

RAPORT DE ACTIVITATE PE ANUL 2022 AFERENT INSTALAȚIEI DE INTERES NAȚIONAL „RO-14-ITIM CENTRU GRID DE INTERES NAȚIONAL IN ZONA DE NORD VEST A ROMÂNIEI”

1. CARACTERISTICI GENERALE

1.1 SCURT ISTORIC ȘI PREZENTARE GENERALĂ A INSTALAȚIEI DE INTERES NAȚIONAL

Centrul Grid RO-14-ITIM, devenit funcțional în anul 2007, asigură serviciile de stocare și prelucrare de date în regim continuu 24 ore/7 zile/365 zile/an în condițiile respectării cerințelor standardului ANSI/TIA-942 referitoare la designul interior, alimentarea cu energie electrică, sistemele de iluminare și răcire, prevenirea incendiilor, inundațiilor, efracției etc. De asemenea, conform cu Memorandumul of Understanding semnat între CERN Geneva și clusterul RO-LCG Romania în care Centrul Grid din INCDTIM este parte semnatară, funcționarea în urma monitorizării sistemului GRID trebuie să asigure o disponibilitate de minimum 95 %, indicator indeplinit de site pe toată perioada 2007-2022. Site-ul RO-14-ITIM ca parte a centrului Grid este destinat 100% prelucrării de job-uri furnizate de experimentul ATLAS de la acceleratorul Large Hadron Collider (LHC) de la CERN Geneva.

Instalația RO-14-ITIM Centru GRID de interes național în zona de Nord Vest a României este înscrisă în portalul ERRIS (<https://eeris.eu/ERIF-2000-000J-0308>) ca infrastructură de cercetare cu denumirea *INGRID - Sistem Grid*.

Pe baza unei strategii coerente de dezvoltare, Centrul Grid RO-14-ITIM s-a aflat într-un continuu proces de modernizare, dezvoltare și creștere a fiabilității conform standardelor internaționale. Acest lucru a putut fi realizat datorită finanțării proprii, a suportului financiar obținut cu ajutorul autorității naționale pentru cercetare-dezvoltare și prin derularea unor proiecte de cercetare care au avut ca obiectiv principal dezvoltarea centrului.

Centrul Grid RO-14-ITIM are o structură bazată pe două Sisteme de calcul distribuit, tehnologie Rack mountable respectiv tehnologie Blade, și un Sistem de calcul de înaltă performanță format din trei clustere: HPC, MPI Crystal și MPI Echidna.

Cele două **Sisteme de calcul distribuit** destinate prelucrării de job-uri furnizate de experimentul ATLAS de la LHC CERN Geneva, amplasate în 3 rack-uri, cumulativ au 94 work node-uri de prelucrare de date și o capacitate de stocare de 150 TB.

Cele trei clustere independente ce compun **Sistemul de calcul paralel de înaltă performanță**, destinat calculelor de structuri, modelări moleculare și chimie cuantică, cumulativ au 49 servere de calcul și o capacitate de stocare de 50 TB.

Conectarea centrului Grid la rețeaua RoEduNet este realizată printr-o legătură de fibra optică (2 „dark fiber” închiriate). Gateway-ul folosit pentru conectare este un switch layer 3 Cisco Enterprise 6509E, care asigură conectare la viteza de 10 Gbps cu rețeaua RoEduNet. Centrul Grid beneficiază de toate facilitățile unui centru de date modern: sistem de alimentare permanentă cu energie electrică (UPS plus generator diesel), sistem de răcire redundant, sistem de monitorizare a parametrilor ambientali și sistem de stingere a incendiilor cu gaz inert.

Centrul Grid RO-14-ITIM este deservit de o echipă formată de 6 specialiști, aceștia asigurând realizarea proceselor de întreținere, upgradare, funcționare și exploatare în regim permanent (24 ore/7 zile/365 zile/an) a centrului, precum și acțiunile de raportare/diseminare a rezultatelor obținute.

2. STRUCTURA RAPORTULUI

2.1. INFORMAȚII PRIVIND UNITATEA DE CERCETARE-DEZVOLTARE

a. Denumire	Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Tehnologii Izotopice și Moleculare - INCDTIM Cluj-Napoca
b. Statut juridic	INCD
c. Act de înființare	H.G. nr. 408 din 1999
d. Modificări ulterioare	H.G. nr 1401 din 2005
e. Director general	Dr. Ing. Romulus Valeriu Flaviu TURCU
f. Adresă UCD	Str. Donat, nr. 67-103, cod 400293, Cluj-Napoca, România
g. Telefon	0264 584037
h. Fax	0264 420042
i. E-mail	itim@itim-cj.ro

1.2 INFORMAȚII PRIVIND INSTALAȚIA DE INTERES NAȚIONAL

a. Responsabil IOSIN	Ing. Gabriel Popeneciu
b. Adresă	Str. Donat, nr. 67-103, cod 400293, Cluj-Napoca, România
c. Telefon	0264 584037
d. Fax	0264 420042
e. E-mail	itim@itim-cj.ro
j. Pagina web a IOSIN	http://ro.itim-cj.ro/ro-14-itim-centru-grid-descriere/

1.3 VALOAREA INSTALAȚIEI DE INTERES NAȚIONAL

		Lei
TOTAL		6.157.549,48
din care:	Terenuri și amenajări spații	-
	Clădiri	129.436,30
	Echipamente și software	6.028.113,18
	Altele (menționați care)	-

1.4 SUPRAFAȚA INSTALAȚIEI DE INTERES NAȚIONAL

		MP
TOTAL TERENURI		-
din care:	Teren	-
	Amenajare spații verzi	-
	Drumuri de acces betonate și asfaltate	-
	Platforme betonate și asfaltate	-
TOTAL CLĂDIRI		110
din care:	Birouri	20
	Spații tehnologice (hale, anexe - se va menționa)	90
	Vestiare, grupuri sanitare, holuri	-
	Laboratoare, ateliere	-
	Săli conferințe	-

1.5 DEVIZ POST-CALCUL PENTRU ANUL 2022 (de la bugetul de stat, conform deconturilor transmise și aprobate)

Lei

Nr.crt.	explicații (capitol/categorie de cheltuieli)	TOTAL
1	Cheltuieli cu personalul, din care:	351.883,00
1.1	Salarii directe	344.138,00
1.2	Contribuția asiguratorie de muncă (CAM)	7.745,00
2	Cheltuieli cu materiile prime și materialele, din care:	50.229,11
2.1	Cheltuieli cu materiile prime	0
2.2	Cheltuieli cu materialele consumabile, inclusiv materialele auxiliare, combustibili utilizați direct pentru IOSIN, piese de schimb	29.566,34
2.3	Cheltuieli privind obiectele de inventar	584,29
2.4	Cheltuieli privind materialele nestocate	0
2.5	Cheltuieli cu energia, apa și gazele utilizate direct pentru IOSIN	20.078,48
3	Cheltuieli cu serviciile prestate de terți, din care:	39.815,46
3.1	Cheltuieli cu întreținerea și reparațiile, inclusiv amenajarea spațiilor	0
3.2	Cheltuieli cu redevențe, locații de gestiune și chirii	0
3.3	Cheltuieli cu transportul de bunuri	0
3.4	Cheltuieli cu servicii pentru teste, analize, măsurători etc	0
3.5	Cheltuieli cu servicii informatice	0
3.6	Cheltuieli cu servicii de expertiză, evaluare, asistență tehnică etc	0
3.7	Cheltuieli cu servicii de întreținere a echipamentelor	4.780,40
3.8	Cheltuieli cu alte servicii strict necesare pentru IOSIN	35.035,06
	Sub-total I (1+2)	402.112,11
	Sub-total II (1+2+3)	441.927,57
4	Cheltuieli cu regia (40 %** aplicabil la Sub-total I)	159.848,43
	TOTAL CHELTUIELI (1+2+3+4)	601.776,00

1.6 DEVIZ ANTECALCUL ESTIMATIV PENTRU ANUL 2023 (estimat a se solicita de la bugetul de stat)

Lei

Nr.crt.	explicații (capitol/categorie de cheltuieli)	TOTAL
1	Cheltuieli cu personalul, din care:	795.000
1.1	Salarii directe	777.506
1.2	Contribuția asiguratorie de muncă (CAM)	17.494
2	Cheltuieli cu materiile prime și materialele, din care:	596.572
2.1	Cheltuieli cu materiile prime	0
2.2	Cheltuieli cu materialele consumabile, inclusiv materialele auxiliare, combustibili utilizați direct pentru IOSIN, piese de schimb	19.000
2.3	Cheltuieli privind obiectele de inventar	0
2.4	Cheltuieli privind materialele nestocate	224.000
2.5	Cheltuieli cu energia, apa și gazele utilizate direct pentru IOSIN	353.572
3	Cheltuieli cu serviciile prestate de terți, din care:	43.000
3.1	Cheltuieli cu întreținerea și reparațiile, inclusiv amenajarea spațiilor	0
3.2	Cheltuieli cu redevențe, locații de gestiune și chirii	0
3.3	Cheltuieli cu transportul de bunuri	0
3.4	Cheltuieli cu servicii pentru teste, analize, măsurători etc	0
3.5	Cheltuieli cu servicii informatice	0
3.6	Cheltuieli cu servicii de expertiză, evaluare, asistență tehnică etc	0
3.7	Cheltuieli cu servicii de întreținere a echipamentelor	7.000
3.8	Cheltuieli cu alte servicii strict necesare pentru IOSIN	36.000
	Sub-total I (1+2)	1.391.572
	Sub-total II (1+2+3)	1.434.572
4	Cheltuieli cu regia (40 %** aplicabil la Sub-total I)	556.628
	TOTAL CHELTUIELI (1+2+3+4)	1.991.200

1.7 RELEVANȚA

Datorită structurii complexe și accesibilității sale pentru activități CDI, centrul Grid RO-14-ITIM este un catalizator în realizarea unor parteneriate între organizațiile de cercetare din țară și străinătate.

Prin semnarea Memorandum of Understanding (MoU) Romania-CERN privind colaborarea internațională *Worldwide LHC Computing Grid* (WLCG), centrul Grid RO-14-ITIM face parte din sistemul de management și dezvoltare la nivel național a resurselor și serviciilor destinate sistemului Grid, asigurând participarea României la cercetări de frontieră în domeniul fizicii energiilor înalte (HEP). Prin această colaborare centrul Grid contribuie la consolidarea integrării europene a comunității științifice din România și creșterea contribuției României la rezolvarea provocărilor globale.

Centrul Grid RO-14-ITIM, ca singur centru Grid din nord-vestul României, răspunde priorității privind creșterea competitivității *Regiunii de Nord-Vest* și stimularea cercetării și inovării prin sprijinirea și promovarea activităților de CDI și realizarea de investiții în domeniile de specializare inteligentă ale regiunii.

Centrul Grid prin activitățile sale și prin calificarea experților care-l deservește contribuie la atragerea și păstrarea în sistemul românesc de cercetare a resursei umane înalt calificate. Totodată sunt create premisele pentru (i) creșterea numărului de cercetători și ingineri IT din cadrul INCDTIM și atragerea de tineri pentru activitatea de CDI, (ii) facilitarea accesului la infrastructuri de cercetare performante prin participarea la mari infrastructuri internaționale de cercetare și (iii) integrarea personalului de cercetare în comunitatea științifică internațională prin asigurarea mobilității internaționale, organizarea și participarea la conferințe științifice internaționale.

Centru Grid este înscris în portalul ERRIS (<https://eeriș.eu/ERIF-2000-000J-0308>) ca infrastructură de cercetare cu denumirea **INGRID - Sistem Grid**.

După 14 ani de funcționare continuă, sustenabilitatea și reziliența centrului Grid sunt la un nivel înalt, atrăgând tot mai multe fonduri prin proiecte naționale de CDI și fonduri europene nerambursabile pentru realizarea de mari infrastructuri de cercetare (proiectul POC 2014-2020 „Dezvoltarea CENTRULUI de DATE din cadrul INCDTIM pentru realizarea unei platforme CLOUD, integrată în rețele europene de CDI” în valoare de 4,2 milioane lei).

1.8 STRUCTURA UTILIZATORILOR

Pentru îndeplinirea misiunii și a obiectivele strategice definite centrul Grid RO-14-ITIM colaborează cu entități naționale și internaționale de prestigiu.

Centrul GRID al INCDTIM fiind integrat TIER 2, principalul utilizator este organizația virtuală ATLAS în cadrul Colaborării internaționale ATLAS de la CERN Geneva: în anul 2022 au fost prelucrate 580.413 job-uri ATLAS (accounting.egi.eu). În același timp, Centrul GRID al INCDTIM ca parte a clusterului național RO-LCG, pune la dispoziția membrilor clusterului resurselor de calcul și stocare ale site-ului.

Sistemul de calcul de înaltă performanță (HPC) este pus la dispoziția Laboratorului de calcul paralel în domeniul biomolecular și nano-structuri din INCDTIM. În anul 2022 au fost prelucrate peste 8.000 job-uri utilizând programe specifice de modelare/simulare.

1.9 INFORMAȚII PRIVIND ACCESUL LA IOSIN

Activitățile din cadrul centrului Grid sunt „open for general acces”, dar cu respectarea *Regulamentului de acces* avizat de MCID, pe baza acordurilor de colaborare, contractelor de cercetare sau MoU.

Infrastructura și expertiza centrului Grid RO-14-ITIM este accesibilă centrelor grid din cadrul clusterului RO-LCG a TIER-2 Romania Federation, și anume: IFIN-HH cu site-urile RO-07-NIPNE,

RO-02-NIPNE și RO-11-NIPNE; UAIC Iași cu site-ul RO-16-UAIC; ISS București cu site-ul RO-13-ISS; UPB cu site-ul RO-03-UPB.

Serviciile oferite de Sistemul de calcul paralel de înaltă performanță pot fi accesate de utilizatori externi în cadrul colaborărilor/parteneriatelor cu grupuri de cercetare din cadrul INCDTIM Cluj-Napoca.

Accesul la facilitățile centrului Grid se realizează conform „Regulamentului de acces la IOSIN Centru GRID RO-14-ITIM” (<http://grid.itim-cj.ro/>) aprobat de Direcția Management Instituțional a MCID. Astfel este asigurat: i) *acces direct*, pe baza MoU, pentru procesarea de job-uri direct în sistemul Grid RO-14-ITIM, utilizându-se platforma de acces Middleware și organizația virtuală ATLAS pe care site-ul o susține; ii) *acces indirect* pentru utilizatorii externi care trebuie să fie inițial înregistrați într-o organizație virtuală recunoscută de site-ul Grid RO-14-ITIM: odată aprobat accesul se acordă priorități în funcție de relevanța științifică, activitățile de cercetare care se doresc a fi realizate și de impactul științific estimat al proiectului de calcul propus.

1.10 LISTA UTILIZATORILOR și domeniile de activitate/ activități prestate

În cadrul colaborării internaționale România-CERN centrul Grid a fost implicat în proiectele:

- Contribuția națională la dezvoltarea gridului de calcul LCG pentru fizica particulelor elementare”, CONDEGRID, PN3 / Subprogramul 5.2, Modulul CERN-RO, Contract de finanțare nr. 11/2022
- Experimentul ATLAS de la LHC CERN Geneva, PN3 / Subprogramul 5.2, Modulul CERN-RO, Contract de finanțare nr. 10/2022.

La nivel național Centrul Grid prin apartenența la clusterul RO-LCG, are colaborări cu site-urile grid din următoarele institute și universități:

- IFIN-HH prin site-urile RO-07-NIPNE, RO-02-NIPNE și RO-11-NIPNE;
- UAIC Iași prin site-ul RO-16-UAIC;
- ISS prin site-ul RO-13-ISS;
- UPB prin site-ul RO-03-UPB.

Conform site-ului accounting.egi.eu, în anul 2022 au fost prelucrate **580.413** job-uri ATLAS (Fig. 1), însumând 49.241.899 ore *Normalized Elapsed time (HEPSPEC06) x Number of Processors*.

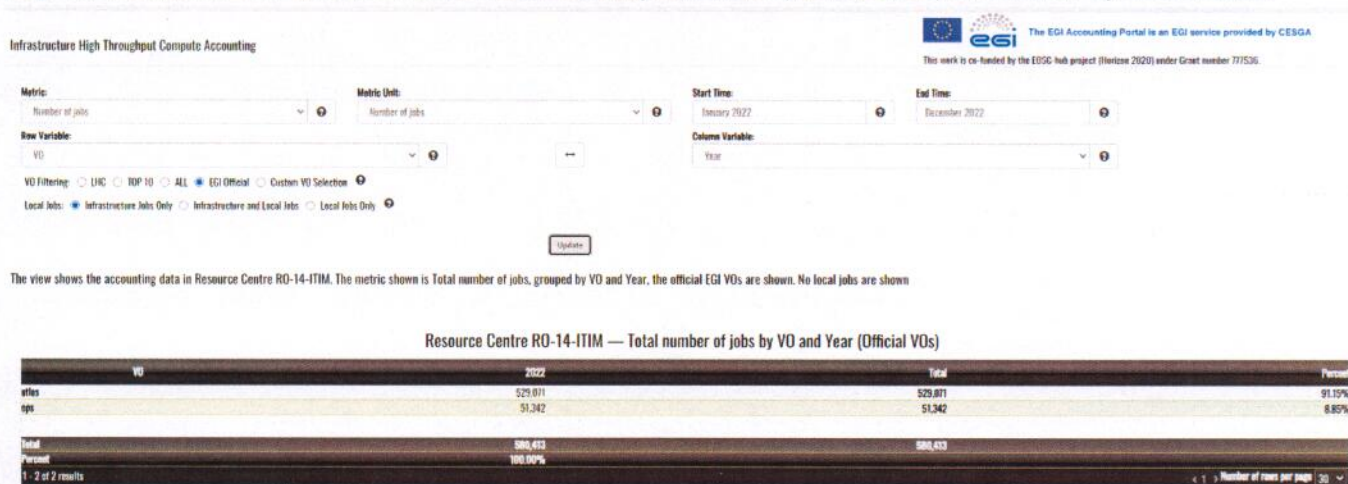


Fig. 1 <https://accounting.egi.eu/egi/site/RO-14-ITIM/njobs/VO/Year/2022/1/2022/12/egi/onlyinfrajobs/>

Sistemul de calcul paralel HPC servește ca suport în câteva colaborări internaționale care au ca rezultat un număr semnificativ de proiecte CDI aflate în derulare, constituind totodată și o platformă solidă pentru noi colaborări în domeniile de expertiză a centrului Grid cum ar fi Parteneriatul INCDTIM - University of Texas Health Science Center-Houston/ McGovern Medical School, Houston Texas respectiv Acordul de colaborare INCDTIM - Istituto di Motori-National Research Council of Italy, Napoli. Astfel în anul 2022 au fost prelucrate peste 8.000 job-uri utilizând programe specifice de modelare/simulare.

LA NIVEL INTERNAȚIONAL				LA NIVEL NAȚIONAL				TOTAL ORE		NR.MEDIU ORE/ UTILIZATOR	
OP.EC.		UCD		OP.EC.		UCD		R*	P	R	P
R	P	R	P	R	P	R	P				
		1	1			5	5	49.241.899	30.000.000	5.804.610	6.000.000

* Normalized Elapsed time (HEPSPEC06)x Number of Processors conform site-ului accounting.egi.eu

unde:

- R = valoare realizată în anul 2022
- P = valoare planificată în anul 2023

din punctul de vedere al utilizatorilor, alții decât personalul instalației/ obiectivului de interes național, astfel:

- operatori economici la nivel internațional
- operatori economici la nivel național
- unități de cercetare-dezvoltare la nivel internațional
- unități de cercetare-dezvoltare la nivel național

1.11 GRADUL DE UTILIZARE

GRAD DE UTILIZARE	R anul 2022 [%]	P anul 2023 [%]	OBSERVAȚII
TOTAL, din care:	100	100	
COMANDĂ INTERNĂ	20	15	Modelari si simulari nano-structuri si bio-molecule
COMANDĂ UCD	80	85	Prelucrare date furnizate de experimentul ATLAS LHC CERN
COMANDĂ OP.EC.	-	-	

1.12 REZULTATE DIN EXPLOATARE

1.12.1 VENITURI DIN EXPLOATARE ([altele decât finanțarea de la bugetul de stat](#))

Lei

a. Realizate în anul 2022	
b. Planificate a se realiza în anul 2023	

Prin natura centrului Grid veniturile obținute din exploatare sunt indirecte neputând fi cuantificate. Astfel prestarea serviciile de calcul distribuit pentru experimentul ATLAS de la LHC CERN Geneva se face pe baza angajamentelor (MoU) României ca țară membră a CERN, iar serviciile realizate de sistemul HPC au ca beneficiar direct grupuri de cercetare din institut sau din institute/universități partenere în proiecte de CDI.

1.12.2 CHELTUIELI DE DEZVOLTARE DIN SURSE ATRASE ([altele decât finanțarea de la bugetul de stat](#))

Lei

a. Realizate în anul 2022	220.000
b. Planificate a se realiza în anul 2023	3.500.000

1.12.3 PARTENERIATE/ COLABORĂRI INTERNAȚIONALE/ NAȚIONALE

Nr

a. Realizate în anul 2022	6/11
b. Planificate a se realiza în anul 2023	6/12

1.12.4 ARTICOLE

	Nr
a. Realizate în anul 2022	47
b. Planificate a se realiza în anul 2023	57

1.12.5 BREVETE/ CERERI DE BREVET SOLICITATE

	Nr
a. Realizate în anul 2022	- / 1
b. Planificate a se realiza în anul 2023	1 / 1

1.13 OBIECTIVE STRATEGICE DE DEZVOLTARE ALE INSTALAȚIEI DE INTERES NAȚIONAL

Obiectivul strategic al centrului GRID RO-14-ITIM este de a asigura accesul grupurilor de C-D din România pentru utilizarea neîngrădită a infrastructurii de stocare și prelucrare de date în cadrul proiectelor naționale și internaționale pe care aceste grupuri le derulează în domenii strategice ale economiei naționale.

Obiectivele specifice ale centrului Grid RO-14-ITIM sunt defalcate pe cinci direcții principale:

(i) Dezvoltarea continuă a site-ului RO-14-ITIM acreditat și certificat pentru producție, destinat prelucrării datelor furnizate de experimentul ATLAS de la Large Hadron Collider CERN Geneva. Angajamentul are la bază semnarea de către INCDTIM a „Memorandum of Understanding for LCG”, în calitate de membru al clusterului „Tier 2 Romanian Federation”.

În acest moment Site-ul RO-14-ITIM face parte din cloud-ul Tier1 IN2P3 Lyon, Franța, unul din cele 14 centre Grid din lume ce deservește experimentele de la LHC-CERN Geneva (<https://atlas-france.in2p3.fr/cgi-bin/twiki/bin/view/Atlas/FrenchCloud>).

(ii) Dezvoltarea Sistemului de calcul paralel de înaltă performanță pentru cercetări care necesită volume mari de calcule în domenii cu un puternic caracter interdisciplinar:

- Prelucrarea de date specifice determinărilor de structuri moleculare: calculul de densități de sarcină și a nivelurilor energetice în configurații moleculare neutre și ionizate; utilizarea bazelor de date spectrale și de structură care caracterizează clase de compuși contaminanți în diferite matrici din mediul acvatic.

- Prelucrarea de date legată de experimentele în domeniul transportului electronic în structuri nanoscopice (electronica moleculară).

- Prelucrarea de date în fizica izotopilor stabili, rezultate din cercetări legate de ciclul global al carbonului în corelare cu schimbările climatice: surse și consumatori de carbon, factori care influențează mărimea acestor surse, monitorizarea lor pe timp îndelungat și estimarea evoluției lor în timp.

- Prelucrarea de date în modelarea moleculară bazate pe teoria mecanicii cuantice în domeniul fizicii, chimiei și biologiei.

(iii) Atragerea personalului de cercetare cu înaltă calificare, cercetători valoroși, dispuși să activeze într-un domeniu tehnologic de mare actualitate;

(iv) Formarea profesională a tinerilor cercetători și ingineri de dezvoltare tehnologică;

(v) Propunerea unor noi proiecte de cercetare naționale și internaționale.

DIRECTOR GENERAL

Dr. Ing. Romulus Valeriu Flaviu Turcu



DIRECTOR ECONOMIC

Dr. Ec. Diana Nicoară

RESPONSABIL IOSIN

Ing. Gabriel Popeneciu