

Dan slovenskega superračunalniškega omrežja, MREŽA ZNANJA
16. november 2023

arnes 



EURO



SLING

Dostopi do infrastrukture SLING in EuroHPC

Prezenter: Dejan Valh, IZUM - Institut informacijskih znanosti Maribor

O IZUM-u



- Javni infrastrukturni in raziskovalni zavod, 118 zaposlenih (6 zaposlenih za superračunalništvo)
- Knjižnični informacijski sistem
- Informacijski sistem o raziskovalni dejavnosti
- UNESCO regionalni center



United Nations
Educational, Scientific and
Cultural Organization

Regional Centre for
Library Information Systems and
Current Research Information Systems
Regionalni center za knjižnične
informatijske sisteme in informatijske
sisteme o raziskovalni dejavnosti



- Operacija HPC RIVR, konzorcij SLING
- HPC eksperti UM, IZUM, IJS, Arnes
- HPC Maister (UM), HPC Trdina (FIŠ)

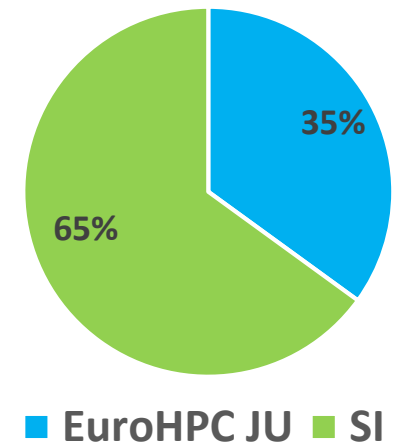


Deleži virov HPC Vega



Za HPC Vega so na letni bazi namenjeni naslednji deleži uporabe:

- **65 % celotne kapacitete – nacionalni delež**, razdeljen:
 - do 70 % za odprti dostop (znanstveniki, raziskovalci, profesorji, študenti, javne službe – npr. ARSO...)
 - do 20 % za gospodarski dostop – komercialno (za plačilo) ali razvojno-industrijsko (samo za razvoj)
 - od 10 % naprej gostitelj (IZUM) rezervira za:
 - nujna prioriteta raba (npr. prioriteta uporaba nacionalnega pomena)
 - neprekinjeno vzdrževanje (posodobitve/nadgradnja/popravila)
- **35 % celotne kapacitete – delež EuroHPC JU:**
 - Projekti, ki jih odobri EuroHPC JU



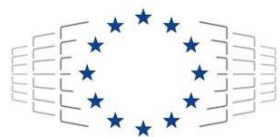
Kaj pomeni odprti dostop do virov



Raziskovalna Infrastruktura
Vzhodne Regije



V E G A



EuroHPC
Joint Undertaking

SLING

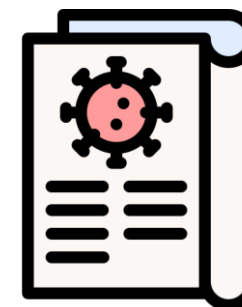
Slovensko nacionalno
superračunalniško
omrežje

- Je **BREZPLAČEN** (fundiran vnaprej), vendar z jasnimi zahtevami
- **PRIZNANJE** (zahvala) financerjem v vseh predstavitevah, objavah, promocijah (npr. omemba HPC Vega, projekta HPC RIVR, zahvala EuroHPC JU, SLING)
- Priprava **POROČILA** in objava rezultatov raziskave (npr. objava odkritij, spoznanj, rešitev, postopkov, procesov, modelov v znanstvenih revijah, na konferencah, forumih itd.)
- Sodelovanje v **DISEMINACIJSKIH** aktivnostih in **PROMOCIJI** projektov, uspešnih zgodb, raziskovalne infrastrukture, financerjev

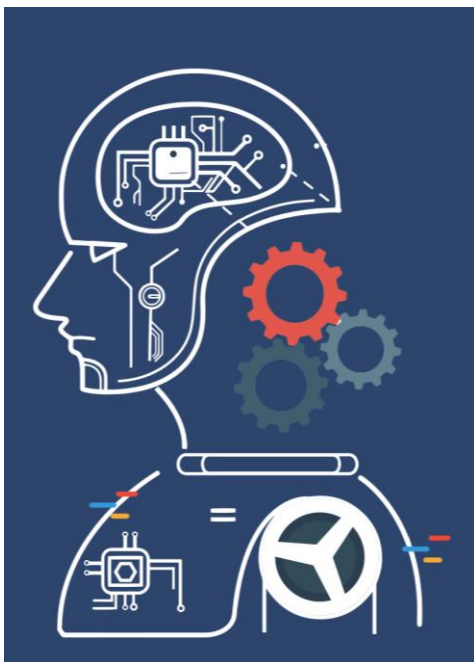
Nova pravila za odprti dostop



- Nova NACIONALNA PRAVILA V ODPRTEM DOSTOPU so sprejeta v letošnjem letu
- Štirje tipi razpisov za testne, razvojne, običajne in velike projekte
- Potrjen Pravilnik Komisije Sveta SLING za odprti nacionalni dostop
- Potrjeni so člani komisije po področjih za znanstveno presojo (peer-review)
- Zahtevana poročila, ki vsebujejo (odvisno od velikosti porabe virov HPC):
 - Uspešnosti raziskave in kakšni so zaključki
 - Seznam objavljenih znanstvenih člankov (če so nastali)
 - Možni vplivi na družbo (če gre za večje znanstvene projekte)
 - Ocena tehnične in uporabniške pomoči SLING
- Prijavitelj je odgovoren vodja raziskave
- Potreben je/bo podpis Splošnih pogojev poslovanja in izjava GDPR/DPA
- Začenjamo z “mehkim” prehodom na nov način prijav na odprte pozive.

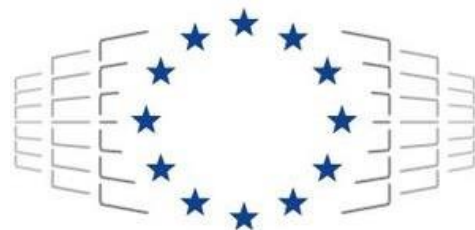


Nova politika dostopov EuroHPC JU



Vir: <https://dribbble.com/shots/15401203-Artificial-intelligence-G-F>

- Nova verzija 2.0 je v nastajanju, v zadnjem branju (INFRAG, GB)
- Opisana vloga pisarne EuroHPC Peer-Review (preseljeno iz PRACE)
- Ukinjena Fast Track Access for Academia; for Industry
- Jasen je poudarek na projektih za umetno inteligenco (UI), predvsem za majhna in srednja podjetja:
 - neposredna zahteva s strani Evropske Unije
 - potrebno je najti eksperte za znanstveno evalvacijo projektov UI
 - uveden nov dostop *“Industry Access for Artificial Intelligence”*



EuroHPC
Joint Undertaking

EuroHPC JU Access Modes (preliminary)



| Access Mode | Extreme Scale Access | Regular Access | Industry Access for AI | Benchmark Access | Development Access |
|-----------------------------------|---|---|---|--|--|
| Allocations Duration | 1 year | 1 year | 1 year | 3 months | 6 months to 1 year |
| Recurrence | Continuous call, cut-offs every six months (2 cut-offs per year). | Continuous call, cut-offs every six months (2 cut-offs per year). | Continuous call, bi-monthly cut-offs (6 cut-offs per year) | Continuous call, monthly cut-offs (12 cut-offs per year) | Continuous call, monthly cut-offs (12-cut offs per year) |
| Possibility for project extension | Yes, max 3 months and up to 10% of initial allocation, subject to progress report approval. | Yes, max 3 months and up to 10% of initial allocation, subject to progress report approval. | Yes, max 3 months and up to 10% of initial allocation, subject to progress report approval. | No | No |
| Share of resources (indicative) | Up to 50 % of participating systems High-end systems (pre-exascale and exascale) | Up to 70 % of participating systems All systems | up to 20% of participating systems All system partitions with AI capabilities | up to 5% of participating systems All systems | up to 5% of participating systems All systems |
| Data storage needs | Large storage for medium to long term | Large storage for medium to long term | Large storage for medium to long term | Limited | Data processing environment and platform |
| Accessible to industry | Yes Specific track and evaluation criteria | Yes Specific track and evaluation criteria | Exclusively for AI industry applications – Special conditions for SMEs and startups | Yes | Yes |
| Scientific Peer-review | Yes | Yes | Yes (specific to AI aspects) | No | No |
| Technical assessment | Yes | Yes | Yes | Yes | Yes |
| Data Management Plan | Yes | Yes | Yes | No | No |
| Application type | Full application | Full application | Full application | Technical application | Technical application |
| Prerequisite | Benchmark | Benchmark | Benchmark | None | None |
| Duration of evaluation process | 6 months | 4 months | 2 month | 2 weeks | 2 weeks |
| Final report (for general public) | Within 3 months after completion | Within 3 months after completion | Within 3 months after completion including exploitation plan | Within 3 months after completion (short report) | Within 3 months after completion (short report) |

Možni načini za odprti dostop



| Nacionalni odprti dostopi SLING | Dostopi EuroHPC JU |
|---|-------------------------------------|
| Testni projekti – krajše TP) ¹ | Benchmark Access ² |
| Razvojni projekti (RP) ¹ | Development Access ² |
| Običajni raziskovalni projekti (ORP) ¹ | / (ni približnega ekvivalenta) |
| Veliki raziskovalni projekti (VRP) ¹ | Regular Access ² |
| / | Extreme Scale Access ³ |
| / | Industry Access for AI ⁴ |

¹ Nova pravila odprtega dostopa – začetek predvidoma 1. 2. 2024

² Velja za HPC Vega, ostane v novi politiki dostopa EuroHPC JU

³ Se izvaja (ne za HPC Vega), za pre-exascale in exascale sisteme

⁴ Nov način dostopa – za projekte AI iz industrije

Pridržana je pravica financerjev do specialnih dostopov (Special Access), npr. prednostni (nacionalni) projekti, izredne razmere


UPRAVIČENCI SLING – raziskovalci, ki imajo dostop do omrežja ARNES; **UPRAVIČENCI EuroHPC** – potrjuje EuroHPC JU

PRIJAVA SLING: preko obrazca na www.sling.si; **PRIJAVA EuroHPC JU** – preko portala PRACE (kmalu bo nov portal)

Testni projekti (skupne lastnosti)



- **Namen:** za primerjalno testiranje, testiranje in razvoj programske opreme ter demonstracije, priprava za nadaljnje razpise z več viri HPC
- **Razpis:** stalno odprt, prijave možne kadarkoli
- **Čas trajanja projekta:** tri mesece
- **Viri:** na nacionalnih razpisih bodo enaki deležu EuroHPC JU za HPC Vega:
 - Particija Vega CPU: 5.000 vozliščnih ur = 625 k jedrnih ur
 - Particija Vega GPU: 400 vozliščnih ur = 51,2 k jedrnih ur

| | | | | |
|---|-------------------|-------------------------------|----------|-------|
|  | IZUM Maribor (SI) | Atos BullSequana XH2000 | Vega CPU | 5 000 |
| | | | Vega GPU | 400 |

Testni projekti (razlike)




| | Testni projekti SLING | EUROHPC JU Benchmark projekti |
|--|---------------------------------------|---|
| Upravičenci | Raziskovalci, dostop do omrežja ARNES | Administrativni pregled opravi EuroHPC |
| Prijava | Preko portala SLING | Preko portala PRACE (bo nov portal) |
| Prijavni podatki | Osnovni | Osnovni in bolj podrobni (npr. št. poslov) |
| Tehnični pregled | V enem mesecu, običajno v nekaj dneh | V 14 dneh, običajno v nekaj dneh |
| Časovno podaljšanje in povečanje virov | Za največ 20 % | Izrecno NE, v praksi možno po posebni prošnji |
| Možnost obnovitve | Največ dvakrat | Ni opredeljeno |
| Omejitve prijavitelja | Največ 10 takih projektov | Ni opredeljeno |
| Za podjetja | Ni možnosti | Se lahko prijavijo – odobri EuroHPC JU |
| Poročilo | Končno poročilo po končanju | Končno poročilo v treh mesecih |

Razvojni projekti (skupne lastnosti)



- **Namen:** razvoj programske opreme in algoritmov, lahko je tudi raziskovalni projekt z omejenimi potrebami po virih, priprava za prijavo na projekte z več viri HPC
- **Razpis:** stalno odprt
- **Viri:** na nacionalnih razpisih bodo enaki deležu EuroHPC JU za HPC Vega:
 - Particija Vega CPU: 10.000 vozliščnih ur = 1,28 M jedrnih ur
 - Particija Vega GPU: 1.000 vozliščnih ur = 128 k jedrnih ur

| | | | | |
|---|-------------------|-------------------------------|----------|--------|
|  | IZUM Maribor (SI) | Atos BullSequana XH2000 | Vega CPU | 10 000 |
| | | | Vega GPU | 1 000 |

Razvojni projekti (razlike)



| | Razvojni projekti SLING | EUROHPC JU Development projekti |
|--|---------------------------------------|---|
| Prijavni podatki | Osnovni, podrobni bolj v pisni obliki | Osnovni in bolj podrobni (npr. št. poslov) |
| Tehnični pregled | V enem mesecu, običajno v nekaj dneh | V 14 dneh, običajno v nekaj dneh |
| Čas trajanja projekta | Devet mesecev | Šest mesecev do enega leta |
| Časovno podaljšanje in povečanje virov | Za največ 20 % | Izrecno NE, v praksi možno po posebni prošnji |
| Možnost obnovitve | Največ enkrat | Ni opredeljeno |
| Omejitve prijavitelja | Največ dva taka projekta | Ni opredeljeno |
| Za podjetja | Ni možnosti | Se lahko prijavijo – odobri EuroHPC JU |
| Poročilo | Vmesno poročilo po šestih mesecih | Končno poročilo v treh mesecih |

Običajni raziskovalni projekti SLING



- **Namen:** kot produkcijska raba superračunalniških kapacitet ali dodelitve podatkovnih shramb, kadar zahteve niso zelo velike.
- **Razpis:** trikrat letno
- **Upravičenci, prijava:** kot pri malih nacionalnih projektih
- **Prijavni podatki:** razširjeni (podrobne potrebe po virih, izkušnje, predhodni rezultati testiranj, razvoja, potrebe po shranjevalnih virih itd.)
- **Tehnična ocenitev** primernosti projekta (ni potrebna znanstvena recenzija) se izvede v mesecu dni
- **Viri** - za HPC Vega bodo določeni za vsak razpis posebej za vse projekte:
 - Upoštevalo se bo porabljene vire preteklih projektov in velike projekte
 - Načeloma ena tretjina (trije razpisi letno) od 50% vseh razpoložljivih virov na nacionalnem deležu
 - Npr. na particiji Vega CPU za vse projekte 800.000 vozliščnih ur = 102,4 M jedrnih ur
 - Npr. na particija Vega GPU za vse projekte 50.000 vozliščnih ur = 6,4 M jedrnih ur



Veliki raziskovalni projekti / Regular



- **Namen:** produkcijska uporaba, pa tudi za razvoj programskih sistemov in algoritmov, prilagajanje obstoječe programske opreme ali testiranje metodologije specifičnih znanstvenih prototipov, kadar je za postopek ali zaradi količine podatkov treba uporabiti velike količine računskih virov ali podatkovnih shramb.
- **Znanstvena ocena odličnosti:** zahtevan postopek ocenjevanja znanstvene odličnosti, ki se skupaj s tehnično oceno primernosti zaključi v največ treh mesecih
- **Pričakovanja:** velik učinek na mednarodni ravni.
- **Trajanje projekta:** 12 mesecev
- **Razpis:** dvakrat letno
- **Viri** - za HPC Vega bodo določeni za vsak razpis posebej za vse velike raz. projekte:
 - Upoštevalo se bo porabljene vire preteklih običajnih projektov in velike projekte
 - Načeloma polovica (dva razpisa na leto) do 40% vseh razpoložljivih virov na nacionalnem deležu
 - Npr. na particiji Vega CPU za vse projekte 1 M vozliščnih ur = 128 M jedrnih ur
 - Npr. na particija Vega GPU za vse projekte 80.000 vozliščnih ur = 10,24 M jedrnih ur

VRP/Regular (razlike)



| | Veliki raziskovalni projekti SLING | EUROHPC JU Regular projekti |
|-----------------------|---|--|
| Upravičenci | Raziskovalci, dostop do omrežja ARNES | Administrativni pregled opravi EuroHPC |
| Prijava | Preko portala SLING | Preko portala PRACE (bo nov portal) |
| Prijavni podatki | Razširjeni | Razširjeni, zelo podrobni |
| Časovno podaljšanje | Za največ 12 mesecev | Za največ tri mesece |
| Povečanje virov | Za največ 20% | Za največ 10% |
| Možnost obnovitve | Največ enkrat | Ni predvideno |
| Omejitve prijavitelja | Največ en tak projekt | Lahko več, če so viri na voljo |
| Za podjetja | Ni omogočen | Je omogočen (odobri EuroHPC JU) |
| Poročilo | Potrebno poslati po šestih mesecih | Potrebno poslati po treh mesecih |

Prijava na pozive EuroHPC JU



Project Application

The Project

Project name: Skin permeability

Research field title: LS1 Molecular and Structural Biology and Biochemistry

Research field sub-title: LS1_1 Molecular biology and interactions

Research field share (%): 100

Additional keywords:

Skin permeability prediction

Topical formulation development

Project summary (abstract):

A molecular level understanding of skin permeation may rationalize and streamline product development and improve quality and control, of transdermal and topical drug delivery systems. We have developed an atomistic model of the main barrier in human skin. We use that model to predict drug permeability using molecular dynamics (MD) simulations (with GROMACS). We have also shown that we can predict the effect of permeation enhancers in pharmaceutical formulations. This will help us improve topical drug delivery.

Permeability calculations, using MD simulations, through barrier structures with long correlation times, such as the lipid barrier in skin, require much sampling. The compute capabilities of HPC significantly enhance the throughput, making it possible to evaluate the properties of complex pharmaceutical transdermal, or dermal, formulations consisting of multiple components.

Proposal for civilian purposes: Proposal for civilian purposes

Resubmission type: no

ID of the original project for resubmission (if applicable): Not provided

Track selection: Industry Access Track

Partitions

Partition name: Vega GPU

Code used: GROMACS

Requested amount of resources 1st year in core hours: 3900000

Number of jobs simultaneously: 2

Wall clock time of a typical job execution (h): 48

Are you able to write checkpoint?: yes

Maximum time between 2 checkpoints (h): 1

Minimum # cores: 384

Average # cores: 384

Maximum # cores: 384

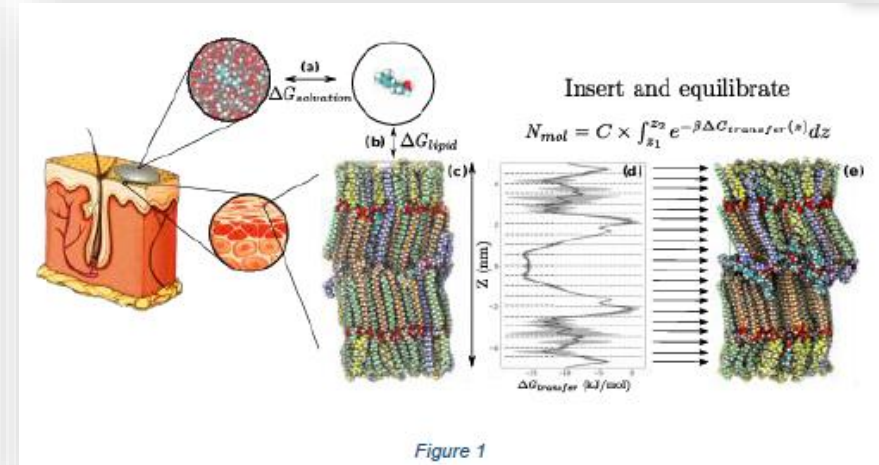
Minimum job memory (total usage over all cores GB): 20

Average job memory (total usage over all cores GB): 20

Maximum job memory (total usage over all cores GB): 20

Maximum amount of SCRATCH needed at a time (GB): 20

Maximum amount of WORK needed at a time (GB): 100



2.5 Description of the results obtained from the scientific point of view, future perspectives, benefits to the society and the benefits of using computer resources

Please fill in the information in the box below (maximum 1000 words).

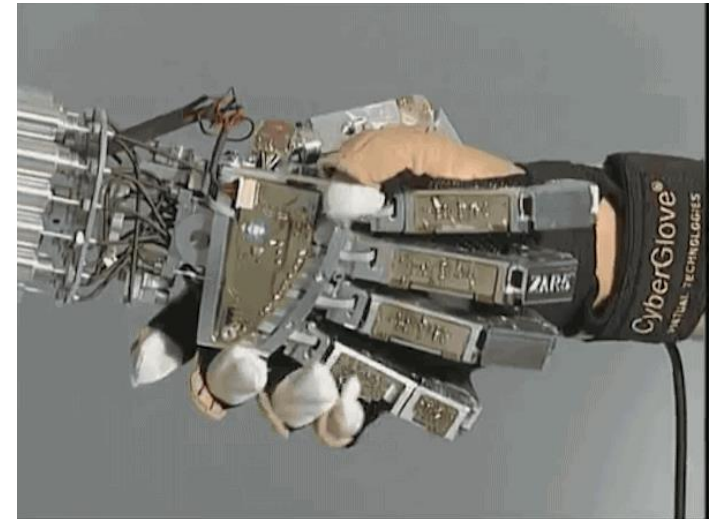
Understanding how chemical permeation enhancers (PEs) impact skin to improve transdermal delivery of drugs has great implications for clinical medicine, as replacing oral, or intravenous, with topical, drug administration, would give physicians better control over medication and dosage levels. Due to the inability of current in vitro methods to predict the effects of PEs on transdermal drug transport, complementary in silico-methods are requested.

Using molecular dynamics (MD) simulation we have predicted the effect of PEs on drug permeation through skin. Qualitative agreement between calculated- and in vitro determined permeability coefficients is good, and MD simulations are able to reproduce PE permeability enhancement ratio (ER) rankings.

Je možen odprti dostop za PODJETJA?



- **DA**, preko pozivov EuroHPC JU za deleže EuroHPC na **vseh sistemih EuroHPC**
- Na nacionalnem deležu HPC Vega in ostalih gruč preko **sodelovalnih projektov raziskovalne narave** npr.:
 - zaposleni v podjetju je vpisan na doktorski študij
 - sodelovanje v centrih odličnosti EuroHPC (CoE)
 - izvedba projekta, ki ga izvaja fakulteta ali institut v sodelovanju s podjetjem
 - sodelovanje na projektih EuroHPC JU (npr. interTwin).
- **za izobraževalne in testne (uvajalne) namene**, npr. preko EuroCC SLING, E-DIH, DIGI-SI



O komercialnem (tržnem) dostopu



- Rabo virov je treba plačati (Pay-per-use)
- Splošna **omejitev** za tržno dejavnost na raziskovalni infrastrukturi je **20%** (regulacija EU)
- Brez omejitev so komercialni ponudniki
- Oblike in načini izvedbe so različni glede na potrebe podjetij in njihovo **zrelost za uporabo superračunalnikov**
- Kdo ponuja tržne storitve v Sloveniji:
 - Podjetje *Arctur* kot komercialni ponudnik za **razne vrste projektov (razvojne)**
 - *Univerza v Mariboru* na raziskovalni infrastrukturi HPC Maister za **projekte z manj viri**
 - *IZUM* na raziskovalni infrastrukturi HPC Vega za projekte, kjer se potrebuje **veliko računskih virov**



Komercialna raba HPC Vega



- Za organizacije, ki imajo **večje potrebe po računskih virih** (npr. ko jim ostala infrastruktura ne zadostuje in imajo dovolj znanja in izkušenj)
- Na voljo je **20% od nacionalnega deleža** (13% HPC Vega) – če bi to presegli, potem je na voljo **tudi 20% od deleža EuroHPC** (7%), cena je za oba dela enaka (<https://si-vegadocs.vega.izum.si/cenik/>)!
- Primerna so organizacije, ki imajo **več izkušenj pri rabi HPC**:
 - Izobraževanja nudi EuroCC SLING
 - Razvojno pomoč, svetovanje in testiranje za dvig zrelosti lahko pridobijo pri komercialnih ponudnikih, kot je npr. Arctur
 - Podpora HPC Vega je v prvi vrsti namenjena raziskovalnim skupinam



gorenje

a **Hisense** company



Hvala!

Projekt EuroCC 2 financira Evropska unija. Financiran je s sredstvi Skupnega evropskega podjetja za visokozmogljivo računalništvo (EuroHPC JU) ter Nemčije, Bolgarije, Avstrije, Hrvaške, Cipra, Češke republike, Danske, Estonije, Finske, Grčije, Madžarske, Irske, Italije, Litve, Latvije, Poljske, Portugalske, Romunije, Slovenije, Španije, Švedske, Francije, Nizozemske, Belgije, Luksemburga, Slovaške, Norveške, Turčije, Republike Severne Makedonije, Islandije, Črne gore in Srbije v okviru sporazuma o dodelitvi sredstev št. 101101903.



**Funded by
the European Union**