FCT
Fundação para a Ciência e a Tecnologia
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO E CIÊNCIA

FCCN

RNCA – Rede Nacional de Computação Avançada - Relatório de atividades de 2020

10-fev-2021

Elaborado por: FCT-FCCN

ÍNDICE

1 INTRODUÇÃO **2**

2 EXECUÇÃO OPERACIONAL 2020 ..... **4**

3 SUPORTE DA RNCA **18**

4 PERSPECTIVAS PARA 2021 ..... **19**

ACRÓNIMOS **20**

1 INTRODUÇÃO

A computação avançada constitui um instrumento de grande utilidade para realizar investigação e inovação a vários níveis, desde a simples parametrização e utilização de modelos computacionais pré-existentes até ao desenvolvimento de novas técnicas, na fronteira do conhecimento científico. Através da computação avançada é possível realizar simulações e análises de dados impossíveis de realizar de outra forma. A computação avançada tem adquirido nos últimos anos uma importância crescente devido à necessidade de tratar e extrair valor de elevados volumes de dados, o designado *big data*, recorrendo a técnicas muito exigentes do ponto de vista computacional, tais como a inteligência artificial e aprendizagem profunda. Neste contexto os países europeus tem reforçado e desenvolvido os seus centros e redes de computação avançada tais como a RES[1], em Espanha, a CINECA[2] na Itália, a GRNET[3] na Grécia, a CINES[4] em França ou a SLING[5] na Eslovénia.

A Rede Nacional de Computação Avançada (RNCA) é uma plataforma colaborativa, que reúne infraestruturas, recursos humanos e parcerias relacionadas com a Computação Avançada em território nacional, em articulação com iniciativas internacionais.

A RNCA é gerida pela Fundação para a Ciência e a Tecnologia, I.P. (FCT), destinando-se a disponibilizar serviços de computação avançada às comunidades de investigação, tecnologia e inovação. Foi criada pela iniciativa de competências digitais Portugal INCoDe.2030, através da resolução de Conselho de Ministros 26/2018. Foi integrada no Roteiro Nacional das Infraestruturas de Investigação de Interesse Estratégico (RNIE) em Abril de 2019 através do Despacho n.º 4157/2019 do Gabinete do Ministro da Ciência, Tecnologia e Ensino Superior, sendo regulada pelo Regulamento n.º 1049/2020 publicado em diário da república.

A RNCA contou em 2020 com 4 centros operacionais, que disponibilizaram serviços computacionais no âmbito do primeiro concurso de acesso lançado pela FCT:

- MACC - *Minho Advanced Computing Centre*;
- Laboratório de Computação Avançada da Universidade de Coimbra;

[1] https://www.res.es/en - Red Espanola de Supercomputacion
[2] https://www.cineca.it/en
[3] https://grnet.gr/en/services/computing-and-storage-services/hpc/
[4] https://www.cines.fr/?lang=en
[5] http://www.sling.si/sling/en/

- INCD – Infraestrutura Nacional de Computação Distribuída; e
- Universidade de Évora.

Para além dos centros operacionais contou também com o apoio de centros de competência e visualização.

2 EXECUÇÃO OPERACIONAL 2020

2.1 OBJECTIVOS

Call nacional de acesso a recursos computacionais avançados

Previu-se em 2020 realizar uma *call* FCT para acesso a recursos de computação avançada pelas comunidades nacionais de investigação e inovação, o que foi realizado, tendo sido atribuídos recursos computacionais a 129 projetos aprovados.

Imagem do portal FCT com informação sobre o concurso:

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

FCT Fundação para a Ciência e a Tecnologia

Apoios | Concursos | Media | Estatísticas | Sobre a FCT

FCT › Apoios

Recursos de Computação Avançada para Investigação e Inovação

1ª edição do Concurso de Projetos de Computação Avançada

Em Destaque

16.12.2020 – Encontra-se publicada a Lista das Candidaturas Aprovadas com Acesso a Recursos Computacionais e Resumo de Resultados do Concurso de Projetos de Computação Avançada FCT/CPCA /2020/01 - 1ª Edição, 2020". Informação complementar aqui.

11.12.2020 - Nota informativa: Calendarização Prevista para o 1ª Edição do Concurso de Projetos de Computação Avançada.
10.08.2020 - Abertura das Candidaturas à 1ª edição do Concurso de Projetos de Computação Avançada. **Submissão de propostas** às **12h00** de **14 de setembro de 2020**.

Visão geral e objetivos

A consolidação e o reforço do Sistema Científico e Tecnológico Nacional (SCTN) constituem prioridades da política de ciência e tecnologia nacional. Estas prioridades visam aumentar a competitividade nacional e internacional da ciência e tecnologia, e o seu contributo para 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, assume particular relevância a promoção e o reforço de competências das instituições científicas e tecnológicas através da participação das suas equipas em projetos de computação avançada.

É com estes objetivos que a FCT abre este concurso para suportar tecnologicamente projetos de computação avançada em todos os domínios científicos.

A FCT, via RNCA – Rede Nacional de Computação Avançada - procura

DOCUMENTOS IMPORTANTES:

- Aviso para Apresentação de Candidaturas
- Guião da candidatura
- Guião de Avaliação
- Regulamento de Projetos de Computação Avançada
- Ficha Técnica do Concurso

Este objetivo foi concluído.

Decorrerão em 2021 as alocações dos recursos computacionais nas plataformas até ao verão.

Call com recursos da RICA – Rede Ibérica de Computação Avançada

Previu-se em 2020 realizar uma *call* FCT para acesso a recursos da RICA – Rede Ibérica de Computação Avançada, mas não foi realizada, dado que houve atrasos com os concursos EuroHPC de aquisição dos novos supercomputadores, que serão os recursos a integrar na RICA. A RICA é uma iniciativa que decorre de um memorando de entendimento do setor da ciência e tecnologia, entre Portugal e Espanha, de 2018.

Portugal concorreu ao EuroHPC para instalar e operar em Portugal o supercomputador Deucalion e Espanha concorreu ao EuroHPC para instalar e operar em Espanha o supercomputador Marenostrum 5.

Tendo ambas as propostas sido aceites, decorrem ainda os respetivos processos aquisitivos.

Fotografia de novembro de 2020, da cerimónia de assinatura de contratos EuroHPC para aquisição de novos supercomputadores:

Este objetivo deverá transitar para 2021.

Integração de operadores na RNCA

Previu-se em 2020 protocolar com operadores de computação avançada nacionais os serviços a prestar no âmbito da RNCA. Esse processo não ficou concluído, verificando-se atraso nos passos administrativos a cumprir que são os seguintes: (1) publicar em Diário da República o regulamento interno da RNCA; (2) realizar consulta pública sobre os requisitos mínimos dos centros

operacionais e centros de competência; (3) aprovação pelo Conselho Diretivo da FCT desses requisitos mínimos; (4) publicar em Diário da Republica os requisitos mínimos; e, finalmente, (5) protocolar com os operadores de computação avançada os serviços a prestar no âmbito da RNCA.

O passo (1) foi realizado em 2020, decorrendo em 2021 os restantes passos.

A imagem seguinte é do regulamento da RNCA publicado em diário da república:

Este objetivo deverá transitar para 2021. O suporte financeiro dos centros operacionais para o 1º concurso RNCA foi assegurado através de verbas transferidas anteriormente pela FCT. Para o 2º concurso RNCA, em 2021, deverá ser orçamentado o respetivo suporte financeiro.

2.1 DESTAQUES OPERACIONAIS, AÇÕES DESENVOLVIDAS

Acompanhamento do Grupo "Sherpas" da Computação Avançada

Em 2020 foi dinamizado pela FCT-FCCN um grupo informal dos "Sherpas" da Computação Avançada nacional, através da realização de 15 reuniões por sistema de videoconferência. Nesse grupo estiveram representantes dos centros operacionais e centros de competências da RNCA, para além da coordenação geral da unidade FCCN da FCT. Nessas reuniões discutiu-se principalmente temas sobre o desenvolvimento da RNCA. O grupo "Sherpas" deverá ser extinto em 2021, dando lugar a órgãos de gestão da RNCA por nomeação formal para este consórcio. O grupo Sherpas foi instrumental para a organização do 1º concurso RNCA, nomeadamente para a revisão das peças administrativas do concurso. Continuará em atividade em 2021 até, como referido anteriormente, possa ser substituído por órgãos formais da RNCA.

Acompanhamento dos centros operacionais

Em 2020 foram realizadas pela FCT-FCCN reuniões mensais de acompanhamento dos Centros Operacionais. Nessas reuniões discutiu-se principalmente o estado das plataformas, conetividade, necessidade de *upgrades*, obtenção de indicadores e temas relacionados com a utilização e divulgação da RNCA.

	MACC	INCD	LCA-UC	HPC-UÉ
#reuniões	16	16	Terão início em 2021, não tendo ocorrido em 2020	12

Arranque de operações do centro operacional da Universidade de Évora

Iniciaram em 2020 as operações do centro operacional da Universidade de Évora com um sistema computacional denominado Oblivion. Parte deste sistema integrou o 1º concurso de acesso RNCA.

A notícia seguinte diz respeito ao evento de inauguração, que contou com a participação do Conselho Diretivo da FCT e da Reitoria da Universidade de Lisboa.

Centro de visualização na Universidade do Algarve

Em 2020 foi instalado um centro de visualização na Universidade do Algarve, constituído por um processador gráfico de 4 saídas e um ecrã de grandes dimensões. É complementado por um subsistema de GPUs instalado em servidores X86, óculos de realidade virtual, *storage* local e sub-sistema de áudio.

Os equipamentos foram adquiridos pela FCT-FCCN[6] no âmbito de um protocolo estabelecido em 2020 entre a FCT e a Universidade do Algarve, para dinamizar a rede de centros de competência e visualização da RNCA. Os centros de visualização permitem demonstrar os *outputs* da computação avançada, em condições físicas melhoradas. Um exemplo típico são os modelos visuais 3D que, quando mostrados num centro de visualização, permitem uma observação mais detalhada.

[6] Financiamento do *COMPETE* 2020 no âmbito do projeto RCTS100

Imagem do posto de visualização inicialmente equipado com um único ecrã:

Projeto EuroCC

A utilização de recursos computacionais avançados requer competências especificas por parte dos seus utilizadores, pelo que a formação aos utilizadores é um fator de sucesso importante para os utilizadores conseguirem tirar partido destes recursos.

Exemplos de competências especificas são a programação paralela, a familiarização e utilização de ambientes de *High Performance Computing*, a utilização de aplicações especificas ou algoritmos especiais como o *deep learning*, ou ainda a análise de aplicabilidade dos modelos e arquiteturas computacionais a requisitos específicos dos utilizadores.

A FCT liderou um consórcio nacional para integrar o projeto europeu EuroCC[7] com a participação das seguintes instituições: Universidades do Minho, Porto, Coimbra, Lisboa e Évora e o LIP - Laboratório de Instrumentação e Física Experimental de Partículas.

[7] https://ec.europa.eu/digital-single-market/en/news/eurocc-and-castiel-two-new-projects-boost-european-hpc-knowledge-and-opportunities

Este projeto a 24 meses iniciou-se em setembro de 2020 e criará um centro de competências nacional em computação avançada. A FCT assegurou o compromisso do suportar a contra-parte nacional do projeto que é de 1M€, sendo a restante verba de 1M€ suportada pelo EuroHPC JU.

O EuroCC servirá os ecossistemas da investigação e inovação, incluindo a indústria, explorando *use cases* concretos que este setor tem para a utilização da computação avançada.

Alargamento dos centros de competências e visualização

Foram estabelecidos em novembro os seguintes protocolos de colaboração para o desenvolvimento da rede de centros de competência e de visualização em computação avançada:

- UBI – Universidade da Beira Interior;
- UA – Universidade de Aveiro; e
- UTAD – Universidade de Trás os Montes e Alto Douro.

Os protocolos previram uma verba da FCT para arranque do centro, nomeadamente para a aquisição do sistema físico de visualização.

A rede de centros de competência e de visualização ficou composta por estas 3 entidades, mais as Universidades do Minho (MACC), Algarve, Lisboa e Porto.

A imagem seguinte é da agenda relativa ao evento público de inauguração do centro da UBI:

AGENDA

Intervenções	Intervenientes
Abertura	António Fidalgo Reitor da Universidade da Beira Interior
	Helena Pereira Presidente da Fundação para a Ciência e Tecnologia
ACP.2030 - Estratégia Nacional de Computação Avançada	Nuno Feixa Rodrigues FCT – INCoDe.2030
Centro de Competência em Computação Avançada	Pedro Inácio Presidente do Departamento de Informática da UBI
Assinatura do Protocolo	
Encerramento	Manuel Heitor Ministro da Ciência, Tecnologia e Ensino Superior

https://www.incode2030.gov.pt/

Estratégia para a Computacional Avançada nacional

Foram produzidos elementos de apoio para o documento de estratégia da Computacional Avançada nacional, no âmbito da Iniciativa Nacional Competências Digitais e.2030.

A imagem seguinte é do portal INCoDe.2030, a partir da qual está disponível o referido documento de estratégia:

https://www.incode2030.gov.pt/computacao-avancada
Search
SETOR TERRA
COLABS
CENTROS DE INVESTIGAÇÃO
SETOR SAÚDE
SETOR MOBILIDADE
PESSOAS
INFRAESTRUTURA
INFO-ESTRUTURA
POLITÉCNICA
PME
SETOR SOCIAL
SETOR CIENTÍFICO
UNIVERSIDADES
Advanced Computing Portugal 2030 - ACP.2030
ACP.2030 > PDF

Informação WEB sobre a RNCA

Foi criada em 2020 uma página especifica no portal www.fccn.pt para a RNCA, conforme ilustrado na imagem seguinte:

Em 2021 deverá ser criado um portal específico dedicado à RNCA.

Preparação da receção em Portugal do supercomputador Deucalion

Como referido anteriormente Portugal concorreu, em conjunto com Espanha, ao EuroHPC para instalar e operar em Portugal o supercomputador Deucalion.

O supercomputador Deucalion terá requisitos exigentes de potência elétrica, refrigeração e cargas decorrentes do seu peso físico elevado, que são aproximadamente 26 toneladas.

Em 2020 foi submetida pela Universidade do Minho uma candidatura à CCDR-Norte - Comissão de Coordenação e Desenvolvimento Regional do Norte, para requalificação de um edifício presente no parque de ciência e tecnologia, em Guimarães para receber o Deucalion.

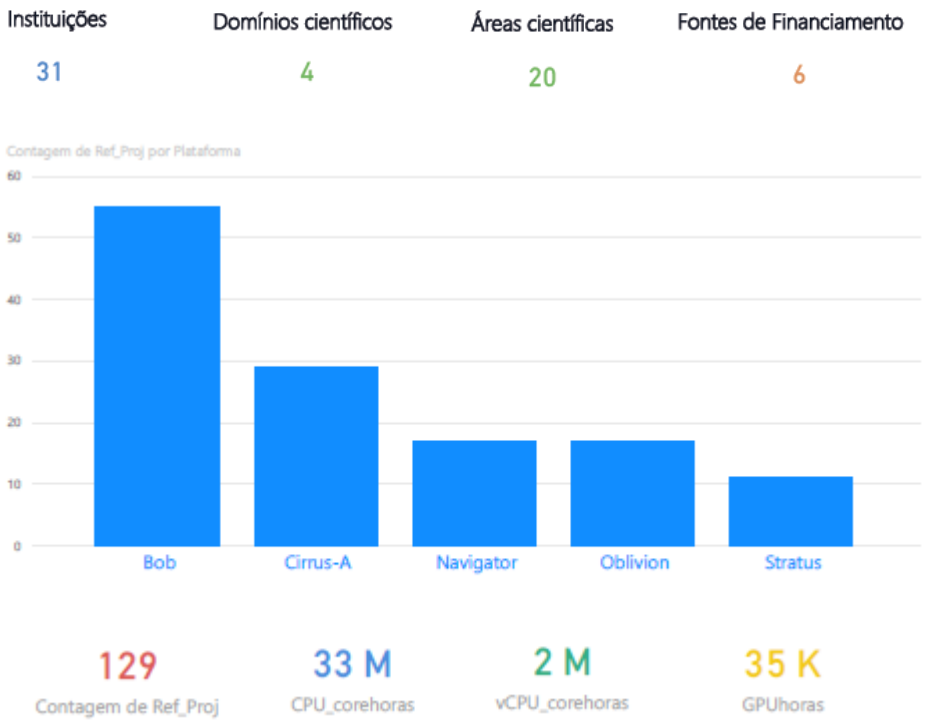
A FCT apoiará este projeto, no que diz respeito à criação de condições para o funcionamento do MACC - *Minho Advanced Computing Center* na sua perspetiva de serviços nacionais e de obrigações internacionais no quadro do EuroHPC.

2.1 INDICADORES

- Indicadores do concurso CPCA#1

A 1ª edição do Concurso de Projetos de Computação Avançada trouxe novos utilizadores e muitos dados relevantes para avaliar a procura e necessidade destes recursos pelas comunidades de Investigação & Inovação.

A imagem seguinte resume alguns indicadores essenciais como o número de instituições proponentes no concurso, os domínios e áreas científicas e o número de fontes de financiamento distintas dos projetos associados[8].



Estão representados indicadores cujas candidaturas foram recebidas entre agosto e setembro de 2020. Os 129 projetos aprovados representam cerca de 33 milhões de CPU core.horas distribuídas

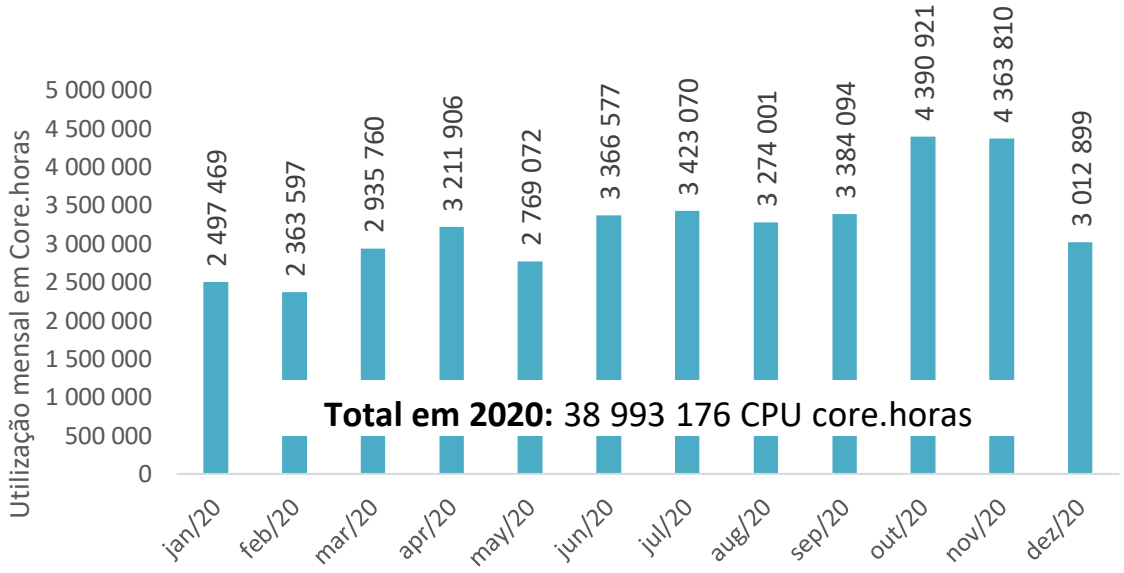
[8] Cada projeto computacional insere-se normalmente num ou mais projetos científicos ou de inovação, designados de projetos associados. Contudo é possível submeter propostas sem projeto associado

pelas 4 plataformas HPC e 2 milhões de CPU core.horas virtuais na plataforma Cloud – Stratus. Foram pedidas 80 milhões de core.horas tendo sido atribuídas, dessas, apenas 44% por limitação dos recursos existentes, tendo-se demostrado que procura destes recursos é superior à oferta nacional. Estes 129 projetos são provenientes de 31 instituições distintas onde se incluem várias Universidades, centros de investigação, laboratórios associados e colaborativos e pelo menos um Instituto Politécnico e uma empresa. Os 4 Domínios científicos estão todos representados, com maior proporção de utilizadores das Ciências Exatas e Engenharias (75%) historicamente mais familiarizados com estes recursos. Cerca de 80% dos projetos têm um projeto científico ou de inovação associado, de 6 fontes de financiamento distintas entre as quais a FCT, ANI e ERC. A utilização dos recursos pelos 129 projetos decorrerão nos primeiros 6 meses de 2021. Principais conclusões, dados, publicações, patentes resultantes e outros indicadores serão reunidos posteriormente com a entrega dos relatórios finais por parte dos beneficiários.

Em dezembro de 2020 todos os projetos tinham assinado o Termo de aceitação que permitem dar início aos trabalhos computacionais durante o 1º semestre de 2021.

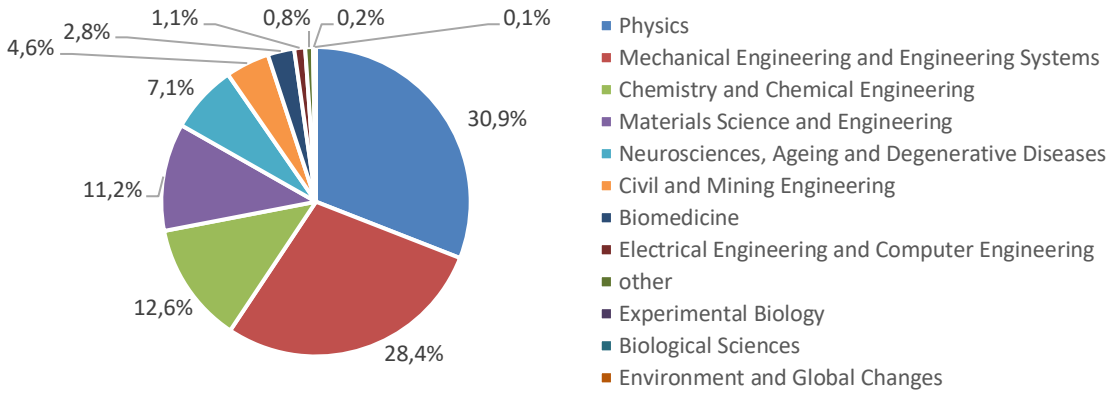
- Indicadores do *cluster* HPC Bob

O gráfico seguinte indica milhões horas de CPU de tempo de computação no *cluster* Bob.



Houve 56 utilizadores distintos no *cluster* Bob a que usualmente corresponde um ou mais projetos independentes.

A distribuição por área científica foi a seguinte:



- Capacidade instalada na RNCA

HPC – *High Performance Computing*:

Platforma & Centro	**Bob MACC**	**Navigator/Navigator+ LCA-UC**	**Oblivion HPC-UE**	**Cirrus-A INCD**
Peak performance	1 PFLOP	---	239 TFLOPS	---
***Cores* totais**	12800	3936 + 1280	2492	---
Nodes totais	800	196	68	---
CPU_Cores disponíveis no concurso	5760	---	---	384
Compute Nodes* disponíveis *no concurso	360	---	---	6
Tipo de CPU (*compute nodes*)	2x Intel Xeon *Sandy Bridge* (16-core) @2,7GHz	2 x Intel Xeon *E5-2697v2* (12-core) @ 2.70 GHz and 2x Intel Xeon *Gold 6148* (20-core) @ 2.40 GHz	2x Intel Xeon *Gold 6154* (36-core) @ 3GHz	2x AMD EPYC 7501 (64-core) @2.6GHz *Consultar restantes CPU no URL
Memória (GB RAM/core)	2	4,8 - 8	5.33	---
Armazenamento em disco	1,5 PB	220 TB + 1,27 PB	576 TB	---
Limite de Armazenamento	Variável	Variável	Max: 100TB por projeto	Variável
GPU (y/n)	Not yet (1)	Yes (8)	No	Yes (4)
Tipo de GPU	----	NVIDIA Tesla V100	-----	Nvidia Tesla T4
Infiniband	FDR 56 Gb/s	FDR 2:1 + EDR 100 Gb/s non-blocking	EDR HCA	FDR 56 Gb/s
Sistema de ficheiros	LUSTRE	LUSTRE	BeeGFS	LUSTRE
Job Queue Manager	SLURM	SLURM	SLURM	-----

Recursos incluídos no concurso CPCA #1

Centro operacional	Plataforma	Sistema	Modelo computacional	Dotação a 6 meses
MACC	Bob	360 *compute nodes*, cada um com dois Intel X86 Xeon E5-2680 (8 cores cada CPU) @2.7Ghz 2GB-RAM/core	HPC (CPU)	15 Milhões de core.horas
LCA-UC	Navigator/ Navigator+	164 *compute nodes*, cada um com dois Intel Xeon E5-2697v2 (12 cores cada CPU) @2.7 GHz 32 *compute nodes*, cada um com dois Intel Xeon Gold 6148 (20 cores cada CPU) @2.4 GHz + GPU	HPC (CPU + GPU)	5 Milhões de core.horas
HPC-UE	Oblivion	68 *compute nodes*, cada um com dois Intel Xeon Gold 6154 (18 cores cada CPU)@3.0 Ghz	HPC (CPU)	4,3 Milhões de core.horas
INCD	Cirrus-A	CPU do tipo AMD EPYC 7501, cada um com 500GB-RAM e 64 cores;	HPC (CPU + GPU) e HTC	1,3 Milhões de core.horas
		CPU do tipo AMD Opteron 2356, cada um com 32 GB-RAM e 8 cores CPU do tipo AMD Opteron 2356, cada um com 24 GB-RAM e 8 cores CPU do tipo Xeon E5-2680 v3 @ 2.50GHz, cada um com 200 GB-RAM e 24 cores GPU do tipo Tesla T4, cada um 16GB-RAM e 2.560 cores;		
	Stratus	vCPU em AMD EPYC 7501, cada um com 500GB-RAM e 64 cores	Cloud	1,7 Milhões de vCPU core.horas

3 SUPORTE DA RNCA

Em 2020 a FCT procedeu à atualização do Roteiro Nacional de Infraestruturas de Investigação de Interesse Estratégico – RNIE, na qual figuram os 4 centros operacionais ou as estruturas que os suportam: RNCA (suporte ao MACC e restantes centros), LCA-UC (Navigator), INCD (Cirrus e Stratus) e ENGAGE SKA (suporte ao Oblivion).

Nesse contexto a FCT suportou financeiramente a RNCA, com despesas relativas ao Serviço de alojamento em *data center* para o supercomputador Bob e também com as outras plataformas.

Adicionalmente suportou financeiramente: a contra-parte nacional no projeto EuroCC; parcialmente, despesas para receção e operação em Portugal do supercomputador Deucalion, nomeadamente obras de requalificação de edifício no Ave Parque e despesas gerais para operação do MACC; a compra de material de manutenção relativo ao supercomputador Bob; desenvolvimento da rede de centros de competência e de visualização em computação avançada correspondente aos protocolos assinados em 2020; e recursos humanos da FCT dedicados à gestão da RNCA.

Os centros operacionais e de competências suportaram a RNCA prestando serviços computacionais e de suporte aos utilizadores e contribuindo também para o desenvolvimento da RNCA.

A imagem seguinte é dos quatro supercomputadores em operação em 2020: Bob, Navigator, Oblivion e Cirrus:

4 PERSPECTIVAS PARA 2021

O supercomputador Deucalion iniciará operações em 2021 o que permitirá descontinuar o supercomputador Bob que tem aproximadamente 9 anos de idade, apresentando taxas de eficiência modestas comparativamente com sistemas mais modernos. O Bob apresenta também uma capacidade limitada face às exigências nacionais e perspetiva de crescimento da utilização.

Será realizada a 2ª edição do Concurso de Projetos de Computação Avançada, desta feita com avaliação científica e não apenas com avaliação de adequação técnica.

O projeto EuroCC iniciará atividades em pleno com oferta de formações especializadas em computação avançada.

Será acompanhado o desenvolvimento da rede de centros de competência e de visualização em computação avançada.

Em 2021, nos termos do regulamento da RNCA, serão estabelecidos protocolos de adesão à RNCA dos centros operacionais e de competência, e, posteriormente, serão nomeados os órgãos de gestão da RNCA. A RNCA deverá manter-se a funcionar como uma rede colaborativa gerida pela FCT. Em caso necessidade de estabelecer uma relação jurídica com a RNCA esta será estabelecida com a FCT ou com um dos parceiros da rede.

ACRÓNIMOS:

CA	Computação Avançada
CPCA	Concurso de Projetos de Computação Avançada
GPU	Graphics Processing Unit
HPC	High Performance Computing
INCD	Infraestrutura Nacional de Computação Avançada (LIP)
JU	Joint Undertaking
KPI	Key Performance Indicator
LAC	Laboratório Avançado de Computação (U. Coimbra)
MACC	MACC - Minho Advanced Computing Centre (U. Minho)
PUE	Power usage effectiveness
RICA	Rede Ibérica de Computação Avançada
RNCA	Rede Nacional de Computação Avançada
RNIE	Roteiro Nacional de Infraestruturas de Investigação
SKA	Square Kilometer Array
TACC	Texas Advanced Computing Center
TCO	Total Cost of Ownership