

Córdoba 5 de julio del 2021

Centro de Computación de Alto Desempeño

Informe de gestión 2020

Director: Oscar Reula

El Centro de Computación de Alto Desempeño (CCAD) de la Universidad Nacional de Córdoba es un organismo creado en 2013 que tiene como finalidad la de administrar los recursos de computación de alto desempeño dentro de la Universidad Nacional de Córdoba. Consta de: un Directorio -integrado por miembros de las Facultades fundadoras, de la Prosecretaría de Informática y del CCT-Córdoba; un Director; Secretarios Técnico y Administrativo, y un Consejo Científico encargado de diseñar las políticas de uso y asignación de tiempo de cómputo. El CCAD posee una página web (<http://ccad.unc.edu.ar/>) con información detallada de sus equipos y actividades.

Durante el 2020 el Centro de Computación de Alto Desempeño realizó las siguientes tareas:

1. Equipamiento:

a. [Tres servidores nuevos para Eulogia](#)

Aumentamos la capacidad de Eulogia en más de 50%, pero con las elecciones de diciembre de 2019 y la pandemia todo se retrasó.

El miércoles 8 de julio de 2020 finalmente llegaron los nodos KNL ([Xeon Phi 7210](#)) los cuales fueron adquiridos, a través de una barata de eBay, a fines de 2019 al vendedor Lambda Labs con sede en San Francisco, California, EEUU. El equipamiento adquirido son 3 chasis 2U de 4 nodos KNL 7210 cada uno, totalizando 12 procesadores de 2.66 TFLOPS pico cada uno, por un valor total de U\$D 6.000.

b. [Compra Comunitaria: RAM y SSD para nuevos nodos de Eulogia](#)

Se continuó con el esquema de **compras comunitarias** pidiendo pequeños aportes a las y los usuarios y así poder equipar al CCAD. Se invirtió en Eulogia por un total de \$350.000 para comprar:

* 4 SSD [Intel S4610 240GB](#), por un monto de U\$D 688,64.-

* 24 módulos RAM 16 GiB DDR4-2400 2Rx4 ECC REG por un monto de U\$D 3.687,50.-

Con esta Compra Comunitaria ya tenemos RAM y SSD para completar 4 nodos de los 12 que llegaron de Eulogia.

c. [La UNC adjudicó su próximo cluster](#)

El Honorable Consejo Superior de la UNC aprobó la adjudicación del PAGE No.1 a la Licitación Pública Nacional para la adquisición de un «Sistema Integral de Supercómputo» por U\$D 371.784 a la firma Army Technologies / Multitech. La [Resolución del Consejo Superior 414-2020](#) finaliza un proceso de licitación que empezó en noviembre de 2019 y que casi termina la primera quincena de marzo, pero fue demorada por la pandemia de COVID-19. En el proceso de licitación hubo cuatro oferentes admisibles, todos con ofertas ajustadas al pliego técnico y con una buena relación GFLOPS/USD.

2. Formación de Recursos Humanos / Servicios / Capacitación

a. [Ayuda al LaES para modernizar código](#)

El CPA Principal de CONICET Carlos Bederián modernizó un código "C" para el Laboratorio de Energías Sustentables de la UNC. Carlos logró que el código sea diez veces más rápido, es decir 10 veces más simulaciones o sistemas 10 veces más grandes.

b. [Instalación de servers de cómputo en INTA](#)

En septiembre de 2019 nos contactaron para acondicionar equipos destinados a Bioinformática desde el recientemente creado UFYMA, una Unidad Ejecutora de doble dependencia entre CONICET y Centro de Investigaciones Agropecuarias (CIAP) del INTA.

Se puso en funcionamiento un cluster compuesto por una cabecera HP DL580 Gen9 con 2*Xeon E7-4809v3, 512 GiB RAM y 5*256 GiB SSD RAID5 storage y dos nodos de cálculo HP ProLiant XL170r Gen9 con 2*Xeon E5-2620v4 y 128 GiB RAM.

Los equipos estaban a la espera de instalar desde hace un par de años, y como el valor de las supercomputadoras se deprecia con el tiempo, el CPA de CONICET y técnico del CCAD, Lic. Marcos Mazzini aprovechó toda la experiencia de Mendieta y Mulatona.

3. Otras Gestiones:

a. Se inició un Convenio Específico con FAdeA S.A. con el fin de brindar servicios de HPC a dicha empresa.

b. Participación en el NODO de Inteligencia Artificial CTC-FaMAF-CCAD.

c. Participación del Consejo de la Diplomatura en Ciencia de Datos de la FaMAF.

d. Re-empadronamiento de usuarios.

e. [Ciclo de Charlas 2020](#)

El Rector de la Universidad Nacional de Córdoba, Dr. Hugo Juri, inauguró un Ciclo de Charlas organizado por el CCAD-UNC. Se dieron un total de 9

charlas con investigadoras e investigadores de todo el país en diferentes temas alrededor de la pregunta "¿Por qué es importante el HPC en Argentina?". Contamos también con la presencia de investigadores de Uruguay, Chile y Suiza.

- f. El CCAD priorizó proyectos relacionados a COVID-19
- El Directorio del Centro de Computación de Alto Desempeño otorgó prioridad absoluta en sus sistemas de cómputo a todo cálculo o procesamiento de datos relacionado con proyectos orientados a paliar el impacto de la pandemia ocasionada por el virus COVID-19. Se puso a disposición todo el equipamiento y esto fueron los logros más importantes:
- i. Drug repurposing de la [FCQ-UNC](#): screening virtual de para predecir la interacción de fármacos con proteínas y testear fármacos ya aprobados por la [FDA](#) con el objetivo de comprobar si alguno es efectivo contra el SARS-CoV-2. El equipo de la [FCQ-UNC](#) formado por Marcelo Piuatti (Química Orgánica), Alfredo Quevedo (Farmacia), Rodrigo Quiroga (Química Teórica), Alexis Paz (Química Teórica), Sergio Ribone (Farmacia) y Marcos Villarreal (Química Teórica).
 - ii. Drug repurposing del [IIMT-Universidad Austral](#): el mismo objetivo que el anterior, pero con diferente base de datos de fármacos y la utilización de química cuántica para los cálculos de interacciones. El Laboratorio de "Diseño Computacional de Fármacos e Informática Biomédica" del Dr. Claudio Cavasotto ([Instituto de Investigaciones en Medicina Traslacional](#), CONICET-Universidad Austral) publicó recientemente un trabajo usando la estrategia de reposicionamiento de fármacos, en el que se analizaron más de 11.000 compuestos, y se identificaron candidatos promisorios para COVID-19.
 - iii. Estrategias de cuarentena basados en circulación de personas de [FaMAF-UNC](#). Benjamín Marcolongo de FaMAF-UNC realizó simulaciones de estrategias de cuarentena basados en la circulación de personas.

4. CCAD en los medios

- a. Las supercomputadoras de la UNC ayudan a enfrentar la pandemia«, «Un periplo para que Eulogia sume poder», La Voz del Interior, 20200721.
- b. [Las supercomputadoras de la UNC contra la Pandemia](#)«, Marcela Palermo y Luis Ernesto Zegarra, Canal 10, SRT, 20200722.
- c. [«Las supercomputadoras de la UNC ayudan a enfrentar la pandemia](#)«, La Voz del Interior, 20200721.
- d. [«El rector Juri participó en la apertura del ciclo de charlas del CCAD](#)«, Comunicación de la UNC, 20200910.

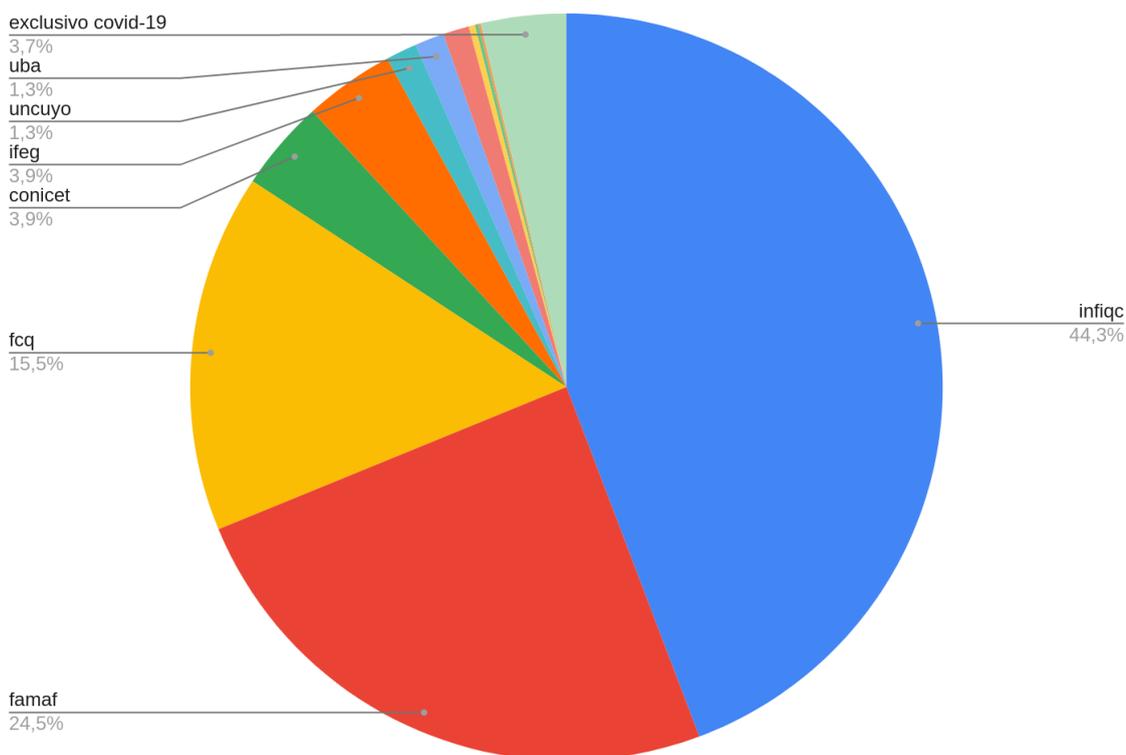
Uso de los recursos computacionales

En las siguientes gráficas se muestra el uso de los clusters durante el año 2020 discriminando según las distintas unidades académicas. Cabe destacar que el uso de estos recursos no se circunscribe a la región, teniendo usuarios regulares de otras provincias, como los de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (previamente Instituto de Ciencias Básicas) de la Universidad de Cuyo, del Centro de Investigación de Métodos Computacionales de Santa Fe, de otros países de la región como los de la Universidad de la República de Uruguay, y de empresas privadas a las que el centro les presta servicios a través de acuerdos de vinculación tecnológica.

CLUSTER MENDIETA

Horas de uso mendieta 2020

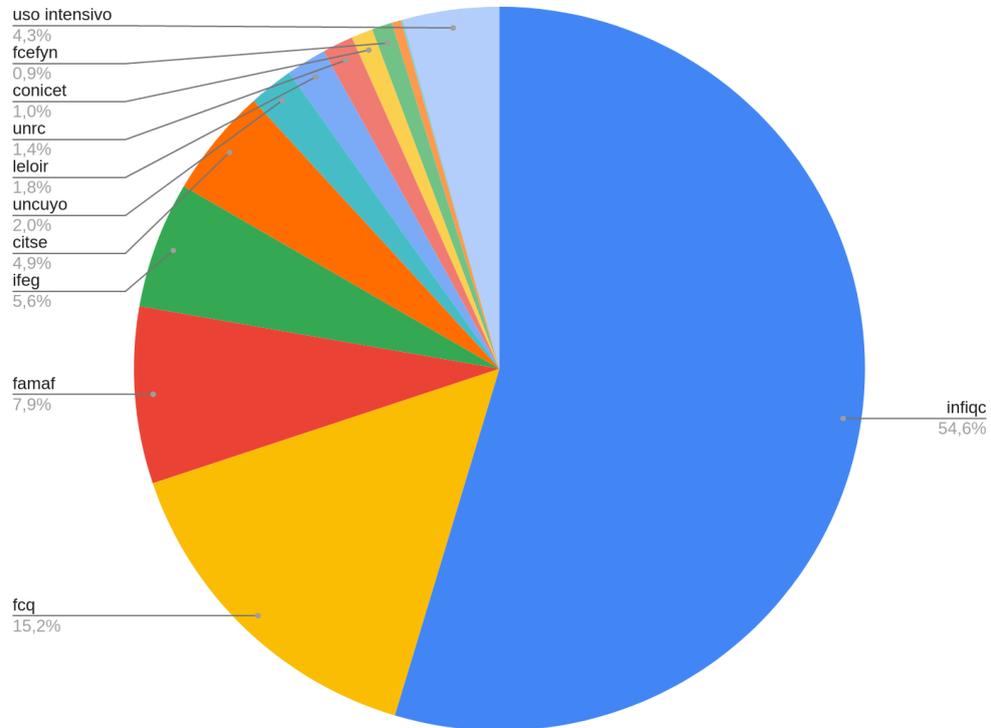
Total: 2577369 hs/core - Ocupación: 79,95%



CLUSTER EULOGIA

Horas de uso eulogia 2020

Total: 40741234 hs/core - Ocupación: 70,83%

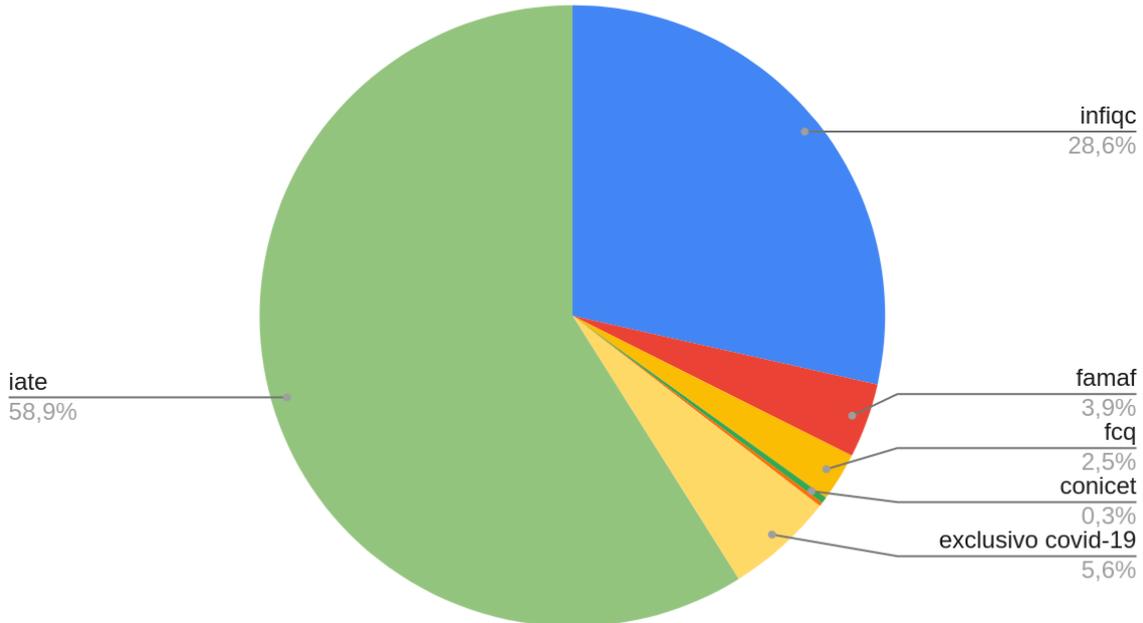


NOTA: cabe destacar que, dado las características de las placas INTEL XEON PHI con 1312 cores total que pueden trabajar como hasta 5248 cores, la ocupación del cluster Eulogia no está correctamente reflejada en la gráfica anterior.

CLUSTER MULATONA

Horas de uso mulatona 2020

Total: 1306203 hs/core - Ocupación: 63,04%



Conclusiones

El CCAD mantiene sus recursos computacionales con un porcentaje de uso muy alto, lo cual es bueno, ya que indica que estos, que caducan en un plazo bastante corto, son aprovechados de forma máxima. El impacto de estas facilidades ha sido muy grande, dando lugar a la culminación de 36 trabajos científicos ([LINK](#)). A través del monitoreo del uso de los clusters vemos que el sistema está saturado de trabajos, siendo imperioso contar con mayores facilidades de cómputo en la Universidad, para evitar demoras en el proceso de investigación o incluso el uso de recursos computacionales de otras universidades.

Tareas para el corriente año (2021)

Durante este año los clusters han estado funcionando casi sin interrupción, en el presente año dedicaremos nuestros recursos en:

1. Mudanza del equipamiento al Data Center de la UNC
2. Instalación y configuración del nuevo cluster Serafín
3. Reconversión de servidores para Inteligencia Artificial.
4. Mejorar el sistema de almacenamiento de datos, dotándolo de una capacidad mayor de flujo de datos de entrada y salida y mayor capacidad de almacenamiento.
5. Gestionar diversas fuentes de financiamiento estableciendo convenios con diversas empresas (CEPROCOR, FAdeA S.A., CIECTI)
6. Realización de Workshops y dictado de cursos de capacitación en programación paralela.