

Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación

Resolución Comité de Acceso, Asignación de Horas de Supercomputación para la Red Española de Supercomputación (RES) 1er período 2014

Barcelona, Febrero 2014

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 35 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-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).

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 2014.

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 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 ó 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 ha limitado la cantidad asociada a cada actividad a un máximo de 1,7 millones de horas. PRACE (www.prace-ri.eu) ofrece cantidades de horas a partir de estas capacidades y se debería solicitar a PRACE dichos proyectos. Esta nueva recomendación del Comité de Acceso se presentará a los órganos de gobierno del BSC para que se establezca de forma adecuada las modificaciones a la normativa de acceso.

4. Consideraciones adicionales

1.1. 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.

1.2. 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.

1.3. 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.

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Antoni Planas	Evidence of Conformational Selection in a Glycosyltransferase Structure?	256		700	700		UPM
Arianna Fornili	Collective variables from Structural Alphabets for protein model refinement	228		700	300		UZ
Assensi Oliva	Direct Numerical Simulation of stabilised jet flames.	660	170	400	2048	4096	BSC/MN
Carlos Vega	Ice crystallization	150	150	500	0		UV
Carme Rovira	Conformational free energy landscapes of carbohydrates	460		2500	2500	3000	BSC/MN
		128		2000	2000	3000	BSC/MT
Carme Rovira	Elucidating the catalytic mechanism of retaining glycosyltransferases	448		1500	1700	3000	BSC/MN
		128		1500	1700	3000	BSC/MT
César González Pascual	First-principles modelling of radiation-resistant materials: interfaces between immiscible and incoherent transition metals	800	100	1000	1000		UC
Charlotte Fillon	Tectonic/surface processes modeling of the Neogene Mesopotamian basin evolution	90		500	100	1000	BSC/MN
Constantia Alexandrou	Disconnected contributions for the nucleon form factors from GPUs	432		1000	1000	20000	BSC/MT
Daniel Lietha	Allosteric regulation of the SHIP2 phosphatase by its C2	1800		5000	10	1000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Daniel Stich	domain. Old earthquakes in 3D models	41		300	300		UV
Edilberto Sánchez	Electrostatic microinstabilities and zonal flows in stellarator plasmas.	600		6000	500	6000	BSC/MN
Eliseo Ruiz	Transport through Magnetic Molecules	300	150	80	20	1000	BSC/MN
Emilio Artacho	Large-scale radiation damage cascades from first principles	1250		1000	200	1000	BSC/MN
Enrique Martinez Gonzalez	Constraints on inflationary models of the universe based on CMB data		100	1000	1000		UPM
Ernest Giralt Lledó	Improvement of the affinity of a membrane receptor ligand	300		300	500		UV
Fco. Javier Luque Garriga	Binding of novel activators to AMPK and theoretical study of the activation mechanism	276		900	500	400	BSC/MN
		86		900	500	400	BSC/MT
Felipe J. Llanes Estrada	Monte Carlo simulation of Higgs production and other high energy processes at the LHC	130		250	1000		UV
Fernando Martin	XUV/X-ray laser pulses for ultrafast electronic control in molecules	400		300	1000	1000	BSC/MN
Francesc Illas	Activation and conversion of CO2 through novel catalysts based on Au and Cu nanoparticles supported on molybdenum carbides	691		300	600	800	BSC/MN
Francesc Illas	Towards realistic models of stoichiometric and doped TiO2 nanoparticles relevant to photocatalysis: Atomic and electronic structure from Density Functional Theory and Quasiparticle GW calculations	1500	300	500	1000	1000	BSC/MN
Francesco Luigi Gervasio	The effect of the oncogenic mutations on the conformational landscape of B-RAF kinase.	1080		1000	2000	1000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Francisco Marques	Direct numerical simulations of Taylor-Couette flow for the Princeton experimental setup.	800		2000	200		UMA
Grigory E. Astrakharchik	Diffusion Monte Carlo simulation of quantum gases and solids.	80	20	100	100	1000	BSC/MN
		50		50	300	1000	BSC/MT
Gustavo Yepes	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	800		8000	8000	100000	BSC/MN
Ignacio Pagonabarraga	Self assembly in active suspensions	590		2000	2000	2000	BSC/MN
Jana Selent	Molecular Dynamics of Gpcrs In Lipid Rafts Of Cns Diseases	755,71		1000	1000	250	BSC/MN
Javier Carrasco	First-principles study of Na insertion/extraction in the FePO ₄ -NaFePO ₄ system for cathode material in Na-ion batteries	720		350	300		IAC
Javier Jimenez Sendin	Time-resolved evolution of vorticity and momentum cascades in statistically stationary homogeneous shear turbulence	21		120	120	1000	BSC/MN
Javier Sancho Sanz	New methodology development for energetic and pathway analysis of binding interactions of ligands and proteins	200		100	100	200	BSC/MT
Javier Sancho Sanz	Study of the Helicobacter pylori's flavodoxin unfolding pathway through molecular dynamic simulations biased by experimental phi-values.	250		300	30	300	BSC/MN
		250		300	30	200	BSC/MT
Javier Trujillo Bueno	Three Dimensional Simulations Of The Generation And Transfer Of Polarized Radiation In The Solar Outer Atmosphere	1800		1500	20	1000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Jessica Walkenhorst	Optimal Control of Molecular Spectra in 1D Model Systems and 3D Molecular Systems	500	55	1000	1000	1000	UPM
Johan Jansson	High performance adaptive finite element methods for turbulent flow and fluid-structure interaction with applications in biomechanics, aerodynamics and aeroacoustics	1000	200	5000	300	5000	BSC/MN
Johannes Jaeger	In silico evolution of the gap gene network: how to turn one fly into another		41	10	50	1000	BSC/MN
Jordi José	3D simulations of nova explosions: diffusion, shear and hydrodynamic instabilities	505,6		3000	3000	2000	BSC/MN
Jordi Marti	Molecular dynamics simulation study of the influence of cholesterol on ionic adsorption in biological membranes	1800		200	50	100	BSC/MN
Jordi Teixidó	Development of novel treatments for myotonic dystrophy: in vivo drug discovery	118		700	700	200	BSC/MT
Jordi Teixidó	Study of the role of EGFR activating mutations in the development of drug resistance in non-small cell lung cancer treatment	25		700	200	200	BSC/MT
Jose E. Roman	Parallel eigensolvers for nonlinear eigenvalue problems in SLEPc	25		400	400		UC
Jose Luis Fernandez Abascal	Existence of the liquid-liquid critical point in supercooled water	52		500	500	500	BSC/MT
José Luis Velasco	Monte Carlo NC simulations in fusion reactor-relevant conditions	200		300	30	1000	BSC/MN
Joseba Alberdi	New local multipole implementation and visualization for Octopus code	100		2000	2000		UPM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Josep M. Poblet	Structure , reactivity and physical properties of polyoxometallates in solution	200	100	50	250		UMA
Juan Jose Novoa Vide	Understanding the nature of the driving force of the phase transitions in switchable phenalenyl-base molecular materials	245,76		8	70	1000	BSC/MN
Juan José Palacios Burgos	Molecular Kondo Project	675		100	200		UPM
Kendall N. Houk	Computational exploration of Directed Evolution rules for tuning enzymatic activities	46,8		2000	2000	1000	BSC/MT
Konstantin Neyman	Towards more realistic modelling of industrially important Pd/CeO ₂ and Pt/CeO ₂ catalyts	810		900	900		UZ
Manthos G. Papadopoulos	Elucidation of the activation mechanism of the 20S proteasome: A molecular dynamics study	40		200	200	1000	BSC/MT
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Molecular-level understanding of CeO ₂ as catalyst for partial alkyne hydrogenation	150		400	300	1000	BSC/MN
Marino Arroyo Balaguer	Phase field modeling of biomembrane dynamics and crack propagation	250		500	500	1000	BSC/MN
Mariona Sodupe	Redox properties of Cu ₂ ^{+/+-} Ab(1-16) species. Stability of transient species from Ab Initio Molecular Dynamics Simulation	250		500	1500	200	BSC/MN
Mercedes Boronat	Characterization of Cu active centers in Cu-zeolite catalysts for the selective reduction of NO _x	192		200	200		UV
Michele Amato	Understanding Polytypism in Group IV Nanowires from an Ab initio perspective	185		20	20		UC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Miquel Solà	Bingel-Hirsch additions on Endohedral Metallofullerenes. How are they affected by the metallic cluster, the strain energy and the solvent effects?	300	179	50	200	1000	BSC/MN
Natalia Calvo Fernández	IMPACT OF SOLAR FORCING ON FUTURE CLIMATE CHANGE USING A CHEMISTRY CLIMATE MODEL – CONTINUATION -	374,78		3000	6000	22000	BSC/MN
Nuria Lopez	Theoretical Modeling of Aquous Phase Reforming: 2nd period	1600	200	1000	500	150	BSC/MN
Pablo Chacon	Study of the nucleotide conformational switch in bacterial cell division proteins by all-atom simulations	688		140	120	1000	BSC/MN
Pablo Fosalba	The MICE project -1. Mapping the high-redshift universe	450		30000	30000	60000	BSC/MN
Pilar Queralt	3D geoelectrical characterization of geological reservoirs		50	10	2	1000	BSC/MN
Ramiro Logares-Haurie	Microbial Oceanomics using Next-Generation Sequencing (454/Illumina)	614,4		2000	3000	3000	BSC/MN
Ramon Gómez Gesteira	Analysis of Scour induced by ship propellers in the Harbour of Barcelona using GPU clusters	72,9		200	5000	5000	BSC/MT
Roberto San Jose	DEVELOPMENT AND CONSOLIDATION OF GEOSPATIAL SUSTAINABILITY SERVICES FOR ADAPTATION OF ENVIRONMENTAL AND CLIMATE CHANGE URBAN IMPACTS (DECUMANUS)	829,44		2000	4000	2000	BSC/MN
Roberto San Jose	European framework for online integrated air quality and meteorology modelling	552,96		2000	4000	10000	BSC/MN
Ruben Perez	Adsorption of proteins on defective surfaces with large-scale molecular dynamics simulations	45		3000	2500	3000	BSC/MT

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Ruben Perez	First principles simulations of Scanning Probe Microscopies experiments on graphene heterostructures and metal oxides	240		2000	1000		UPM
Santiago Badia	Improving the scalability of balancing substructuring domain decomposition methods for computational fusion	150	50	100	400	1000	BSC/MN
Sergio Diaz Tendero	Ab initio molecular dynamics of photovoltaic organic self-assembled monolayers adsorbed on metal surfaces	500		400	600	1000	BSC/MN
Stefan Bromley	Modelling the properties of cosmic and atmospheric nanosilicates	1152		1000	1000		UV
Victor Manuel Garcia Suarez	Simulation of nanoparticles of pristine and Co-doped ZnO	100	50	20	10		UZ
Victor Martin Mayor	Random Field Ising Model in four spatial dimensions and beyond	700		200	20	1000	BSC/MN
Xevi Biarnés	Redesign of enzymes in silico. Testing the BindScan algorithm.	36		1500	1500	900	BSC/MN

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.