

# 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 2016

Barcelona, Junio 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 45,35 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), 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). En el caso del CESGA, la máquina está en fase de puesta a punto, así que se prestará servicio a la RES solo a partir del 1 de Septiembre del 2016, la asignación a este site ya se ha hecho teniendo en cuenta este periodo de solo 2 meses de acceso.

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 Octubre 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](http://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](mailto: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
Albert Rimola	H additions to CO towards CH <sub>3</sub> OH formation: adsorption, diffusion and reactions	170	70	100	200		CESGA
Alfredo Levy Yeyati	Transient transport properties of superconducting quantum dots	200		200	200		UC
Annapaola Migani	Role of singlet/singlet and singlet/triplet crossings in methanol oxidation on TiO <sub>2</sub> (110).	100	50	725	725		UPM
Antoni Planas	Probing Conformational Selection in a Glycosyltransferase Structure. Activity: Dynamics of the Products Release.	150		1000	1000		UPM
Antoni Planas	Protein conformational changes at the membrane interface. Activity: The extended conformation of a Mycobacterium tuberculosis glycosyltransferase.	250	50	1000	1000		UPM
Antonio Fernandez-Guerra	Exploring the uncharted protein regions of the ocean microbiome	200		5000	5000		UZ
Antonio Rodríguez Fortea	Analysis of the ultrafast charge transfer in organic photovoltaic devices based on endohedral metallofullerenes	521		2000	2000	2000	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	400		400	2048		CESGA
Assensi Oliva	Flow over a realistic car model: Turbulence structures and wheel rotation effects	700		500	2048		CESGA
Blanca Biel	Structural, transport and optical properties of distorted nanographenes	570		500	500		IAC
Carme Rovira Virgili	Conformational free energy landscapes of carbohydrates. Implications for catalysis in carbohydrate-active enzymes	560		2500	2500	3000	BSC/MN
		128		2100	2500	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		2500	2500	3000	BSC/MT
Carmen Domene	'Chameleonic' behaviour of small peptides: mechanistic studies of the micelle-induced structural transition between two ordered peptide structures	400		500	500		UPM
César González Pascual	Grain boundaries in a MoS <sub>2</sub> monolayer: adsorption of inorganic molecules and one-dimensional electronic transport	300		500	500		UV
Claudio Dalla Vecchia	EDGE - Environment Driven Galaxy Evolution	1400	600	50000	20000	30000	BSC/MN
Cristina Díaz	Grazing incidence fast molecule diffraction (GIFMD): A new tool for surface characterization.	150		200	100		FCSC

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Daniel Mira	Prediction of instabilities in a downscale can combustor using large-eddy simulation close to the lean blow off limit.	1400		5000	5000	5000	BSC/MN
David Mateos	ShockWave Evolved Collisions		200	2048	2048	128	BSC/MN
David Torrents Arenales	Identification of virus in 2700 PanCancer genomes using an improved version of SMUFIN	300	200	500	500	1000	BSC/MN
Edilberto Sánchez	Turbulence simulations in stellarator plasmas with EUTERPE gyrokinetic code	550		12000	3000	14000	BSC/MN
Eliseo Ruiz	Spin-filter Effects in Single-Molecule Devices	300		120	20		UPM
Emilio Artacho	Study of interaction between non-adiabatic electronic excitations and defect dynamics in graphene	500		500	200	200	BSC/MN
Ernest Giralt Lledó	Rational design of peptidomimetics targeting epidermal growth factor (EGF) protein	700		600	100		FCSC
Esteban Ferrer	Implicit Large Eddy Simulations for rotating vertical axis turbines using a high order Discontinuous Galerkin method with sliding meshes	600		500	50		FCSC
F.Xavier Trias	Building a new subgrid characteristic length for Large-Eddy Simulation	500	250	250	3072	3072	BSC/MN
Fco. Javier Luque Garriga	Identification and Characterisation of a Secondary Sodium-Binding Site and the main selectivity determinants in The Human Concentrative Nucleoside Transporter 3	200	100	4096	3072	500	BSC/MN
		84		4096	3072	500	BSC/MT
Fernando Martín	Ultrahigh pressure chemistry at the nanoscale	165		200	200		

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Fernando Martín	XUV/X-ray laser pulses for ultrafast electronic control in molecules	700		300	1000	1000	BSC/MN
Fernando Mellibovsky	Active flow control of boundary layer separation in airfoils at high angle of attack using fluidic oscillators	200		2500	2000		CSUC
Fernando Moreno-Insertis	Eruptions and heating in the solar corona	1200		2000	10000	5000	BSC/MN
Francesc Illas	Activation and conversion of CO <sub>2</sub> by tuning structure and composition of transition metal carbides: Role of the crystal structure and of the surface termination.	645		300	600		FCSC
Francesc Illas	Computational screening of transition metal carbides and oxides for CO <sub>2</sub> activation: feeding the machine learning algorithm	1116		900	1000	1000	BSC/MN
Francesco Luigi Gervasio	The role of the membrane in the allosteric regulation of receptor kinases	1100		1000	1000	2000	BSC/MN
François Massonnet	Ensemble sea ice data assimilation for polar prediction	900		7000	20000	10	BSC/MN
Gregori Ujaque	Au-catalyzed Hydration of unsaturated bonds: the effect of water solvent in the mechanism		100	2000	6000	200	BSC/MN
Grigory E. Astrakharchik	Dynamical properties of quantum systems	200		300	200	10	BSC/MN
		90		50	500	10	BSC/MT
Gustavo Yepes	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	630	270	20000	80000	330000	BSC/MN

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Ignacio Pagonabarraga	Self-assembly in actuated and active soft matter	1850		4000	4000	4000	BSC/MN
Ivone Jiménez-Munt	Modeling the Topographic Evolution of Iberia (MITE)	600		1500	15000	15000	BSC/MN
Javier Carrasco	Enhancing Ionic Conductivity of Lithium Garnets through Cationic Doping	286		200	300	30	BSC/MN
Javier Carrasco	First principles study of P2- and O3-Na <sub>2</sub> /3Fe <sub>2</sub> /3Mn <sub>1</sub> /3O <sub>2</sub> cathode materials for low-cost batteries	315		220	250		UV
Javier Trujillo Bueno	Radiative Transfer Modeling of the UV Spectropolarimetric Observations Obtained with CLASP	1700	460	4000	60	10	BSC/MN
Jordi José	Multidimensional simulations of mixing of novae: from the onset of Kelvin-Helmoltz instabilities to envelope detachment	650		8500	8500	4000	BSC/MN
Jordi Villà-Freixa	Lipid-dependent binding of neutralizing and nonneutralizing antibodies to the membrane-proximal external region of HIV gp41	350		60	120		CESGA
Jordi Torra i Roca	Gaia: Data Processing and Simulation of Telemetry Stream	1500		80000	95000	120000	BSC/MN
Jorge Ramirez	Mechanisms of Molecular Motion in Polymers with Nonuniform Stiffness	90		200	200		UPM
Jose E. Roman	GPU codes for (block) orthogonalization in the context of iterative linear algebra solvers	14		800	800	10	BSC/MT

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
José Miguel Alonso Pruneda	Competition between Charge Density Waves and Superconductivity in single layers of transition metal di- and tri-chalcogenides	537		100	100		IAC
Juan Ignacio Beltran	First principles study of ferroelectric-based heterojunctions: The role of extrinsic interfacial effects.	100		200	300		UPM
Juan Jose Novoa Vide	Towards the rational design of new switchable dithiazolyl-based bistable magnetic materials	368		10	80	10	BSC/MN
Konstantin Neyman	Structure and surface composition of Pt-based bimetallic nanoparticles for catalysis and beyond	717		900	900		UZ
Leonardo Pardo	Understanding potency and selectivity of BACE1 inhibitors using computational tools	516		2000	2000	10	BSC/MN
Maciej Lewenstein	Two-electron strong field processes driven by long wavelengths laser pulses and plasmonic-enhanced fields	1118		8000	8000	8000	BSC/MN
Manel Perucho Pla	The deceleration of extragalactic jets	400		2000	2000	10	BSC/MN
		400		2000	2000		UV
Manuel Alcamí	Theoretical modelling of NO removal catalysed on metal surfaces.	275		300	500	10	BSC/MN
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Revealing the active site for CO oxidation on Au/ceria model catalysts	1100	200	400	300		UV
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Toward rational design of Ni-ceria catalysts for increasing natural gas exploitation: the methane dry reforming reaction		200	400	300		FCSC

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Marta Reynal-Querol	Computing pixel base socio-economic measures to analyze economic development	700		1500	1500	1500	BSC/MN
Martin Obergaullinger	Stellar core collapse with rotation and magnetic fields	210	50	200	1500		UMA
Mercedes Alfonso Prieto	Modulation of ligand-gated ion channels by light-switchable molecules	120		2000	2000	3000	BSC/MT
Natalia Calvo Fernández	Porting CESM1.2 and running WACCM5 on MareNostrum 3	220	90	6000	5000	12000	BSC/MN
Nicola GA Abrescia	Structure of large viruses with a membrane studied by high-resolution cryo-electron microscopy	207,36		1500	2000		UMA
Omar Bellprat	Extreme climate event attribution using dynamical seasonal predictions	430	106	2000	10000	10	BSC/MN
Pablo Fosalba	Fast and accurate approximations to massive Nbody simulations	400		30000	15000	30000	BSC/MN
Pablo Ordejón	Thermal conductivity of 2D materials from first principles	368		300	4	10	BSC/MN
Pablo Ordejón	Thermal energy storage in molten salts and nanofluids	600		500	150	10	BSC/MN
Pablo Palacios	Theoretical calculations of band alignment in thin film CuGaS <sub>2</sub> doped with Cr.	100		500	800		UZ
Perla Wahnón	Search of dopants to enhance the light absorption in photovoltaic perovskites by two-photon process	70	70	500	800		CESGA
Ramiro Logares	Microbial Oceanomics	100	50	8000	4000		UZ
Ramon Crehuet Simon	PCNA sliding mechanism on DNA	200		2000	2500	2000	BSC/MT

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Rubén Pérez	Friction Force Microscopy in water: towards more realistic surface topologies	400		4000	3000		CSUC
Rubén Pérez	Hydration Properties of Single-Stranded DNA Films	50		3000	3000	3000	BSC/MT
Santiago Badia	Performance and scalability analysis of balancing domain decomposition by perturbation	200		400	800	10	BSC/MN
Sascha Husa	Preparing for the second observation run of advanced gravitational wave detectors	1800		2000	5000	10000	BSC/MN
Sergio Diaz Tendero	Ab initio molecular dynamics of photovoltaic organic self-assembled monolayers adsorbed on metal surfaces	113		400	600		CENITS
Sergiu Arapan	A genome materials initiative for the discovery of future and strategic permanent magnets.	200		2000	2000		UPM
Shimpei Futatani	Non-linear MHD modelling of pellet injection for ELM control in fusion plasmas	800	300	10000	30000	10000	BSC/MN
Silvia Osuna	Markov State Models for Enzyme Design	288		5000	5000	10	BSC/MT
Stefan Bromley	Development of New TiO <sub>2</sub> -SiO <sub>2</sub> Mixed Oxide Materials: From Nanoscale to Bulk	250		1000	2000		UAM
Stefan Bromley	Evaluating the Potential Experimental Realisation of 2D Materials based on Radical Building Blocks	737		1000	2000		UMA
Victor Homar Santaner	Predictability of Mediterranean severe weather: contribution of HyMeX multicomponent observing systems	360		20000	1000	10	BSC/MN
Xavier Barril	Identification of cryptic pockets with organic co-solvents	250		200	200	10	BSC/MT

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Xavier Daura	A molecular-dynamics study of the temperature dependence of polypeptide-hydration thermodynamics	800	100	7000	1100		UC

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