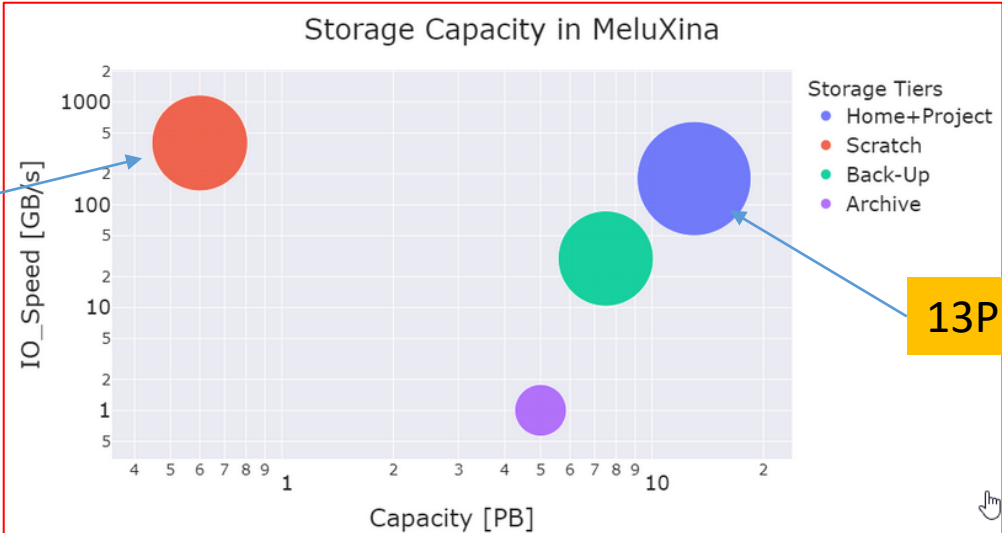


- <https://docs.lxp.lu/system/overview/>

Compute Module	#Nodes	Type	CPU	Accelerator	RAM	Disk	Interconnect	Total #Cores	Total RAM	HPL Perf.
Cluster	573	XH2000 (DLC)	2x AMD EPYC Rome 7H12 64c @ 2.6GHz	-	512GB	-	1xHDR200 SP	73.344	293TB	>2PFlops
Accelerator - GPU	200	XH2000 (DLC)	2x AMD EPYC Rome 7452 32c @2.35GHz	4x NVIDIA Ampere 40GB HBM	512GB	1.92TB SSD	2xHDR200 SP, dual-rail	12.800	102TB	>=10PFlops
Accelerator - FPGA	20	X430-A5	2x AMD EPYC Rome 7452 32c @2.35GHz	2x Intel Stratix 10MX 16GB HBM	512GB	1.92TB SSD	1xHDR200 DP, dual-rail	1.280	10TB	
Large Memory	20	X430-A5	2x AMD EPYC Rome 7H12 64c @ 2.6GHz	-	4096GB	1.92TB SSD	1xHDR200 DP, dual-rail	2.560	80TB	

- Débito de cálculo: 2 + 10 Pflop

0,6PB



SISTEMAS EUROPEUS “KAROLINA” – REP. CHECA



- <https://docs.it4i.cz/karolina/compute-nodes/>
- 829 nós computacionais
- Total e 106.752 núcleos de CPU (CPU core)
- Débito de cálculo (máximo, teórico): 15 Pflops
- *ranked in the top 10 of the most powerful supercomputers in Europe.*

interconnected through an InfiniBand HDR 200 Gbps

Armazenamento de dados:

Mountpoint	Usage	Protocol	Net Capacity	Throughput	Limitations
/home	home directory	NFS	31 TB	1.93 GB/s write, 3.1 GB/s read	Quota 25 GB
/scratch	cluster shared jobs' data	Lustre	1361 TB	730.9 GB/s write, 1198.3 GB/s read	Quota 20 TB

SISTEMAS EUROPEUS “DISCOVERER” - BULGÁRIA



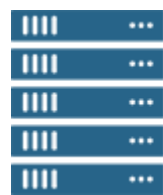
- <https://sofiatech.bg/en/petascale-supercomputer/>
- Débito de cálculo: 4,2 Pflops
- 376 nós computacionais, prefazendo 144.384 núcleos de CPU
- 2 PB de armazenamento de dados (tipo paralelo - DDN)



SISTEMAS EUROPEUS “LUMI” – FINLÂNDIA



- <https://www.lumi-supercomputer.eu/>

 **1 SYSTEM**
550+ Pflop/s
PEAK PERFORMANCE

 **117 PB**
STORAGE 

- Nós computacionais (sem aceleração)
 - 196.608 núcleos de CPU, em dois CPUs por nó do tipo *64-core 3rd-generation AMD EPYC™ CPU*
- Partição acelerada com GPUs
 - 2.560 nós
 - Cada nó com 4xAMD MI250X GPUs.
 - Cada GPU com 14.080 stream processors.

RESUMO DOS SISTEMAS DISPONÍVEIS ATUALMENTE



Rede Nacional de Computação Avançada (RNCA)

Centro	Sistema	CPU	GPU	Storage	Obs.
MACC	Bob (*)	200x2x(8-core “Sandy Bridge”)	2x Nvidia Tesla T4	115 TB Até 1,5 PB (**)	
LCA-UC	Nav. + Nav.+	3.936 + 1.280 core_CPU	4x 2 NVIDIA Tesla V100	220 TB + 1,3 PB	
HPC_UE	Oblivion	68x2x Intel Xeon Gold 6154 (36-core)		1PB	
	Vision	2x NVIDIA DGX A100	2x 16 GPUs A100		~2x5 Pflop!
INCD	Lx-1	2.304 cores em AMD Epyc 96	2x Nvidia A100	6 PB raw	
	Lx-2	2.112 cores em AMD Epyc	2x Nvidia V100 e 8x Nvidia T4		
	Lx-3	2.088 cores em Intel Xeon			
	Norte-1 (*)	2.560 cores em Intel Xeon		Até 1,5 PB (**)	

(*) Limitações energia. Max=600 compute nodes vs. 200

(**) partilhado com 2 centros

EuroHPC (novos)

País	Sistema	CPU	GPU	Storage	Obs.
Eslováquia	Vega	112.000 cores	240 GPUs NVidia A100	100T+12P	
Luxemburgo	Meluxina	73.344 cores	200x4 Placas Nvidia		FPGA
Rep. Checa	Karolina	106.752 cores		1,4P	
Bulgária	Discoverer	144.384 cores		2P	
Finlândia	LUMI	196.608 cores	2.560 x 2x Placas AMD	>100P	E. Hidro elect.

... e outros via PRACE

FORMAS DE ACESSO

CONCURSOS PRACE / EUROHPC E OUTROS



Concursos PRACE

A Associação **PRACE** - Partnership for Advanced Computing in Europe - promove a colaboração e a utilização da computação de alto desempenho ou High Performance Computing (HPC) a nível europeu. A participação portuguesa no PRACE é assegurada pela Universidade de Coimbra, com o apoio da FCT. Os concursos PRACE atribuem recursos de computação avançada, não sendo atribuído qualquer subsídio financeiro.



Contacto nacional da PRACE: prace_info@uc.pt

Para mais informações sobre o acesso a recursos computacionais do PRACE, consulte esta [página](#).

Acesso preparatório PRACE - [acesso aberto](#)

Concursos EuroHPC

A EuroHPC é uma Iniciativa Tecnológica Conjunta, criada no âmbito do Artº 187 do Tratado do Funcionamento da União Europeia, que envolve a Comissão Europeia e os Estados-Membros e Associados, contando também com o apoio da Plataforma Tecnológica Europeia para a Computação de Alto Desempenho (ETP4HPC) e da Big Data Value Association (BDVA). O objetivo da EuroHPC é contribuir para colocar a União Europeia na liderança das tecnologias de computação de alto desempenho, apoiando o desenvolvimento de supercomputadores de exaescala.



EuroHPC
Joint Undertaking

Para mais informações sobre a EuroHPC, consulte esta [página](#).

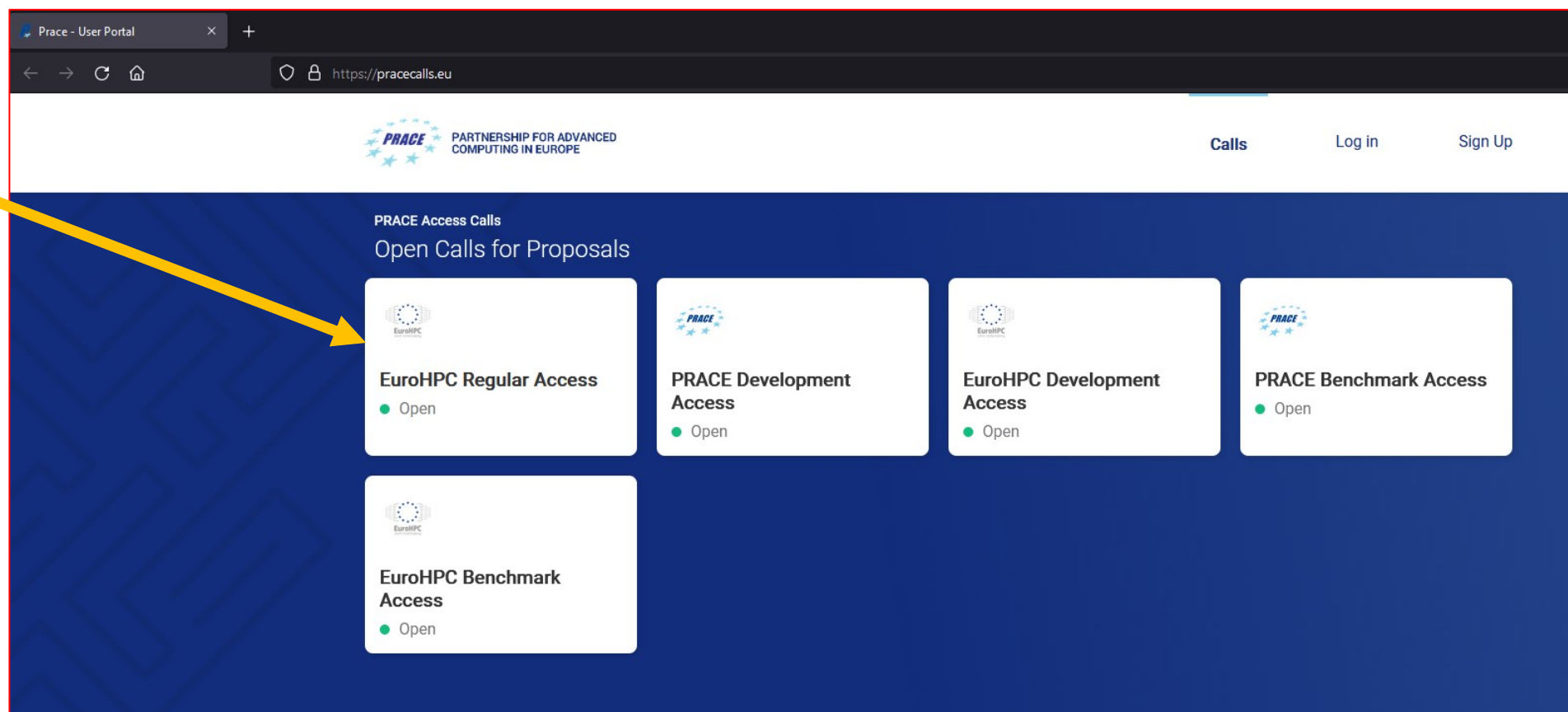
Para mais informações sobre o acesso a recursos computacionais do EuroHPC, consulte esta [página](#).



CONCURSOS PRACE / EUROHPC E OUTROS

<https://pracecalls.eu/>

1-jul, 7-out



Apoio à candidatos nacionais via Centro de Competências Português:

CONCURSOS NACIONAIS DE ACESSO



Apoios	Concursos	Media	Estatísticas	Sobre a FCT
FCT > Apoios				



Concursos da Rede Nacional de Computação Avançada (RNCA)

A FCCN, Unidade de Computação Científica Nacional da FCT, promove o desenvolvimento da Rede Nacional de Computação Avançada (RNCA), coordenando recursos nacionais de computação avançada, fomentando a cooperação entre os vários centros envolvidos e desenvolvendo parcerias nacionais e internacionais com outras entidades. Neste contexto, são promovidos concursos regulares para suportar tecnologicamente projetos de computação avançada em todos os domínios científicos.

Contacto da RNCA para informações: rnca@fccn.pt

2022

- 1ª edição de Concurso de Projetos de Computação avançada: Inteligência Artificial em Cloud

2021

- 2ª edição do Concurso de Projetos de Computação Avançada

2020

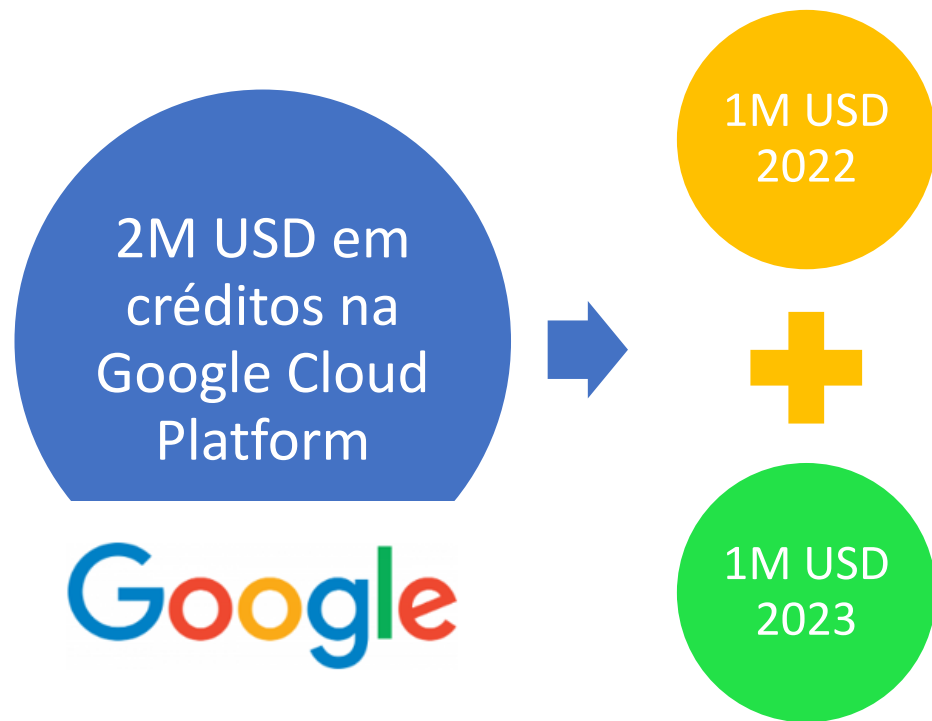
- 1ª edição do Concurso de Projetos de Computação Avançada
- Projetos de I&D AI 4 COVID-19: Ciência dos Dados e Inteligência Artificial na Administração Pública – 2020



CONCURSOS DE PROJETOS DE COMPUTAÇÃO AVANÇADA

2022

CONCURSO DE PROJETOS DE COMPUTAÇÃO AVANÇADA: INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL EM *CLOUD*



**AVISO PARA APRESENTAÇÃO DE CANDIDATURAS PARA
CONCURSO DE PROJETOS DE COMPUTAÇÃO AVANÇADA:
INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL EM *CLOUD***

**NAS ÁREAS PREFERENCIAIS DE PROCESSAMENTO DE LINGUAGEM NATURAL E ÉTICA NA
INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL**

Ref.: FCT/CPCA-IAC/2022/01

QUE PROJETOS SÃO ELEGÍVEIS?

Projetos de investigação, desenvolvimento ou inovação que utilizem a oferta da Google Cloud Platform.

- Aplicam-se as seguintes quotas:
 - **80% são para as áreas preferenciais do concurso: Processamento de linguagem natural e Ética na inteligência artificial.**
 - 20% são reservados às restantes áreas científicas com utilização da oferta GCP em inteligência artificial e algoritmos de análise de dados.
- Caso os recursos solicitados não esgotem os disponíveis, a parte remanescente pode ser atribuída a quaisquer outras áreas.

QUEM SE PODE CANDIDATAR?

- Instituições de I&D
- Empresas que desenvolvam projetos de computação avançada em atividades de investigação, desenvolvimento ou inovação.
- Instituições estrangeiras desde que participem como parceiras.
- **Pessoas singulares que exerçam atividade em Portugal.**

- Pelo novo Regulamento de Projetos de Computação Avançada (Regulamento n.º 10/2022) pessoas singulares podem candidatar-se, desde que:
 1. Exerçam atividade em Portugal
 2. Pretendam desenvolver projetos de computação avançada em qualquer área científica.
 3. Grau académico, por ex., licenciatura, mestrado ou doutoramento, não é requisito. Contudo, o curriculum dos candidatos é um critério de avaliação neste concurso.

COMO SE CANDIDATAR?

www.fct.pt

De 30 de março de 2022 a 18 de maio de 2022.

Extensão prazo até ao dia 30 de maio.



The screenshot shows the FCT website navigation menu with 'Concursos' selected. A dropdown menu lists 'Emprego Científico', 'Projectos', 'Prémios CoLAB', and 'Computação'. The 'Computação' option is highlighted with a hand cursor. The main content area displays the title 'Recursos de Computação Avançada para Investigação e Inovação' and the specific competition: 'Concurso de Projetos de Computação avançada: Inteligência Artificial em Cloud (1ª edição)'. A green box under 'Em Destaque' announces the opening of applications from March 30 to May 18, 2022. The 'Visão geral e objetivos' section describes the SCTN's goals. A sidebar on the right lists 'DOCUMENTOS DE APOIO' and 'ONDE CONCORRER'. The 'ONDE CONCORRER' section has a red circle around 'Acesso Fixo' and 'Acesso Variável'.

Apoios Concursos Media Estatísticas Sobre a FCT

FCT > Apoios > Concurso de Projetos de Computação Avançada: Inteligência Artificial em Cloud

Emprego Científico Projectos Prémios CoLAB Computação

Recursos de Computação Avançada para Investigação e Inovação

Concurso de Projetos de Computação avançada: Inteligência Artificial em Cloud (1ª edição)

Computação

Em Destaque

23.03.2022 – Abertura das Candidaturas para **Concurso de Projetos de Computação Avançada: inteligência artificial em cloud** a partir do dia 30 de março de 2022 e até 18 de maio de 2022.

Visão geral e objetivos

A consolidação e o reforço do Sistema Científico e Tecnológico Nacional (SCTN) constituem prioridades da política de ciência e tecnologia. Através destas prioridades visa-se contribuir para a competitividade nacional e internacional da ciência e tecnologia, promover a inovação e transferência de conhecimento, assim como contribuir para a realização das aspirações globais definidas nos Objetivos para o Desenvolvimento Sustentável (ODS) das Nações Unidas. Neste contexto, a FCT procura promover o reforço de competências das instituições científicas e tecnológicas através da sua participação em projetos de computação avançada.

A FCT tem a atribuição de gerir meios computacionais avançados disponíveis em rede e promover a sua acessibilidade às diferentes entidades do Sistema Educativo e do Sistema Científico e Tecnológico Nacional, independentemente da sua natureza pública ou privada.

Como parte do seu esforço crescente para apoiar a investigação de excelência no meio académico português, a Google disponibilizou à FCT créditos na Google Cloud Plataforma (GCP) no valor de 1M USD (um milhão de Dólares dos Estados Unidos).

A FCT gere a **Rede Nacional de Computação Avançada (RNCA)** procurando agregar os recursos nacionais de computação avançada, promovendo a cooperação entre os vários centros envolvidos e desenvolvendo parcerias nacionais e internacionais com outras entidades. Assim, a FCT abre o presente Concurso de Projetos de Computação Avançada, para suportar projetos de investigação e desenvolvimento nas áreas preferenciais de **"Processamento de linguagem natural"** (*Natural Language Understanding*) e **"Ética na Inteligência Artificial"** (*Ethical Artificial*).

DOCUMENTOS DE APOIO:

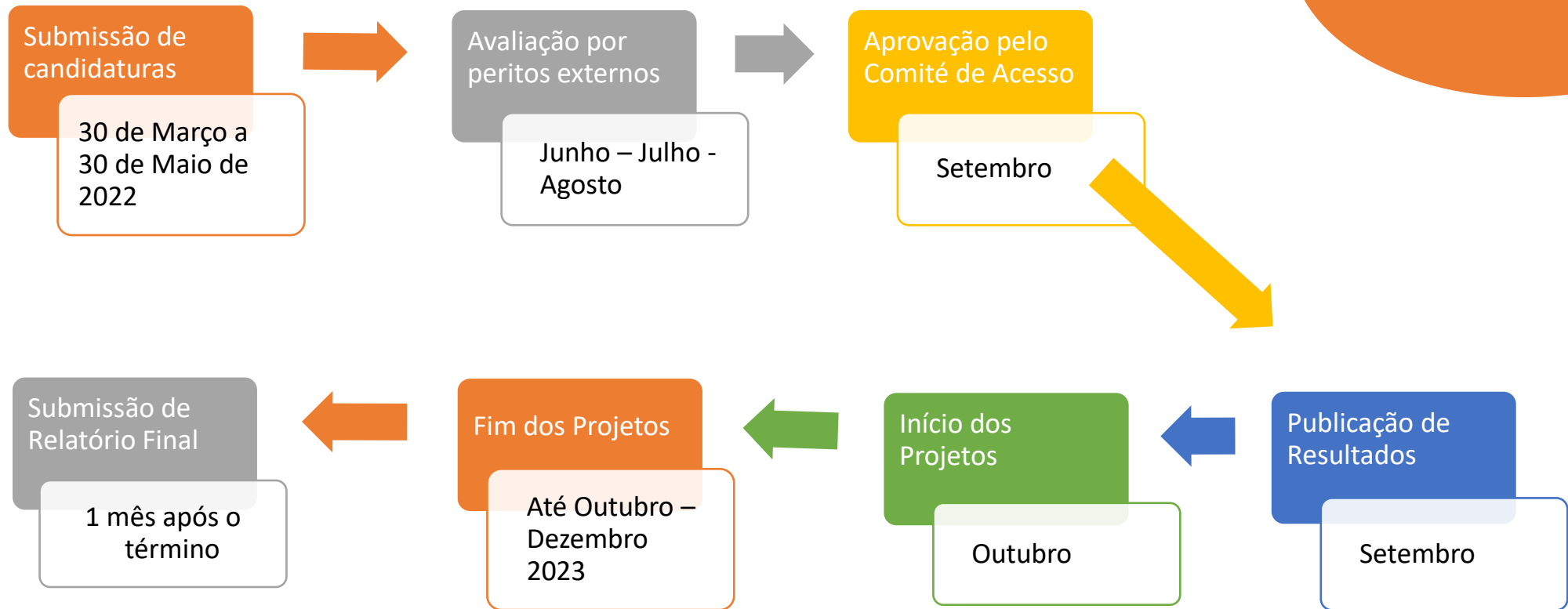
- Aviso de Abertura
- Guião de Candidatura
- Guião de Avaliação
- Regulamento de Projetos de Computação Avançada
- Guião do CiênciaVitae
- Template "Workplan"
- Template "Data Management Plan"
- Boas Práticas Google + FCT
- FAQs

ONDE CONCORRER

- Acesso Fixo
- Acesso Variável

CALENDARIZAÇÃO

1ª EDIÇÃO



Submeta a sua candidatura.

CONCURSO DE PROJETOS DE COMPUTAÇÃO AVANÇADA

3ª EDIÇÃO



CONCURSOS DE PROJETOS
DE COMPUTAÇÃO
AVANÇADA

2021 e 2020

COMO ESCOLHER A SUA TIPOLOGIA:



Tipologias de acesso (CPCA #2)

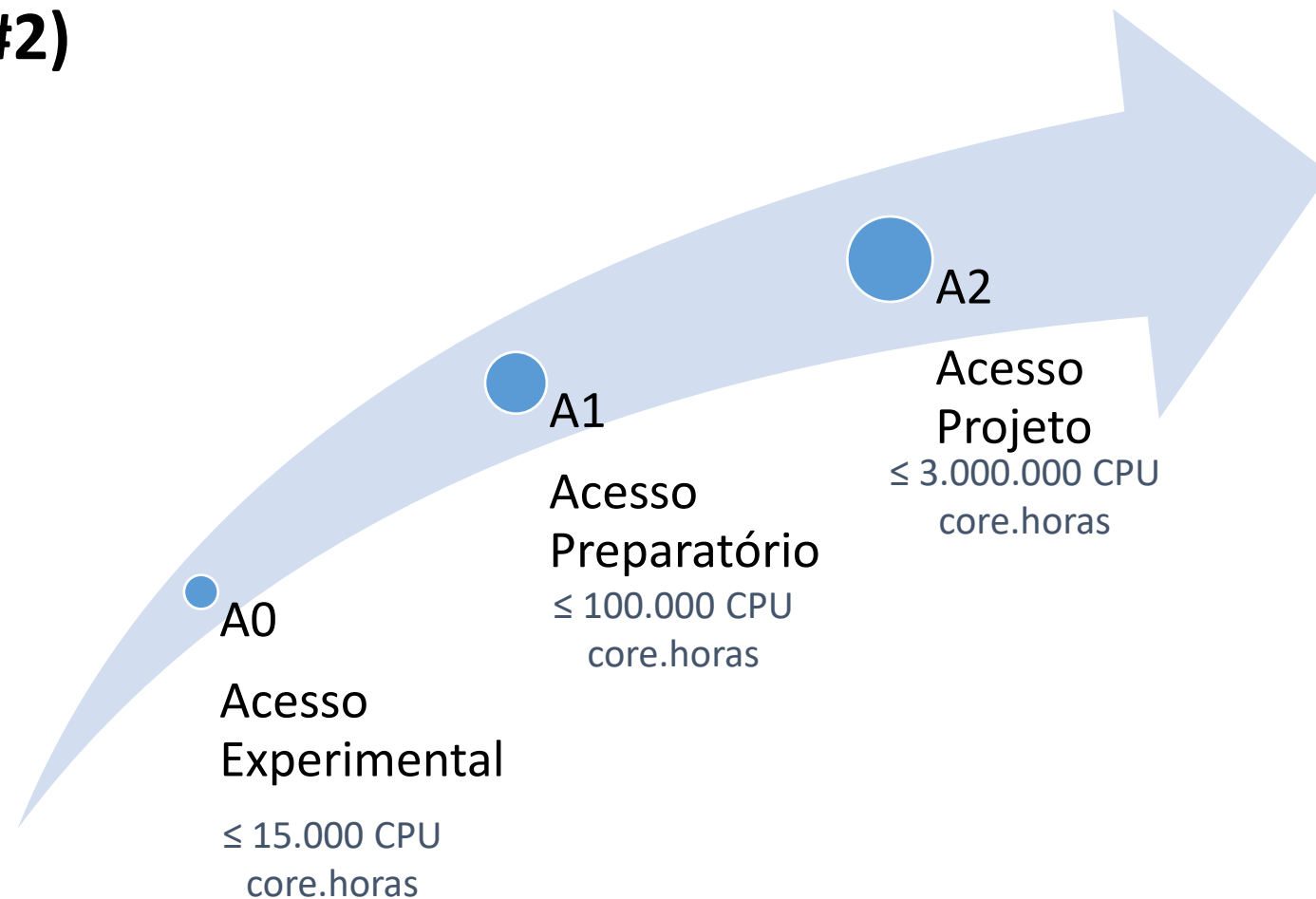
- A0, A1, A2

Modelos computacionais

- HPC
- Cloud científica
Com ou sem GPU

Duração dos projetos

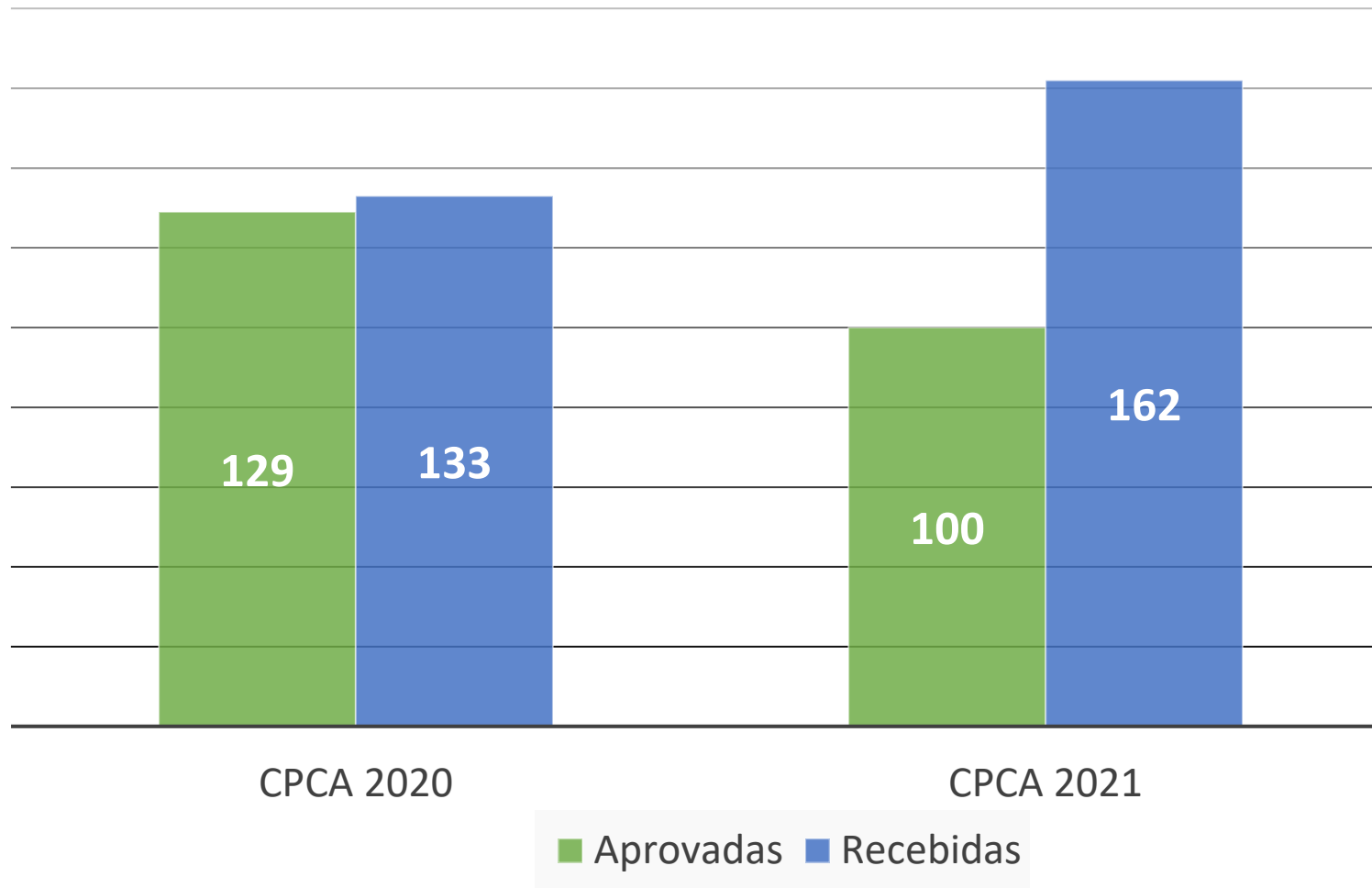
- 6 a 12 meses



INDICADORES: TAXA DE APROVAÇÃO



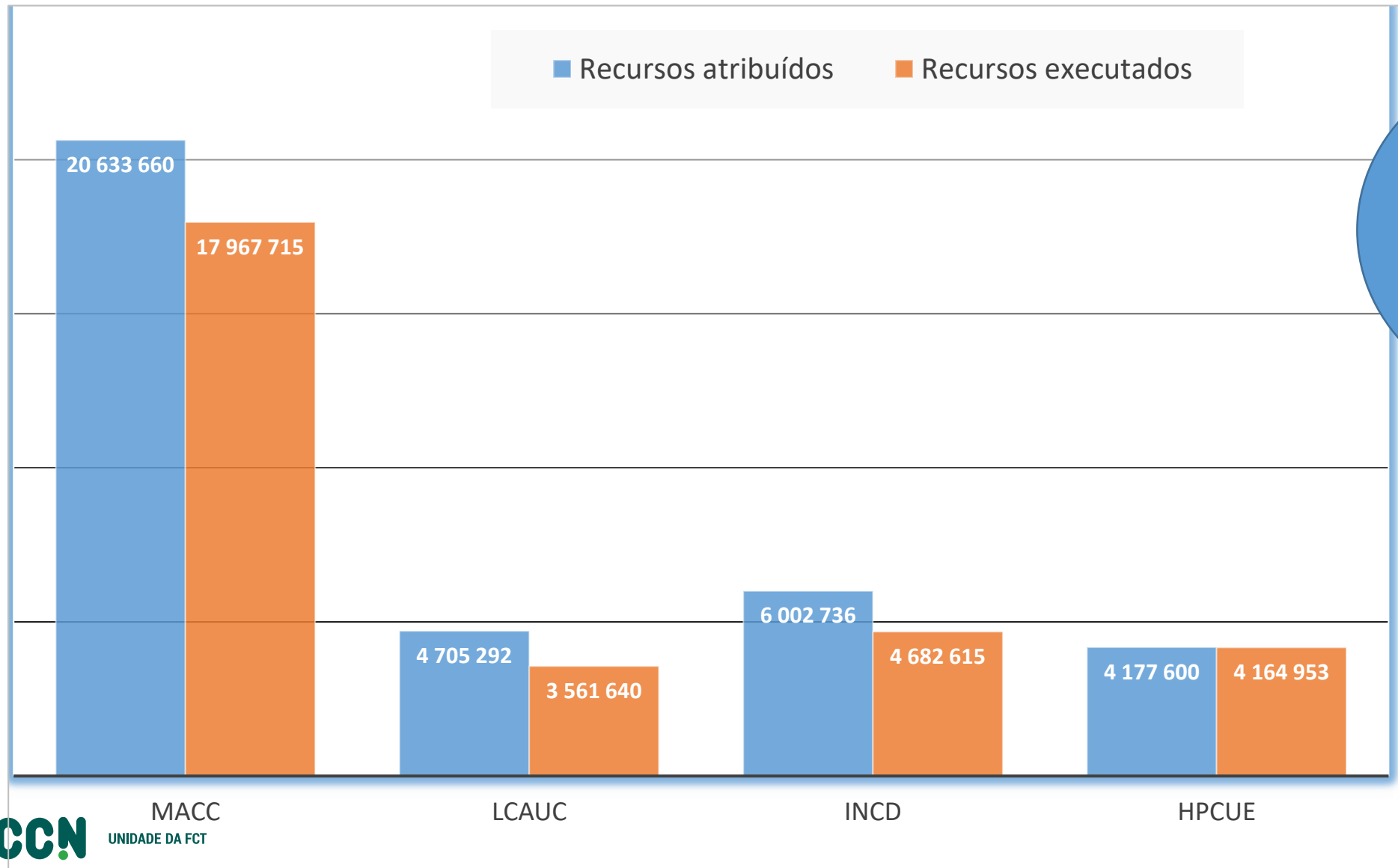
Candidaturas



CPCA 2021: 62% aprovadas.

CPCA 2020: 97% aprovadas -
incluímos os vouchers de
experimentação atribuídos aos
projetos abaixo da linha de corte.

EXECUÇÃO FINAL #CPCA 2020

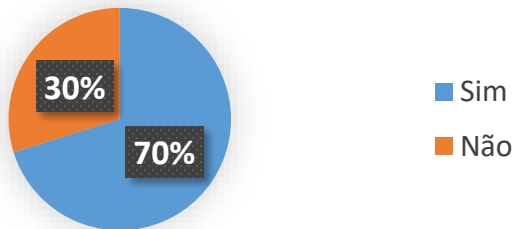


82%
(execução
média)

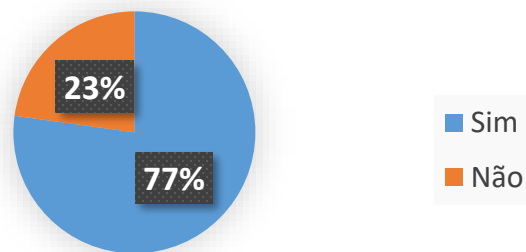
O QUE DIZEM OS NOSSOS UTILIZADORES



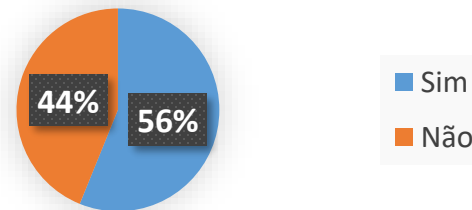
Estarão os dados de investigação abertos ao público?



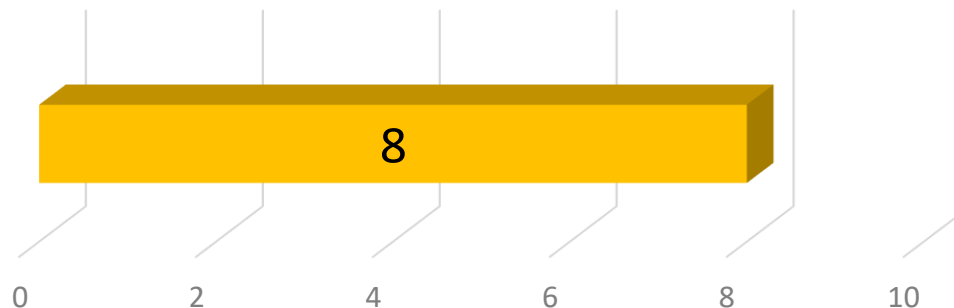
Serão os dados incluídos em artigos científicos, relatórios ou outros?



Serão estes dados utilizados em teses de mestrado e/ou doutoramento?



Satisfação do usuário



Resultados obtidos através de 114 respostas recebidas

DICAS PARA OS CANDIDATOS



- Ler a documentação de apoio
- Caso não tenha experiência em HPC, [opte por um acesso experimental](#)
- Os acessos A0/A1 podem também ser úteis para preparar uma futura candidatura a um acesso A2 ou até para outras máquinas Europeias de maior porte.
- Nas candidaturas maiores, sempre fundamente a quantidade e cálculos de recursos pedidos
- Deverá cumprir prazos de execução, regras e políticas de acesso dos centros operacionais
- Entregue o relatório final até 30 dias após terminar o projeto

NCC PORTUGAL – PROJETO EUROCC

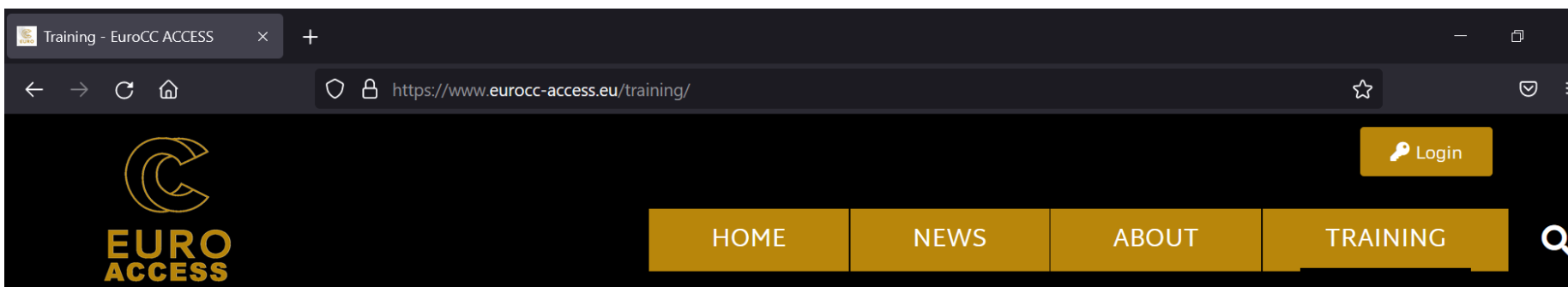


Site: eurocc.fccn.pt

Redes sociais:

https://twitter.com/eurocc_portugal

<https://www.linkedin.com/in/eurocc-portugal>

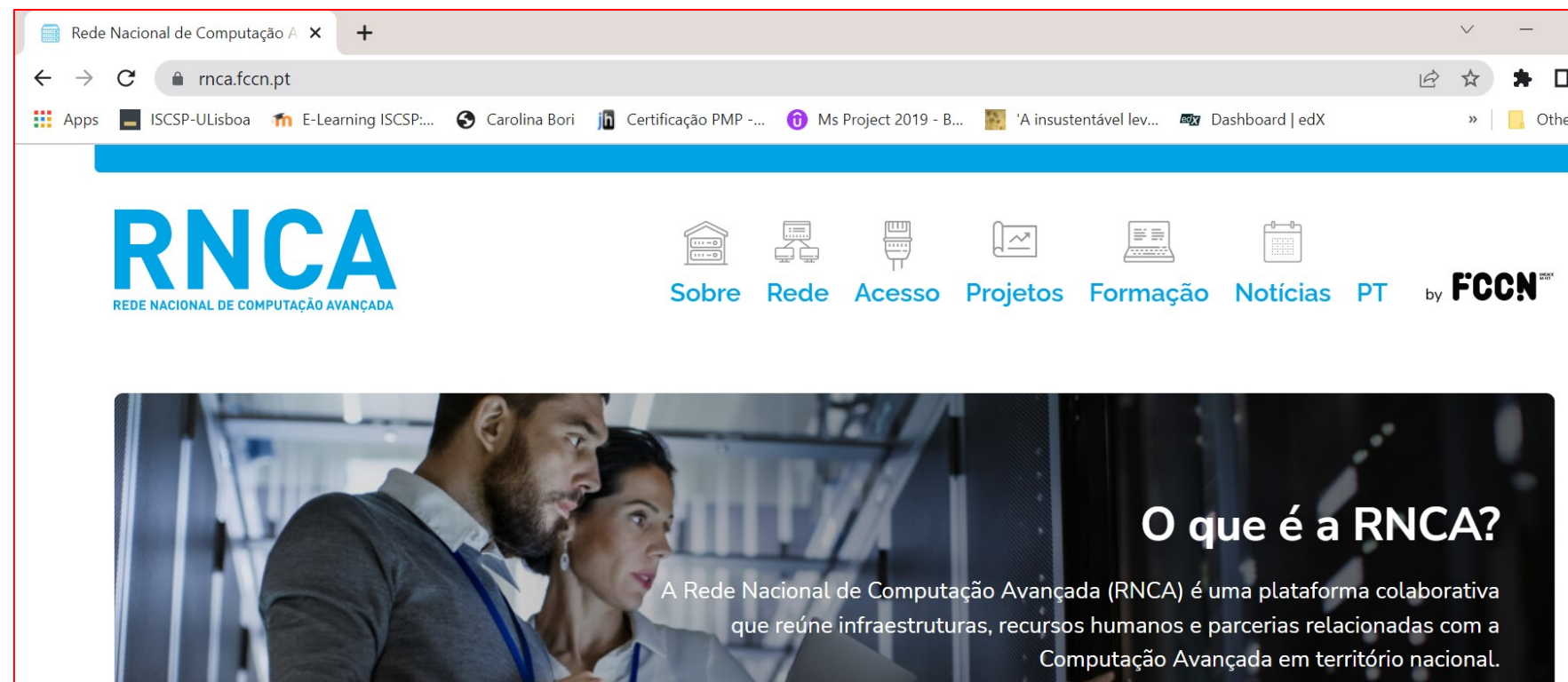


Várias formações planeadas ainda em 2022!

SAIBA MAIS EM:

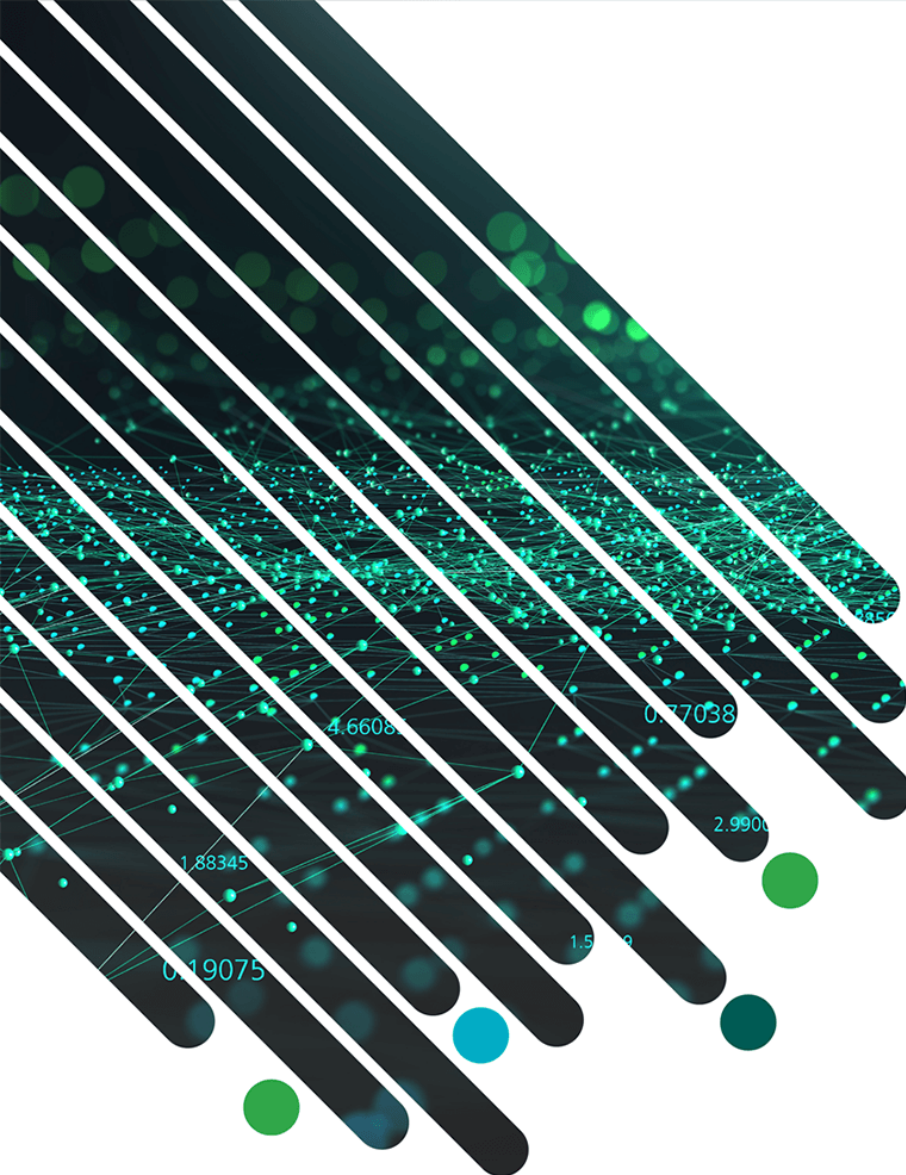


- <https://rnca.fccn.pt>



<https://www.fct.pt/apoios/Computacao/index.phtml.pt>

Mailing list RNCA: <https://forms.office.com/r/H6kUZqJRgd>



OBRIGADO

E-mail: rnca@fccn.pt