

# INICIATIVA DE PROYECTOS ACELERADOS DE CÁLCULO

GUÍA PARA LA PRESENTACIÓN DE PROYECTOS

• • •

## Iniciativa de Proyectos Acelerados de Cálculo (IPAC) - Clementina XXI

La convocatoria pone en disponibilidad recursos computacionales a gran escala para otorgar horas de cómputo en proyectos anuales a ejecutarse en la supercomputadora Clementina XXI.





## Iniciativa de Proyectos Acelerados de Cálculo (IPAC)

#### **Objetivos**

- ☐ Facilitar el acceso abierto competitivo a los recursos computacionales a gran escala de la supercomputadora Clementina XXI, para todo el sistema científico-tecnológico argentino.
- ☐ Contribuir a la producción de nuevos conocimientos, la realización de nuevas interpretaciones científicas y la resolución de problemas tecnológicos.
- ☐ Favorecer el desarrollo de la comunidad de usuarios de supercómputo a nivel federal.
- ☐ Optimizar la utilización de los recursos adquiridos con fondos públicos.

#### **Destinatarios**

- ☐ Instituciones y organismos científico-tecnológicos que integran el SISTEMA NACIONAL DE CIENCIA, TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN (SNCTI).
- Organismos e instituciones no pertenecientes al SNCTI, siempre y cuando realicen actividades sustantivas vinculadas a la investigación científica y tecnológica.



# Características de los proyectos

Se otorgarán horas de cómputo en la supercomputadora Clementina XXI para la ejecución de proyectos anuales de investigación en las siguientes categorías:

### A

Hasta **10** Proyectos de Avances Decisivos con Supercómputo (PADS), de hasta 4.000.000 de horas de CPU y/o 250.000 horas GPU.

### B

Hasta **40** Proyectos de Cálculo Intensivo (PCI), de hasta 1.000.000 de horas de CPU y/o 60.000 horas GPU.

#### C

Hasta **60** Proyectos de Iniciación en Supercómputo en Argentina (PISCA), de hasta 100.000 de horas de CPU y/o 1.000 horas GPU.

### Formulario de presentación

#### Iniciar Sesión

Usuario

Contraseña

#### Acceder

¿No tienes cuenta? ¡Regístrate! ¿Olvidaste tus datos? ¡Recupéralos!



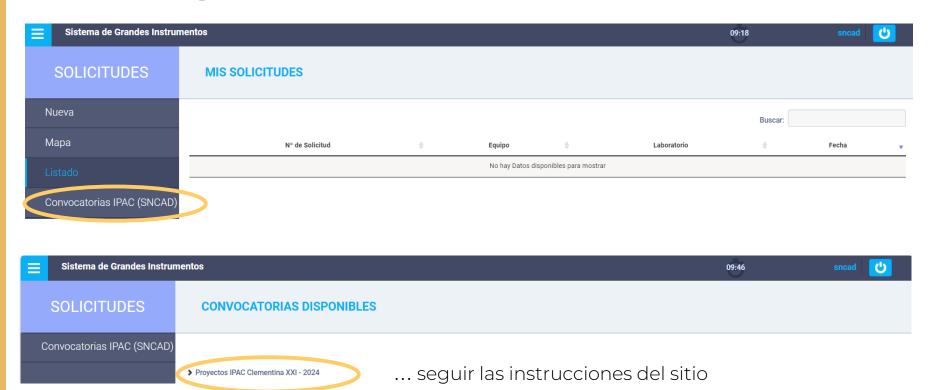
Para completar al formulario es preciso contar con un usuario en el Sistema de Gestión de Turnos. Una vez que la cuenta haya sido validada, recibirás un correo que te habilitará a cargar los datos.

En caso de no recordar la clave, podrás recuperarla.





# Formulario de presentación





- A. Carátula
- B. Objetivos científico-tecnológicos
- C. Plan computacional
- D. Descripción del enfoque y modelos numéricos que se utilizarán
  - D.1. Descripción del código
  - D.2. Entorno de programación y requisitos en tiempo de ejecución
    - D.2.a. Lenguaje de programación
    - D.2.b. Paradigma de paralelización utilizado
    - D.2.c. Compilador requerido (GNU o Intel OneAPI)
    - D.2.d. Bibliotecas necesarias y posibilidad de instalación en espacio de usuario
    - D.2.e. Requerimiento de memoria por núcleo o por GPU
    - D.2.f. Requerimiento de memoria virtual
    - D.2.g. Capacidad de reinicio de los cálculos
    - D.2.h. Escalabilidad del código
    - D.2.i. Otros requisitos
- E. Plan de gestión de datos
- F. Referencias



#### A. Carátula

### B. Objetivos científico-tecnológicos

Breve y claro, mencionar antecedentes científicos-tecnológicos del grupo listando **brevemente** algunas publicaciones o patentes de los últimos 5 años, o algunos proyectos financiados en los últimos 8 años, relacionados con la temática científica.

## C. Plan computacional

Es importante demostrar que se tiene una idea clara de lo que se desea calcular, los recursos que esos cálculos demandan y que **no** se trata de un pedido improvisado susceptible de estar mal dimensionado de acuerdo a la cantidad de horas. Por ejemplo, si se realizarán diferentes tipos de cálculos en CPUs se espera la especificación del número de núcleos a utilizar en c/u y la duración promedio de los mismos en una tabla como la siguiente:

Tipo de cálculo	Número promedio de cores a utilizar, N <sub>core</sub>	Wall time promedio en horas, t	Tiempo total de horas de CPU, T=N <sub>core</sub> .t	Espacio de almacenamiento para datos generados (GB)
1. Cálculo tipo 1	192	2500	480000	300
2. Cálculo tipo 2	320	1000	320000	500
3. Cálculo tipo 3	640	300	192000	200
		Total	992000	1000

¡El vínculo entre los cálculos propuestos y los objetivos científicos es muy recomendable!

## D.1. Descripción del código

- Código comercial o de uso libre desarrollado por otros investigadores
  - Breve descripción
  - Enlace al sitio web del código (recomendado)
  - Antecedentes de uso del mismo en diferentes arquitecturas
  - Referencias de trabajos donde el mismo se haya usado para cálculos similares

Código propio del grupo de investigación

Descripción más detallada en caso de no disponer de documentación de acceso público

¡Es importante demostrar que el código es apto (o lo será durante la ejecución del proyecto) para los objetivos propuestos!



#### D.2.a. Lenguaje de programación

Python, Fortran, C, OneAPI/OpenMP, herramientas de migración de CUDA, ... Esto incluye paquetes científicos o bibliotecas que sean requeridas para el proyecto.

### D.2.b. Paradigma de paralelización utilizado

¿MPI, OpenMP? Es aconsejable explicar demostrando que el grupo conoce la manera en que el código está paralelizado para sacar provecho de manera eficiente del mismo en el *hardware* solicitado. Si usa GPUs, explicar qué partes del algoritmo se ejecutan en GPUs y cuáles en CPUs y detallar si para funcionar eficientemente, es necesario/conveniente cierto tipo de acelerador (por ejemplo, GPUs con cierta cantidad de memoria requerida).

#### D.2.c. Compilador requerido

GNU o OneAPI ¿Dependencias con otros softwares?

# D.2.d. Bibliotecas necesarias y posibilidad de instalación en espacio de usuario Lapack, FFT...



## D.2.e. Requerimiento de memoria por núcleo

El Consejo Asesor del SNCAD debe disponer de la información necesaria para evaluar la factibilidad del proyecto en el sistema disponible en caso que los requerimientos de memoria por núcleo sean significativos.

### D.2.f. Requerimiento de memoria virtual

Es aconsejable dar información que permita estimar si es factible que los procesos ocupen memoria virtual y su impacto en la *performance* si eso fuese posible.

### D.2.g. Capacidad de reinicio de los cálculos

¡Es excluyente que los códigos a utilizar tengan capacidad de reinicio!

#### ¡Los cálculos largos deben poder fraccionarse!

Clementina XXI y todos los equipos adheridos al SNCAD cuentan con *schedulers* y colas con tiempo máximo restringido para optimización del uso (para controlar eficientemente tiempo de espera, evitar pérdida de tiempo por corte de energía, etc.).

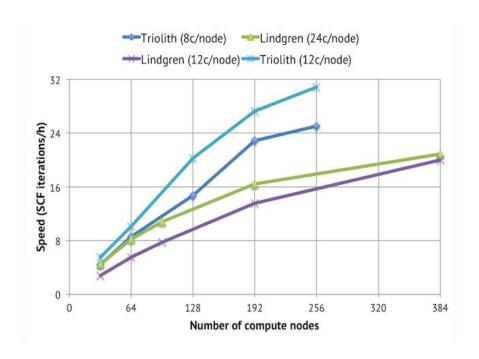


### D.2.h. Escalabilidad del código

Es recomendable aportar resultados de pruebas de escalabilidad que demuestren la eficiencia del código a utilizar y para cálculos similares a los propuestos, como en la figura de ejemplo.

#### D.2.i. Otros requisitos

Es conveniente indicar cualquier otro requisito especial de forma breve y concisa.





### E. Plan de gestión de datos

Es aconsejable detallar los requerimientos de disco de los cálculos a desarrollar y de almacenamiento del proyecto en general.

En caso de producirse volúmenes significativos de datos, detallar la forma en que se planea procesarlos y/o transferirlos a medios de almacenamiento del grupo de investigación, contemplando la velocidad de conectividad, etc.



#### En resumen...

Siendo que los objetivos científicos están avalados por la actividad reciente de los investigadores, ¡la clave del éxito es una correcta descripción técnica y planificación de cómo serán usadas eficientemente las horas de cómputo!

Al redactar el proyecto, recomendamos poner el foco en:

- Una justificación rigurosa y detallada de la factibilidad del plan computacional,
- La eficiencia de los códigos a utilizar, y el correcto tamaño del problema para el *hardware* disponible, y
- Demostrar idoneidad para utilizar recursos computacionales de alto desempeño. Los requisitos para los proyectos PISCA serán adecuados considerando a nuevos usuarios en el área de HPC.



