



Portuguese **Distributed Computing** Infrastructure

Relations with Users

Periodic Report of the activities of the WP3

State:	FINAL
Dissemination:	Public
Authors:	Catarina Ortigão (INCD)
URL:	http://www.incd.pt

Date	Author	Comments
09-07-2019	Catarina Ortigão	Initial version
16-09-2019	Catarina Ortigão	Updated

Cofinanciado por:





Scope and Introduction

The Relation with users' activity intends to boost the interaction with both potential and actual user communities of the INCD infrastructure. It will interact direct with interested users, analyse their objectives and needs, and collect feedback on the effective use of pilot services. Its main objective is to maximize the benefits of INCD services to the user communities.

Sub-task 2 (Liaison with the users) was planned to be a continuous interaction phase with potential users, where contacts would be tracked and direct contacts established in coordination with activity 2 (dissemination).

This is the Periodic Report of the Work Package 3 (Relations with users) and complies the project's milestone **M3.3.- Periodic Report.**

Update of the activity

It our understanding that INCD web presence is essential for the credibility of the infrastructure so the new web page of INCD includes service information, use case examples, project fact sheets and other information.

We have produced a user-oriented documentation system (<https://wiki.incd.pt/>), and some dissemination and training materials. Moreover, it is now running a new user management web portal, which aims to provide integrated management of access requests, resource allocation and results collection.

INCD has received several user requests and those were accommodated in the infrastructure with initial and follow up meetings shepherded. The following table resumes the activity from July/2018 to July/2019.

Internal ID	Date	Institution	Requirements
88	2018-06-18	Universidade de Lisboa - Instituto Superior de Agronomia	Actualmente as 50000 simulações são feitas numa máquina com 12 processadores, 128 Gb de RAM, ocupando durante o processamento até 300 Gb, que depois são reduzidos a cerca de 2Gb no final. A duração é de 10 dias. A grande limitação são os processadores. O problema é escalável, quantos mais processadores mais rapido será o processamento OU mais simulações será possível fazer.
93	2018-07-13	Faculdade de Medicina Veterinária da Universidade de Lisboa	Cores:10 RAM: 128 Gb RAM storage space: 1Tb
94	2018-07-18	Instituto Superior Técnico	Não estão definidos.
103	2018-09-06	Coimbra Institute for Biomedical Imaging and Translational Research (CIBIT)	Nesta fase inicial, 5 cores seria indicado para o processamento de dados de 5 participantes em paralelo. Apenas o processamento será feito nos servidores, portanto não será necessário grande armazenamento.

114	2018-10-23	MARE - Marine and Environmental Sciences Centre	Para este ambiente de qualidade precisamos. API Gateway 1 Cloud computing com 4gb Ram, 60 SSD, 4CPUs Apache Kafka Server 1 Cloud computing com 4gb Ram, 60 SSD, 4CPUs Processing Cluster 2 Cloud computing com 16gb Ram, 100 SSD, 8CPUs Geo Server 1 Cloud computing com 16gb Ram, 60 SSD, 8CPUs db Cluster 1 Cloud computing com 8gb Ram, 100 SSD, 4CPUs HDFS Storage ou block > 2Tb É espectável testar todos os algoritmos com e medir latências e tempos de processamento. Posteriormente optar ou não por mover o block storage para junto do cluster de processamento se verificarmos atrasos significativos a processar pedidos de > 100gb em ficheiros NetCDF Todo o ambiente será construído com Docker Swarm e vários workers estarão espalhados por cada máquina de processamento
119	2018-12-02	cE3c - centre for ecology, evolution and environmental changes, FCUL, Universidade de Lisboa	As análises requerem sobretudo RAM e armazenamento em disco. Poderemos efectuar as análises passo a passo, o que requer menos cores, RAM e armazenamento, ou com mais análises em simultâneo, pelo que indico um intervalo de valores. Nº cores: 10-100 RAM: 10-100GB Armazenamento: 500GB-1TB
120	2019-01-21	Instituto Superior de Engenharia de Coimbra	Mínimo 4 máquinas dedicadas - ótimo 8 máquinas Armazenamento - mínimo 200gbs RAM - mínimo 8gb - ótimo 16gbs CPU - ideal seria octa-core 1.80GHz
121	2019-01-21	Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa (FCUL)	Nº de cores: 64 a 256 RAM: 160GB a 640GB Armazenamento: 1TB a 2TB
124	2019-01-28	ISCTE-IUL	Nº de cores: 16 Memória: 32GB Armazenamento: 256GB Sistema operativo: Linux Software: RStudio Server, R, Mplus (temos a licença para tal).
125	2019-01-28	ISPA-IU	4 cores i7, 32 GB RAM, 1 TB HD
126	2019-02-01	ISEC	1 computador, Armazenamento mínimo 1TB, máximo de 2TB RAM - máximo que conseguirem CPU - melhor que conseguirem
127	2019-02-20	LNEC	Está prevista a simulação de 20 cenários para os casos de estudo. Cada cenário representará uma simulação de 150 dias. Com base em testes preliminares realizados na Medusa - LNEC, estima-se que para cada cenário serão necessários 96 cores, demorando a corrida cerca de 12 dias.
128	2019-02-22	Universidade do Minho/Escola de Engenharia/Departamento de Informática	5 grupos de alunos a trabalharem com OpenStack Labs Para cada --- Várias VMs (se possível em locais diferentes) --- 16 GB RAM --- 1 TB de disco
129	2019-02-27	LNEC (DHA-NPE)	Armazenamento: para cada simulação valor médio 25 GB. Numero mínimo de cores: não tem. O modelo não tem versão paralelizada.

130	2019-03-01	Universidade Aberta	Acesso a cluster configurado para HPC, naturalmente partilhado com outros utilizadores. Expectativa de cluster com um mínimo de algumas dezenas de cores.
131	2019-03-05	Universidade Nova de Lisboa	Nº de cores: 32 Memória ram: 16G Armazenamento: 5G
132	2019-03-06	FCT/UNL	Ainda não definidos mas são baixos.
133	2019-03-09	Universidade de Coimbra	Se possível deter controlo limitado na criação de máquinas virtuais, com um certo limite superior, 8 cores, 16Gb memória e 128Gb de storage seria ideal para o problema em causa.
134	2019-03-25	FCT-UNL	Cloud
135	2019-03-26	CEDOC - Nova Medical School	Preveremos dois tipos de necessidades, análises "High memory, low CPU usage" e "Low memory, high CPU usage". RAM: 150-200 G 20-30 cores Computação em paralelo que permita MPI e PThreads Local disk: trabalhamos com ficheiros que podem ter 1 Gb mas podemos ter que analisar várias dezenas destes ficheiros numa só análise. Softwares. Todos as ferramentas são de livre acesso e não prevemos usar software com licenças pagas (exemplo R).
136	2019-04-04	Universidade Nova de Lisboa - Nova School of Business and Economics	Não temos requisitos específicos em termos de cores, teríamos de pensar em como paralelizar processos. As necessidades de memória devem ser da ordem das dezenas de Gigabytes. O armazenamento, neste momento, é trivial, certamente menos de 1 TB no total e no futuro previsível.
137	2019-04-08	CICECO - Instituto de Materiais da Universidade de Aveiro	Acesso a plataformas baseadas em múltiplos CPU (ou CPU+GPU dupla precisão para cálculos com o código VASP - código comercial (ou Quantum Espresso - código livre). Cálculos baseados na teoria dos funcionais da densidade eletrónica das geometrias e energias de adsorção de inibidores de corrosão em superfícies metálicas baseadas em ferro ou alumínio. Projeto DATACOR: http://www.ciceco.ua.pt/index.php?menu=219&language=eng&tabela=projectosdetail&projectid=975&language=eng Acesso a plataformas baseadas em múltiplos CPU (ou CPU+GPU precisão simples para cálculos com o código GROMACS - código livre. Cálculos de dinâmica molecular clássica com modelos coarse-grained de soluções aquosas de tensioativos e monómeros de sílica ou organossílica. Projeto SÍLVIA: http://www.ciceco.ua.pt/index.php?menu=219&language=eng&tabela=projectosdetail&projectid=897&language=eng

138	2019-04-18	Universidade Aberta	Trabalho com o que existir, mas para terem uma ideia do que tenho utilizado, fica aqui referências relativas a uma instância fechada, da qual testei várias configurações para procurar entender o que melhor resulta e conseguir fechar instâncias em aberto: - P2 8h UBS SER CLB11 MTW, 10*36 cores, lht changed ---- Instance done: LB76 UB76 (7786.56s). [22/22 0/894 x0.27 0/11693/1524246 x0.27] --- tst41.o7286037 --- took 776 ch - SER UBS CLB11 MTW 24 cores, 3 days --- Instance done: LB76 UB76 (230123.56s). [14/14 0/111 x0.89 0/1444/2832546 x0.89 ~251437!2027240(1805044)] maxL27 --- tst41ser3d.txt --- took 1470 ch Numa corrida a mesma instância foi resolvida em 776 cores.hora, em outra corrida foi resolvida em 1470 cores.hora, sendo praticamente tudo igual excepto o número de processos.
139	2019-04-23	Center for Marine Technology and Engineering (CENTEC)	Number of CPU =480 Memory (GB) = 640 Estimated Maximum Storage Quantity Required (Scratch) (GB) = 4000 Expectation of number of tasks running simultaneously =10 Expected execution time of a task (in hours)= 300
140	2019-05-04	Cicant - ULHT	Estimativa inicial: - 4 cores - 32 GB RAM - 1TB Storage
141	2019-05-30	Instituto Nacional de Saúde Doutor Ricardo Jorge	A discutir em sede de reunião, se possível.
142	2019-07-16	Faculdade de Ciências e Tecnologia / Universidade Nova de Lisboa	# cores: 100-200 RAM: 5-10 GB Storage space: 500 GB
143	2019-07-16	Universidade de Aveiro	Nó com: 24 processadores ou mais 265 gb de RAM ou mais 500 gb de armazenamento ou mais
144	2019-07-16	Universidade de Aveiro	Nº de processadores superior a 24 Memória RAM superior a 256 GB espaço em disco 500 GB
145	2019-07-23	CICECO Instituto de Materiais de Aveiro, Universidade de Aveiro	Utilização do software GROMACS, em processamento multi-core e/ou com recurso a GPU.
146	2019-07-24	Universidade de Coimbra	storage space: algumas dezenas de TB; cores: algumas centenas; memória não deverá ser problema, dado que hoje em dia as máquinas têm várias dezenas de GB por core.
147	2019-07-24	CFisUC, Centro de Física da Universidade de Coimbra	1200 cores, cada core com pelo menos 50 GB de RAM , 1 TB de espaço no disco
148	2019-07-25	University of Aveiro	Utilização do software GROMACS, em processamento multi-core e/ou com recurso a GPU.

New supported projects accept during 2019

- UID/BIA/00329/2013
 - "CENTRE FOR ECOLOGY, EVOLUTION AND ENVIRONMENTAL CHANGES"
- Marie-Sklodowska Curie action MAPGenome (no. 799729)
 - "MAPGenome: Mapping migration and adaptation in genomes"
- PTDC/MHC-PSO/1044/2014
 - "Cognição de equipas, adaptação e sistemas multi-equipas em ambientes dinâmicos"
- PTDC/AAG-MAA/6899/2014
 - "UBEST - Understanding the biogeochemical buffering capacity of estuaries relative to climate change and anthropogenic inputs"
- PTDC/EEI-ESS/1189/2014
 - "Data Science for Non-Programmers"
- POCI-01-0145-FEDER-016759
 - "Intensificação do processo de produção e valorização de microalgas"
- DSAIPA/AI/0087/2018
 - "Identifying and Predicting Emergency Admissions"
- DATACOR POCI-01-0145-FEDER-030256
 - "dados inteligentes para desenhar inibidores de corrosão"
- EOSC-synergy grant 857647
 - "European Open Science Cloud – Expanding Capacities by Building Capabilities"
- CENTRO-01-0145-FEDER-31002
 - SILVIA - Modeling the synthesis of silica materials via multiscale computer simulations
- PTDC/FIS-MAC/32229/2017
 - **NA
- AESOP P2020 - 31/SI/2017
 - Criação de plataforma de orquestração micro serviços baseada em métricas de QoS *
- LISBOA-01-0145-FEDER-007660
 - Microbiologia Molecular, Estrutural e Celular *
- UID/QUI/50006/2019
 - Cálculo computacional utilizando Dinâmica Molecular Clássica & Metadynamics: cadeias de DNA, clatratos de gelo, líquidos iónicos
- UID/CCI/4667/2019
 - NA