

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 2014

Barcelona, Junio 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 Septiembre 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 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

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
Adriana Zagari	Study of Phe allosteric site of phenylalanine hydroxylase by molecular dynamics	140	60	1000	500	500	BSC/MN
Alistair Revell	Investigating new hybrid RANS-LES methods for the simulation of a full aircraft wing configuration	130	70	2000	2000	2000	BSC/MN
Annapaola Migani	Effect of defects on the two-photon photoemission (2PP) resonance for methanol and water on TiO ₂ (110)	117	21	200	200	0	UPM
Annapaola Migani	Oxygen induced step-doubling transition of the vicinal Pt(997) surface.	590		400	400	0	UPM
Antoni Planas	Evidence of Conformational Selection in a Glycosyltransferase Structure?	210	90	700	700	0	UPM
Assensi Oliva	Multi-physics coupled simulations: interaction of turbulence with radiation. Application to direct numerical simulation of turbulent Rayleigh-Bénard convection in a radiatively participating medium.	200		400	4096	4096	BSC/MT
Assensi Oliva	Turbulent flow through a square duct: direct numerical simulation and advanced turbulence	650	190	250	2048	2048	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
	modeling						
Avelino Corma Canós	Alkane oxidation over CeO ₂ nanoparticles: role of defects	230		300	300	100	BSC/MN
Carlos Vega	Ice crystallization	127		500	100	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	550		2000	2000	3000	BSC/MN
		128		2000	2000	3000	BSC/MT
César González Pascual	First-principles modelling of radiation-resistant metallic interfaces: Cu/W	750	60	1000	1000	0	UC
Christopher Cramer	Iron Cerium adducts as intermediates in the water oxidation reaction	303	66,6	50	200	0	BSC/MN
Daniel Lietha	Allosteric regulation of the SHIP2 phosphatase by its C2 domain.	1440	300	5000	10	0	BSC/MN
Daniel Stich	Old earthquakes in 3D models	10		300	300	0	UV
Eliseo RUIZ	Transport through Magnetic Molecules	180	90	80	20	10	BSC/MN
Emilio Artacho	First-principles investigation of intrinsic screening mechanisms in ferroelectric thin film	650		300	0	300	BSC/MN
Emilio Artacho	Study of 2-dimensional nanoconfined water from ab	300	120	500	200	200	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
	inicio simulations						
Fco. Javier Luque Garriga	Effect of the S31N mutation on the inhibition of the M2 proton channel of influenza virus	553		1000	500	400	BSC/MN
		18		500	300	300	BSC/MT
Fco. Javier Luque Garriga	Novel compounds against angiogenesis: Design of selective inhibitors against alpha_v/beta_3 integrins	138		500	500	400	BSC/MN
		86		500	500	400	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 CO2 through novel catalysts based on Au and Cu nanoparticles supported on molybdenum carbides	300	197	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	1566	200	500	1000	1000	BSC/MN
Francesco Luigi Gervasio	The effect of the oncogenic mutations on the conformational landscape of B-RAF kinase (continuation).	756	200	1000	3000	1000	BSC/MN
Francisco J. Doblas-Reyes	Impact of ocean resolution and initialisation in climate seasonal predictions	1600	200	10000	10000	20000	BSC/MN
Francisco Marques Truyol	Direct numerical simulations of Taylor-Couette flow for the Princeton experimental setup.	500	140	3000	200	0	UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Gregori Ujaque	Calculating delta-G of Associative and Dissociative Organometallic Reaction Steps: The case of Pd-Catalysts in Cross-Coupling	122		500	1500	0	UC
Grigory E. Astrakharchik	Diffusion Monte Carlo simulation of quantum gases and solids.	50	20	100	100	0	BSC/MN
			50	50	300	0	BSC/MT
Gustavo Yepes	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	700	111	10000	70000	130000	BSC/MN
Ignacio Pagonabarraga	Self assembly in active suspensions	600		2000	2000	2000	BSC/MN
Iván Cabria	Hydrogen Spillover on Pd-doped Nanoporous Carbons and Catalytic Activity of Silver-Gold Nanoparticles	102		60	40	0	UMA
Jana Selent	Molecular Dynamics Of GPCRS In Lipid Rafts Of CNS Diseases	480	100	1000	1000	250	BSC/MN
Javier Carrasco	First-principles study of Na insertion/extraction in the (Fe,Mn)PO4-Na(Fe,Mn)PO4 system for cathode material in Na-ion batteries	390	100	350	400	0	UV
Javier Fdez Sanz	Catalysis modeling: cerium oxide nanoparticles supported Cu(111) as paradigm of inverted catalysts	387	63	750	750	0	UPM
Javier Jimenez Sendin	Development of the GPGPU generation of DNS codes.	250		4000	256	4000	BSC/MT

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Javier Jimenez Sendin	Time-resolved evolution of vorticity and momentum cascades in statistically stationary homogeneous shear turbulence	350		6000	1024	4000	BSC/MN
Javier Trujillo Bueno	Three Dimensional Simulations Of The Generation And Transfer Of Polarized Radiation In The Solar Outer Atmosphere	1600	200	1800	250	1200	BSC/MN
Jean Kormann	3D Elastic Full Waveform Inversion: Toward Reflection Based Inversion	700	180	4000	4000	4000	BSC/MN
Jessica Walkenhorst	Optimal Control of Molecular Spectra in 1D Model Systems and 3D Molecular Systems	180		1000	1000	0	UPM
Joaquim Jornet Somoza	Improving the Performance of the IO and Density Fragment procedures on OCTOPUS code.	70	14	2000	2000	2000	BSC/MN
Johan Jansson	High performance adaptive finite element methods for turbulent flow and fluid-structure interaction with applications in biomechanics, aerodynamics and aeroacoustics	700	260	5000	300	5000	BSC/MN
Johannes Jaeger	In silico evolution of the gap gene network: how to turn one fly into another	54	50	10	50	1	BSC/MN
Jordi Marti	Molecular dynamics simulation study of the influence of cholesterol on ionic adsorption in biological membranes	1600	200	200	50	100	BSC/MN
Jordi Teixidó	Development of novel treatments for myotonic	118		700	700	200	BSC/MT

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
	dystrophy: in vivo drug discovery						
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
Jordi Villà-Freixa	Modulation of immune receptors function as a novel therapeutic strategy for acute CNS damage	840	300	80	30	110	BSC/MN
Jose E. Roman	Parallel eigensolvers for nonlinear eigenvalue problems in SLEPc	10		400	400	0	UC
Jose Luis Fernandez Abascal	Existence of the liquid-liquid critical point in supercooled water	71		500	500	0	BSC/MT
José Luis Velasco	Monte Carlo NC simulations in fusion reactor-relevant conditions	400	100	300	30	0	BSC/MN
Jose Miguel Reynolds	Understanding and optimizing turbulent transport simulations in stellarator plasmas with the GENE gyrokinetic code	550	150	2500	1000	2000	BSC/MN
Juan Jose Novoa Vide	Understanding the nature of the driving force of the phase transitions in switchable phenalenyl-base molecular materials	356	57,96	10	80	0	BSC/MN
Juan José Palacios Burgos	Molecular Kondo Project - II	500	110	100	200	0	UMA
Kendall N. Houk	Conferring natural enzymes new synthetically useful functionalities	26		2000	2000	0	BSC/MT

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Konstantin Neyman	Towards more realistic modelling of industrially important Pd/CeO ₂ and Pt/CeO ₂ catalyts	600	50	900	900	0	UZ
Leonardo Pardo	New strategies in GPCR drug discovery	180	100	5000	5000	100	BSC/MN
Maite Alducin Ochoa	Competition between phonons and electron-hole pair excitations in ab-initio molecular dynamics simulations of gas/surface reactivity	140	50	300	300	0	BSC/MN
Manthos G. Papadopoulos	Elucidation of the activation mechanism of the 20S proteasome: A molecular dynamics study	202		200	200	0	BSC/MT
Manuel Alcami	Fragmentation and reaction dynamics of charged and excited molecules in gas phase	210		300	500	0	UC
Marcel Swart	Molecular chemistry of Alzheimer s disease	261	50	100	200	0	BSC/MN
		8		2000	2000	0	BSC/MT
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Understanding monofunctional active sites for the water-gas shift reaction on model Ni/ceria catalysts	363		400	300	0	UZ
Marino Arroyo Balaguer	Phase field modeling of biomembrane dynamics and crack propagation	70	35	500	500	1000	BSC/MN
Marino Arroyo Balaguer	The mechanics of unfolding in coiled-coils	73	30	1000	700	700	BSC/MN
Mariona Sodupe	Redox properties of Cu ²⁺ / ⁺ -Ab(1-16) species. Stability of transient species from Ab Initio Molecular Dynamics Simulation	297	52	500	1500	200	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Mercedes Boronat	Characterization of Cu active centers in Cu-zeolite catalysts for the selective reduction of NOx	250	20	250	250	0	UV
Michele Della Morte	Non-perturbative studies of massive gauge theories	1000	200	10	200	0	UV
Pablo Fosalba	The MICE project -2. Volume and mass resolution effects on small-scale dark matter clustering	400	250	30000	20000	50000	BSC/MN
Pablo Pou Bell	New Frontiers on Scanning Probe Microscopies: charge density distribution, subsurface resolution and atomic manipulation with the force and the electric current studied by First Principles simulations.	382	67	2000	1000	2000	BSC/MN
Ramiro Logares-Haurie	Microbial Oceanomics using Next-Generation Sequencing (454/Illumina)	368		6000	3000	2000	BSC/MN
Riccardo Rurali	Nanoporous silicon for thermoelectric applications	565		500	500	200	BSC/MN
Roberto San Jose	Development And Consolidation Of Geo-Spatial Sustainability Services For Adaptation Of Environmental and Climate Change Urban Impacts (DECUMANUS)	150	100	6000	6000	6000	BSC/MN
Roberto San Jose	European framework for online integrated air quality and meteorology modelling	350	100	4000	6000	6000	BSC/MN
Ruben Perez	First-principles simulations of metal oxide surface chemistry and defects aided by scanning probe microscopies	304	45	2000	1000	0	UPM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Ruben Perez	Mechanical properties of biological systems as measured by atomic force microscopy	185		3000	3000	3000	BSC/MT
Santiago Badia	Improving the scalability of balancing substructuring domain decomposition methods for computational fusion	200		100	400	0	BSC/MN
Sascha Husa	Coalescence of Black Hole Binary systems	800	185	1000	2500	5000	BSC/MN
Sergio Diaz Tendero	Ab initio molecular dynamics of photovoltaic organic self-assembled monolayers adsorbed on metal surfaces	500		400	600	0	BSC/MN
Stefan Bromley	Modelling the properties of cosmic and atmospheric nanosilicates	324		1000	2000	0	UV
Victor Martin Mayor	Random Field Ising Model in four spatial dimensions and beyond	700		200	20	0	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 rellena la información, el equipo de soporte local del site de asignación se pondrá en contacto con los usuarios para proporcionar la información necesaria.