

Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación

Resolución Comité de Acceso, Asignación de Horas de Supercomputación para la Red Española de Supercomputación (RES) 1er período 2013

Barcelona, Febrero 2013

1 Introducción

El Comité de Acceso del Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación es un órgano asesor del Director que informará las solicitudes de acceso al Centro de los investigadores y grupos de investigación que lo soliciten. El Comité propondrá al Director, en base a la calidad científica y técnica de las propuestas recibidas una lista razonada y priorizada de las solicitudes. Corresponde al Director la decisión sobre los accesos autorizados.

El acceso es para las máquinas de la Red Española de Supercomputación (RES), e incluye MareNostrum. La asignación entre las diferentes máquinas se hace con motivos de necesidad de las actividades y de eficiencia.

El protocolo de acceso aprobado por la Comisión Ejecutiva del BSC está publicado en la página de web del BSC, <http://www.bsc.es/RES>

2 Análisis

En la presente convocatoria se ha realizado una asignación total de 31,2 millones de horas, sumando todas las horas de las diferentes arquitecturas, incluyendo las horas de prioridad A y prioridad B. Estas horas incluyen las máquinas instaladas en Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS), Universidad Politécnica de Madrid (UPM), Instituto Astrofísico de Canarias (IAC), Universidad de Cantabria (UC), Universidad de Málaga (UMA), Universidad de Valencia (UV), Universidad de Zaragoza (UZ) e Instituto Tecnológico de Canarias (ITC).

Todas las actividades han sido evaluadas por los paneles de expertos, clasificando las solicitudes según si eran excelentes, muy buenas y buenas. Adicionalmente, se han tomado en consideración los criterios de evaluación descritos en la Sección [Comentarios sobre la evaluación](#).

Con las actividades excelentes de mayor prioridad, se cubre el uso teórico de MareNostrum y del resto de máquinas de la RES para el próximo período de 4 meses. Algunas actividades calificadas como excelentes no han podido recibir recursos por la gran cantidad de demanda recibida, y sólo han podido recibir horas sin prioridad.

A la mayoría de actividades que han obtenido recursos, se han asignado horas de uso de las máquinas de la RES con utilización preferente. El resto de actividades que han obtenido recursos, es con utilización no preferente (es decir, utilizando las horas cuando estas no sean usadas por las actividades preferentes).

Las actividades que no reciben horas de utilización al sistema no podrán disponer de acceso al mismo. Todas estas actividades recibirán un e-mail indicando que no ha sido posible concederles acceso a las máquinas en esta oportunidad. Se anima a todos los solicitantes a presentar solicitud de acceso para la siguiente convocatoria, que iniciará la evaluación el próximo mes de Mayo de 2013.

Para mejorar como se comparten los recursos asignados entre las diferentes actividades, y evitar así las concentraciones de uso de MareNostrum y el resto de máquinas en determinados periodos de tiempos, se requiere la utilización proporcional de los recursos asignados. Así, si una actividad no utiliza la parte proporcional asignada en un periodo determinado, quedará reducida la asignación total de forma proporcional. Por ejemplo, si de una asignación de 300 mil horas en tres meses, no utiliza cerca de 100 mil horas el primer mes, su asignación para el periodo completo será reducida a 200 mil. De la misma forma, se reducirá la prioridad de acceso a las actividades que sobrepasen su asignación proporcional en cada periodo de tiempo. Por ejemplo, si de una asignación de 300 mil horas en cuatro meses, se utiliza cerca de 200 mil horas el primer mes, se ira reduciendo la prioridad de los diferentes trabajos en el sistema para que la prioridad regularice el consumo.

Así mismo, las horas no consumidas en el período no se pueden acumular para próximas convocatorias.

La utilización se medirá según "*elapsed time*", considerando la utilización por el número de procesadores asignados. Por ejemplo, si se debe asignar el uso en exclusiva de un nodo (que tiene varios procesadores, dependiendo de la máquina) durante 1 hora, se considerará el uso de 16, 8, 4 ó 2 horas, dependiendo de la máquina.

3 Comentarios sobre la evaluación

El Comité de Acceso del BSC-CNS ha seguido los siguientes criterios para la evaluación de las actividades:

1. Reglas generales

- a. La relevancia del proyecto científico en que se enmarca la actividad propuesta (20 %)
- b. La justificación de la actividad propuesta y de los cálculos a realizar en la RES para la consecución del proyecto científico global (30 %)
- c. La calidad científica del grupo solicitante (10%)
- d. La experiencia y capacitación en el cálculo de alto rendimiento (10 %)

- e. La necesidad real de supercomputación para realizar el cálculo (20 %)
 - f. La adecuación técnica del proyecto a la arquitectura de los recursos de la RES (10 %)
2. Evaluación de los resultados presentados por las actividades de continuación
 - a. Publicaciones presentadas como resultado del acceso de actividades anteriores
 - b. Resultados técnicos obtenidos en los periodos anteriores
 3. Utilización adecuada y completa de los recursos asignados en los periodos anteriores
 4. Participación de grupos españoles en las actividades solicitadas
 5. Actividad específica dentro de un proyecto de investigación. El acceso a los recursos de la RES corresponde a actividades específicas dentro de un proyecto de investigación, y no corresponden a agrupaciones de diferentes actividades de investigadores de comunidades virtuales.
 6. Seguir adecuadamente las obligaciones adquiridas en la utilización de MareNostrum y los otros recursos de la RES.
 - a. Envío a la RES de copia electrónica de las publicaciones científicas en las cuales el uso de los recursos de la RES ha resultado determinante.
 - b. Mencionar explícitamente en las publicaciones científicas la ayuda del RES en su proyecto.
 - c. Cumplimiento de las normas de utilización de los recursos de la RES y de las políticas de seguridad y confidencialidad determinados por la RES .
 - d. No hacer negocio con los resultados obtenidos en los recursos de la RES bajo el formato “Investigación Pública”.
 - e. Proporcionar anualmente información y documentación, como videos, presentaciones, y cualquier otro material, para ser utilizado como material divulgativo de la RES.

4 Consideraciones adicionales

4.1 Actividades industriales

Cualquier actividad industrial está sujeta a las mismas condiciones de calidad que las actividades de investigación pública. Todos los usuarios con actividades industriales, y con acceso a las máquinas de la RES deben pagar por el acceso a los recursos. El precio se calcula para cada una de las actividades que lo indiquen, teniendo en cuenta los recursos solicitados (humanos y técnicos) y el interés científico/económico de la actividad.

4.2 Política de uso de disco

En la actual resolución, se ha realizado asignación no sólo de tiempo de CPU, sino de espacio de almacenamiento. Se ha tenido en cuenta el espacio solicitado, así como el espacio disponible y la eficiencia en la utilización de los recursos.

Para cada actividad, se ha asignado capacidad en tres espacios diferentes:

- **Projects:** para tener almacenados los resultados de las simulaciones que se necesitan durante todo el periodo de asignación
- **Scratch:** espacio necesario para realizar las simulaciones en cada momento. Se debe considerar que este es un espacio de disco que se debe liberar 7 días después de haber finalizado la simulación que lo ha producido
- **HSM:** espacio de disco/cinta que permite almacenar todos los resultados obtenidos. En los centros que no dispongan de este equipo, se podría permitir ampliar el plazo de 7 días en Scratch. Se estudiará para cada caso en particular.

4.3 Paralelismo compulsivo

Para mejorar la eficiencia de los sistemas, es necesario que todas las actividades que han planteado simulación que requieren paralelismo compulsivo (muchas ejecuciones del mismo programa, con variación de los datos de entrada), utilicen la herramienta GRID superscalar (<http://www.bsc.es/grid/gridsuperscalar>). El envío de trabajos secuenciales al sistema se limitará.

El equipo de soporte del BSC-CNS y equipo del Nodo Computacional del INB en el BSC, ofrecerán la ayuda necesaria para portar los códigos a esta tecnología. Se debe contactar con support@bsc.es

4.4 Instalación de nuevos sistemas y ampliación de existentes

La actualización de MareNostrum y del resto de nodos de la RES ya se ha completado, estando todos los sistemas en producción.

5 Listados y asignaciones

A continuación se incluye la lista de las actividades que tendrán acceso a los diferentes nodos de la RES, con las asignaciones en miles de horas, y las capacidades en Gigabytes de los diferentes sistemas de ficheros. Las actividades asignadas se indican en miles de horas correspondientes a cada máquina (se ha considerado un rendimiento a la baja en cada máquina, de forma que el número de horas asignadas se corresponde en la mayoría de los casos con el correspondiente de las horas solicitadas). En el caso de acceso a BSC, se indica acceso a MareNostrum abreviando con MN, y a MinoTauro abreviado con MT. En el caso de actividades con doble asignación a diferentes máquinas, se repite el título de la actividad. En este caso, al ser el disco compartido por ambos supercomputadores, sólo se indica una vez.

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Agustí Lledós	Oxidative addition at Pd centers by explicit solvent ab initio molecular dynamics	950		1000	4000	200	BSC/MN
Alberto García	Optimization and Exploration of an Orbital Minimization Scheme for ab-initio molecular-dynamics simulation in the SIESTA code	150		100	50		UC
Alessandro Stroppa	MEMOIR: Multiferroic and magnetoElectric Metal Organic frameworks	615		300	400	300	BSC/MN
Angel Rubio	Octopus GS and TD scaling testing in new architectures	40		1200	1200		UPM
Angel Rubio	Octopus GS and TD scaling testing in new architectures	120		1200	1200	2000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Angel Rubio	Ultrafast Electron Dynamics at alkali/ice structures adsorbed on Cu(111) from experiments and theory	165		1000	800	1000	BSC/MN
Angel Rubio	Quantum nonlocal effects in plasmonic nanostructures: bridging the gap between fully atomistic approaches and the classical descriptions of their electronic response	284		1500	1000	1000	BSC/MN
Antoni Planas	Evidence of Conformational Selection in a Glycosyltransferase Structure?	480		700	700		UPM
Antonio Guerrero	Install and test run of the Space Weather Modeling Framework" at RES"	15	15	100	100	100	BSC/MN
Assensi Oliva	Turbulent flow around a square cylinder at high Reynolds numbers: direct numerical simulation and regularization modeling	317		250	2048	2048	BSC/MN
Assensi Oliva	Direct Numerical Simulations of channel flows with regime transition due to coalescence in gas liquid bubbly flows.	800		250	2048	2048	BSC/MN
Assensi Oliva	Vortex dynamics and coherent structures in swirling flows	350		300	2048	3072	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Avelino Corma Canós	Rationalization of the different reactivity of CeO ₂ crystallographic facets from first principles calculations	50		250	250	100	BSC/MN
Carles Serrat	Scaled Attosecond Physics	60	60	6000	3000	3000	BSC/MN
Carlos Vega	Ice crystallization	150	150	500	100		UV
Carme Rovira	Elucidating the catalytic mechanism of retaining glycosyltransferases	128		2000	2000	3000	BSC/MN
Carme Rovira	Elucidating the catalytic mechanism of retaining glycosyltransferases	128					BSC/MT
Carme Rovira	Ab initio metadynamics simulations of the binding of peptides to gold nanoparticles	50	45	3000	3000	3000	BSC/MN
Carme Rovira	Ab initio metadynamics simulations of the binding of peptides to gold nanoparticles	128	45	3000	3000	3000	BSC/MT
Constantia Alexandrou	Disconnected contributions for the η' and the nucleon form factors from GPUs	432		4000	4000	4000	BSC/MT
Daniel Crespo	Dynamic structure factor of Bulk Metallic Glasses determined by Molecular Dynamics simulation	600		1000	1000	1000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Daniel Stich	Imaging fields for time reversal in seismology	9		300	300		UV
Domingo Giménez	Modelling and optimization of basic parallel routines in cc-NUMA	20		140		10	BSC/Altix
Elena Khomenko	Simulations of dynamics of partially ionized solar atmosphere	60		8192	8192	8192	BSC/MN
Eliseo Ruiz	Magnetism and Transport Properties of Magnetic Molecules on Surfaces and Nanostructured Systems	200	300	80	20	10	BSC/MN
Emilio Artacho	Study of bulk and nanoconfined liquid water from ab initio simulations	375		500	200		UPM
Enrique Martinez Gonzalez	Constraints on inflationary models of the universe based on CMB data	200		1000	1000		UPM
Fco. Javier Luque Garriga	Thermodynamics and kinetics of ligand binding to retinol-binding protein I and II	415		1000	1000	400	BSC/MN
Fco. Javier Luque Garriga	Thermodynamics and kinetics of ligand binding to retinol-binding protein I and II	216					BSC/MT
Federico Gago	Targeting the dimerization interface of leishmania trypanothione reductase in the search for new drugs	150		450	550	500	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Felipe J. Llanes Estrada	Monte Carlo simulation of Higgs production and other high energy processes at the LHC	120	120	10	200		UV
Fernando Martin	XUV/X-ray laser pulses for ultrafast electronic control in molecules	280		300	1000	1000	BSC/MN
Francesc Illas	Methane activation by metallic nanoparticles supported on MoC and Mo2C	100		300	600	800	BSC/MN
Francesc Illas	Electronic structure of semiconductors by means of quasiparticle calculations: relevance to photocatalysis	120		200		1000	BSC/Altix
Francisco J. Doblas-Reyes	Initialization of seasonal-to-decadal climate predictions	1167		500	5000	5000	BSC/MN
Grigory E. Astrakharchik	Diffusion Monte Carlo simulation of quantum gases and solids.	67		40	400	10	BSC/MN
Grigory E. Astrakharchik	Diffusion Monte Carlo simulation of quantum gases and solids.	35		40	400	10	BSC/MT
Gustavo Yepes	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	1500		8000	8000	100000	BSC/MN
Ignacio Pagonabarraga	Self assembly in active suspensions	500		2000	2000	2000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Jana Selent	Molecular dynamics of GPCRS in lipid RAFTS of CNS diseases	100	300	200	200	50	BSC/MN
Javier Fdez Sanz	Catalysis modeling: gold nanoparticles supported on yttrium modified anatase as efficient WGS and CO oxidation catalysts	150	195	750	750		UPM
Javier Jiménez Sendin	Direct numerical simulation of a high-Reynolds-number homogeneous shear turbulence	20		700	700	10	BSC/MN
Javier Jiménez Sendin	Particle tracking and acceleration statistics in massively parallel simulations of wall-bounded turbulent flows	20		1000	1000	10	BSC/MN
Javier Junquera	Simulation of the negative electron compressibility in LaAlO ₃ /SrTiO ₃ interfaces	200		50	50		UMA
Javier Sancho Sanz	Mechanistic and energetic analysis of binding interactions of ligands and proteins: Steered MD simulation of cofactor and anion dissociation from Helicobacter pylori and Anabaena PCC 7119 flavodoxins.	105		100	100	200	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Javier Sancho Sanz	Mechanistic and energetic analysis of binding interactions of ligands and proteins: Steered MD simulation of cofactor and anion dissociation from Helicobacter pylori and Anabaena PCC 7119 flavodoxins.	105					BSC/MT
Jesus Mari Ugalde Uribe-txeberria	Transition metal chemistry with PNOF5.	150	580	250	500	10	BSC/MN
Joaquín Fernández-Rossier	Electronic properties of the nanoscale interfaces based on the graphene and molybdenum monolayers.	300		500	60		IAC
Johannes Jaeger	Reverse-engineering embryo segmentation patterning in flies: from Clogmia to Megaselia	75		20	20	10	BSC/MN
Jordi Faraudo	GPU-accelerated simulations of all atomic and coarse grain models of soft matter systems	200		200	110	100	BSC/MT
Jordi José	3D simulations of mixing in novae: the effect of the white dwarf composition and mass	169		4000	4000	2000	BSC/MN
Jordi Ribas	Elucidating the mechanism of formation of the enamine intermediate in proline catalyzed aldol reactions in water	307		10	250		UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Jordi Teixidó	Development of novel treatments for myotonic dystrophy: in vivo drug discovery	21	21	200	200		ITC
Jordi Torra i Roca	Gaia: Simulation of Telemetry Stream	350		5500	10000	20000	BSC/MN
Jorge Ferrer Marrades	Genomic regulation of transcription in Human Pancreatic Islets	50		4000	500	10	BSC/MN
José Carlos Conesa	DFT modeling of ethane dehydrogenation catalysts	30		30	500	10	BSC/MN
Jose E. Roman	Eigensolvers for symmetric generalized eigenproblems in SLEPc	1	4	400	400	10	BSC/MN
Josep M. Poblet	Polyoxometallates on surfaces as new molecular electronic devices and electron storage systems	267		60	30		UC
Juan Jose Novoa Vide	Ab initio molecular dynamics of organic ion-radical pairing in solution	368		6	80	10	BSC/MN
Juan Manuel Vanegas	Role of hopanoids in the mechanical properties of model bacterial membranes and function of mechanosensitive channels	790		1200	500	1200	BSC/MN
Kendall N. Houk	De novo design of enzymes	50		2000	2000	10	BSC/MT

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Konstantin Neyman	Towards catalysts of new generation: Active sites of ionic Pt in nanostructured ceria	170		200	200	50	BSC/MN
Leonardo Scapozza	Structural modelling of an RNA stem-loop that regulates the alternative splicing of SMN2: a new therapeutic target in Spinal Muscular Atrophy	210	210	1000	100		UZ
Ludger Wirtz	Electronic and optical properties of two-dimensional materials. Graphene and transition metal dichalcogenides.	60	60	100	100		ITC
Luis Errea	GridTDSE: direct numerical resolution of TDSE in atomic and molecular collisions	30		120	120		ITC
Manuel Alcami	Charge transfer and self-assembly of molecules on modified metal surfaces	167		500	100		UC
Marcel Swart	Catalytic mechanism of the Complex II family enzyme Succinate:quinone oxidoreductase (SQR)	10		50	200	10	BSC/MN
Marcel Swart	Catalytic mechanism of the Complex II family enzyme Succinate:quinone oxidoreductase (SQR)	23					BSC/MT
Mario Piris	PNOF5-PT2: A new benchmark tool in computational chemistry	100	140	250	500	10	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Nuria Lopez	Post-synthetic modification of Metal-organic frameworks: an ab initio theoretical study (2nd. period)	800		250	250	100	BSC/MN
Nuria Lopez	Study of the adsorption and reactivity of biomass-derived compounds on metallic surfaces in an aqueous environment: Ab Initio Molecular Dynamics studies on the structure of thick water layers. (2nd. period)	350	650	1000	500	150	BSC/MN
Pablo Chacón	Study of the nucleotide conformational switch in bacterial cell division proteins by all-atom simulations	984		10	10	1	BSC/MN
Pablo Fosalba	The MICE project -1. Mapping the high-redshift universe	492		8000	8000	40000	BSC/MN
Pablo Fosalba	The MICE project -1. Mapping the high-redshift universe	11					BSC/MT
Pablo Palacios Clemente	Theoretical Characterization of the optimized geometry and energy levels in an hybrid nanostructure.	500		500	800		UPM
Paolo Carloni	Investigating the protomeric space of Hairpin DNA by CPMD simulations	719		600	600	600	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Patricia Tissera	Chemical Evolution of the Universe	1130		700	1000	1000	BSC/MN
Peter Wittek	Approximating the Ground State of a Many-Particle Quantum System with Semi-Definite Relaxations	46		30	30	10	BSC/MT
Ramiro Logares-Haurie	Microbial Oceanomics using Next-Generation Sequencing (454/Illumina)	320		5000	500	10	BSC/MN
Ramon Gómez Gesteira	Massively parallel Smoothed Particle Hydrodynamics scheme using GPU clusters.	83		20	20	12	BSC/MT
Rebeca García Fandiño	Transmembrane Ion Transport through alpha, gamma-Peptide Nanotubes	200		1000	1000		UZ
Riccardo Rossi	Development and validation of a parallel solver for turbulent fluid-structure interaction problems	750		50	100		IAC
Roberto San Jose	Fuel moisture content models to forest fire behaviour forecast		100	1000	2000	10	BSC/MN
Rosa Domínguez	Dust Effects on the Spectral Energy Distribution of Galaxies	312		6	12		UC
Ruben Perez	A theoretical study on the adsorption and mechanical properties of the Immunoglobulin G (IgG)	252		3000	2000	3000	BSC/MT

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Ruben Perez	First-principles simulations of defects on metal oxides and graphene sensed by scanning probe microscopies	250		2000	1000	4000	BSC/MN
Santiago Badia	Improving the scalability of balancing substructuring domain decomposition methods for computational fusion	100		200	400	10	BSC/MN
Santiago Cuesta López	Multiscale Modelling and Materials by Design of interface-controlled Radiation Damage in Crystalline Materials – RADINTERFACES	200		1000	1000		UC
Sascha Husa	Coalescence of Black Hole Binary systems	800		1000	2000	5000	BSC/MN
Teresa Parra	Mixing features of swirling flows in combustors	2000		2500	2500		UV
Thomas Schafer	Ab initio study of organic molecule solvation in ionic liquid-water mixtures.	542		300	300	150	BSC/MN
Victor Homar Santaner	Implementation of a High-Res Ensemble Kalman Filter for the Western Mediterranean	800		1000	200	10	BSC/MN
Victor Martin Mayor	Anisotropic Heisenberg spin-glasses on the GPU	356		1600	300	10	BSC/MT
Xavier Barril	Conformational plasticity of ATP-lid in HSP90: Implications for drug design	40		800	40	10	BSC/MT

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Xavier Barril	Understanding the binding kinetics of Acetylcholine Binding Protein (AChBP) inhibitors	160		800	10		UMA

6 Sigüientes pasos

Se dispone de un entorno web para poder acceder durante el periodo a toda la información relacionada con la actividad.

Esta disponible a través de la web: <http://www.bsc.es/RES>. Es una zona protegida, que puede accederse con el correo electrónico del líder de la actividad, o de la persona que presentó la solicitud.

Desde esta zona, que esta en construcción y evolución, se puede:

- Dar de alta a los usuarios/investigadores que participan en esta actividad. Se hace de forma automática, pero es imprescindible firmar el documento y devolverlo por correo antes de 15 días de dar el alta. De otra forma se anulará el acceso al sistema hasta que se reciba la documentación. Esto debe realizarse tanto para los usuarios de actividades de continuación como para actividades nuevas.
- Consultar la información proporcionada por el comité de acceso.
- Consultar los recursos asignados para la actividad. Es importante comprobar que no hay errores en estos datos, ya que serán los que se apliquen en los diferentes sites.
- Analizar el consumo semanal de recursos

Una vez rellenada la información, el equipo de soporte local del site de asignación se pondrá en contacto con los usuarios para proporcionar la información necesaria.