

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 2015

Barcelona, Febrero 2015

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 38,5 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 Junio de 2015.

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 recuerda a los proyectos que solicitan muchas horas que PRACE (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.

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
Alfonso Valencia	The Effect of Carcinogenic Mutations on Nuclear Receptor RXRa Dimers	660		1000	1000		UC
Andras Stirling	In silico speciation of Pd catalyst in water by first principles simulation	230		500	2000		IAC
Angel Rubio	Modelling 2D Transition Metal Dichalcogenide Heterostructures	60	100	500	500		UPM
Annapaola Migani	Interfacial level alignment across the photodissociation coordinate of water and methanol on rutile TiO ₂ (110).	326,4	13,6	400	400		UPM
Antoni Planas	Evidence of Conformational Selection in a Glycosyltransferase Structure?	200		700	800		UPM
Antonio Fernandez-Guerra	Standardized and comparable ecological and biotechnological metagenome analysis of Ocean Sampling Day's marine ocean microbes	120		2000	500	2000	BSC/MN
Antonio Rodríguez Fortea	Analysis of the ultrafast charge transfer in organic photovoltaic devices based on endohedral metallofullerenes: effect of the solvent	538,2	151,8	2000	1000	2000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Assensi Oliva	Direct Numerical Simulations of Compressible Turbulent Flows at Moderate Reynolds Numbers: Compressible Flow around a NACA0012 airfoil with incidence		100	400	4096	4096	BSC/MN
Assensi Oliva	Flow topology in turbulent natural convection: direct numerical simulation and advanced turbulence modeling	960	240	250	2048	2048	BSC/MN
Avelino Corma Canós	Alkane oxidation over CeO ₂ nanoparticles: role of defects	294,4	25,6	350	350		UC
Carlos Vega	Ice crystallization	264,6	5,4	500	500		UV
Carme Rovira	Conformational free energy landscapes of carbohydrates	460		2500	2500	3000	BSC/MN
		128		2000	2000	3000	BSC/MT
Carme Rovira	Uncovering the molecular mechanisms of O-glycosylation	448		2000	2000	3000	BSC/MN
		192		2000	2000	3000	BSC/MT
Carmen Domene	Interactions between Peptides and Membranes Studied by all-atom free Energy Calculations	300		1200	1200		UPM
Daniel Lietha	Allosteric regulation of the SHIP2 phosphatase by its C2 domain.	280		3000	50		UPM
Daniel Mira	Development of turbulent combustion models for premixed combustion based on tabulated chemistry for Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) and large-eddy simulation (LES)	405	45	5000	5000	20000	BSC/MN
Edilberto Sánchez	Electrostatic microinstabilities and zonal flows in stellarator plasmas.	600		6000	1000	6000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Elena Khomenko	Simulations of dynamics of partially ionized solar atmosphere	2160	240	6000	6000	8192	BSC/MN
Eliseo Ruiz	Looking for High Conductance Molecules	617,5	32,5	120	20	120	BSC/MN
Ernest Giralt Lledó	Heterochiral Proteins?	227		300	600		ITC
Fco. Javier Luque Garriga	Translocation of ADP/ATP: Mechanism of the membrane protein carrier	1382		2048	1024	500	BSC/MN
		43		2048	1024	500	BSC/MT
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 CO ₂ through novel catalysts based on Au and Cu nanoparticles supported on molybdenum carbides	1009		300	600	800	BSC/MN
Francesc Illas	Towards realistic models of stoichiometric and doped TiO ₂ nanoparticles relevant to photocatalysis: Atomic and electronic structure from Density Functional Theory and Quasiparticle GW calculations	1644,75	290,25	500	1000	1000	BSC/MN
Francisco J. Doblas-Reyes	Impact of ocean resolution and initialisation in climate seasonal predictions	2100		2000	20000	1000	BSC/MN
Gregori Ujaque	Wacker-type oxidation of olefins: the effect of solvent in anti-Markovnikov addition	196,8	49,2	500	2000	200	BSC/MN
Grigory E. Astrakharchik	Diffusion Monte Carlo simulation of quantum gases and solids.		80	200	200	0	BSC/MN
		50		50	300	0	BSC/MT

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Gustavo Yepes	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	800		15000	70000	300000	BSC/MN
Ignacio Pagonabarraga	Self assembly in active suspensions	1600		2000	2000	2000	BSC/MN
Javier Jimenez Sendin	Development of the GPGPU generation of DNS codes.	300		2000	2000	6000	BSC/MT
Javier Trujillo Bueno	Three Dimensional Simulations Of The Generation And Transfer Of Polarized Radiation In The Solar Outer Atmosphere		100	6000	80	0	BSC/MN
Jean Kormann	3D Elastic Full Waveform Inversion: Toward Reflection Based Inversion	912,6	101,4	5000	2000	3000	BSC/MN
Joaquim Jornet Somoza	First principle simulations of gas storage on nano-structured materials	700		1500	1500		IAC
Jordi Marti	Molecular dynamics simulation study of the influence of cholesterol on ionic adsorption in biological membranes	1440	360	400	50	100	BSC/MN
Jordi Teixidó	Development of novel treatments for myotonic dystrophy: in vivo drug discovery	118		700	700	200	BSC/MN
Jordi Torra i Roca	Gaia: Data Processing and Simulation of Telemetry Stream	1000		30000	35000	60000	BSC/MN
Jose Luis Fernandez Abascal	Existence of the liquid-liquid critical point in supercooled water	81		500	500	100	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Jose Miguel Reynolds	Understanding and optimizing turbulent transport simulations in stellarator plasmas with the GENE gyrokinetic code	1300		5000	2000	5000	BSC/MN
Konstantin Neyman	Determination of chemical ordering in large bimetallic particles from density-functional calculations	780		900	1000		UZ
Leonardo Pardo	New strategies in GPCR drug discovery	1770		5000	5000	1000	BSC/MN
Manel Perucho Pla	Wind-wind interaction in gamma-ray binaries and long term evolution of extragalactic jets	500		9000	9000	0	BSC/MN
Manel Perucho Pla	Wind-wind interaction in gamma-ray binaries and long term evolution of extragalactic jets	500		1000	2000		UV
Miquel Solà	Maximum Aromaticity as the key property to unravel the Relative Stabilities of Endohedral Metallofullerenes	536		50	200	100	BSC/MN
Neven Stjepan Fuckar	Impact of sea ice initialization on seasonal climate prediction	257,6	22,4	400	5000	0	BSC/MN
Nuria Lopez	Synthesis-structure-activity relationships for surfactant coated metal nanoparticles (2nd period)	922		1000	500	150	BSC/MN
Oriol Jorba-Casellas	Contribution to AQMEII – phase 3 and COST Action ES1004 air quality simulations with the Online model NMMB/BSC-CTM	250	150	4000	500	0	BSC/MN
Pablo Fosalba	The MICE project -2. Volume and mass resolution effects on small-scale dark matter clustering		100	20000	25000	60000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Pilar Queralt	Inversion of new Magnetotelluric (MT) and Control Source Electromagnetic (CSEM) data for geoelectrical characterization and monitoring of geological reservoirs	90	10	20	2	90	BSC/MN
Prof. Dr. Josep M. Poblet	Formation and characterization of polyoxometalates in water solution	245,64	30,36	50	250	100	BSC/MN
Ramiro Logares-Haurie	Microbial Oceanomics using High-Throughput Sequencing	300		7000	6000	4000	BSC/MN
Riccardo Rurali	Nanoporous silicon for thermoelectric applications	552,6	61,4	500	500	200	BSC/MN
Rubén Pérez	Active centers in realistic metal oxide surfaces characterized with first-principles simulations and scanning probe microscopies	600		3000	1500		UPM
Santiago Badia	Improving the scalability of balancing substructuring domain decomposition methods for computational fusion	200	50	100	400	0	BSC/MN
Sascha Husa	Coalescence of Black Hole Binary systems	800		1000	2500	5000	BSC/MN
Stefan Bromley	Design of 2D Materials based on Radical Building Blocks	1550		2000	3000		UV
Victor Martin Mayor	Random Field Ising Model in four spatial dimensions and beyond	1120		500	20		UMA
Xavier Barril	Assessing the inherent conformational flexibility of F1-ATPase alpha subunit: a molecular dynamics simulation study	360		500	0		UZ
Xavier Barril	The Quasi-Bound State: application to virtual fragment screening	240		500	500	500	BSC/MT

6. Siguiendo 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.