

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 2017

Barcelona, Febrero 2017

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

IMPORTANTE:

En la presente convocatoria, debido a la actualización prevista para los próximos meses del supercomputador MN3, se ha realizado una asignación total de 19.5 millones de horas, esto es menos de un 50% de la asignación habitual. Esta reducción tan importante ha limitado en gran medida el número de proyectos aceptados en esta resolución y también su asignación a máquinas, debido al gran número de horas y proyectos solicitados en este periodo. Cabe destacar que aunque MareNostrum3 no estará operativo todo el periodo, se han asignado 3.3 millones de horas, las cuales sólo podrán utilizarse durante los días 1-15 de marzo, que es cuando se parará el MN3 para su actualización. Estas horas han sido asignadas solo a proyectos con experiencia previa en MN3 y que el comité de acceso ha creído que podrían hacer un uso intensivo de la máquina en un periodo tan corto de tiempo, y en caso de no ser utilizadas, no dará derecho a utilizarlas en otras máquinas o en periodos posteriores..

Los 19.5 millones de horas son 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), Universidad Politécnica de Madrid (UPM), Instituto Astrofísico de Canarias (IAC), Universidad de Cantabria (UC), Universidad de Málaga (UMA), Universidad de Valencia (UV), Consorci de Serveis Universitaris de Catalunya (CSUC), CénitS-COMPUTAEX (CENITS), Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León (FCSCCL), Universidad Autónoma de Madrid (UAM) y Fundación Pública Galega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia (CESGA).

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 las 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 2017.

Para mejorar como se comparten los recursos asignados entre las diferentes actividades, y evitar así las concentraciones de uso 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 irá 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 o 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 vídeos, presentaciones, y cualquier otro material, para ser utilizado como material divulgativo de la RES.
 7. Dada la alta competencia por recursos y la cantidad total disponible de estos, se recuerda a los proyectos que solicitan muchas horas que PRACE (www.prace-ri.eu) ofrece cantidades de horas a partir de 4 millones anuales, disponiendo de dos evaluaciones de proyectos anuales.

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 COMPSs (<http://www.bsc.es/computer-sciences/grid-computing/comp-superscalar>). 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.

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.

| Líder | Título | Con prioridad | Sin prioridad | Projects | Scratch | HSM | Site/Máquina |
|----------------------------|--|---------------|---------------|----------|---------|-------|--------------|
| Albert Rimola | Ab initio modeling of protein/surface interactions. Stability of peptide secondary structures upon adsorption on TiO ₂ surfaces | 200 | | 100 | 200 | 1000 | BSC/MN |
| Blanca Biel | Transport and structural properties of Van der Waals few layered A-RAM devices | 250 | | 500 | 500 | 500 | BSC/MN |
| Carlos David Pérez Segarra | Wall Resolved LES Simulations at High Reynolds on Airfoils at Large Angles of Attack. | 800 | | 600 | 2048 | | UV |
| Carme Rovira Virgili | Conformational free energy landscapes of sugar-like molecules. Implications for catalysis in carbohydrate-active enzymes | 200 | | 4096 | 4096 | 4000 | BSC/MN |
| | | 150 | | 10240 | 10240 | 10240 | BSC/MT |
| Carme Rovira Virgili | Elucidating catalytic mechanisms of engineered glycosidases and glycosyltransferases | 116 | | 3000 | 3000 | | BSC/MN |
| | | 192 | | 10240 | 10240 | 10240 | BSC/MT |
| | | 300 | | 3000 | 3000 | | CESGA |
| Chloe Prodhomme | Tackle seasonal forecast deficiencies by improving mean state representation | 250 | 150 | 8000 | 15000 | | CESGA |
| Emilio Artacho | Studying non-linear electronic response in finite and infinite systems using TDDFT | 500 | | 1000 | 500 | | CSUC |

| Líder | Título | Con prioridad | Sin prioridad | Projects | Scratch | HSM | Site/Máquina |
|---------------------------|--|---------------|---------------|----------|---------|------|--------------|
| Fco. Javier Luque Garriga | Constant pH Replica Exchange Molecular Dynamics of the M2 Channel of Influenza A Virus | 300 | 60 | 4000 | 3000 | | UC |
| Fco. Javier Luque Garriga | Redesigning anti-influenza compounds: novel anilines with multi-target activity | 157 | | 4000 | 3000 | 1000 | BSC/MT |
| Fernando Martín | Attosecond atomic and molecular dynamics | 100 | | 300 | 1000 | | BSC/MN |
| | | 700 | | 300 | 1000 | | CESGA |
| Fernando Martín | Ultrahigh pressure chemistry at the nanoscale | 150 | | 200 | 200 | | UPM |
| Gregori Ujaque | Cyclic vs acid/base proton transfer in protodeauration step: a particular case with general implications | 400 | | 500 | 2000 | | UPM |
| Gregorio Herdoiza | Charm physics on fine lattices | 1325 | | 20000 | 20000 | | FCSCCL |
| Grigory E. Astrakharchik | Quantum gases in optical lattices as a tool to study the ground-state supersolidity | 90 | | 500 | 500 | 1000 | BSC/MT |
| Gustavo Yepes | The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe | 150 | | 2000 | 3000 | | UAM |
| Ignacio Pagonabarraga | Emerging structures in actuated and active suspensions | 900 | | 4000 | 4000 | | BSC/MN |
| | | 1000 | | 4000 | 4000 | | CESGA |
| Ivone Jiménez-Munt | Modeling the Topographic Evolution of Iberia (MITE) | 200 | 200 | 1600 | 2000 | | FCSCCL |
| Javier Carrasco | Assessment of a new allotrope of silicon as a potential anode material for sodium-ion batteries | 460 | | 150 | 200 | | UV |
| Javier Sancho Sanz | Towards computing protein | 200 | | 3000 | 1000 | 3000 | BSC/MN |
| | | | 200 | 3000 | 1000 | 3000 | BSC/MT |

| Líder | Título | Con prioridad | Sin prioridad | Projects | Scratch | HSM | Site/Máquina |
|-----------------------------------|---|---------------|---------------|----------|---------|--------|--------------|
| Joan Torras Costa | Porosity control of nanoporated politiophene nanomembranes for drug delivery | 150 | | 300 | 200 | 500 | BSC/MN |
| | | 120 | | 300 | 200 | | IAC |
| Jordi Torra i Roca | Gaia: Cyclic Data Processing and Catalogue Simulations | 200 | | 100000 | 125000 | 175000 | BSC/MN |
| Jordi Villà-Freixa | Influence of the lipidic environment on the immune response against the membrane-proximal external region (MPER) of HIV gp41 | 850 | | 300 | 240 | | UV |
| Lluís Blancafort | Optical spectra of DNA oligomers and polymers simulated with real time-dependent density functional theory | 200 | | 3000 | 3000 | | UPM |
| Manuel Luna | Solar prominence instabilities and eruptions | 870 | | 1000 | 1000 | | IAC |
| | | 100 | | 1000 | 1000 | | UAM |
| Maria Teresa Pay Perez | Photochemical modelling to attribute emission sources and source regions to high particulate matter concentration in urban areas in Spain | 300 | | 5000 | 1000 | | CESGA |
| Maria Veronica Ganduglia-Pirovano | Chemical nature of the elusive active site for CO oxidation on Au/ceria model catalysts | 500 | | 400 | 300 | | UPM |
| Marta Reynal-Querol | Computing pixel base socio-economic measures to analyze economic development | 200 | | 2000 | 2000 | | BSC/MN |
| | | 600 | 100 | 2000 | 2000 | | UMA |
| Martin Obergaulinger | Engines of long gamma-ray bursts in massive stars | 300 | | 2000 | 2000 | | BSC/MN |
| | | 700 | | 2000 | 2000 | | CESGA |
| Modesto Orozco López | MODEL-tox. Construction of an MD library of toxicology relevant proteins in the human proteome | 400 | | 2000 | 800 | | BSC/MN |
| | | 800 | | 2000 | 800 | | UC |

| Líder | Título | Con prioridad | Sin prioridad | Projects | Scratch | HSM | Site/Máquina |
|-----------------|---|---------------|---------------|----------|---------|-------|--------------|
| Nikola Vitas | Magneto-convection simulations including the partially ionization effects and advanced radiative transfer | 165 | | 2000 | 2000 | | IAC |
| Nuria Lopez | Metal oxides beyond the common limits: complex reactivity, surface dynamics, and doping | 550 | 150 | 1000 | 1000 | | UPM |
| Pau Figueras | New frontiers in numerical general relativity | 300 | | 5000 | 5000 | 10000 | BSC/MN |
| Riccardo Rurali | Phonons dispersion relation in GaP crystal phase superlattices | 100 | | 1000 | 1500 | | CSUC |
| Rubén Pérez | Double stranded DNA and RNA under constant stretching forces: atomistic insights from microsecond-long molecular dynamics | 250 | | 6000 | 6000 | 6000 | BSC/MT |
| Sara Basart | Applying an ensemble data assimilation technique to generate a high-resolution regional dust analysis | 112 | | 600 | 3000 | | CENITS |
| Sascha Husa | Highly resolved gravitational wave signals from black hole mergers | 200 | | 2000 | 6000 | | CESGA |
| Silvia Osuna | The role of distal mutations and allosteric regulation on the catalytic efficiency of tryptophan synthase | 288 | | 5000 | 5000 | | BSC/MT |
| Stefan Bromley | Design of 2D covalent organic frameworks based on open and closed shell building blocks | 800 | | 1000 | 3000 | | FCSC |
| Stefan Bromley | Development of New TiO ₂ -SiO ₂ Mixed Oxide Materials: From Nanoscale to Bulk | 500 | 100 | 1000 | 2000 | | UMA |

6. Sigüientes pasos

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

Está 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 está 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.