

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 2016

Barcelona, Febrero 2016

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 40,6 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), 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), Instituto Tecnológico de Canarias (ITC), Consorci de Serveis Universitaris de Catalunya (CSUC), CénitS-COMPUTAEX (CENITS), Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León (FCSCL) y Universidad Autónoma de Madrid (UAM) .

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 2016.

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 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) 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.

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Agusti Lledos	Nuclear quantum effects in molecular rotors	460		2000	4000	1000	BSC/MN
Alfredo Levy Yeyati	Transient transport properties of topological superconducting quantum dots	240		200	200		UPM
Annapaola Migani	Understanding the relationship between adsorbate localized and d-d transitions induced features in 2PP spectra of rutile TiO ₂ (110)	399		725	725		UPM
Antonio Fernández-Guerra	Exploring the uncharted protein regions of the ocean microbiome	200		4000	2000		UZ
Antonio Rodríguez Fortea	Analysis of the ultrafast charge transfer in organic photovoltaic devices based on endohedral metallofullerenes: effect of the solvent	520		2500	2000		IAC
Assensi Oliva	Advanced turbulence models for buoyancy driven flows	1000		250	3072	3072	BSC/MN

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Assensi Oliva	Direct Numerical Simulation of turbulent atomizing two-phase jets with an adaptive mesh refinement strategy	450	100	400	2048	2048	BSC/MN
Assensi Oliva	Direct Numerical Simulations of Taylor bubbles in inclined channels by using domain optimization methods	500	50	400	2048		UC
Blanca Biel	Structural, transport and optical properties of distorted nanographenes	560		500	500		IAC
Carlos Vega	Ice crystallization from aqueous solutions	305		500	100		UPM
Carme Rovira Virgili	Conformational free energy landscapes of carbohydrates. Implications for catalysis in carbohydrate-active enzymes	560		2500	2500	3000	BSC/MN
		128		2000	2000	3000	BSC/MT
Carme Rovira Virgili	Uncovering the molecular mechanisms of O-glycosylation: role of the lectin domain	512		2500	2500	3000	BSC/MN
		192		2000	2000	3000	BSC/MT
César González Pascual	Detection of small inorganic molecules adsorbed on point defects and grain boundaries in a MoS ₂ monolayer with an atomic force microscopy	220		500	1000		ITC
Daniel Lietha	Computational methods to predict the effect of kinase mutations on small-molecule kinase inhibitors.	260		2000	50		BSC/MN

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Daniel Mira	Numerical investigation a downscale can combustor using large-eddy simulation close to the lean blow off limit	1120		5000	5000	5000	BSC/MN
David Mateos	ShockWave Evolved Collisions		500	1024	2048	128	BSC/MN
Edilberto Sánchez	Electrostatic microinstabilities and zonal flows in stellarator plasmas	700		8000	1000	8000	BSC/MN
Elena Khomenko	Simulations of waves and instabilities in partially ionized plasmas		500	12000	12000	12000	BSC/MN
Eliseo Ruiz	Spin-filter Effects in Single-Molecule Devices	650		120	20	120	BSC/MN
Emilio Artacho	Structural and dynamical properties of nanoconfined liquid water	700		500	200	200	BSC/MN
Fco. Javier Luque Garriga	Estimating the conformational cost of bioactive ligands within the Multilevel strategy	172		4000	3000	100	BSC/MT
Fco. Javier Luque Garriga	Metadynamics studies of the portal area in retinol-binding proteins: Implications in retinol binding	1970		4000	3000	1000	BSC/MN
Fernando Martín	Modifying the properties of graphene supported on ruthenium	230		100	100		UPM
Fernando Martín	XUV/X-ray laser pulses for ultrafast electronic control in molecules	700		300	1000	1000	BSC/MN
Fernando Moreno-Insertis	Jets and eruptions in the solar corona: a new view	1200		2000	4000	5000	BSC/MN

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Francesc Illas	Zirconia Nanoparticles as Support for Metal Atoms and Clusters: Unveiling Chemical Interaction and Interface Processes from Density Functional Theory	1382		900	1500	1500	BSC/MN
François Massonnet	Ensemble sea ice data assimilation for polar prediction	500		2000	10000	100	BSC/MN
Gregori Ujaque	Modelling anion dissociation as a key step in organometallic catalysis	200		500	2000		UMA
Grigory E. Astrakharchik	Dynamical properties of quantum systems	200		300	200	100	BSC/MN
		90		50	300	100	BSC/MT
Gustavo Yepes	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	900		15000	65000	300000	BSC/MN
Ignacio Pagonabarraga	Self-assembly in actuated and active soft matter	1600		4000	4000	4000	BSC/MN
Javier Carrasco	First principles study of P2- and O3-Na2/3Fe2/3Mn1/3O2 cathode materials for low-cost batteries	243		200	300		UV
Javier Honrubia	Particle-In-Cell simulations of laser-driven ion acceleration in cone targets	375		200	10000	15000	BSC/MN
Javier Jimenez Sendin	Coherent structures in homogeneous isotropic turbulence	250		5000	256	5000	BSC/MT

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Joan Baiges	HPC - EUNISON: High Performance Computing Algorithms for the EUNISON project.	40		300	500	500	BSC/MN
Jorge Ramirez	Mechanisms of Molecular Motion in Polymers with Nonuniform Stiffness	120		200	200		CENITS
Jose E. Roman	GPU codes for (block) orthogonalization in the context of iterative linear algebra solvers	10		800	800	100	BSC/MT
Jose Luis Fernandez Abascal	Computer simulation of ionic solutions	84		400	400	100	BSC/MT
Juan José Palacios Burgos	Collective Electronic States in Low Dimensional Materials.	500		300	200		FCSCCL
Konstantin Neyman	Structure and surface composition of Ni-based bimetallic nanoparticles as catalysts	753		900	900		UZ
Leonardo Pardo	Functional Elements of Metabotropic Glutamate Receptors	885		2000	2000	1000	BSC/MN
Manel Perucho Pla	The deceleration of extragalactic jets		400	2000	2000	100	BSC/MN
			200	2000	2000		UV
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Toward rational design of Ni-ceria catalysts for increasing natural gas exploitation: the methane dry reforming reaction	952		400	300		UMA
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Understanding the nature of Au species in Au/ceria model catalysts	1843		400	300	25	BSC/MN
Mariano Carrión-Vázquez	Exploring the difference between functional and toxic amyloids	10,24		100	100	100	BSC/MT

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Marta Reynal-Querol	Computing pixel base socio-economic measures to analyze economic development	40,32		2000	5000	5000	BSC/MN
Martin Obergaulinger	Stellar core collapse with rotation and magnetic fields	600		200	1500		CSUC
Mercedes Alfonso Prieto	Structural and mechanistic insight into cancer-associated mutants of isocitrate dehydrogenase.	100	100	2000	2000	3000	BSC/MN
Mercedes Alfonso Prieto	Structural and mechanistic insight into cancer-associated mutants of isocitrate dehydrogenase.	120		2000	2000	3000	BSC/MT
Nuria Lopez	Single-Site Catalysis	890,88		500	750	100	BSC/MN
Pablo Chacon	Understanding dynamic stability of microtubules	1000	200	1600	1600		FCSCCL
Pat Scott	GAMBIT Search for New Physics	250	250	500	1000	1000	BSC/MN
Petr Nachtigall	Exploring the Stability and Reactivity of Novel 2D zeolites.	250		200	200		UAM
Ramiro Logares	Microbial Oceanomics	215,04		6000	3000		UZ
Riccardo Rurali	Thermal transport in isotopically disordered Si nanowires	198,14		500	500	200	BSC/MN
Robert Castilla	CFD of the flow inside a Gerotor Pump with Dynamic Mesh and Contact Point	360	50	4000	8000		UPM
Robert Castilla	LES (Large Eddy Simulation) of the falling cast iron jet in a mold filling	240	50	2000	4000		UPM
Rubén Pérez	Atomic-Scale Stick-Slip Friction in a Liquid Environment	350		3000	3000		UC

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Rubén Pérez	High resolution AFM imaging of organic molecules on metal oxide and ionic surfaces with first-principles simulations	75	50	3000	1000		UC
Rubén Pérez	Hydration Properties of Single-Stranded DNA Films	188		3000	3000	3000	BSC/MT
Santiago Badia	Performance and scalability assesment of hybrid inexact MLBDDC-AMG variants of the MLBDDC preconditioner	200		400	800	100	BSC/MN
Sascha Husa	Preparing for the second observation run of advanced gravitational wave detectors	1900		1000	3000	5000	BSC/MN
Sergio Zlotnik	Dynamics of double-polarity subduction processes and the evolution of the Western Mediterranean		500	1600	1600	100	BSC/MN
Shimpei Futatani	Non-linear MHD modelling of pellet injection for ELM control in fusion plasmas	1000	200	6000	20000	20000	BSC/MN
Sílvia Osuna	Markov State Models for Enzyme Design	288		5000	5000	100	BSC/MT
Stefan Bromley	Probing 2D Materials based on Radical Building Blocks under Realistic Conditions	921		1000	2000		UV
Stefan Bromley	Stability of TiO ₂ -SiO ₂ mixed oxide nanomaterials	992		1000	2000		UV
Victor Homar Santaner	Predictability of Mediterranean severe weather: contribution of HyMeX multicomponent observing systems	1820		3072	500	100	BSC/MN

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Xavier Barril	Water displaceability in bromodomains: application in ligand design	90		2048	1	100	BSC/MT
Yolanda Prezado	New approaches in radiotherapy	504		20	20		FCSCCL

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