

Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación

Resolución Comité de Acceso, Asignación de Horas de Supercomputación para la Red Española de Supercomputación (RES) 2o período 2015

Barcelona, Junio 2015

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 35 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 Junio de 2015.

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 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
Alfredo Levy Yeyati	Theoretical study of Majorana single-charge transistor using numerical renormalization group	334		1000	1000		UPM
Andrea Floris	Using nanoparticles to improve the thermal properties of molten salts for energy storage		100	50	120	200	BSC/MN
Annapaola Migani	Oxygen induced step-doubling transition of the vicinal Pt(997) surface.	311		500	500		UPM
Antoni Planas	Probing Conformational Selection in a Glycosyltransferase Structure by Bias-Exchange.	280		700	700		UPM
Antonio Fernandez-Guerra	Standardized and comparable ecological and biotechnological metagenome analysis of Ocean Sampling Day's marine ocean microbes	330		3000	5000		UZ
Antonio Rodríguez Fortea	Analysis of the ultrafast charge transfer in organic photovoltaic devices based on endohedral metallofullerenes: effect of the solvent	1099		4000	2000	2000	BSC/MN
Assensi Oliva	Advanced turbulence models for buoyancy driven flows	1200		250	3072	3072	BSC/MN
Assensi Oliva	Direct Numerical Simulations of Compressible Turbulent Flows at Moderate Reynolds Numbers: Compressible Flow around a NACA0012 airfoil with incidence		70	400	1000	4096	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Assensi Oliva	Large eddy simulations of the flow past a circular cylinder. Flow control mechanism by means of surface-roughness.	720		400	2048	2048	BSC/MN
Ayse Gungor	DNS of a Non-Equilibrium Adverse Pressure Gradient Turbulent Boundary Layer		100	500	1000	1000	BSC/MN
Blanca Biel	Design and characterization of the physical properties of distorted nanographenes	370		500	500		IAC
Carlos Palenzuela	Modeling the coalescence of magnetized neutron stars	460		5	20	20	BSC/MN
Carme Rovira	Conformational free energy landscapes of carbohydrates. Implications for catalysis in carbohydrate-active enzymes..		75	2500	2500	3000	BSC/MN
		192		2000	2000	2000	BSC/MT
Carme Rovira	Uncovering the molecular mechanisms of O-glycosylation: enzyme specificity	512		2000	2000	3000	BSC/MN
		192		2000	2000	3000	BSC/MT
Cesar de la Fuente	Study of STM conductivity through Rare Earth Adatoms.		110	1000	1000		UZ
César González Pascual	Electro-chemical reactivity of defects and grain boundaries in 2D materials	90	90	1000	1000		UC
Christina Curtis	Investigation of Genomically Quiescent Breast Tumors	13,6		5000	400		UC
Claudio Dalla Vecchia	Environment Driven Galaxy Evolution (EDGE)	2000		20000	20000	50000	BSC/MN
Cristina Diaz	Diffraction of atoms and light molecules as an analysis tool in surface science	750		200	500		IAC
Daniel Crespo	Flow-induced anisotropy in metallic glasses	800		100	5	0	BSC/MN
Daniel Mira	Prediction of stabilization mechanisms for lean-premixed flames in a downscale stage combustor using large-eddy simulation.	1500		5000	5000	20000	BSC/MN
David Martí Linares	3D elastic full waveform inversion for the subsurface imaging: application to real seismic data set		100	5000	5000	5000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
David Torrents Arenales	Identification of somatic variation in ICGC-PanCancer Genomes	1200		500	500	1000	BSC/MN
David Zanuy Gomara	Simulation of selective protein channels embedded in electroactive polymeric membranes""		150	500	500		UV
Elena Khomenko	Simulations of dynamics of partially ionized solar atmosphere		100	8000	8000	8000	BSC/MN
Eliseo Ruiz	Looking for High Conductance Molecules		60	120	20	120	BSC/MN
Emilio Artacho	Structural and dynamical properties of nanoconfined liquid water	700		500	200	200	BSC/MN
Ernest Giralt Lledó	Discovery of new EGFR inhibitory peptides with improved Blood-Brain Barrier (BBB) permeability		100	600	100		UPM
Eva Casoni	Simulation of damage failure mechanisms in composites structures using high-performance computing technologies.		63	5000	5000	10000	BSC/MN
Fco. Javier Luque Garriga	Translocation of ADP/ATP: Mechanism of the membrane protein carrier	600		2000	1000		BSC/MN
		123		2000	1000		BSC/MT
Feliu Maseras	Homogeneous versus heterogeneous catalyst: Catalytic Reduction in Surfactant Coated Nanoparticles		100	1000	500	150	BSC/MN
Fernando Martin	Modifying the properties of graphene supported on ruthenium	230		300	500		UPM
Fernando Martin	XUV/X-ray laser pulses for ultrafast electronic control in molecules	500		300	1000	1000	BSC/MN
Francesc Illas	Structure and reactivity of Au nanoparticles supported on MoC, improving catalysts for the low temperature water gas shift reaction	1382		900	1000	1000	BSC/MN
Francesc Illas	Zirconia Nanoparticles for Catalytic Applications: Size, Shape and Composition from Density Functional Theory	368		500	1000	1000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Francesco Luigi Gervasio	The effect of the oncogenic mutations on the conformational landscape of B-RAF kinase (continuation).	1080		2000	3000		BSC/MN
Francisco J. Doblas-Reyes	Impact of land surface initialisation in climate seasonal predictions	1500		2000	20000		BSC/MN
Gregori Ujaque	Wacker-type oxidation of olefins: the effect of solvent in anti-Markovnikov addition		100	500	2000		IAC
Grigory E. Astrakharchik	Diffusion Monte Carlo simulation of quantum gases and solids.	200		200	200		BSC/MN
		52		50	300		BSC/MT
Gustavo Yepes	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	600		15000	30000	20000 0	BSC/MN
Ignacio Pagonabarraga	Complex structures in complex active materials	1600		4000	4000	4000	BSC/MN
Javier Carrasco	High voltage sulphate cathodes Li ₂ Fe(SO ₄) ₂ for batteries: evaluation of stability and Li diffusion using first principles		100	250	450		UV
Javier Carrasco	Towards new oxynitride phases for cathodes in Li-ion batteries	226		300	350		UV
Javier Honrubia	Particle-In-Cell simulations of laser-plasma interactions: From very intense to relativistic regime		100	1000	15000	4000	BSC/MN
Javier Jimenez Sendin	Development of the GPGPU generation of DNS codes.	300		4000	4000	4000	BSC/MT
Javier Trujillo Bueno	The Small-Scale Magnetic Activity Of The Quiet Solar Photosphere	2480		4000	60		BSC/MN
Joan Baiges	HPC - EUNISON: High Performance Computing Algorithms for the EUNISON project.		35	300	500	500	BSC/MN
Jordi Villà-Freixa	Lipid-dependent binding of neutralizing and nonneutralizing antibodies to the membrane-proximal external region of HIV gp41		100	60	240	300	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Jorge Iribas Cerdá	Electronic and magnetic properties of molecules adsorbed on semi-infinite surfaces including spin-orbit coupling	806		500	100		UMA
Jose E. Roman	GPU codes for plasma physics simulations	150		800	800	100	BSC/MT
Jose Miguel Reynolds	Understanding and optimizing turbulent transport simulations in stellarator plasmas with the GENE gyrokinetic code	1300		5000	2000	5000	BSC/MN
Juan Jose Novoa Vide	Understanding the nature the phase transitions in switchable molecular materials containing TCNQ-ions		60	10	80	0	BSC/MN
Kendall N. Houk	Computational exploration and design of new epoxide hydrolase variants	57,6		3000	3000	0	BSC/MT
Konstantin Neyman	Determination of chemical ordering in large bimetallic particles from density-functional calculations	780		900	900		UZ
Leonardo Pardo	New strategies in GPCR drug discovery	700		5000	5000		BSC/MN
Manel Perucho Pla	Wind-wind interaction in gamma-ray binaries and long term evolution of extragalactic jets	1000		9000	9000		BSC/MN
		530		1000	1000		UV
Manuel Alcamí	Fragmentation of biomolecules from selected valence-hole states.	500		300	500	0	BSC/MN
Marcel Swart	Interaction of substrate with taste receptors	57,6		3000	3000	0	BSC/MT
Marco Bernasconi	First-principles simulation of the heterogeneous crystallization of chalcogenide alloys for phase change memories	384		120	180		UC
Maria José Caturla Terol	Molecular dynamics simulations of manipulation and irradiation of graphite and graphene	900		1000	50	1000	BSC/MN
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Rational design of noble-metal free catalysts for the dry reforming of methane		100	400	300		UMA
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Understanding the water-gas shift reaction for hydrogen production on model Ni/ceria catalysts	239		400	300		UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Marino Arroyo Balaguer	Fracture and hydrodynamics in curved and evolving surfaces	80		500	500		UMA
Mariona Sodupe	Fluorescence markers for amyloid detection. Insights from molecular dynamics simulations.	227		500	1500		ITC
Neven Stjepan Fuckar	Impact of sea ice initialization on seasonal climate prediction	280		400	7000		BSC/MN
Nicola GA Abrescia	High-resolution structures of whole viruses by cryo-electron microscopy techniques	27		100	100		UMA
Nuria Lopez	Metal oxides beyond the common limits: complex reactivity, surface dynamics, and doping		100	1000	500	150	BSC/MN
Nuria Lopez-Bigas	Computing signals of positive selection in the pattern of somatic mutations in tumors		75	200	1000		UPM
Pablo Fosalba	Fast and accurate approximations to massive Nbody simulations		50	10000	10000	25000	BSC/MN
Paolo Barone	ELEOS: relativistic ELEctronics in multilayered OxideS		100	300	400	300	BSC/MN
Peter Wittek	Large-scale classical simulations of quantum system using the Trotter-Suzuki decomposition	13		15	10		BSC/MT
Ramiro Logares	Microbial Oceanomics using High-Throughput DNA-Sequencing and High-Performance Computing		300	7000	5000	2000	BSC/MN
Ramon Gómez Gesteira	A SPH based model to analyze ship induced sediment transport in Harbors using GPU cluster	80,64		200	7000	12	BSC/MT
Robert Castilla	CFD of the flow inside a Gerotor Pump with Dynamic Mesh and Contact Point	350		2000	2000		UPM
Roberto D'Agosta	Polymers for thermoelectric energy conversion	680		700	1000		UV
Roberto San Jose	Urban climate atlas and health impact DECUMANUS premium services	940,03		6000	10000	10000	BSC/MN
Roger Estrada	Implication of conformational changes in the activation loop of MNK1/2 in breast cancer	30		700	200	200	BSC/MT
Rubén Pérez	Oxygen intercalation in graphene on metals with ab initio DFT and STM simulations	270		1500	500		UPM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Santiago Badia	Segregated Runge Kutta and Block preconditioners based on multilevel domain decomposition for the incompressible Navier Stokes equations.	250		100	400		BSC/MN
Sascha Husa	Merger and gravitational wave signal of non-precessing black holes with large spins		100	1000	2500	5000	BSC/MN
Shimpei Futatani	Non-linear MHD modelling of pellet injection for ELM control in fusion plasmas		400	4000	4000	7000	BSC/MN
Silvia Osuna	Markov State Models for enzyme design	144		3000	3000	0	BSC/MT
Stefan Bromley	Design of 2D Materials based on Radical Building Blocks	876		500	500		UV
Xavier Barril	The Quasi-Bound State: application to binding mode prediction	180		2000	100		BSC/MT
Xavier Daura	A molecular-dynamics study of the temperature dependence of polypeptide-hydration thermodynamics	435		5000	1000		UC
Xevi Biarnés	In-silico Protein Engineering with BindScan. Epoxide Hydrolase Benchmark.		20	1200	1200	500	BSC/MN

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