

# Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación

## Resolución Comité de Acceso, Asignación de Horas de Supercomputación para la Red Española de Supercomputación (RES) 3er período 2014

Barcelona, Octubre 2014

## 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 Enero 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 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 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](http://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](mailto: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	Quantum Effects in the Diffusion of Atomic Hydrogen on Interstellar Silicate Surfaces	375		150	250	25	UPM
Antoni Planas	Evidence of Conformational Selection in a Glycosyltransferase Structure?	300		700	700		UPM
Antonio Rodríguez Fortea	Analysis of the ultrafast charge transfer in organic photovoltaic devices based on endohedral metallofullerenes	597,15		2000	1000	2000	BSC-MN
Assensi Oliva	Flow topology in turbulent natural convection: direct numerical simulation and advanced turbulence modeling	900	100	250	2048	2048	BSC-MN
Assensi Oliva	Multi-physics coupled simulations: interaction of turbulence with radiation. Application to direct numerical simulation of turbulent Rayleigh-Bénard convection in a radiatively participating medium.	550	60	4096	2048	2048	BSC-MT
Avelino Corma Canós	Alkane oxidation over CeO <sub>2</sub> nanoparticles: role of defects	250		250	350	100	BSC-MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Carne Rovira	Conformational free energy landscapes of carbohydrates	460		2500	2500	3000	BSC-MN
		128		2000	2000	3000	BSC-MT
Carne Rovira	Uncovering the molecular mechanisms of O-glycosylation	448		2000	2000	3000	BSC-MN
		192		2000	2000	3000	BSC-MT
César González Pascual	First-principles modelling of grain boundaries in W	630	70	1000	1000		UC
Daniel Mira	Development of turbulent combustion models for premixed combustion based on tabulated chemistry for Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) and large-eddy simulation (LES)	280	40	5000	5000	10000	BSC-MN
Edilberto Sánchez	Electrostatic microinstabilities and zonal flows in stellarator plasmas.	750		6000	1000	6000	BSC-MN
Elena Khomenko	Simulations of dynamics of partially ionized solar atmosphere	800	600	8000	8000	16000	BSC-MN
Eliseo RUIZ	Looking for High Conductance Molecules		45	120	20	120	BSC-MN
Emilio Artacho	First-principles investigation of intrinsic screening mechanisms in ferroelectric thin film	260	65	500	0	500	BSC-MN
Enrique Martinez Gonzalez	Constraints on inflationary models of the universe based on CMB data	25		1000	1000		UPM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Fco. Javier Luque Garriga	Binding of novel activators to AMPK and theoretical study of the activation mechanism (II)	184		1024	750	1000	BSC-MN
		216		7024	750	1000	BSC-MT
Fernando Martin	XUV/X-ray laser pulses for ultrafast electronic control in molecules	500		300	1000	1000	BSC-MN
Francesc Illas	Activation and conversion of CO2 through novel catalysts based on Au and Cu nanoparticles supported on molybdenum carbides	1014		300	600	800	BSC-MN
Francesc Illas	Towards realistic models of stoichiometric and doped TiO2 nanoparticles relevant to photocatalysis: Atomic and electronic structure from Density Functional Theory and Quasiparticle GW calculations	2580		500	1000	1000	BSC-MN
Francisco J. Doblas-Reyes	Impact of ocean resolution and initialisation in climate seasonal predictions	2100		2000	20000	1000	BSC-MN
Francisco Marques Truyol	Direct numerical simulations of Taylor-Couette flow for the Princeton experimental setup.	720	80	3000	200		UMA
Giancarlo Franzese	Hydration force in the supercooled regime of water: a Molecular Dynamics study		105	50	50	0	UZ
Grigory E. Astrakharchik	Diffusion Monte Carlo simulation of quantum gases and solids.	90	10	100	100	1000	BSC-MN
		50		50	300	1000	BSC-MT

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Gustavo Yepes	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	800		10000	60000	250000	BSC-MN
Ignacio Pagonabarraga	Self assembly in active suspensions	1600		2000	2000	2000	BSC-MN
Iván Santos	Optoelectronic properties of defects in semiconductors through GW simulations. Case of Silicon.	300	150	500	300	0	IAC
Javier Carrasco	First-principles study of Na insertion/extraction in the (Fe,Mn)PO4-Na(Fe,Mn)PO4 system for cathode material in Na-ion batteries	435	300	350	400		UV
Javier Jimenez Sendin	Time-resolved evolution of vorticity and momentum cascades in statistically stationary homogeneous shear turbulence	380		8192	1096	30000	BSC-MN
Javier Trujillo Bueno	THREE DIMENSIONAL SIMULATIONS OF THE GENERATION AND TRANSFER OF POLARIZED RADIATION IN THE SOLAR OUTER ATMOSPHERE	1800	200	3000	30	1000	BSC-MN
Joan Baiges	Numerical simulation of turbulent optical parameters around telescopes	20		300	500	500	BSC-MN
Johannes Jaeger	In silico evolution of the gap gene network: how to turn one fly into another	95	10	20	50	1000	BSC-MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Jordi Clarimón	Rare genetic variants in Alzheimer's disease (AD): use of next-generation sequencing for a comprehensive analysis of genes related to AD	255	30	2000	2000		UV
Jordi José	3D simulations of nova explosions: diffusion, shear and hydrodynamic instabilities	400	100	4000	4000	2000	BSC-MN
Jordi Marti	Molecular dynamics simulation study of the influence of cholesterol on ionic adsorption in biological membranes	1620	180	400	50	100	BSC-MN
Jordi Teixidó	Development of novel treatments for myotonic dystrophy: in vivo drug discovery	118		700	700	200	BSC-MT
Jordi Teixidó	Study of the role of EGFR activating mutations in the development of drug resistance in non-small cell lung cancer treatment	15		700	700	200	BSC-MT
Jordi Torra i Roca	Gaia: Data Processing and Simulation of Telemetry Stream	1500		30000	35000	60000	BSC-MN
Jordi Villà-Freixa	Modulation of immune receptors function as a novel therapeutic strategy for acute CNS damage	630	70	120	60	180	BSC-MN
Jose Luis Fernandez Abascal	Existence of the liquid-liquid critical point in supercooled water	84		500	500	0	BSC-MT
José Luis Velasco	Monte Carlo NC simulations in fusion reactor-relevant conditions	270	70	300	30	1000	BSC-MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Jose Miguel Reynolds	Understanding and optimizing turbulent transport simulations in stellarator plasmas with the GENE gyrokinetic code	1000		5000	2000	5000	BSC-MN
Juan Jose Novoa Vide	Understanding the nature of the driving force of the phase transitions in switchable phenalenyl-base molecular materials	100	20	10	80	0	BSC-MN
Juan José Palacios Burgos	Molecular Kondo Project - III	400	50	300	200		UMA
Kendall N. Houk	Conferring natural enzymes new synthetically useful functionalities	57,6		2000	2000	0	BSC-MT
Konstantin Neyman	Towards more realistic modelling of industrially important Pd/CeO <sub>2</sub> and Pt/CeO <sub>2</sub> catalysts	768		900	900	100	UZ
Leonardo Pardo	New strategies in GPCR drug discovery	436		5000	5000	100	BSC-MN
Maite Alducin Ochoa	Competition between phonons and electron-hole pair excitations in ab-initio molecular dynamics simulations of gas/surface reactivity	138,24		150	150	0	BSC-MN
Manuel Alcamí	Fragmentation and reaction dynamics of charged and excited molecules in gas phase	310		300	500	0	UC
Manuel García-Villalba	Direct Numerical Simulations of 3D flows over flapping wings	250		4000	1000	5000	BSC-MN
Marcel Swart	Interaction of substrate with taste receptors	59,04		2000	2000	0	BSC-MT

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Molecular-level understanding of hydrogen activation on copper-ceria catalysts for methanol synthesis		17	400	300	25	BSC-MN
Mercedes Boronat	Characterization of Cu active centers in Cu-zeolite catalysts for the selective reduction of NOx	230		200	300		UV
Michele Amato	Understanding Polytypism in Group IV Nanowires from an Ab initio perspective	300	150	20	20	20	IAC
Nuria Lopez	Synthesis-structure-activity relationships for surfactant coated metal nanoparticles		230	1000	500	150	BSC-MN
Nuria Lopez	Turning Metal-Organic Frameworks into active, stable and selective Catalytic Materials (1st. period)	900		1000	500	150	BSC-MN
Oscar Flores	Numerical Simulation of Mixing Layers with variable density	300	30	500	250		UPM
Pablo Fosalba	The MICE project -2. Volume and mass resolution effects on small-scale dark matter clustering	300	100	15000	15000	50000	BSC-MN
Pablo Pou Bell	New Frontiers on Scanning Probe Microscopies: charge density distribution, subsurface resolution and atomic manipulation with the force and the electric current studied by First Principles simulations.	505		2000	1000	2000	BSC-MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Pietro Vidossich	Towards the design of isoform-selective adenylyl cyclase inhibitors for the study of signaling cascades: a molecular simulation study	510	45	1000	1000		UV
Ramiro Logares-Haurie	Microbial Oceanomics using Next-Generation Sequencing (454/Illumina)	258		7000	4000	2000	BSC-MN
Riccardo Rurali	Nanoporous silicon for thermoelectric applications		40	500	500	200	BSC-MN
Roberto san jose	Development And Consolidaton Of Geo-Spatial Sustainability Services For Adaptation Of Environmental And Climate Change Urban Impacts (DECUMANUS)	750	89	6000	12000	1000	BSC-MN
Roberto san jose	European framework for online integrated air quality and meteorology modelling	300	100	6000	12000	1000	BSC-MN
Rubén Pérez	First-principles simulations of metal oxide surface chemistry and defects aided by scanning probe microscopies	450		3000	1000	2000	UPM
Santiago Aparicio	Acid Gas Removal by Ionic Liquids: a Computational Approach		40	100	100	100	UMA
Santiago Aparicio	Acid Gas Removal by Ionic Liquids: a Computational Approach		13	100	100	100	UPM
Santiago Badia	Improving the scalability of balancing substructuring domain decomposition methods for computational fusion	250		100	400	1000	BSC-MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Sascha Husa	Coalescence of Black Hole Binary systems	720	80	1000	2500	5000	BSC-MN
Sergio Diaz Tendero	Ab initio molecular dynamics of photovoltaic organic self-assembled monolayers adsorbed on metal surfaces	175	100	400	600	0	BSC-MN
Victor Martin Mayor	Random Field Ising Model in four spatial dimensions and beyond	300		300	30	1000	BSC-MN
Xevi Biarnés	Dynamics and Stability of Novel Polymersome Formulations for Drug Delivery	260		700	700	700	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 rellenada la información, el equipo de soporte local del site de asignación se pondrá en contacto con los usuarios para proporcionar la información necesaria.