

# 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 2012

Barcelona, Octubre 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 34,5 millones de horas (estandarizadas PowerPC), 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](mailto:support@bsc.es)

## 4.4 Instalación de nuevos sistemas y ampliación de existentes

Se está realizando actualización de MareNostrum y otros nodos de la RES en los primeros meses de este periodo. Se debe contactar con los equipos de soporte local para conocer en detalle la disponibilidad de cada máquina, que de forma general se resume en

- MareNostrum3 – BSC

Se espera que entre en producción a finales de 2012.

- Tirant – UV

Se actualizará a mediados de Noviembre, dejando de estar activo durante dos semanas. A partir de ese momento tendrá 4 veces la capacidad actual.

- La Palma – IAC

Se actualizará a finales de Noviembre, dejando de estar activo durante dos semanas. A partir de ese momento tendrá 2 veces la capacidad actual.

## 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
Carme Rovira	Ab initio metadynamics simulations of the binding of peptides to gold nanoparticles	128	1500	2500	3000
Carme Rovira	Elucidating the catalytic mechanism of retaining glycosyltransferases	128	2000	2000	3000
Fco. Javier Luque Garriga	Oligomerization of alpha-1-microglobulin triggered by heme binding	15	200	200	200
Grigory E. Astrakharchik	Diffusion Monte Carlo simulation of quantum gases and solids	30	100	300	40
Jordi Faraudo	GPU-accelerated simulations of all atomic and coarse grain models of soft matter systems	245	100	40	200
Kendall N. Houk	De novo design of enzymes	120,96	2000	2000	1000
Marcel Swart	Catalytic mechanism of the Complex II family enzyme Succinate:quinone oxidoreductase (SQR)	70	2000	2000	1000
Ramon Gómez Gesteira	Massively parallel Smoothed Particle Hydrodynamics scheme using GPU clusters.	82	100	10000	1000

Lider	Título	Asignación	Projects	Scratch	HSM
Sergio Diaz-Tendero	Structure, stability and spectroscopic properties of positively charged polycyclic aromatic hydrocarbons	140	300	500	1000
Victor Martin Mayor	Anisotropic Heisenberg spin-glasses on the GPU	350	1600	300	100
Xavier Barril	Conformational plasticity of ATP-lid in HSP90: Implications for drug design	145	800	100	100

## 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 BSC, UC y UPM/CeSViMa 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).

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Albert Cirera Hernández	Study of dopants in Silicon Quantum dots for Solar Cells Application (EU project FP7-NMP-245977)	64,0		60	60		ITC
Alberto García	Optimization and Exploration of an Orbital Minimization Scheme for ab-initio molecular-dynamics simulation in the SIESTA code	27,7		60	50		UC
Angel Rubio	Quantum nonlocal effects in plasmonic nanostructures: bridging the gap between fully atomistic approaches and the classical descriptions of their electronic response	283,3		1800	1000	1000	BSC
Angel Rubio	Ultrafast Electron Dynamics at alkali/ice structures adsorbed on Cu(111) from experiments and theory	333,3		1000	800	1000	BSC
Antoni Planas	Binding of glycosylated surfactants to concanavalin A	125,0		700	700		UPM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Antoni Planas	Evidence of Conformational Selection in a Glycosyltransferase Structure?	160,0		700	700		UPM
Assensi Oliva	Direct Numerical Simulations of channel flows with regime transition due to coalescence in gas liquid bubbly flows.	133,3	166,7	250	2048	2048	BSC
Assensi Oliva	Turbulent flow around a square cylinder at high Reynolds numbers: direct numerical simulation and regularization modeling	316,7		250	2048	2048	BSC
Assensi Oliva	Vortex dynamics and coherent structures in swirling flows	288,7		300	2048	2048	BSC
Avelino Corma Canós	Rationalization of the different reactivity of CeO <sub>2</sub> crystallographic facets from first principles calculations	240,7		200	300	1000	BSC
Ayse Gungor	Simulation of Roughness Effects in Separated Turbulent Boundary Layers	150,0		500	1000	1000	BSC
Carles Serrat	Scaled Attosecond Physics	100,0	166,7	6000	3000	3000	BSC
Carlos Vega	Ice crystallization	200,0		600	600		UV
Carme Rovira	Ab initio metadynamics simulations of the binding of peptides to gold nanoparticles	83,3		1500	2500	3000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Carme Rovira	Elucidating the catalytic mechanism of retaining glycosyltransferases	150,0		2000	2000	3000	BSC
Claudio Cazorla	The Phase Diagram of Bismuth Ferrite by Ab Initio Calculations	180,0		75	150		IAC
Daniel Crespo	Dynamic structure factor of Bulk Metallic Glasses determined by Molecular Dynamics simulation	200,0		1000	1000	1000	BSC
Daniel Stich	Imaging fields for time reversal in seismology	23,0		300	300		UV
Elena Khomenko	Simulations of dynamics of partially ionized solar atmosphere	50,0	50,0	8192	8192	8192	BSC
Eliseo RUIZ	Magnetism and Transport Properties of Magnetic Molecules on Surfaces and Nanostructured Systems	215,0		60	20	1000	BSC
Emilio Artacho	Study of bulk and nanoconfined liquid water from ab initio simulations	375,0		500	200		UPM
Enrique Martinez Gonzalez	Constraints on inflationary models of the universe based on CMB data	100,0		1000	1000		UPM
Fco. Javier Luque Garriga	Oligomerization of alpha-1-microglobulin triggered by heme binding	320,0		400	200	200	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Federico Gago	TARGETING THE DIMERIZATION INTERFACE OF LEISHMANIA TRYPTOPHANASE IN THE SEARCH FOR NEW DRUGS	50,0		450	550	500	BSC
Fernando Martin	XUV/X-ray laser pulses for ultrafast electronic control in molecules	333,3		300	1000	1000	BSC
Francesc Illas	Methane activation by metallic nanoparticles supported on MoC and Mo2C	146,0		300	2000	400	BSC
Francisco J. Doblas-Reyes	Slow down of the global warming in the early XXIst century	240,0		80	2500	5000	BSC
Gregori Ujaque	The Nature of Pd(0) precatalyst in Cross-Coupling Reactions	81,7		500	1500	200	BSC
Grigory E. Astrakharchik	Diffusion Monte Carlo simulation of quantum gases and solids.	33,3		50	10	40	BSC
Gustavo Yepes	The Marenostrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	666,7		8000	8000	85000	BSC
Hirotsada Okawa	Weighing light with supermassive black holes	133,3		1000	3000		UC
Ignacio Pagonabarraga	Self assembly in active suspensions	200,0		1000	2000	1000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Javier Fdez Sanz	Catalysis modeling: gold nanoparticles supported on yttrium modified anatase as efficient WGS and CO oxidation catalysts	350,0		1000	1000		UPM
Javier Junquera	First principles calculation of the thermoelectric properties of electron-doped SrTiO <sub>3</sub> and hole-doped LaRhO <sub>3</sub> in thin-film configuration	300,0		100	100		UV
Javier Junquera	Tunning of the electronic state of a 2-dimensional electron gas in PbTiO <sub>3</sub> /SrRuO <sub>3</sub> interfaces	83,3		100	0		UC
Jerzy Cioslowski	Benchmark Calculations on Few-Electron Harmonium Atoms	60,0		200	400	1000	BSC
Jesus Mari Ugalde Uribe-txeberria	Transition metal chemistry with PNOF5.	90,0		250	500	1000	BSC
Johannes Jaeger	Reverse-engineering embryo segmentation patterning in flies: exploring different scenarios	100,0	250,0	20	20		UZ
Jordi José	3D simulations of mixing in novae: the effect of the white dwarf composition and mass	160,0		4000	4000	2000	BSC
Jordi Ribas Ariño	Elucidating the mechanism of formation of the enamine intermediate in proline catalyzed aldol reactions in water	576,0		100	200		UV

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Jordi Torra i Roca	Gaia: Simulation of Telemetry Stream	566,7		500	7000	16000	BSC
Jorge Ferrer Marrades	Genomic regulation of transcription in Human Pancreatic Islets	3,3		1200	2000	4000	BSC
José Carlos Conesa	DFT modeling of ethane dehydrogenation catalysts	66,7		300	100	1000	BSC
Jose E. Roman	Eigensolvers for symmetric generalized eigenproblems in SLEPc	8,3		400	400	1000	BSC
Josep M. Luis	A comparison of the exohedral reactivity of the endohedral metallofullerenes (EMFs) M@C <sub>2v</sub> (9)-C <sub>82</sub> (M = Sc, Y, La, Ce, Gd, Lu, Er, Dy, Tb, Yb, Tm, Eu, Sm and Ti) in carbene addition.	355,0		50	200		UV
Josep M. Poblet	Polyoxometallates on surfaces as new molecular electronic devices and electron storage systems	166,7		50	30		UC
Juan Jose Novoa Vide	Ab initio molecular dynamics of organic ion-radical pairing in solution	163,8		5	60	1000	BSC
Juan Pablo Sanchez Serrano	Simulation study of Genomic Selection for increasing heat tolerance of livestock	405,0		1000	1000		IAC
Konstantin NEYMAN	Towards catalysts of new generation: Active sites of ionic Pt in nanostructured ceria	106,7		200	200	1000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Manuel Alcami	Charge transfer and self-assembly of molecules on modified metal surfaces	333,3		500	500		UC
Marcel Swart	Catalytic mechanism of the Complex II family enzyme Succinate:quinone oxidoreductase (SQR)	23,3	23,3	50	200	1000	BSC
Marcel Swart	Characterization of supramolecular host-guest cages	50,0	40,0	50	200	1000	BSC
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	First principles investigation of Ni/ceria nanocatalysts for water-gas shift reaction	200,0	133,3	300	100	1000	BSC
Massimiliano Stengel	First-principles study of multifunctional perovskite systems	78,3		500	1000	1000	BSC
Mercedes Boronat	Ketonic decarboxylation over metal oxides: MgO and ZrO <sub>2</sub>	350,0		200	200		UPM
Miguel Pruneda	Graphene heterostructures with 2D nanosheets.	350,0		100	200		UZ
Nuria Lopez	Post-synthetic modification of Metal-organic frameworks: an ab initio theoretical study (1st. period)	133,3	66,7	250	250	100	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Nuria Lopez	Study of the adsorption and reactivity of biomass-derived compounds on metallic surfaces in an aqueous environment: Ab Initio Molecular Dynamics studies on the structure of thick water layers. (1st. period)	166,7	83,3	1000	500	150	BSC
Pablo Ordejón	Electron-phonon coupling and CDWs in low-dimensionality crystals	68,0		100	100	1000	BSC
Perla Wahnón	Design and Characterization of Advanced Photovoltaic Materials with High Efficiency	265,0		500	800		UPM
Ramiro Logares-Haurie	Microbial Oceanomics using Next-Generation Sequencing	120,0		5000	500	1000	BSC
Rebeca García Fandiño	Transmembrane Ion Transport through alpha, gamma-Peptide Nanotubes	33,3	33,3	1000	1000	1000	BSC
Roberto San Jose	Fuel moisture content models to forest fire behaviour forecast	245,7		1000	2000	1000	BSC
Ruben Perez	First-principles simulations of defects on metal oxides and graphene sensed by scanning probe microscopies	250,0		1000	2000	2000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Santiago Badia	Improving the scalability of balancing substructuring domain decomposition methods for computational fusion	166,7		200	400	1000	BSC
Sascha Husa	Coalescence of Black Hole Binary systems	333,3		1000	2000	5000	BSC
Stefan Bromley	Understanding the dynamics of water-silicate interactions at the nanoscale	33,3	28,3	400	100	100	BSC
Stephan Roche	Longitudinal and Transverse Transport in Dirac-Cone Materials	123,3		150	200		UC
Ulrich Sperhake	Impact of Charge and Spin on Black-Hole Collisions	300,0		200	1000		UZ
Victor Homar Santaner	Implementation of a High-Res Ensemble Kalman Filter for the Western Mediterranean	100,0	100,0	1000	100	500	BSC
Victor Manuel Garcia Suarez	Role of impurities and vacancies on the electronic and transport properties of magnetic semiconductors	116,7		40	10		UC
Xavier Barril	Understanding the binding kinetics of Acetylcholine Binding Protein (AChBP) inhibitors	66,7		800	10	1000	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.