

# 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 2016

Barcelona, Octubre 2016

## 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 46 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), 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 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 Febrero de 2017.

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](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
Alberto Sanchez	Scale-able Bridges between Molecular and Macroscopic Dynamics	105		1000	10	1000	BSC/MT
Alejandro Caceres	A Co-splicing Map across 54 Human Tissues	63		500	0		UPM
Alfredo Levy Yeyati	Coherent control of Andreev bound states in superconducting quantum dots	225		400	400		UC
Annapaola Migani	Coverage-dependent two-photon photoexcitation at the H <sub>2</sub> O/TiO <sub>2</sub> (110) interface	207		800	800		UPM
Antoni Planas	Protein conformational changes of a Mycobacterium tuberculosis glycosyltransferase. Activity: Metadynamics in solution.	270		1000	1000		UPM
Antonio Fernandez-Guerra	Exploring the uncharted protein regions of the ocean microbiome	100		5000	5000		UZ
Antonio Muñoz Mateo	Flow instabilities in two-component 2D Bose-Einstein condensates	113		300	800		CENITS
Antonio Rodríguez Fortea	Analysis of the ultrafast charge transfer in organic photovoltaic devices based on endohedral metallofullerenes	260		2000	2000	1000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Assensi Oliva	Computations of 3D Taylor bubbles in a broad range of flow conditions		192	400	2048	2048	BSC/MN
Assensi Oliva	Flow over a realistic car model: Turbulence structures and wheel rotation effects	750		5000	5000		CESGA
Blanca Biel	Transport and structural properties of Van der Waals few layered A-RAM devices	650		500	500		UMA
Carlos D. Pérez Segarra	DNS of 3D turbulent sprays with the aid of adaptive mesh refinement and low dissipative advective schemes	750		2000	2000		CESGA
Carlos David Pérez Segarra	Wall Resolved LES Simulations at High Reynolds on Airfoils at Large Angles of Attack.	1000		600	2048	2048	BSC/MN
Carlos Vega	Polymorphic competition in ice crystallization along pressure	998		750	200		UPM
Carme Rovira Virgili	Conformational free energy landscapes of sugar-like molecules. Implications for catalysis in carbohydrate-active enzymes	560		2500	2500	3000	BSC/MN
		128		2100	2500	3000	BSC/MT
Carme Rovira Virgili	Elucidating the catalytic mechanism of engineered glycosidases and glycosyltransferases	512		2500	2500	3000	BSC/MN
		192		2500	2500	3000	BSC/MT
César González Pascual	Electronic transport and atomic characterization of metal contacts for 2D materials	300		500	500		UV
Daniel Mira	Generation of Eulerian models for a downscale can combustor using Lagrangian particle tracking with large-eddy simulation	1400		5000	5000	5000	BSC/MN
David Mateos	ShockWave Evolved Collisions		320	5120	5120	128	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Edilberto Sánchez	Global gyrokinetic simulations in Wendelstein 7-X configurations with EUTERPE	650		12000	3000	14000	BSC/MN
Edilberto Sánchez	Turbulence simulations in stellarator plasmas with EUTERPE gyrokinetic code	650		12000	3000	14000	BSC/MN
Eleftheria Exarchou	Understanding the sources of model bias in the Tropical Atlantic	580		7160	7160	1000	BSC/MN
Emilio Artacho	Studying non-linear electronic response in finite and infinite systems using TDDFT	400		1000	300	300	BSC/MN
Enric Canadell	Fluorine-based $S = \frac{1}{2}$ kagome lattices: a new paradigm in the search for quantum spin liquids.	239,6		50	50		UV
Ernest Giralt Lledó	Rational design of peptidomimetics targeting vascular epidermal growth factor (VEGF) protein	1500		900	500		FCSC
F. Javier Salvador	Study of atomization using Direct Numerical Simulation (DNS)		200	5000	5000	5000	BSC/MN
F.Xavier Trias	Building a new subgrid characteristic length for Large-Eddy Simulation		240	250	3072	3072	BSC/MN
F.Xavier Trias	Direct numerical simulation of turbulent flow at high Reynolds number over a backward-facing step		240	500	3000	3000	BSC/MN
Fco. Javier Luque Garriga	Constant pH Replica Exchange Molecular Dynamics of the M2 Channel of Influenza A Virus		230	4000	3000	1000	BSC/MN
Fco. Javier Luque Garriga	Entropy/Enthalpy control of the hexacoordination process in hemoglobins	314		4000	3000	1000	BSC/MT
Fernando Martín	Attosecond atomic and molecular dynamics	800		300	1000	1000	BSC/MN
Fernando Martín	Ultrahigh pressure chemistry at the nanoscale	200		200	200		UPM



Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Fernando Mellibovsky	Active flow control of boundary layer separation in airfoils at high angle of attack using fluidic oscillators	50	20	1200	1200		IAC
Fernando Moreno-Insertis	Eruptions and heating in the solar corona	1350		2000	10000	5000	BSC/MN
Ferran Feixas	The molecular basis of R513 arginine recognition and methylation in cardiac conduction disease	57,6		5000	5000	1000	BSC/MT
Francesc Illas	Computational screening of transition metal carbides and oxides for CO <sub>2</sub> activation: feeding the machine learning algorithm	1474		900	1000	1000	BSC/MN
Francesc Illas	Computational Study of the Reducibility of Nanostructured Zirconia via Hydrogen Adsorption and Water Desorption	654		900	1000	1000	BSC/MN
François Massonnet	Ensemble sea ice data assimilation for polar prediction	800		7000	20000	1000	BSC/MN
Gregori Ujaque	Cyclic vs acid/base proton transfer in protodeauration step: a particular case with general implications	350		500	1200		UV
Gregorio Herdoiza	Charm physics on fine lattices	950		40000	20000	2000	BSC/MN
Grigory E. Astrakharchik	Quantum gases in optical lattices as a tool to study the ground-state supersolidity	90		50	500	1000	BSC/MT
		200		300	200		UAM
Gustavo Yepes	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	900		20000	80000	350000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Ignacio Pagonabarraga	Emerging structures in actuated and active suspensions	1850		4000	4000	4000	BSC/MN
Ivette Rodriguez	Boundary layer development and turbulent structures in airfoils at high lift	741		2000	4000		CESGA
Ivone Jiménez-Munt	Modeling the Topographic Evolution of Iberia (MITE)	700		1600	2000		FCSCCL
Javier Carrasco	Assessment of a new allotrope of silicon as a potential anode material for sodium-ion batteries	354		150	200		UV
Javier Carrasco	Enhancing Ionic Conductivity of Lithium Garnets through Cationic Doping		61,6	200	250	30	BSC/MN
Javier Honrubia	Particle-In-Cell simulations of laser-driven ion acceleration in hollow cone targets	30	200	50	500		UPM
Javier Trujillo Bueno	Radiative Transfer Modeling of the UV Spectropolarimetric Observations Obtained with CLASP		320	4000	60	1000	BSC/MN
Jeremías Likerman	3D thermomechanical evolution of oceanic lithosphere	41	100	5000	1000		FCSCCL
Joan Baiges	Direct numerical simulation of the [s] fricative sound production inside the vocal tract at in-vivo flow conditions.		70	300	300	300	BSC/MN
Joan Torras Costa	Bioinspired nanoscale materials for drug delivery	970		500	200	500	BSC/MN
Jordi Torra i Roca	Gaia: Cyclic Data Processing and Gaia Catalogue Simulations	750		90000	120000	160000	BSC/MN
José Miguel Alonso Pruneda	Charge Density Waves at Grain Boundaries in Transition Metal Dichalcogenides	460		20	50		UV

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
José Miguel Alonso Pruneda	Competition between Charge Density Waves and Superconductivity in single layers of transition metal di- and tri-chalcogenides	737,3		100	30		IAC
Juan Jose Novoa Vide	Towards the rational design of new switchable dithiazolyl-based bistable magnetic materials	553		10	80	1000	BSC/MN
Juanjo Lozano	Colorectal Cancer Research: Genetic predisposition to colorectal cancer, Implications of copy number variants of the genome in the etiology and progression of colorectal cancer, Biomarker development for noninvasive detection	30		18000	25000		BSC/MN
Konstantin Neyman	Structure and surface composition of Pt-based bimetallic nanoparticles for catalysis and beyond	595		900	900		UZ
Linda Zotti	Electron transport through blue copper azurin		100	3000	3000	3000	BSC/MT
		180		300	300		UV
Manel Juan Otero	ALLORESPONSE TO ANTI-LEUKEMIA (CLL): REASSESSING THE ROLE OF CD4+ T CELLS		25	2000	800		UAM
Manel Soria	Direct Numerical Simulation of Synthetic Jets. Application to Active Flow Control	261		400	1024	1024	BSC/MN
Maria José Caturla Terol	Molecular dynamics simulations of manipulation and irradiation of graphite and graphene		100	2000	1000	2000	BSC/MN
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Catalytic Activation of CH4 in natural gas: Structure-reactivity relationships in dry reforming catalysts	600		400	300		CSUC
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Revealing the active site for CO oxidation on Au/ceria model catalysts	1806		400	300	25	BSC/MN
Marta Reynal-Querol	Computing pixel base socio-economic measures to analyze economic development	700		4000	4000	4000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Martin Obergaulinger	Engines of long gamma-ray bursts in massive stars		200	2000	2000	1000	BSC/MN
Mercedes Alfonso Prieto	Modulation of ligand-gated ion channels by light-switchable molecules		32	2000	2000	3000	BSC/MN
		120		2000	2000	3000	BSC/MT
Modesto Orozco López	MODEL-tox. Construction of an MD library of toxicology relevant proteins in the human proteome	1500		8000	500	8000	BSC/MN
Natalia Calvo Fernández	Porting CESM1.5 and running WACCM5 on MareNostrum 3		62	6000	5000	12000	BSC/MN
Neven Fuckar	Impact of increased horizontal resolution on processes underlying climate variability and change	672		2000	10000	1000	BSC/MN
Nicola GA Abrescia	Structure of large viruses with a membrane studied by high-resolution cryo-electron microscopy	132		1500	2000		UMA
Pablo Chacon	Understanding dynamic stability of microtubules	442		1200	1200		UV
Pablo Fosalba	Fast approximate mocks for the optimal exploitation of galaxy surveys		79,872	20000	20000	20000	BSC/MN
Pablo Ordejón	Thermal conductivity of 2D materials from first principles	380		300	400	1000	BSC/MN
Pablo Ordejón	Thermal energy storage in molten salts and nanofluids	300		500	150		UC
Pau Figueras	New frontiers in numerical general relativity	2000		5000	5000	5000	BSC/MN
Prof. Dr Mervi Mantsinen	Gyrokinetic Simulations for Characterizing Fast Ion Stabilization of Plasma Turbulence in ASDEX Upgrade		397,2	5000	5000	5000	BSC/MN
Ramiro Logares	Exploring the marine microbiome	23	20	2000	1000		UAM
Roger Estrada	Dynamic study of the effect of point mutations on STAT3 stability to induce its inhibition.	30		700	200	200	BSC/MT
Roger Guimera	Inference for time-evolving complex networks	9,44		100	100	100	BSC/MT

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Rubén Pérez	Controlling mechanical properties of self-assembled mono-layers via their hydration	350		5000	5000	5000	BSC/MT
Rubén Pérez	Friction Force Microscopy in water: towards more realistic surface topologies	378		4000	4000		UC
Rubén Pérez	Machine learning of hybrid organic/oxide interfaces	300		1500	1500		IAC
Santiago Badia	Performance and scalability analysis of balancing domain decomposition by constraints associated with subobjects	200		400	800	1000	BSC/MN
Sascha Husa	Highly resolved gravitational wave signals from black hole mergers	1200		2000	6000		CESGA
Sergio Zlotnik	Dynamics of double-polarity subduction processes and the evolution of the Western Mediterranean		204,8	1600	1600	1600	BSC/MN
Sergiu Arapan	A genome materials initiative for the discovery of future and strategic permanent magnets.	415		2000	2000		UZ
Shimpei Futatani	Non-linear MHD modelling of pellet injection for ELM control in fusion plasmas		385,792	5000	15000	10000	BSC/MN
Silvia Osuna	The role of distal mutations and allosteric regulation on the catalytic efficiency of tryptophan synthase	288		5000	5000	1000	BSC/MT
Stefan Bromley	Evaluating the Potential Experimental Realisation of 2D Materials based on Radical Building Blocks	370		1000	2000		UMA
Vicente Galiano	Looking for antivirals for Zika and Dengue Virus using molecular docking and molecular dynamics studies	50		200	200		IAC
Victor Homar Santaner	Predictability of Mediterranean severe weather: contribution of remote-sensing observations system to HyMeX	820		20000	1000	1000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Xavier Barril	Identification of cryptic pockets with organic co-solvents	100		250	250	1000	BSC/MT
Yolanda Prezado	New approaches in radiotherapy	19	20	20	40		UC

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