

Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación

Resolución Comité de Acceso, Asignación de Horas de Supercomputación para la Red Española de Supercomputación (RES) 3er período 2017

Barcelona, Octubre 2017

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

Los 88 millones de horas son 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 Tecnolóxico de Supercomputación de Galicia (CESGA).

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 las 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 2018.

Para mejorar como se comparten los recursos asignados entre las diferentes actividades, y evitar así las concentraciones de uso 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 15 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
Alejandro Luque Estepa	Electro-hydrodynamic simulation of the streamer-to-leader transition in lightning and other long electric discharges	420	0	1000	2500	0	BSC/MN
Anne Dejoan	Direct Numerical Simulations of inertial particles settling in homogeneous isotropic turbulence	486,4	0	1000	1000	1000	BSC/MN
Benjamí Martorell Masip	DFT Modelling of Nanoparticles for Cytotoxicity Descriptors: TiO ₂ for the standardization of the method	400	0	1000	3500	0	CSUC
Carlos Hernández-García	Towards a new generation of X-ray lasers with controlled light angular momentum	0	600	4000	4000	8000	BSC/MN
Carlos Martí Gastaldo	Chemical engineering of photocatalytic Metal-Organic Frameworks: electronic structure and band gap modulation	280	0	800	500	150	BSC/MN
Carme Rovira	Elucidating molecular mechanisms of glycosidases involved in disease	461	0	12300	12300	0	BSC/MN
		96	0	12300	12300	12300	BSC/MT
	Deciphering mechanisms of glycosidic bond biosynthesis using QM/MM methods	717	0	12300	12300	12300	BSC/MN
		131	0	12300	12300	12300	BSC/MT

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Carmen Domene	'Chameleonic' behaviour of small peptides:mechanistic studies of the micelleinduced structural transition between two ordered peptide structures	500	0	500	500	0	UPM
Carmen Jiménez Calzado	Spin transitions in non-classical spin-crossover compounds based on Cu(II) and nitronyl nitroxide radicals	670	0	2000	2000	0	IAC
Chris Lorenz	Atomistic Simulations to Investigate Phosphocholine Micelle Self-assembly and Degradation	180	50	400	400	0	CENITS
	Understanding the molecular interactions that allow drug molecules to passively diffuse across the blood brain barrier	350	100	400	400	0	FCSCCL
Daniel Dagnino Vazquez	High-resolution models of rock properties and inter-plate geometry in subduction zones: the upper plate	1300	0	400	400	400	BSC/MN
Daniel Mira	High-fidelity large-eddy simulations of the reacting flow of a swirl-stabilized hydrogen flame with a non-swirling axial jet	0	750	5000	5000	5000	BSC/MN
David Mateos	ShockWave Evolved Collisions	500	700	8192	8192	128	BSC/MN
Edilberto Sánchez González	Global gyrokinetic turbulence simulations in stellarator configurations with EUTERPE	3500	0	14000	3000	14000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Elena Khomenko	Super-granular scale solar magneto-convection simulations till chromospheric heights.	0	700	8000	8000	8000	BSC/MN
Eliseo Ruiz Sabín	Cooperativity Effects in Spin Crossover Complexes: Periodic Calculations and Entropic-Phonon Contributions	1200	0	120	20	0	UMA
Emilio Artacho	Electronic stopping power of heavy ions in transition metals from time-dependent density functional theory	0	800	2000	750	2750	BSC/MN
Ernest Giralt	Cis-proline peptide permeability. A la carte cyclic permeable hexapeptides	1228	0	1000	600	1000	BSC/MN
F. Javier Luque	Mechanism of covalent inhibition of beta-amyloid aggregation by phenolic compounds	645	0	6000	3000	0	BSC/MN
		107	0	6000	3000	0	BSC/MT
Federico Gago	Exploring HtrA1 distal mutations involved in cerebral vessels-related diseases	1400	0	5120	1000	0	BSC/MN
Fernando Martín García	Chemical reactions on graphene/Ru(0001)	230	0	300	500	0	UPM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Fernando Martín García	Attosecond atomic and molecular dynamics	1000	0	300	1000	1000	BSC/MN
Fernando Mellibovsky	Effects of time-periodic spanwise fluidic actuation on the flow around a cylinder	1500	0	4096	4096	0	FCSCCL
Fernando Moreno Insertis	The magnetism of the solar atmosphere: cool and hot ejections and coronal bright points.	3500	0	2000	10000	5000	BSC/MN
Ferran Feixas	Simulating ligand binding and unbinding with accelerated molecular dynamics	40	0	5000	5000	0	BSC/MT
Francesc Illas i Riera	Excited states of realistic anatase TiO ₂ nanoparticles from many body GW techniques: relevance to photocatalytic activity	1300	0	800	1800	0	CESGA
	Prediction of new materials for CO ₂ storage, activation and conversion through computational screening and machine learning techniques	1474	0	800	1600	1600	BSC/MN
Francesc Viñes	First Principles Study of Size, Shape, and Phase Effects on ZnO Photocatalyst Nanostructures	1420	0	300	600	800	BSC/MN
Francesc Viñes Solana	CO ₂ adsorption and activation by early transition metal oxycarbides	640	0	500	700	0	FCSCCL

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Francesca Peiró	Efect of oxygen vacancies in bismut oxide Energy-Loss Near-Edge Structure spectra by ab initio simulations.	25	0	1000	1000	0	CENITS
Francisco Prada	X-ray galaxy cluster mocks for the eROSITA space mission	0	200	300	6000	6000	BSC/MN
Geraint Pratten	Precessing Binary Black Hole Mergers in the Advanced LIGO Era: Preparing for O3 and Beyond	2592	0	4000	8000	0	BSC/MN
Grigory E. Astrakharchik	Quantum simulation of ultradilute liquids	200	0	300	200	0	BSC/MN
		90	0	50	500	0	BSC/MT
Gustavo Yepes Alonso	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	2000	0	40000	40000	270000	BSC/MN
Helvi Witek	Black holes in dark matter environments	1000	0	1000	2000	0	IAC
Ignacio Pagonabarraga	Unraveling the mechanical properties of active assemblies	4900	0	4000	4000	4000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Ivette Rodríguez	On the effects of grooves on the boundary layer dynamics and heat transfer of a sphere at low-to-moderate Reynolds numbers	921,6	0	2048	4096	4096	BSC/MN
Ivone Jiménez Munt	Geodynamic modeling of the Westernmost Mediterranean and the Iberia Peninsula region	2000	0	4800	4800	0	UMA
Javier Carrasco Rodríguez	High-Performance P2-Phase Na ₂ /3Mn _{0.8} Fe _{0.1} Ti _{0.1} O ₂ Cathode Material for Na-Ion Batteries	432	0	300	250	0	UV
Javier García-Serrano	Stratospheric influence on climate variability and predictability	875,52	0	3000	10000	0	BSC/MN
Javier Jiménez	Finding Periodic Orbits in Homogeneous Turbulence with GPUs	500	0	2000	200	0	BSC/MT
Javier Llorca	Multiscale Modelling of Precipitation Strengthening in Metallic Alloys	1000	0	1500	20	0	CESGA
Javier Sancho Sanz	Predicting computational resources for calculating complete "mutomes"	1500	0	3000	1000	0	UC
		0	200	3000	1000	4000	BSC/MT
Javier Trujillo Bueno	A Line Ratio Technique for Probing the Chromosphere-Corona Transition Region	1200	0	6000	80	0	BSC/MN
Jesus Marco de Lucas	Classification of HEP collisions using Convolutional Neural Networks	0	20	5000	5000	0	BSC/MT
Joan Baiges	Variational Multi-Scale error estimators for Adaptive Mesh Refinement simulations of turbulent and aeroacoustic flows.	400	0	500	1000	0	IAC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Jordi Villà-Freixa	HIV neutralizing antibodies	0	750	100	150	150	BSC/MN
Jose E. Roman	Scalable hybrid MPI-GPU codes for large-scale eigenvalue computations and matrix functions	10	0	800	800	1	BSC/MT
Josep M Bergadà Granyó	3D Ahmed body with Active Flow Control	1200	0	4096	4096	0	CESGA
Juan Camilo Acosta Navarro	Improving seasonal forecast capacity by including sea ice data assimilation	0	1000	2000	10000	0	BSC/MN
Juan I. Beltrán	Ab-initio simulation of the electronic and magnetic properties in iridate-based oxide heterostructures	160	0	70	700	0	CENITS
Juan J. Novoa Vide	Elucidating the mechanisms of phase transition in switchable-diradical-based materials	484	0	10	90	0	BSC/MN
Linda Angela Zotti	Magnetism in blue-Copper proteins	0	194	300	300	300	BSC/MN
		0	100	0	0	0	BSC/MT
Lluís Blancafort	Water splitting reactivity of phosphorous doped graphene	250	0	500	500	0	UPM
Luis González MacDowell	Premelting and roughening phase transitions on the surface of ice	2212	0	1024	2048	2048	BSC/MN
Manuel Alcami	Theoretical modelling of NO removal catalysed on metal surfaces.	200	0	300	500	0	UPM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Recycling chlorine from HCl: Mechanism of HCl oxidation over ceria surfaces	963,84	0	300	300	25	BSC/MN
Marija Vranic	Multidimensional particle-in-cell simulations for TNSA ion acceleration using targets with a nanostructured surface	4500	0	10000	10000	0	BSC/MN
Marta Reynal Querol	Computing pixel base socio-economic measures to analyze economic development	400	0	4000	4000	4000	BSC/MN
Martin Obergaulinger	Three-dimensional morphology of stellar core collapse with rotation and magnetic fields	1500	0	100	4000	0	BSC/MN
Martine Bosman	Monte Carlo Simulation for the ATLAS Experiment at the CERN LHC	100	0	20000	20000	20000	BSC/MN
Maximilian Attems	Fast thermalization of the Quark-Gluon-Plasma	600	0	512	7168	0	UPM
Miguel Angel Otaduy	Scale-able Bridges between Molecular and Macroscopic Dynamics	0	20	1000	10	0	BSC/MT
Miquel Coll	Structure of viral portal proteins	0	10	15000	2000	0	BSC/MT
Miquel Solà Puig	Density functional study of the Diels-Alder reactivity of endohedral metallocarbon nano-onion (EMCNO) Li+@C60@C240	491,52	0	50	200	0	UZ
Modesto Orozco López	MODEL-tox. Construction of an MD library of toxicology relevant proteins in the human proteome	1200	0	1000	500	1000	BSC/MN
Nuria Lopez	Theoretical studies on the catalytic needs for an Artificial Leaf (A-LEAF)	0	600	500	1000	0	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
	Carbon-based materials as active supports in heterogeneous catalysis	660	0	500	1000	0	UZ
Oriol Lehmkuhl	Large-eddy simulation of massively separated aircraft wake	1500	0	4096	4096	4096	BSC/MN
Pat Scott	Improving searches for supersymmetry with GAMBIT	4999	0	20000	20000	30000	BSC/MN
Pau Figueras	New frontiers in numerical general relativity	1500	0	10000	10000	10000	BSC/MN
Pedro José Martínez Ferrer	High Fidelity Numerical Simulations of Shock-Induced Combustion Phenomena	500	0	10000	0	0	UC
Ramiro Logares-Haurie	Characterisation of novel microbial genomes extracted from global and local marine multiomics datasets	403,2	0	2000	8000	0	BSC/MN
Roberto Luis Iglesias Pastrana	First-principles modelling of irradiation effects on light species retention and diffusion in materials relevant for nuclear technologies (2nd period)	774	0	1000	1000	0	FCSCCL
Ruben Perez Perez	How soft is a single protein?: Atomistic insights from molecular dynamics simulations	387	0	5000	5000	5000	BSC/MT
	Effect of salt concentration on the mechanical properties of double stranded DNA and RNA under constant stretching forces	350	0	6000	6000	6000	BSC/MT
	Understanding ordering of nanometric iridium clusters on graphene grown on Rh(111)	0	225	3000	1000	0	UPM
Santiago I. Badia Rodríguez	Scalability assesment of multilevel domain decomposition solvers for a novel cut finite element formulation	400	0	400	4000	0	BSC/MN
Sascha Husa	Modelling gravitational wave signals from eccentric binaries	3400	0	7000	12000	15000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Sergio Diaz-Tendero Victoria	Ab initio molecular dynamics of photovoltaic organic self-assembled monolayers adsorbed on metal surfaces	256	0	400	600	0	UAM
Shimpei Futatani	Non-linear MHD modelling of pellet injection for ELM control in fusion plasmas	1497,6	0	1500	20000	500	BSC/MN
Sílvia Osuna	The role of distal mutations and allosteric regulation on the catalytic efficiency of tryptophan synthase	0	50	5000	5000	2000	BSC/MT
Stefan Bromley	Towards more realistic inorganic nanoparticle models: hydroxylated nano-TiO ₂ -SiO ₂	1014	0	1000	8000	0	UC
Víctor Homar Santaner	Predictability of Mediterranean severe weather: Benefits of Satellite Data Assimilation systems on the HyMeX severe weather events.	1113,6	0	20000	1000	0	BSC/MN
Xavier Barril	An automated platform for fragment evolution	1800	0	1000	100	0	BSC/MN
		420	0	5000	0	0	BSC/MT
Xavier Luri Carrascoso	Gaia: Cyclic Data Processing and Catalogue Simulations	1000	0	150	175	250	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.

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.