

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 2012

Barcelona, Junio 2012

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 30,5 millones de horas, 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).

En este periodo se han recibido peticiones para MinoTauro y se ha realizado la asignación correspondiente, un supercomputador con 185,78 Tflops de rendimiento pico, con 128 nodos conectados por una red IB, y cada nodo compuesto por 2 procesadores Intel (6 cores cada uno), 2 tarjetas GPU NVIDIA M2090, 24 GB de memoria, y disco local SSD de 250 GB. El Comité de Acceso ha asignado un total de 1,2 millones de horas sobre MinoTauro.

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 Setiembre de 2012.

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 solicita el uso en exclusiva de un nodo (que tiene cuatro o dos procesadores, dependiendo de la máquina) durante 1 hora, se considerará el uso de 4 ó 2 horas.

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 videos, presentaciones, y cualquier otro material, para ser utilizado como material divulgativo de la RES.

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 GRID superscalar (<http://www.bsc.es/grid/gridsuperscalar>). 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

4.4 Acceso a Altamira, nueva arquitectura

El nodo de la Universidad de Cantabria ha actualizado el sistema Altamira. Aunque el nombre del sistema, se ha renovado completamente el sistema. El nuevo sistema Altamira está basado en servidores IBM con procesadores Intel SandyBridge de última generación interconectados mediante una red de muy alto rendimiento que permite alcanzar de modo sostenido una potencia superior a 74 Teraflops. La capacidad disponible para las RES es del 20%, aunque en este periodo y por estar en su fase final de instalación, el acceso garantizado a Altamira sólo será a partir de Setiembre.

4.5 Instalación de nuevos sistemas y ampliación de existentes

Esta previsto que durante el periodo 2º de 2012, desde Julio a Octubre, se empieza la actualización de diferentes sistemas de la RES, así como la instalación de nuevos nodos. Es el caso particular de MareNostrum, que se espera que a finales de Agosto o Setiembre, pare su producción para dar paso a la instalación del nuevo sistema. El Comité de Acceso ha decidido realizar la asignación completa de la capacidad para todo el periodo, de forma que cada nodo de la RES deberá vigilar para que los usuarios tengan una vez finalizada la actualización de sistemas, una capacidad de uso equivalente a la asignada.

En cualquier caso, se recomienda a todos los usuarios que avancen todo lo posible su producción al inicio del periodo.

5 Listados y asignaciones sobre MinoTauro

A continuación se incluye la lista de las actividades que tendrán acceso a MinoTauro, con las asignaciones en miles de horas, y las capacidades en Gigabytes de los diferentes sistemas de ficheros.

Lider	Título	Asignación	Projects	Scratch	HSM
Constantia Alexandrou	Disconnected contributions for the eta' and the nucleon form factors from GPU's	128	5000	5000	5000
Xavier Barril	Kinetics vs Thermodynamics: Comparison of Steered Molecular Dynamics (SMD) and alchemical transformations for Lead Optimization	40	500	100	1000
Manuel Jesús Castro Díaz	Analysing the parallel capabilities of HySEA multi-GPU solver. Application to the simulation of tsunamis generated by landslides.	350	2000	500	1000
Ramon Gómez Gesteira	Massively parallel Smoothed Particle Hydrodynamics scheme using GPU clusters.	76	100	5000	10000
Kendall N. Houk	De novo design of enzymes	20	2000	1000	1000
Victor Martin Mayor	Anisotropic Heisenberg spin-glasses on the GPU	300	1600	300	1000
Jose E. Roman	New CG-type Eigensolvers in the SLEPc Library	5	20	20	1000
Carme Rovira	Mechanistic insight into N-glycan processing by ab initio metadynamics	144	3600	3200	5000
Carme Rovira	Ab initio metadynamics simulations of the binding of peptides to gold nanoparticles	144	3500	3800	5000
Marcel Swart	Catalytic mechanism of the Complex II family enzyme Succinate:quinone oxidoreductase (SQR)	34,56	1000	1000	1000
Jordi Teixidó	Development of novel treatments for myotonic dystrophy: in vivo drug discovery	25	500	200	4000

6 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 a UPM/CeSViMa se indican en miles de horas correspondientes a dicha máquina basada en Power7, que ofrece mayor rendimiento que PPC (se ha considerado un rendimiento a la baja de 2x, de forma que el número de horas asignadas se corresponde en la mayoría de los casos a la mitad de las horas solicitadas).

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Manuel Alcamí	Properties of epitaxial graphene on Ru(0001)	450		300	500		UPM
Santiago Badia	Improving the scalability of balancing substructuring domain decomposition methods for computational fusion	500		100	200	1000	BSC
J. J. Barbero	QM/MM metadynamics Studies on the beta-Galactosidase Catalytic Mechanism	135		1200	1200	5000	BSC
Xavier Barril	Kinetics vs Thermodynamics: Comparison of Steered Molecular Dynamics (SMD) and alchemical transformations for Lead Optimization	310		700	40	1000	BSC
Mercedes Boronat	Ketonic decarboxylation over metal oxides: MgO and ZrO ₂	260		150	250		UPM
Stefan Bromley	Understanding the dynamics of water-silicate interactions at the nanoscale		74	200	400	1000	BSC
Natalia Calvo Fernández	IMPACT OF SOLAR FORCING ON FUTURE CLIMATE CHANGE USING A CHEMISTRY CLIMATE MODEL – FINAL STAGE -	592		1200	1500	15000	BSC
Albert Cirera Hernández	Equilibrium properties of Silicon Quantum dots for Solar Cells Application: Study of diameters and dopants (EU project FP7-NMP-245977)		22	50	50	1000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Avelino Corma Canós	Gold-catalyzed C-C bond forming reactions: identification of active sites for phenylacetylene homocoupling in homogeneous and heterogeneous gold catalysts	550		200	300	100	BSC
Daniel Crespo	Dynamic structure factor of Bulk Metallic Glasses determined by Molecular Dynamics simulation	600		500	500	1000	BSC
Francisco J. Doblas-Reyes	Slow down of the global warming in the early XX1st century	720		300	3500	5000	BSC
Luis Errea	GridTDSE: direct numerical resolution of TDSE in atomic and molecular collisions	48		50	50	10	UMA
Javier Fdez Sanz	Catalysis modeling: gold nanoparticles supported on yttrium modified anatase as efficient WGS and CO oxidation catalysts	270		700	700		UPM
Jose Antonio Font Roda	Building an improved catalog of gravitational waves from neutron star mergers	700	100	1200	1200	10000	BSC
Federico Gago	TARGETING THE DIMERIZATION INTERFACE OF LEISHMANIA TRYPANOTHIONE REDUCTASE IN THE SEARCH FOR NEW DRUGS	150		450	550	1000	BSC
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	First principles investigation of Ni/ceria nanocatalysts for water-gas shift reaction		140	250	200	1000	BSC
Rebeca García Fandiño	Transmembrane Ion Transport through alpha, gamma-Peptide Nanotubes	200		650	650		UZ
Manel Grifoll	Coupling wave-current-sediment transport (ROMS-SWAN) models in a high resolution coastal area.		20	150	50	1000	BSC
Elvira Guardia	Ab initio molecular dynamics study of aqueous non polar species close to a graphene sheet	480		150	50		IAC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Pilar Hernandez Gamazo	Testing new optimization methods for mixed action simulations	20		800	1000	20000	BSC
Victor Homar Santaner	Implementation of a High-Res Ensemble Kalman Filter for the Western Mediterranean	1000		500	200		BSC
Javier Honrubia	Fast ignition of inertial fusion targets		50	500	500	3000	BSC
Sascha Husa	Calibrating high order finite difference methods for evolving black hole binaries	540		700	1000	4000	BSC
Francesc Illas	Design of new catalysts for methanol synthesis: performance of Au/TiC		80	100	400	1000	BSC
Jorge Iniguez	Interface engineering in multifunctional oxides	100		100	150		UMA
Johannes Jaeger	Reverse-engineering embryo segmentation patterning in flies: exploring different scenarios	350		700	300	1000	BSC
Johannes Jaeger	Reverse-engineering mutant gene regulatory networks in Drosophila	350		400	100		IAC
Javier Junquera	First principles calculation of the thermoelectric properties of electron-doped SrTiO ₃ and hole-doped LaRhO ₃ in thin-film configuration	300		100	100		UV
Javier Junquera	Tuning of the electronic state of a 2-dimensional electron gas in PbTiO ₃ /SrRuO ₃ interfaces	300		100	100		UC
Elena Khomenko	Simulations of dynamics of partially ionized solar atmosphere	200		2000	2000	12000	BSC
Ramiro Logares-Haurie	Microbial Ocean-omics using traditional and next-generation DNA/RNA sequencing technologies	200		2000	400	1000	BSC
Josep M. Luis	1,3-dipolar cycloaddition of azomethine ylide to graphene sheets		70	50	100	1000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Francisco Javier Luque	Exploring a novel non-competitive inhibition mechanism of GSK3: Allosteric regulation by the marine compound palinurin	460		400	200	1000	BSC
Fernando Martin	XUV/X-ray laser pulses for ultrafast electronic control in molecules	1000		300	900	1000	BSC
Enrique Martinez Gonzalez	Constraints on inflationary models of the universe based on CMB data	112		1000	1000		UPM
Konstantin Neyman	Towards catalysts of new generation: Active sites of ionic Pt in nanostructured ceria		80	200	200	1000	BSC
Juan Jose Novoa Vide	CPMD study of the crystal thermal effects on the NCBDTA magnetic crystal: Vibrational thermal effect or phase transition?	262,8		50	60	1000	BSC
Assensi Oliva	Turbulent natural convection in enclosed cavities. On the role of transitional thermal boundary layers in the flow structure	950		250	2000	2048	BSC
Assensi Oliva	Towards the understanding of shear-layer instability mechanisms for drag reduction by means of advanced turbulence modeling	1000		150	900	4000	BSC
Pablo Ordejón	Electron-phonon coupling and CDWs in low-dimensionality crystals		50	100	100	1000	BSC
Salvatore Orlando	Radiative MHD shocks in density structured accretion streams of classical T Tauri stars		90	60	60		UV
Ignacio Pagonabarraga	Self assembly in active suspensions	400		1000	1000	3000	BSC
Matteo Palassini	Numerical study of disordered localized electronic systems using energy minimization	152		200	200		UPM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Ruben Perez	First-principles scanning probe calculations for the characterization of intermolecular interactions and the charge distribution at the atomic scale.	500	600	1500	1500		UPM
Manel Perucho Pla	Relativistic extragalactic jets: Interaction with stellar winds.	500		1000	1000	4000	BSC
Antoni Planas	Evidence of Conformational Selection in a Glycosyltransferase Structure?	640		450	450		UMA
Miguel Pruneda	Graphene heterostructures with 2D nanosheets.	230,4		70	100		ITC
Stephan Roche	Charge and Spin Transport in Topological Insulators	410		100	200		UZ
Luis Rodriguez	Ab Initio Molecular Dynamics Study of the Coordination properties of metal chelators relevant to the Alzheimer disease	160		200	700		UV
Jose E. Roman	New CG-type Eigensolvers in the SLEPc Library		25	200	500	1000	BSC
Carme Rovira	Mechanistic insight into N-glycan processing by ab initio metadynamics	450		1200	1200	5000	BSC
Carme Rovira	Ab initio metadynamics simulations of the binding of peptides to gold nanoparticles	225		1200	1200	5000	BSC
Angel Rubio	Optical response, excitons and electronic correlations in TiO ₂ nanomaterials: novel insights from a fully ab-initio many-body perturbation theory approach	900		700	700	1000	BSC
Angel Rubio	Quantum nonlocal effects in plasmonic nanostructures: bridging the gap between fully atomistic approaches and the classical descriptions of their electronic response		170	1000	800	2000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Eliseo Ruiz	Magnetism and Transport Properties of Magnetic Molecules on Surfaces and Nanostructured Systems	380		60	60	1000	BSC
Luis Raúl Sánchez Fernández	Dynamics of turbulent transport in tokamaks and stellarators	800		800	100	3000	BSC
Thomas Schafer	Ab initio study of organic molecule solvation by ionic liquids	1000	500	240	250	1000	BSC
Carles Serrat	Scaled Attosecond Physics	1000		2000	2000	6000	BSC
Ulrich Sperhake	Impact of Charge and Spin on Black-Hole Collisions	300		100	500		UZ
Daniel Stich	Imaging fields for time reversal in seismology		5	300	300		UMA
Marcel Swart	Catalytic mechanism of the Complex II family enzyme Succinate:quinone oxidoreductase (SQR)		20	50	200	1000	BSC
Jordi Torra i Roca	Gaia: Simulation of Telemetry Stream	1400		400	3800	18000	BSC
Joan Torras Costa	A study of the supramolecular structures of a chiral regioregular poly thiophene, and the role-playing between the solvent and the metal effects on the formation of chiral aggregates.		70	250	150	1000	BSC
Jesus Mari Ugalde Uribe-txeberria	PNOF theory: Towards biological applications	500		200	100	1000	BSC
Gregori Ujaque	Ru-catalyzed hydrogen transfer reactions in water		20	100	500	1000	BSC
Juan Manuel Vanegas	Role of hopanoids in the mechanical properties of model bacterial membranes and function of mechanosensitive channels	774		1000	300	1500	BSC
Carlos Vega	Ice crystallization	180		400	400		UV
Yang Wang	Photofragmentation of amino acids and nucleobases using quantum molecular dynamics		100	200	200	1000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Helvi Witek	Superradiant instabilities in astrophysical systems		30	250	500	2500	BSC
Gustavo Yepes	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	1200		4000	4500	85000	BSC

7 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.