

PRACE Project Access Çađrısı

Dr.Öđr.Üyesi Sefer Baday

Bilişim Enstitüsü, Bilişim Uygulamaları Anabilim Dalı

İstanbul Teknik Üniversitesi

Sunum Planı

2

- Moleküler Dinamik Simülasyonları
- PRACE project access çağrısı genel bilgiler
- PRACE project access başvurusu için istenilen Teknik bilgiler

Molecular dynamics

Newton's equations of motion

acceleration of particle i ("effect")

force on particle i ("cause")

$$m_i \mathbf{a}_i(t) = \mathbf{F}_i(t) = - \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}_i}$$

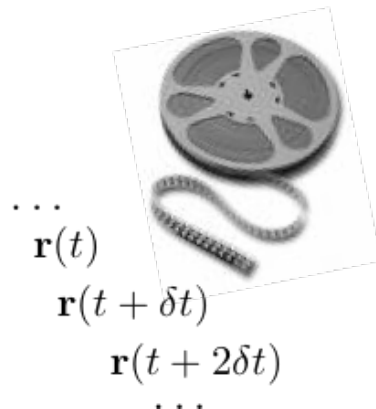
\downarrow

$$\mathbf{v}_i(t)$$

\downarrow

$$\mathbf{r}_i(t)$$

a simple function of the atomic coordinates



Molecular dynamics

Potential energy function

$$\begin{aligned}
 U = & \sum_{\text{bonds}} k_b (b - b_0)^2 + \sum_{\text{angles}} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 + \\
 & + \sum_{\text{dihedrals}} \sum_{n=1}^N K_\varphi^{(n)} [1 + \cos(n\varphi - \delta)] + \sum_{\text{impropers}} K_\omega (\omega - \omega_0)^2 \\
 & + \sum_{i,j} 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \sum_{i,j} \left(\frac{q_i q_j}{D r_{ij}} \right)
 \end{aligned}$$

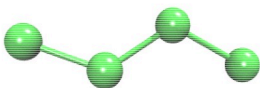
Bond



Angle



Dihedral



Improper

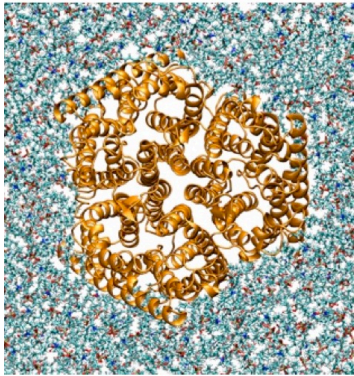


Van der Waals

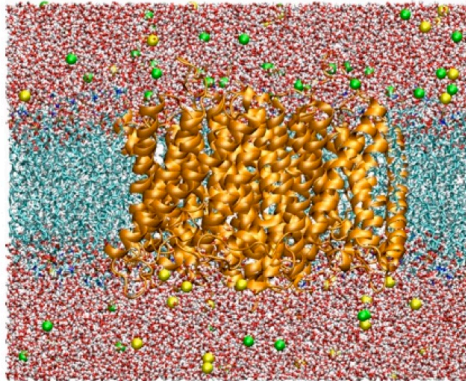
Electrostatic interactions

Molecular dynamics

Simulation system for Ammonium transporter



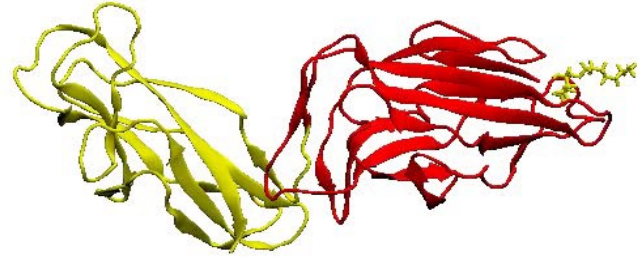
Top View



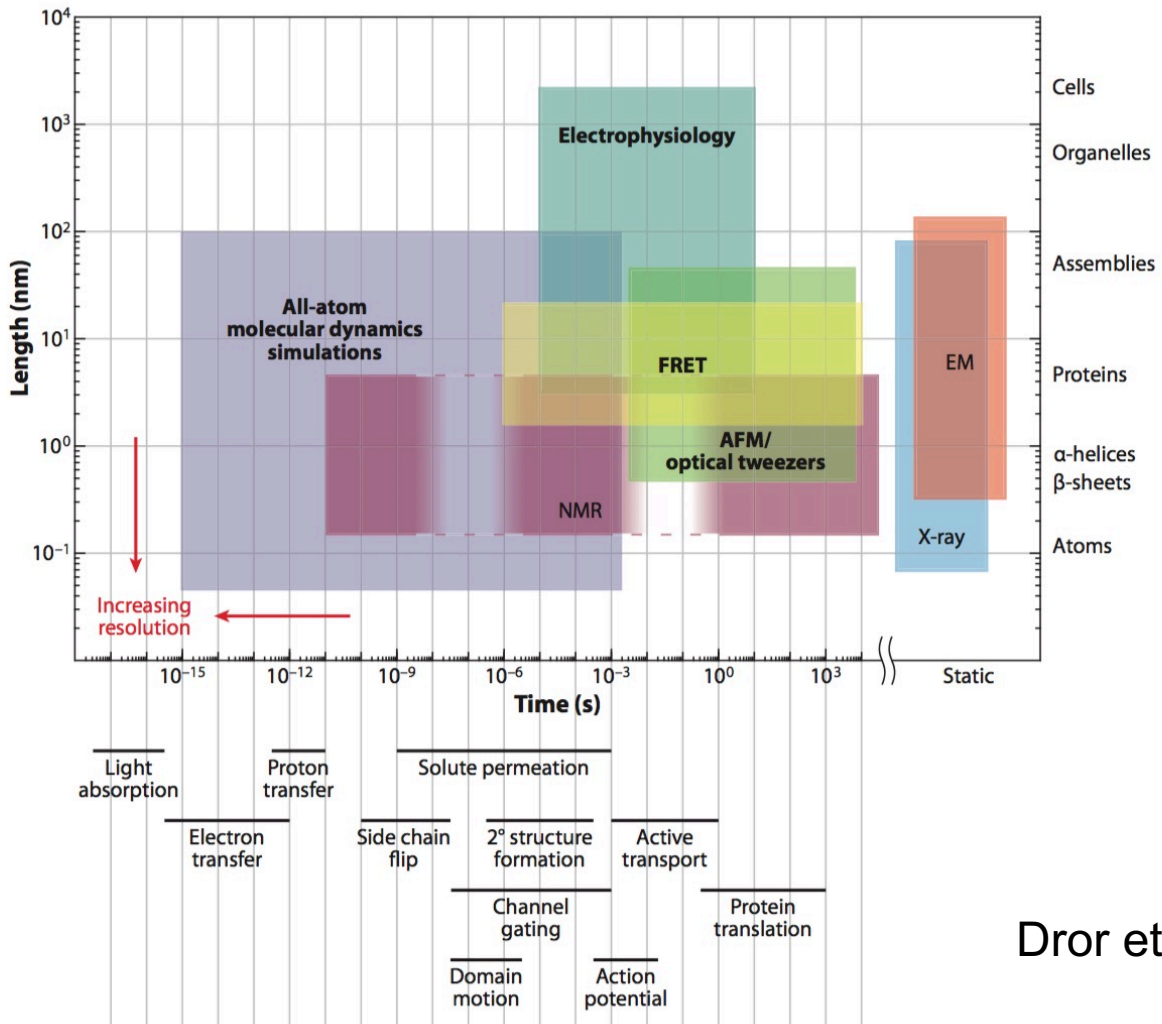
Side View

~120,000 atoms

Simulation of FimH Adhesin protein



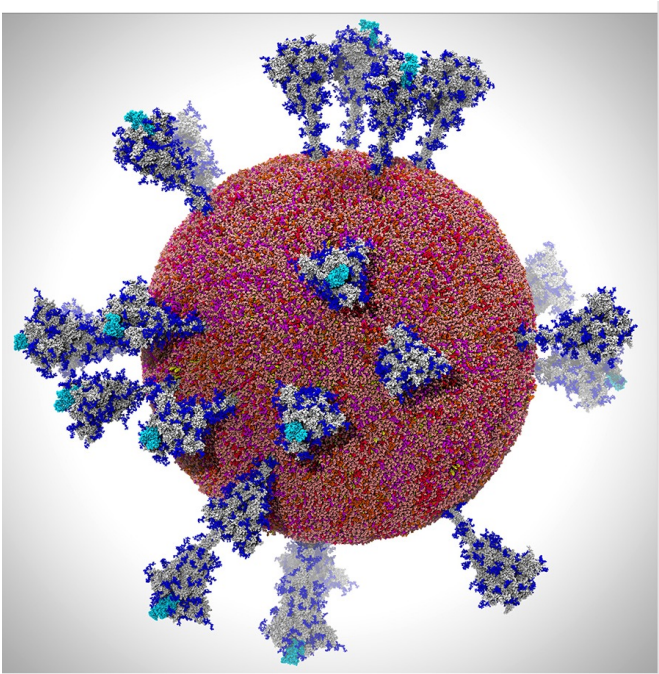
Size and time scales are the most important limitations



Dror et al. 2012

MD simulation of SARS-COV-2

- <https://ucsdnews.ucsd.edu/pressrelease/uc-san-diego-leads-research-that-earns-gordon-bell-special-prize>



All-atom model of the SARS-CoV-2 viral envelope (305 million atoms), including 24 spike proteins.

Figure by UC San Diego's Lorenzo Casalino, the Amaro Lab, and members of the research team.

PRACE

- PRACE: The Partnership for Advanced Computing in Europe
- PRACE'in misyonu, toplumun yararına Avrupa rekabet gücünü artırmak için tüm disiplinlerde yüksek etkili bilimsel keşif ve mühendislik araştırma ve geliştirmesini sağlamaktır.
- PRACE, Avrupa'daki akademi ve endüstriden bilim adamları ve araştırmacılar için akran denetimi (peer-review) ile dünya standartlarında yüksek performanslı bilgi işlem (HPC), veri yönetimi kaynakları ve hizmetleri sunarak bu misyonu gerçekleştirmeyi amaçlamaktadır.
- Bilim adamları ve araştırmacılar, PRACE kaynaklarına erişim için başvurabilirler.
- Endüstriyel kullanıcılar, Avrupa'da merkez ofisleri veya önemli Ar-Ge faaliyetleri varsa başvurabilirler.
- Avrupa birliği 7.çerçeve ve Ufuk 2020 programlarıyla desteklenmiştir.

PRACE Project Access Çađrı (14.Çađrı) Kapsamı

- Yapılan başvurularda gerçekleştirilecek olan simülasyonların test edilmiş ve ölçeklenebilirliğinin gösterilmiş olması gerekmektedir.
- Aynı zamanda çok fazla sayıda simülasyona neden ihtiyaç duyulduğu anlatılması gerekmektedir.
- PRACE kaynaklarının kullanımına neden ihtiyaç duyulduğu açık bir şekilde ifade edilmesi beklenmektedir.
- Kod testi ve optimizasyonu bu çağrı kapsamında değildir.
- Bunun için **Preparatory Access** çağrısı bulunmaktadır.

PRACE Project Access Çađrı (14.Çađrı) Kapsamı

10

- Proje önerilerinde bilimsel mükemmellik ve yenilikçi yaklaşımları aranmaktadır.
- Proje önerileri yüksek etkili dergilerde ve konferanslar yayınlanma potansiyelini göstermelidir.
- Kaynaklar bir veya daha fazla system için istenebilir.
- Tier-0 sistemlerde çalışabilen kod veya programlar olması gerekiyor.
- Tier-0 sistemlere neden ihtiyaç duyulduđu açıklanması gerekmektedir.
- Bir yıl veya çok-yıllık başvurular (2,3 yıllık başvurular)
- Çok-yıllık başvurular her yıl sonunda akran deđerlenmesine tabi tutulurlar.

PRACE Project Access Çađrı (14.Çađrı) Kapsamı

11

- Kimler Başvurabilir:
- **Akademi ve kamu araştırma** kuruluşlarından araştırmacılar, aşağıdaki koşullara sahip oldukları sürece başvuruda bulunabilirler:
- Proje yürütücüsünün kurumda araştırmacı olarak bir iş sözleşmesi olması lazım.
- Proje yürütücüsünün iş sözleşmesi, sözleşme tarihinden itibaren en az 3 ay geçerli olmalıdır.

PRACE Project Access Çađrı (14.Çađrı) Kapsamı

12

- Kimler Başvurabilir:
- **Ticari şirketler:**
- Şirketin merkez ofisi veya önemli bir Ar-Ge faaliyetinin Avrupa'da olması
- Proje yürütücüsünün iş sözleşmesi, tahsis süresinin bitiminden sonra en az 3 ay geçerli olmalıdır.
- Erişim yalnızca açık Ar-Ge araştırma amaçlarına ayrılmıştır.
- Kendi başlarına başvuran ticari şirketler, devlet yardımları düzenlemelerinin getirdiđi kısıtlamaların onaylanmasına bađlı olarak, tek bir PRACE sisteminin toplam bilgi işlem kaynaklarının en fazla %5'i ile sınırlı olacaktır.

PRACE Project Access Çağrısı değerlendirme

13

- Başvuruların ilk önce idari ekip tarafından kontrolü (Başvuruya uygunluk kriterleri kontrolü).
- Teknik ekip tarafından değerlendirme
- Teknik değerlendirmeyi geçen projelerin bilimsel değerlendirmeleri (peer-review)
- Bilimsel değerlendirmelere cevap hakkı
- En son hakemlerin değerlendirmeleri ve hakem değerlendirmelerine başvuru sahibi tarafından verilen cevaplarla birlikte PRACE tarafından oluşturulan panel tarafından sıralama yapılmaktadır.

14. PRACE Başvuru çağrısı kapsamındaki HPC merkezleri

14

➤ Bir veya birden fazla Merkez için başvuru yapılabilir.

- **GENCI – CEA, France** **Bull Bullx cluster “Curie”**
- **GCS – HLRS, Germany** **Cray XC40 System “Hazel Hen”**
- **GCS – JSC, Germany** **IBM BlueGene/Q System “Juqueen”**
- **CINECA, Italy** **Lenovo System “Marconi”**
- **BSC, Spain** **IBM System X iDataPlex “MareNostrum”**
- **CSCS, Switzerland** **Cray XC30 System “Piz Daint”**
- **GCS – LRZ, Germany** **IBM System X iDataPlex “SuperMUC”**

14. PRACE Başvuru çağrısı kapsamındaki HPC merkezleri

15

- Her system tarafından desteklenecek olan hesaplama zamanları

System	Architecture	Site (Country)	Core Hours	Node Hours
Curie	Bull Bullx cluster	GENCI@CEA (FR)	113 million	7 million
Hazel Hen	Cray XC40 System	GCS@HLRS (DE)	57 million	2.4 million
Juqueen	IBM BlueGene/Q system	GCS@JSC (DE)	350 million	4.6 million
Marconi	Lenovo System	CINECA (IT)	630 million (KNL) 35 million (Broadwell)	9.2 million 1 million
MareNostrum	IBM System X iDataplex	BSC (ES)	316 million	7 million
Piz Daint	Cray XC30 System	CSCS (CH)	476 million	7 million
SuperMUC	IBM System X iDataplex/ Lenovo NextScale	GCS@LRZ (DE)	30 million (SuperMUC 1) 14 million (SuperMUC 2)	1.9 million 0.5 million

HPC Merkezlerin Teknik özellikleri

	<i>Curie TN</i>	<i>Hazel Hen</i>	<i>Juqueen</i>	<i>Marconi Broadwell</i>	<i>Marconi KNL</i>	<i>MareNostrum</i>	<i>Piz Daint</i>	<i>SuperMUC Phase 1</i>	<i>SuperMUC Phase 2</i>	
System Type	Bullx	Cray XC40	Blue Gene/Q	Lenovo System NeXtScale	Lenovo System Adam Pass	IBM System x iDataPlex	Hybrid Cray xC30	IBM System x iDataPlex	Lenovo NeXtScale	
Compute	Processor type	Intel SandyBridge EP 2.7 GHz	Intel Xeon E5-2680v3 (Haswell)	IBM PowerPC® A2 1.6 GHz 16 cores per node	Intel Broadwell	Intel Knights Landing	Intel Sandy Bridge EP	SandyBridge Upgrade to Haswell starting Oct 17	Intel Sandy Bridge EP	Haswell Xeon E5-2697 v3 (Haswell)
	Total nb of nodes	5 040	7 712	28 672	1 512	3 600	3 056	5 272	9 216	3 072
	Total nb of cores	80 640	185 088	458 752	54 432	244 800	48 896	84 352 (8x2)	147 456	86 016
	Nb of accelerators/node	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	5272	n.a.	n.a.
	Type of accelerator	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	Kepler K20X Upgrade to Pascal strating Oct 17	n.a.	n.a.
Memory	Memory / Node	64 GB	128 GB	16 GB	128 GB - DDR4	96 GB – DDR4 + 16 GB - MCDRAM	32 GB	32 GB	32 GB	64 GB
Network	Network Type	Infiniband QDR	Cray Aries	5D Torus network	Intel Omni-Path Architecture 2:1	Intel Omni-Path Architecture 2:1	Infiniband FDR10	Cray Aries	Infiniband FDR10	Infiniband FDR14
	Connectivity	Fat tree	Dragonfly	5D Torus network	Fat Tree	Fat Tree	Fat Tree	Dragonfly	Fat tree within island (512 nodes) pruned tree between islands	Fat tree within island (512 nodes) pruned tree between islands

HPC Merkezlerin Teknik özellikleri

17

		<i>Curie</i>	<i>Hazel Hen</i>	<i>Juqueen</i>	<i>Marconi Broadwell</i>	<i>Marconi KNL</i>	<i>MareNostrum</i>	<i>Piz Daint</i>	<i>SuperMUC Phase 1</i>	<i>SuperMUC Phase 2</i>
Home file system	type	NFS	NFS	GPFS	GPFS	GPFS	GPFS	GPFS	NAS *	NAS *
	capacity	8 TB	60 TB	1.8 PB	200 TB	200 TB	59 TB	80 TB	10 PB	10 PB
Work file system	type	Lustre	Lustre	n.a.	GPFS	GPFS	GPFS	GPFS	GPFS *	GPFS *
	capacity	600 TB	12 PB	n.a.	7.1 PB	7.1 PB	612 TB	5.7 PB	12 PB	12 PB
Scratch file system	type	Lustre	n.a.	GPFS	GPFS	GPFS	GPFS	Lustre	GPFS *	GPFS *
	capacity	3.4 PB	n.a.	5.3 PB	2.5 PB	2.5 PB	1.1 PB	2.7 PB (to be upgraded with the system)	5.2 PB *	5.2 PB *
Archive	capacity	Unlimited	On demand	Unlimited	On demand	On demand	3.7 PB	NA	On demand	On demand
Minimum required job size	Nb of cores	1 024	2 048	2 048	540	2 040	1 024	1 024	512	512

* SuperMUC Phase 1 and Phase 2 share the same file systems

Son Prace Access çağırısı

18

System	Architecture	Site (Country)	Core Hours (node hours)	Minimum request (core hours)
<i>HAWK*</i>	HPE Apollo	GCS@HLRS (DE)	345.6 million (2.7 million)	100 million
<i>Joliot-Curie KNL</i>	BULL Sequana X1000	GENCI@CEA (FR)	37.5 million (0.6 million)	15 million
<i>Joliot-Curie Rome</i>	BULL Sequana XH2000	GENCI@CEA (FR)	195.3 million (1.5 million)	15 million
<i>Joliot-Curie SKL</i>	BULL Sequana X1000	GENCI@CEA (FR)	52.9 million (1.1 million)	15 million
<i>JUWELS Booster*¹⁾</i>	BULL Sequana XH2000	GCS@JSC (DE)	85.2 million (1.78 million)	7 million Use of GPUs
<i>JUWELS Cluster*</i>	BULL Sequana X1000	GCS@JSC (DE)	35.04 million (0.73 million)	35 million
<i>Marconi100²⁾</i>	IBM Power 9 AC922 Whiterspoon	CINECA (IT)	165 million (0.47 million)	35 million Use of GPUs
<i>MareNostrum 4*</i>	Lenovo System	BSC (ES)	TBA	30 million
<i>Piz Daint³⁾</i>	Cray XC50 System	ETH Zurich/CSCS (CH)	510 million (7.5 million)	68 million Use of GPUs
<i>SuperMUC-NG*</i>	Lenovo ThinkSystem	GCS@LRZ (DE)	91 million	35 million

Son Prace Access çağrısı

19

		<i>HAWK</i>	<i>Joliot-Curie KNL</i>	<i>Joliot-Curie Rome</i>	<i>Joliot-Curie SKL</i>	<i>JUWELS Booster</i>	<i>JUWELS Cluster</i>	<i>Marconi100</i>	<i>Mare Nostrum 4</i>	<i>Piz Daint</i>	<i>SuperMUC-NG</i>
System Type		HPE	Bull Sequana	Bull Sequana	Bull Sequana	Bull Sequana	Bull Sequana	IBM Power 9 AC922 Whitespace	Lenovo	Hybrid Cray xC50	Lenovo ThinkSystem
Compute	Processor type	AMD Epyc Rome	Intel Knights Landing	AMD Epyc Rome	Intel Xeon Platinum 8168 2.7 GHz	AMD Epyc Rome	Intel Xeon Skylake Platinum 8168	2 * IBM POWER9 AC922 at 3.1 GHz per node	Intel Xeon Platinum 8160 2.1 GHz	Intel® Xeon® E5-2690 v3 @ 2.60GHz (12 cores)	Intel Skylake Xeon Platinum 8174
	Total nb of nodes	5 632	828	2 292	1 656	936	2 511	980	3 456	5 704	6 480
	Total nb of cores	720 896	52 992	293 376	79 488	44 928	120 528	31 360	165 888	68 448	311 040
	Nb of accelerators /node	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	4	n.a.	4 GPU per node	n.a.	1 GPU per node	n.a.
	Type of accelerator	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	NVIDIA® Ampere A100, 40 GB HBM2e	n.a.	NVIDIA® Volta® V100, Nvlink 2.0, 16GB	n.a.	NVIDIA® Tesla® P100 16GB	n.a.
Memory	Memory / Node	256 GB	96 GB DDR4 + 16 GB MCDRAM	256 GB	192 GB	512 GB	96 GB	256 GB DDR4 + up to 1.6 TB NVMe Memory per node	96 GB (200 nodes with 384GB)	64 GB	96 GB
Network	Network Type	Infiniband HDR	BULL BXI	Infiniband HDR 100	Infiniband EDR	InfiniBand HDR	InfiniBand EDR	Mellanox Infiniband EDR	Intel Omni-Path Architecture	Cray Aries	Intel Omni-Path Architecture
	Connectivity	9D enhanced Hypercube	Fat Tree	Dragonfly+	Fat Tree	Dragonfly+	Fat Tree	DragonFly+	Fat Tree	Dragonfly	Fat tree within island (786 nodes) pruned tree between islands

(*)Smaller jobs are NOT accepted in production runs. Jobs can only be requested with defined node numbers (64, 128, 256, 512, 1024, 2048 and 4096) in regular operation (1 node = 128 cores)

Kaynak Kullanımı

20

- Proje süresince (12 aylık) gereksinim duyulan hesaplama kaynak miktarı toplam çekirdek-saat olarak belirtilmesi gerekmektedir.
- Toplam çekirdek saati= Duvar saati (Wall-Clock time) x kullanılan makinenin çekirdek sayısı
- Belirtilen toplam çekirdek saati detaylı bir iş planı ile desteklenmelidir.
- Örnek: **27 Milyon** çekirdek-saat
- Proje kabul olduğunda hemen çalışılmaya başlanması ve ara vermeden sürdürülmesi gerekmektedir.
- İş planı hazırlarken kullanılan makinenin %80 oranında ulaşılabilir olduğunu göz onunda bulundurmak gerekir.
- Kuyruk süreleri, sistemsel problemler veya bakım çalışmaları, veri transferi gibi sebeplerden dolayı %100 istenilen kaynağa ulaşılmayabilir.

Kaynak Kullanımı

21

- 15 milyon çekirdek-saatten az kaynak kullanımı isteniliyorsa Tier-1 sistemler yerine neden Tier-0 sistemlerin istendiği açıklanması lazım.
- Maksimum hesaplama zamanı her system için izin verilen çekirdek saati ile sınırlıdır.

İş özellikleri

22

- Duvar saati zamanı (Wall Clock Time)
- Bir simülasyon birkaç işden oluşabilir.
- Bir simülasyon izin duvar saati zamanı birkaç sıralı adımdan oluşan işlerin için gerekli olan toplam zamanı belirtmektedir.
- Bu süre istenilen makinede izin verilen iş çalışma süresinden fazla olabilir.
- Bu durumda yapılan hesaplama kaydedilip (checkpoint) bir sonraki iş ile devam ettirilebilir olmalı.
- İki checkpoint arasındaki süresi istenilen makinedeki bir işin çalışma süresinden kısa olmalı.

İş özellikleri

23

- Sistemlerin bir işin maximum çalışma süreleri

<i>Field in online form</i>	<i>Machine</i>	<i>Max</i>
Wall clock time of one typical simulation (<u>hours</u>) <number>	Other systems Piz Daint	< 10 months 24 hrs
Able to write checkpoints <check button>	All	Yes
Maximum time between two checkpoints (= maximum wall clock time for a job) (<u>hours</u>) <number>	Other systems Hazel Hen Juqueen Piz Daint SuperMUC	24 hours 24 hours (12 hours)* 24 hours (12 hours)* 24 hours 48 hours

* This might be changed during project runtime, guaranteed minimum is the value in brackets.

Aynı anda paralel çalışan iş sayısı

24

- Sistemlerde her proje için aynı anda belli bir miktarda paralel iş çalıştırmaya izin verilmektedir.

<i>Field in online form</i>	<i>Machine</i>	<i>Max</i>
Number of jobs that can run simultaneously <number>	Curie Hazel Hen Juqueen Marconi MareNostrum Piz Daint SuperMUC	25 (1 024 cores), 4 (8 192 cores) 29 and at maximum 60.000 cores all jobs together 15 2-10 (depending on the job size) Dynamic* We do not have shared nodes 1 job per node maximum 10 (512 cores), 3 (8 192 cores), 1 (>32 768 cores)

Çalıştırılan işlerin büyüklüğü

25

➤ Her system için işler için minimum çekirdek saati bulunmaktadır.

<i>Field in online form</i>	<i>Machine</i>	<i>Min (cores)</i>
Expected job configuration (Minimum) <number>	Curie Hazel Hen Juqueen Marconi MareNostrum Piz Daint SuperMUC	1 024 2 048 2 048 540 (Broadwell) 2 040 (KNL) 1 024 1 024 512
Expected number of cores (Average) <number>	Curie Hazel Hen Juqueen Marconi MareNostrum Piz Daint SuperMUC	4 096 8 192 4 096 1 080 (Broadwell), 4 080 (KNL) 1 024 1 024 minimum + 1 GPU per node 16 384 (Phase1), 7 168 (Phase2)
Expected number of cores (Maximum) <number>	Curie Hazel Hen Juqueen Marconi MareNostrum Piz Daint SuperMUC	40 000 (80 000 on demand) 96 000 (using up to 113 664 cores is possible, but should be requested in the proposal) > 4 096 (up to the complete system) 6 000 (Broadwell), 68 000 (KNL) n.a. 42 176 (84 352 in hyp-thr) 65 536 (Phase1), 14 426 (Phase2)

Işın ölçeklenebilir olması (Scalability)

26

- İstenilen makinede çalıştırılması istenen simülasyonun en azından minimum çekirdek sayısına kadar ölçeklenebilir olduğu gösterilmesi gerekmektedir.
- Uygulamalar için geliştiriciler veya satıcılar tarafından jenerik ölçeklendirme grafikleri kabul edilmiyor.
- Bundan dolayı çalıştırılacak olan program veya uygulama istenilen makinelerde test edilerek ölçeklenebilir olması gösterilmesi gerekmektedir.
- Örnek: <https://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/benchmarks/>

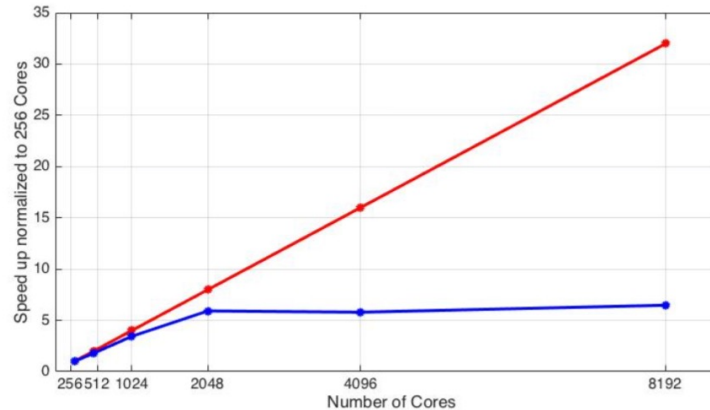


Figure for Scalability tests on Hazel Hen. Red line: Ideal, blue line: Our scalability curve

İşler için Hafıza gereksinimi

27

<i>Field in online form</i>	<i>Machine</i>	<i>Max</i>
Memory (Minimum job) <number>	Curie Hazel Hen Juqueen Marconi MareNostrum Piz Daint SuperMUC	<ul style="list-style-type: none"> - 4 GB * #cores or 64 GB * #nodes - Jobs should use a substantial fraction of the available memory - 1 GB * #cores - <118 GB per node (Broadwell), <90 GB per node (KNL) - 2 GB * #cores - n.a. - Jobs should use a substantial fraction of the available memory
Memory (Average job) <number>	Curie Hazel Hen Juqueen Marconi MareNostrum Piz Daint SuperMUC	<ul style="list-style-type: none"> - 4 GB * #cores or 64 GB * #nodes - Jobs should use a substantial fraction of the available memory - 1 GB * #cores - <118 GB per node (Broadwell); <90 GB per node (KNL) - 2 GB * #cores - n.a. - Jobs should use a substantial fraction of the available memory
Memory (Maximum job) <number>	Curie Hazel Hen Juqueen Marconi MareNostrum Piz Daint SuperMUC	<ul style="list-style-type: none"> - 4 GB* #cores or 64 GB * #nodes - 5GB* #cores - 1GB* #cores for the other cores - 1 GB* #cores - <118 GB per node (Broadwell), <90 GB per node (KNL) - 2 GB* #cores - n.a. - 1 5 GB* #cores or 24 GB* #nodes (Phase1) - 2.0 GB* #cores or 56 GB* #nodes (Phase2)

Depolama

28

- Genel olarak dört deplama alanı bulunmaktadır.
- **Scratch**: Geçici çalışma alanı.
- Çalıştırılan işlerin girdi/çıkıktı dosyaları, denetim nokta (checkpoint) dosyalarının kaydedildiği alanlar.
- Yedekleme mevcut değildir.
- Belli bir süreden sonra dosyalar otomatik olarak silinmektedir.
- **Work**:
- Proje için gerekli olan depolama alanı büyük dosyaları depolamak mümkün.
- Yedekleme mevcut değil.

Depolama

29

➤ Home:

- Kaynak kodların, kütüphanelerin ve uygulamaların depolandığı alan.
- Küçük çaplı girdi/çıkıtlı işlemleri yapılabilir.
- Yedekleme mevcut.
- Belli bir süreden sonra dosyalar otomatik olarak silinmektedir.

➤ Archive:

- Uzun süreli depolama alanı
- Proje süresi bittiğinde arşivdeki verilerde siliniyor.
- Proje süresi boyunca yedekleme mevcut.
- Arşivde yedekleme için binlerce küçük dosya yerine büyük zip, tar gibi kapsayıcı dosya formatları tercih edilmeli. İdeal boyutlar 500-1000GB
- Çok sayıda küçük dosya arşivlenirse arşivden dosyaları geri getirme çok uzun sürmektedir.

Depolama

<i>Field in online form</i>	<i>Machine</i>	<i>Max per project</i>	<i>Remarks</i>
Total storage (Scratch) <number> Typical use: Scratch files during simulation, log files, checkpoints Lifetime: Duration of jobs and between jobs	Curie	20 TB (100 TB)	- without backup, automatic clean-up procedure
	Hazel Hen	-	- HLRS provides a special mechanism for Work spaces, without backup
	Juqueen	20 TB (100 TB)	- without backup, files older than 90 days will be removed automatically
	Marconi	20 TB (100 TB)* ¹	- without backup, clean-up procedure for files older than 30 days
	MareNostrum Piz Daint	100 TB (200 TB) 2.7 PB	- without backup, clean-up procedure - 24 hrs, without backup, clean-up procedure
	SuperMUC	100 TB (200 TB)	- without backup, automatic clean-up procedure
Total storage (Work) <number> Typical use: Result and large input files Lifetime: Duration of project	Curie	1 TB	-
	Hazel Hen	250 TB	- *2
	Juqueen	n.a.	- Not available on JUQUEEN
	Marconi	20 TB (100 TB)* ¹	- Without backup
	MareNostrum Piz Daint	10 TB 5.6 PB	- With backup - Input not readable from compute nodes
	SuperMUC	100 TB (200 TB)	- Without backup
Total storage (Home) <number> Typical use: Source code and scripts Lifetime: Duration of project	Curie	3 GB	- with backup and snapshots
	Hazel Hen	50 GB * ³	- no backup
	Juqueen	6 TB	- with backup
	Marconi	50 GB	-
	MareNostrum Piz Daint	40 GB 60 TB	- with backup -
	SuperMUC	100 GB	- with backup and snapshots
Total storage (Archive) <number>	Curie	100 TB	- File size > 1 GB
	Hazel Hen	* ⁴	-
	Juqueen	* ⁵	- Ideal file size: 500 GB – 1000 GB
	Marconi	20 TB (100 TB)* ⁶	-
	MareNostrum Piz Daint	100 TB n.a.	-
	SuperMUC	100 TB* ⁷	- Typical file size should be > 5 GB

Dosya sayısı

<i>Field in online form</i>	<i>Machine</i>	<i>Max</i>	<i>Remarks</i>
Number of files (Scratch) <number>	Curie Hazel Hen Juqueen Marconi MareNostrum Piz Daint SuperMUC	2 Milion n.a. 4 Million 2 Milion 2 Milion 100.000 1 Million	- - Without backup files older than 90 days will be removed automatically - - No limit while running, but we have limits # number of files left on scratch - Without backup, old files are removed automatically, Ideal file size: >100 GB
Number of files (Work) <number>	Curie Hazel Hen Juqueen Marconi MareNostrum Piz Daint SuperMUC	500 000 4 Million n.a. 2 Milion 2 Milion 250 000 1 Million	- Extensible on demand - - - - - - Ideal file size: >100 GB
Number of files (Home) <number>	Curie Hazel Hen Juqueen Marconi MareNostrum Piz Daint SuperMUC	n.a. 100.000 12 Million 100 000 100 000 100 000 100 000	- - With backup - - - With backup(snapshots)
Number of files (Archive) <number>	Curie Hazel Hen Juqueen Marconi MareNostrum Piz Daint SuperMUC	100 000 10 000 2 Million 10 000* 1 Million* n.a. 100 000	- Extensible on demand - - Ideal file size: 500 GB – 1000 GB - - - Typical file size should be > 5 GB

Depolama

32

- Eğer belirtilenden daha fazla disk alanı veya dosya sayısı istenmişse, bu ihtiyacın nedeni desteklenmelidir.
- Aksi durumda proje önerisi red edilebilir.

Veri Transferi

33

- Proje süresince transfer edilecek veri Gbyte ve Tbyte olarak belirtilmelidir.
- Proje bittiğinde ise toplam transfer edilecek veri miktardır da belirtimlidir.
- Bant genişliğinden ve zamandan dolayı büyük miktarda verinin (onlarca TB) transferi zor olabilir.
- Proje sonunda değilde proje süresinde verinin transferi planlanmalıdır.
- Proje sonunda arşivlenen verilerin teyp (tape) halinde paylaşılması da mümkün olabilir.

<i>Field in online form</i>	<i>Machine</i>	<i>Max</i>
Amount of data transferred to/from production system <number>	Curie	100 TB
	Hazel Hen	100 TB*
	Juqueen	100 TB
	Marconi	20 TB*
	MareNostrum	50 TB
	Piz Daint	Currently no limit
	SuperMUC	100 TB

I/O

34

- Tier-0 sistemler için paralel girdi/çıkıktı zorunludur.
- Paralel I/O nasıl gerçekleştirileceği anlatılmalıdır.
- Örnek: MPI I/O, netcdf, HDF5 veya bunun gibi metotlar
- üretim işlerinde I/O yükü belirtilmelidir: I/O veri trafiği/saat, saat başı üretilen dosyas sayısı gibi.

Başvuruda istenilen bilgiler

35

- Toplam 14 sayfalık başvuru belgesi.
- **Justification for the importance of the scientific problem and the requested resources (~2 pages)**
 - Describe the proposed research and the main scientific/technical advances you will achieve with the requested PRACE allocation.
 - Industry organizations should also summarize the potential economic or strategic business impact.
 - The justification of the requested resources must be clearly linked to the software performance evaluation

Başvuruda istenilen bilgiler

36

- **Overview of the project (~4 pages)**
 - Describe the motivation, objectives and scientific challenges of the problem.
 - Describe and justify the choice of computational methods.
 - State the advances that will be enabled through the requested Tier-0 PRACE award (e.g., impact on community paradigms, valuable insights or solving a long-standing challenge, new technology/therapy, etc.).
 - Provide a list of expected outcomes of your proposal and, if relevant, the interdisciplinary value of your proposal

Başvuruda istenilen bilgiler

37

➤ **Validation, verification, state of the art (~2 pages)**

- Please describe the validity of the simulations and predictions made with this proposal.
- In case you provide references to relevant publications please include here also the key relevant results.
- Please address issues of reproducibility and highlight the predictive capabilities of your simulations..

Başvuruda istenilen bilgiler

38

➤ **Software and Attributes (~2 pages)**

- Describe the software that will be used including a discussion of the state of the art in the field
- Describe particular libraries required by the production and analysis software, algorithms and numerical techniques employed (e.g., finite element, iterative solver), programming languages.
- Please specify requirements for compilation or build environment (build system (e.g., cmake, python version), version control system (e.g., git, subversion) etc.

Başvuruda istenilen bilgiler

39

➤ **Parallel programming**

- Model(s) used (e.g., MPI, OpenMP/Pthreads, CUDA, OpenACC, etc.).

➤ ***I/O requirements***

- I/O requirements (e.g., amount, size, bandwidth, etc.) for execution, input files, restart and other output.
- Describe I/O strategy (number of files, frequency, read/write size) and I/O behaviour of your code during the period of calculations.
- Please specify the restart overhead, not only for I/O; (e.g., a code may have to perform a costly domain decomposition first).

Başvuruda istenilen bilgiler

40

➤ **Data: Management Plan, Storage, Analysis and Visualization**

- Data Management Plan covering both short-term and long-term aspects, including needs for I/O bandwidth, number of files and input/output data volumes.
- Specify for which system the data will be provided, how long the data must be stored at the computing centre after the termination of the project, how it will be moved from the centre, and how subsequent analysis will be performed.
- Specify the availability of both code and data to other researchers, and how this will be handled.
- PRACE should be given credit for all data produced through PRACE allocations when publishing, and described in the provenance when depositing to other infrastructures.

Başvuruda istenilen bilgiler

41

➤ **Milestones (quarterly basis) (Maximum 1 page)**

- Goals and milestones should articulate simulation and developmental objectives and be sufficiently detailed to assess the progress of the project for each year of any allocation granted.
- It is especially important that you provide clear connections between the project's overarching milestones, the planned production simulations, and the compute time expected to be required for these simulations.
- Please clarify any dependencies of milestones on other milestones.
- Please ensure that the core hour consumption is regular throughout the allocation or provide a requested schedule after consultation with the centres.

➤ **Gantt Chart**

- Provide a Gantt Chart of the simulation plan in production indicating job sizes and scheduling of computing tasks.

Başvuruda istenilen bilgiler

42

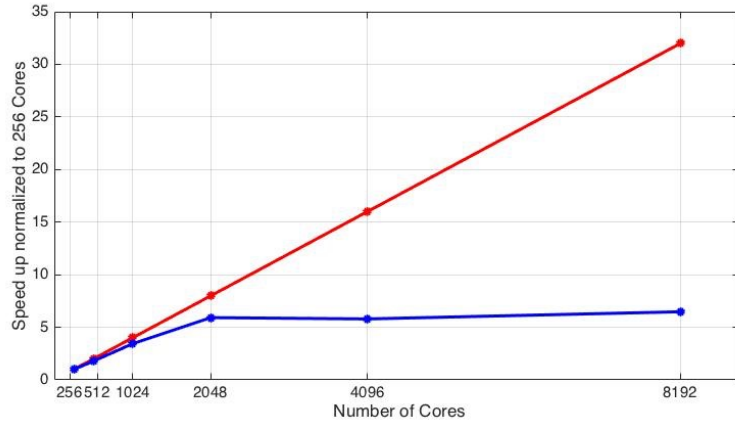
➤ **Track Record of the PI (Appendix)**

- Curriculum vitae and list of publications of the Principal Investigator
- Granted patents and other measures for the relevance of the work
- Prior allocation history in PRACE, national calls, as well as international programs such as INCITE of the US DoE
- Participation by team members in other European Commission (EC) actions, such as ERC or Marie Skłodowska-Curie EC grants, etc.
- Previous presentations at PRACEdays

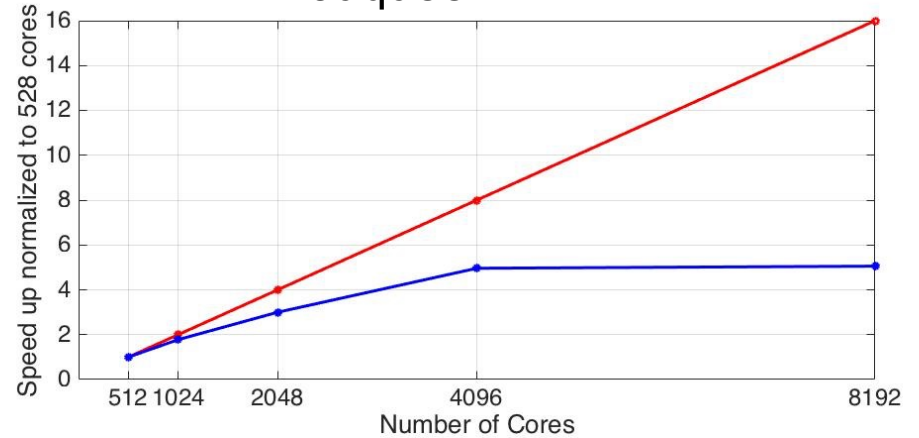
NAMD ölçeklendirme testleri

43

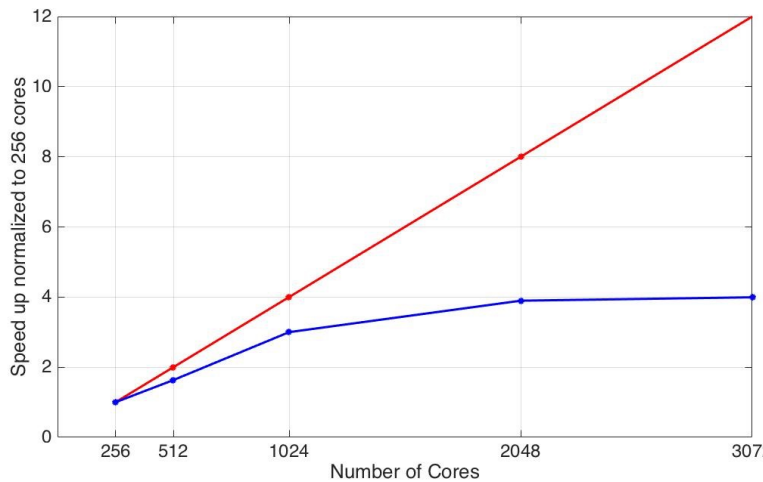
• Hazel_Hen



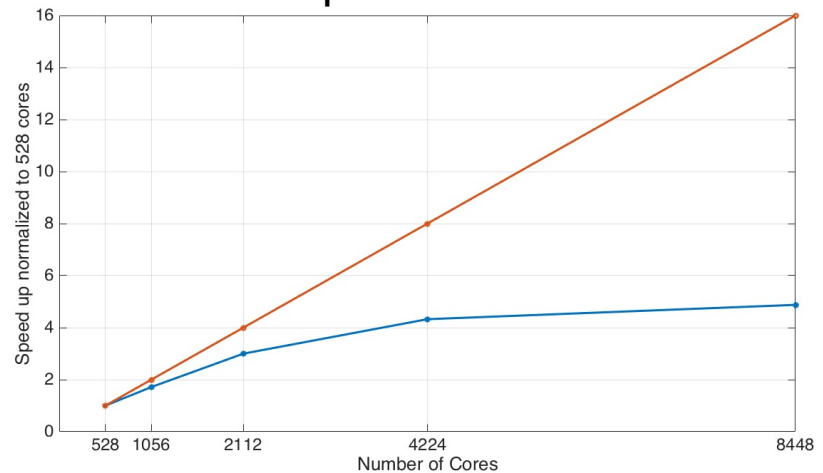
• Juqueen



• MareNostrum



• SuperMuc

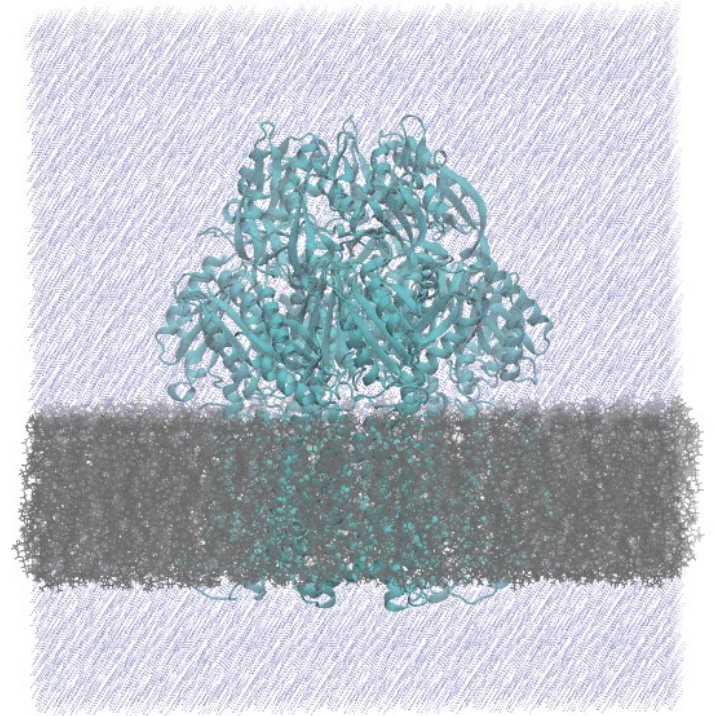


Example for Resource Management

44

➤ My project proposal.

- Bir membrane proteinin 20 ilaç molekülü ile etkileşimlerinin MD simulasyonları ile incelenmesi
- Her ilaç-protein kompleksi için 1 μ s'lik simülasyon planlanmıştır.
- Toplam atom sayısı 460K.
- HazelHen sisteminde 2048 çekirdek kullanarak günde 40ns lik simülasyon verisi elde edilmiştir.
- Buna göre bir ilaç-proteinin 1 μ s'lik simülasyonu için 25 günlük simülasyona ihtiyaç vardır.
- HPC merkezinin %80 kullanılabilir olduğu düşünüldüğünde bir protein-ilaç sistemi için 30günlük iş çalıştırılması gerekmektedir.



Example for Resource Management

45

- Oluşturulan simülasyonların analizleri vakit alacağı için aynı anda iki protein-ilaç kompleksinin simülasyonu planlanmıştır.

	Months											
System	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	■	■										
2	■	■										
3		■	■									
4		■	■	■								
5			■	■	■							
6			■	■	■	■						
7				■	■	■	■					
8				■	■	■	■	■				
9					■	■	■	■	■			
10					■	■	■	■	■	■		
11						■	■	■	■	■		
12						■	■	■	■	■	■	
13							■	■	■	■	■	
14							■	■	■	■	■	
15								■	■	■	■	
16								■	■	■	■	
17									■	■	■	
18									■	■	■	
19										■	■	
20										■	■	

Data Management Plan

46

- Her 5000 adımda bir atomları koordinatları kaydedilecektir. (10ps aralıklarla)
- Bir adım için kaydedilen atom koordinatları 5.5MB'lık yer kaplıyor.
- Bir simülasyon sistemi için bir günde 21.5GB veri üretilecektir.
- İki simülasyon sistemi aynı anda çalıştırılacağı için toplam günlük 43GB veri üretilecektir.
- Sadece protein-ilaç etkileşimleri inceleneceği için su moleküllerin koordinatları silinecektir.
- Bu sayede atom koordinat dosyalarının boyutları 5.5MB'dan 0.5MB'a düşürülecektir.
- Bununla birlikte günlük veri üretimi 4GB olacaktır.
- Üretilen veriler haftalık olarak local makinelere transfer edileceklerdir.

Dikkat edilmesi gereken hususlar

47

- Başvuru zamanı. Geç başvurular kabul edilmiyor.
- Eksik belgeli başvurular kabul edilmiyor.
- Başvuruda sayfa limiti aşılmışsa kabul edilmiyor.
- Sisteme giriş yapılırken minimum istenilen hesaplama saati sorusuna tam cevap yazmak lazım: örnek 54.000.000 yerine 54 yazılması geçersiz kılıyor.
- Teknik hazırlık. Ölçeklendirme analizi yapılmamış başvurular kabul edilmiyor.