

# 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 2018

Barcelona, Junio 2018

## 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

La RES ha asignado este período 88,5 millones de horas, que se obtienen 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 las 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 Septiembre de 2018. En esta convocatoria de Septiembre, la cantidad de recursos disponibles

aumentará de forma significativa, al hacer redistribución de los recursos que el Centro Nacional de Supercomputación realiza a PRACE y a la RES. Con esta redistribución se espera dar cabida a mayor número de actividades o actividades con requerimientos de mayor capacidad, aunque no se cambia el límite superior de solicitud de horas por actividad.

Para mejorar como se comparten los recursos asignados entre las diferentes actividades, y evitar así las concentraciones de uso 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 15 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 (<https://www.bsc.es/research-and-development/software-and-apps/software-list/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.

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Adrià Gil-Mestres	IN SILICO NANOBIO SOLUTIONS: COMPUTATIONAL DESIGN OF BIOACTIVE METAL COMPLEXES AND POLYOXOMETALATES FOR MEDICAL APPLICATIONS		150	500	500		CESGA
Alejandro Luque Estepa	Electro-hydrodynamic simulation of the streamer-to-leader transition in lightning and other long electric discharges	4.600		1.000	2.000		BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Alicia Palacios	Laser-induced ultrafast processes in helium-like atoms and hydrogen halides	200		300	1.500	1.500	BSC/MN
Anne Dejoan	Direct Numerical Simulations of inertial particles settling in homogeneous isotropic turbulence	1.000		4.500	4.500		IAC
Blanca Biel	Lateral heterostructures and grain boundaries in 2D materials	200	100	1.000	700		UC
Carlos David Pérez Segarra	Towards the feasibility of high fidelity CFD simulations of high Reynolds number wall-bounded flows. A new time filtering strategy.	2.174		600	2.048	2.048	BSC/MN
Carlos Marti Gastaldo	Chemical Engineering of Photocatalytic Tinatium-Organic Frameworks Based on Siderophore-type Linkers	414,12		500	800		UV
Carme Rovira Virgili	Elucidating molecular mechanisms of glycosidases involved in disease	500	217	12.300	12.300	12.300	BSC/MN
			45	12.300	12.300	12.300	BSC/MT
Carme Rovira Virgili	Deciphering mechanisms of glycosidic bond biosynthesis	717		12.300	12.300	12.300	BSC/MN
		131		12.300	12.300	12.300	BSC/MT
Carmen Domene	Understanding the mechanisms of permeation in K <sup>+</sup> channels	800		500	1.000		UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Claudia Cardoso	Electronic properties of van der Waals heterostructures	400	100	250	500		UZ
Daniel Argueso Barriga	Impact of resolution and convective scheme on rainfall simulation in the Maritime Continent	2.820		30.000	4.000	25.000	BSC/MN
Daniel Mira Martínez	Assessment of flashback resistance of a swirl-stabilized hydrogen flame with a non-swirling axial jet	1.600		15.000	10.000	5.000	BSC/MN
Edilberto Sánchez	Global gyrokinetic simulations in stellarators with EUTERPE	3.100		15.000	2.000	14.000	BSC/MN
EDUARDO SANZ	Nucleation of crystalline sodium chloride from aqueous solutions	300	100	500	100		UPM
Fco. Javier Luque Garriga	Exploring novel anti-influenza compounds: Preventing the resistance mechanisms in hemagglutinin	2.350		4.000	3.000		UV
Felipe J. BLas	Prediction of crystallisation of hydrates of THF, THF+CH <sub>4</sub> , and THF+CO <sub>2</sub> from computer simulation	561		750	200		UPM
Fernando Martín	Attosecond coupled electron and nuclear dynamics in molecules	1.500		300	2.500	2.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Fernando Martín	Catalyzed chemical reactions on a graphene/Ru(0001) substrate	460		300	500		UPM
Francesc Illas Riera	Methane activation by transition metal carbides based catalyts	1.682		900	1.500	1.500	BSC/MN
Francesc Viñes	Transition Metal Activity Towards Carbon	300		500	700		UMA
Gerasimos Konstantatos	On the Study and Modelling of AgBiS <sub>2</sub> Quantum Dots with Application in Modern Solar Cells	750		1.000	800		IAC
Grigory E. Astrakharchik	Quantum tetramers and hexamers	500		300	200		UMA
Gustavo Yepes	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	2.500		30.000	50.000	190.000	BSC/MN
Ignacio Pagonabarraga	Emerging morphologies and micromanipulation in active and actuated matter	4.900		4.000	4.000	4.000	BSC/MN
Ivette Rodriguez	Effect of the free-stream turbulence in the boundary layer development and heat transfer from a sphere.	1.000		2.000	3.000		UV

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Javier Carrasco	An atom's eye view of glide-based phase transformations in layered oxide cathodes for Na-ion batteries	612		350	400		UC
Javier Garcia-Serrano	Assessing the role of the stratosphere in climate teleconnections		500	3.000	10.000		BSC/MN
Javier LLorca	Multiscale Modelling of Precipitation Strengthening in Metallic Alloys	775		5.000	1.000		UZ
Jazmin Aguado Sierra	Electro-mechanical simulations of anatomically detailed male and female human hearts to understand gender-specific cardiac pathology and medical device interaction	4.999		10.000	5.000	10.000	BSC/MN
Jordi Marti	Metadynamics calculations of free energy landscapes of tryptophan bound to phospholipid cell membranes	166		400	50		UAM
Javier Honrubia	Shock Ignition of inertial confinement fusion targets	492		100	500		UV
Jose Javier Plata Ramos	High-throughput sensitization of ferroelectric materials for sunlight harvesting.	450		750	750		UPM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
José Manuel García Regaña	Transport of particles and heat in the core of magnetically confined thermo-nuclear fusion plasmas		500	2	5	5	BSC/MN
Prof. Dr. Josep M. Poble	Modelling of Super-Reduced Polyoxometalates	584		512	512		BSC/MN
Juan Ignacio Beltrán Fañez	Designing layered materials towards phase transitions in iridate-based superstructures.		160	70	700		CESGA
Juan Jose Novoa Vide	The mechanism of the two-step spin-transition of a thiazyl-diradical-based material presenting geometrical frustration	392		10	90		CENITS
Juan José Palacios Burgos	Optoelectronic properties of novel two-dimensional crystals	450		200	300		CESGA
Konstantin Neyman	Atomic ordering in bimetallic nanoparticles of fcc-type: Pt-Cu	645		1.200	1.200		CESGA
Linda Angela Zotti	Electronic properties of gold-protein-gold junctions	497		600	600	600	BSC/MN
Lluís Blancafort	Rationalizing the shape of photocatalytically active gold nanoplatelets on graphene	500		1.000	1.000		UMA
Manuel Moriche	DNS of large-amplitude transverse gusts on infinite wings at low Reynolds number	575		450	1		UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Marcel Swart	Computational spectroscopy of dinuclear nickel complexes	331,80		200	600		BSC/MN
Maria Maza	Study of flow interaction with a mangrove forest using OpenFOAM	1.000		30.000	35.000		UV
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Catalytic hydrogenation of carbon dioxide	1.578,24		300	300	25	BSC/MN
Bruno Camino	Development of a tool to build Wulff-like stoichiometric nanoparticles from bulk materials.	200		100	200		UC
Marta Reynal-Querol	Computing pixel base socio-economic measures to analyze economic development	300		4.000	4.000	4.000	BSC/MN
Martin Obergaulinger	Multi-messenger signatures of stellar core collapse in three dimensions		1.000	100	12.000		BSC/MN
Mercedes Boronat	Influence of support on the electronic and catalytic properties of copper clusters of low atomicity	414		300	500		UC
Miguel Fosas de Pando	Stability analysis and derivative-free optimization of unsteady flow through a linear cascade	294,91		4.096	10.240		UC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Miguel A. Otaduy	Scale-able Bridges between Molecular and Macroscopic Dynamics	170,60		500	10		BSC/MT
Modesto Orozco López	MODEL-tox. Construction of an MD library of toxicology relevant proteins in the human proteome	2.160		1.000	1.000	1.000	BSC/MN
Nuria Lopez	Theoretical studies on catalysis optimization for an Artificial Leaf (A-LEAF)	2.000	200	1.000	2.000		IAC
Nuria Lopez	Carbon-based materials as support in heterogeneous catalysis (3rd period)	800	400	500	1.000		IAC
Octavio Roncero	Reactions of complex organic molecules at the low temperatures of interstellar media	1.875		10	5		CESGA
Oriol Lehmkuhl	Role of the frequency on the active flow control of airfoils boundary layer at moderate Reynolds numbers		800	2.000	6.000	7.000	BSC/MN
Oscar Flores	Aerodynamic performance of flapping wings in tandem	300		600	600		UV
Ramiro Logares	Exploring the fine-grained variation of marine microbial genomes over time and space	506,88		3.000	12.000		BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Raul Payri	Suitability of different atomization and breakup models for LES numerical simulations of the fuel injection in a LDI burner	156			18.000		UC
Roberto DAgosta	Semiconducting polymers for thermoelectric applications	500		1.000	1.000		CESGA
Rosana Collepardo	Importance of protein disorder in architectural proteins organizing the genome	4.750		400	600		BSC/MN
Rubén Pérez	Accessing sequence dependence of the mechanical properties of dsDNA and dsRNA	160	50	6.000	6.000	6.000	BSC/MT
Santiago Badia	On the performance and scalability of a parallel AMR simulation pipeline for subassembled discrete operators	400		400	4.000		BSC/MN
Sascha Husa	Improving the accuracy of gravitational wave models for non-precessing black hole mergers	3.000		6.000	7.000	7.000	BSC/MN
Sergio Hoyas	Forced convection in turbulent channel flow	2.200		200	10.000	20.000	BSC/MN
Shimpei FUTATANI	Non-linear MHD modelling of pellet injection for ELM control in fusion plasmas		500	1.500	30.000	500	BSC/MN
Shimpei FUTATANI	Kinetic-MHD hybrid simulations for fast particle physics in tokamaks and stellarators		500	500	20.000	20	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Sílvia Osuna	Complete reconstruction of substrate binding in Epoxide Hydrolases	25		5.000	5.000	3.000	BSC/MT
Stefan Bromley	Understanding the structure and vibrational spectra of realistic silicate nanoparticles: linking theory and observation	1.130		500	500		UC
Victor Homar Santaner	Fundamentals of generation and interpretation of dynamical probabilistic severe weather forecasts: Liouville, Bred vectors and Stochastic physics	3.600		30.000	500		BSC/MN
Xavier Barril	XChem+FrEvolAtion: Automating ligand discovery	820		1.000	100		BSC/MN
		160	50	5.000			BSC/MT
Xavier Luri Carrascoso	Gaia: Cyclic Data Processing and Catalogue Simulations	2.250		300.000	300.000	300.000	BSC/MN
Xavier Solans Monfort	Modeling of RuO <sub>2</sub> surface-liquid water and RuO <sub>2</sub> nanoparticle-liquid water interfaces: Influence of surface morphology and nanoparticle size	500		50	100		UMA
Yohan Ruprich-Robert	Impacts of the Atlantic Multidecadal Variability on the mean Climate and weather extremes	4.968,96		5.000	30.000		BSC/MN

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