

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 2015

Barcelona, Octubre 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 40,5 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), 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), Instituto Tecnológico de Canarias (ITC), Consorci de Serveis Universitaris de Catalunya (CSUC), CénitS-COMPUTAEX (CENITS), Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León (FCSCL) y Universidad Autónoma de Madrid (UAM) .

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 2016.

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.

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Alfredo Levy Yeyati	Transient transport properties of superconducting quantum dots	400		200	200		IAC
Antoni Planas	Probing Conformational Selection in a Glycosyltransferase Structure by Bias-Exchange.	260		700	700		UPM
Antonio Fernandez-Guerra	Exploring the uncharted protein regions of the ocean microbiome	300		3000	3000		UZ
Antonio Rodríguez Fortea	Analysis of the ultrafast charge transfer in organic photovoltaic devices based on endohedral metallofullerenes: effect of the solvent	765		2000	2000		UPM
Assensi Oliva	Large eddy simulations of the flow past a circular cylinder. Flow control mechanism by means of surface-roughness.	1081		400	2048	2048	BSC/MN
Blanca Biel	Design and characterization of the physical properties of distorted nanographenes	600		500	500		IAC
Carlos Palenzuela	Modeling the coalescence of magnetized neutron stars	405		2000	10000	5000	BSC/MN

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Carlos Vega	Ice crystallization from aqueous solutions		150	500	100		IAC
Carme Rovira	Conformational free energy landscapes of carbohydrates. Implications for catalysis in carbohydrate-active enzymes.	666		2500	2500	3000	BSC/MN
		128		2000	2000	3000	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
César González Pascual	Adsorption of small inorganic molecules on defects and grain boundaries in 2D materials	53		1000	1000		UC
Claudio Dalla Vecchia	Environment Driven Galaxy Evolution (EDGE)	2000		24000	24000	50000	BSC/MN
Daniel Crespo	Flow-induced anisotropy in metallic glasses	110		400	100		CENITS
Daniel Mira	Prediction of stabilization mechanisms for lean-premixed flames in a downscale stage combustor using large-eddy simulation.	800		5000	5000	5000	BSC/MN
Edilberto Sánchez	Electrostatic microinstabilities and zonal flows in stellarator plasmas	700		4000	1000	4000	BSC/MN
Elena Khomenko	Simulations of waves and instabilities in partially ionized plasmas	880	220	5000	5000	5000	BSC/MN
Eliseo Ruiz	Looking for High Conductance Molecules		200	120	20	120	BSC/MN
Emilio Artacho	Study of 2-dimensional nanoconfined water from ab initio simulations	700		500	200	200	BSC/MN
Ernest Giralt Lledó	Discovery of new peptidic BBB-shuttles for therapeutic application	250		800	500		UAM

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Fco. Javier Luque Garriga	Activation of human cystathionine beta-synthase: effect of allosteric activators and mutations	553		4	2	1000	BSC/MN
		175		4	2	1000	BSC/MT
Feliu Maseras	Homogeneous versus heterogeneous catalyst: Catalytic Reduction in Surfactant Coated Nanoparticles (2nd period)	875		1000	500	150	BSC/MN
Fernando Martín	XUV/X-ray laser pulses for ultrafast electronic control in molecules	600		300	1000	1000	BSC/MN
Fernando Moreno-Insertis	Jets and eruptions in the solar corona: a new view	1600		2000	4000	5000	BSC/MN
Francesc Illas	Structure and reactivity of Au nanoparticles supported on MoC, improving catalysts for the low temperature water gas shift reaction	1622		900	1000	1000	BSC/MN
Francesc Illas	Zirconia Nanoparticles for Catalytic Applications: Size, Shape and Composition from Density Functional Theory	599		900	1000	1000	BSC/MN
Francesco Luigi Gervasio	The effect of the oncogenic mutations on the conformational landscape of B-RAF kinase.	500	500	2000	3000	1000	BSC/MN
Giancarlo Franzese	Hydration force in the supercooled regime of water: a Molecular Dynamics study	250		200	100		ITC
Grigory E. Astrakharchik	Diffusion Monte Carlo simulation of quantum gases and solids.	95		50	300	1000	BSC/MT

Lider	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	600		15000	45000	200000	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	211		200	300		UV
Javier Carrasco	Towards new oxynitride phases for cathodes in Li-ion batteries		150	300	350		UV
Javier Trujillo Bueno	The Small-scale Magnetic Activity of the Quiet Solar Photosphere	1200	400	4000	60	1000	BSC/MN
Jean Kormann	3D elastic full waveform inversion for the subsurface imaging: application to real seismic data set	1550		4000	4000	5000	BSC/MN
Jorge Iniguez	First-principles investigation of phase-change effects in room-temperature multiferroic bismuth cobaltite		100	100	125		FCSCCL
Jose E. Roman	GPU codes for plasma physics simulations	150		800	800	1000	BSC/MT
Jose Luis Fernandez Abascal	Computer simulation of ionic solutions		85	500	500	1000	BSC/MT
Josep M. Poble	Polyoxoanions in Water Solution	645		50	250		FCSCCL
Kendall N. Houk	Computational exploration and design of new epoxide hydrolase variants	57,6		3000	3000	1000	BSC/MT

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Konstantin Neyman	Structure and surface composition of Ni-based bimetallic nanoparticles as catalysts	260	100	900	900		UZ
Leonardo Pardo	Activation of the 5ht6 serotonin receptor	430		2000	2000		CSUC
Manel Perucho Pla	Relativistic outflows in binary stars and active galaxies	500		2000	2000		UV
Manuel Alcamí	Fragmentation of biomolecules from selected valence-hole states.		100	300	500	0	BSC/MN
Marcel Swart	Interaction of taste enhancers with umami taste receptors: study of the molecular mechanism of umami taste synergism		64,8	3000	3000	1000	BSC/MT
Marcel Swart	Spinning Resonance Raman spectroscopy		160	200	400	0	BSC/MN
Marco Bernasconi	First-principles simulation of the heterogeneous crystallization of chalcogenide alloys for phase change memories	500		120	180		UC
Maria Gonçalves Ageitos	Modeling aerosol-radiation interaction and its impact on the Mediterranean climate	100		8000	500	8000	BSC/MN
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Rational design of noble-metal free catalysts for the dry reforming of methane	245	100	400	300		UV
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Understanding the nature of Au species in Au/ceria model catalysts	1500	380	400	300	25	BSC/MN

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Mercedes Alfonso Prieto	Structural and mechanistic insight into cancer-associated mutants of isocitrate dehydrogenase.	360		2000	2000	3000	BSC/MN
		160		2000	2000	3000	BSC/MT
Nicola GA Abrescia	High-resolution structures of whole viruses by cryo-electron microscopy techniques	150		1500	2000		UMA
Ramiro Logares	Microbial Oceanomics using High-Throughput DNA-Sequencing and High-Performance Computing	368,64		7000	5000		UC
Riccardo Rurali	Kapitza Resistance Evaluated at Metal Insulator Nano Interfaces	165,885		500	500		CSUC
Roberto San Jose	Urban climate atlas and health impact DECUMANUS premium services	792,58		8000	12000	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
Roger Guimera	Inference for time-evolving complex networks	4		200	20	1000	BSC/MT
Rubén Pérez	Atomic-Scale Stick-Slip Friction in a Liquid Environment	382		2000	2000		UPM
Rubén Pérez	Atomistic mechanisms for oxygen intercalation on graphene on metals	365		3000	1000		UPM
Rubén Pérez	Hydration Properties of Single-Stranded DNA Films		238	3000	3000	3000	BSC/MT
Sascha Husa	Merger and gravitational wave signal of non-precessing black holes with large spins	1440	360	2000	2500		FCSC

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Sergey Kozlov	Ternary alloy particles for improved oxygen reduction reaction catalysts	550		400	400		UZ
Sergio Zlotnik	Dynamics of double-polarity subduction processes and the evolution of the Western Mediterranean	1200		2000	1000		UV
Shimpei Futatani	Non-linear MHD modelling of pellet injection for ELM control in fusion plasmas	1500	482	5000	10000	10000	BSC/MN
Sílvia Osuna	Markov State Models for enzyme design	288		3000	3000	1000	BSC/MT
Stefan Bromley	Stability of TiO ₂ -SiO ₂ mixed oxide nanomaterials	1000		1000	2000		UMA
Xavier Barril	Water displaceability in bromodomains: application in ligand design	95		2048	10	1000	BSC/MT

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.