

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 2013

Barcelona, Octubre 2013

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 Enero 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 ha limitado la cantidad asociada a cada actividad a un máximo de 1,7 millones de horas. PRACE (www.prace-ri.eu) ofrece cantidades de horas a partir de estas capacidades y se debería solicitar a PRACE dichos proyectos. Esta nueva recomendación del Comité de Acceso se presentará a los órganos de gobierno del BSC para que se establezca de forma adecuada las modificaciones a la normativa de acceso.

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. En el caso de actividades con doble asignación a diferentes máquinas, se repite el título de la actividad. En este caso, al ser el disco compartido por ambos supercomputadores, sólo se indica una vez.

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Agustí Lledós	Oxidative addition at Pd centers by explicit solvent ab initio molecular dynamics	460		1000	4000	1000	BSC/MN
Albert Rimola	Adsorption of Atomic Hydrogen on Defective Non-Stoichiometric Surfaces of Cosmic Dust	350	100	100	200	1000	BSC/MN
Alessandro Stroppa	MEMOIR: Multiferroic and magnetoElectric Metal Organic frameworks	1000	200	700	400	600	BSC/MN
Ángel Martín Pendás	Revealing insulator-to-metal transition in Mott materials with delocalization measures	480	120	400	500		UMA
Angel Rubio	Ab-initio calculations of thermoelectric properties in nanostructures: silicene, germanene, Si/Ge heterostructure, and two-dimensional transition-metal-dichalcogenides	819		500	600	300	BSC/MN
Angel Rubio	Performance of Time Dependent Density Functional Theory in the strong field photoionisation of noble gas atoms	840	90	300	100		UZ
Annapaola Migani	Role of triplet excitons in the photocatalysis of water and methanol on rutile TiO ₂ (110).	220	56	100	300		UPM
Antoni Planas	Evidence of Conformational Selection in a Glycosyltransferase Structure?	200	56	700	700		UPM
Assensi Oliva	Direct Numerical Simulation of stabilised jet flames.	400	100	400	4096	4096	BSC/MN

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Assensi Oliva	High Performance Computing of the flow past a spinning cylinder. Application to flow control.	600		1024	4096	4096	BSC/MN
Assensi Oliva	Turbulent flow through a square duct: direct numerical simulation and advanced turbulence modeling	600	200	250	2048	2048	BSC/MN
Avelino Corma Canós	Rationalization of the different reactivity of CeO2 crystallographic facets from first principles calculations	173		200	300	100	BSC/MN
Carlos Vega	Ice crystallization	160	50	500	0		UV
Carme Rovira	Conformational free energy landscapes of carbohydrates	460		2000	2500	3000	BSC/MN
Carme Rovira	Elucidating the catalytic mechanism of retaining glycosyltransferases	400		2000	2000	3000	BSC/MN
Carme Rovira	Conformational free energy landscapes of carbohydrates	128		2000	2000		BSC/MT
Carme Rovira	Elucidating the catalytic mechanism of retaining glycosyltransferases	128		2000	2000		BSC/MT
Claudio Cazorla	Accuracy of Density Functional Theory Techniques in Prediction of Boron Nitride Gas-Adsorbent Materials	510	120	100	200		IAC
Edilberto Sánchez	Electrostatic microinstabilities and zonal flows in stellarator plasmas.	400		1200	500	2000	BSC/MN
Eduardo Ariel Menendez	Formation energies of point defects in cadmium telluride	600	70	200	1000		UPM
Elena Khomenko	Simulations of dynamics of partially ionized solar atmosphere	100	30	8192	8192	8192	BSC/MN
Emilio Artacho	Role of surface defects on the formation of the 2-dimensional electron gas at polar interfaces	250		200	0	200	BSC/MN
Enrique Martinez Gonzalez	Constraints on inflationary models of the universe based on CMB data	60	40	1000	1000		UPM

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Ernest Giralt Lledó	Improvement of the affinity of a membrane receptor ligand	420		300	500		UV
Fco. Javier Luque Garriga	ligand binding and unbinding to the M2 proton channel	500		500	300	200	BSC/MN
Fco. Javier Luque Garriga	ligand binding and unbinding to the M2 proton channel	18		400	200		BSC/MT
Fernando Martin	XUV/X-ray laser pulses for ultrafast electronic control in molecules	350		300	1000	1000	BSC/MN
Francesc Illas	Electronic structure of semiconductors by means of quasiparticle calculations: relevance to photocatalysis	555	100	400	800		UPM
Francisco J. Doblas-Reyes	Ocean tuning in high-resolution climate prediction experiments	1700		1000	17000	10000	BSC/MN
Grigory E. Astrakharchik	Diffusion Monte Carlo simulation of quantum gases and solids.	80		100	100	0	BSC/MN
Grigory E. Astrakharchik	Diffusion Monte Carlo simulation of quantum gases and solids.	45		200	100		BSC/MT
Gustavo Yepes	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	600		8000	8000	100000	BSC/MN
Ignacio Pagonabarraga	Self assembly in active suspensions	970		2000	2000	2000	BSC/MN
Jana Selent	MOLECULAR DYNAMICS OF GPCRS IN LIPID RAFTS OF CNS DISEASES	600		1000	1000	250	BSC/MN
Javier Carrasco	First-principles study of Na insertion/extraction in the FePO4-NaFePO4 system for cathode material in Na-ion batteries	750	180	350	300		UV

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Javier Trujillo Bueno	THREE DIMENSIONAL SIMULATIONS OF THE GENERATION AND TRANSFER OF POLARIZED RADIATION IN THE SOLAR OUTER ATMOSPHERE	1700		3000	20	1000	BSC/MN
Johan Jansson	High performance adaptive finite element methods for turbulent flow and fluid-structure interaction with applications in biomechanics, aerodynamics and aeroacoustics	600	200	5000	300	5000	BSC/MN
Johannes Jaeger	Reverse-engineering embryo segmentation patterning in flies: from Clogmia to Megaselia	100		20	20	1000	BSC/MN
Jordi Teixidó	Development of novel treatments for myotonic dystrophy: in vivo drug discovery	20	3	500	100		BSC/MT
Joseba Alberdi	Implementation of new exchange correlation functionals and molecular dynamics calculations in Octopus	100		2000	2000		UPM
Juan Jose Novoa Vide	Ab initio molecular dynamics of organic ion-radical pairing in solution	308		5	100	1000	BSC/MN
Leonardo Scapozza	Structural modeling of an RNA stem-loop that regulates the alternative splicing of SMN2: a new therapeutic target in Spinal Muscular Atrophy	288		1000	400		BSC/MT
Manuel Alcami	Charge transfer and self-assembly of molecules on modified metal surfaces	200	150	500	500		UC
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Molecular-level understanding of CeO ₂ as catalyst for partial alkyne hydrogenation	352		400	300	25	BSC/MN
Mariano Carrión-Vázquez	Study of the fluctuations of neurotoxic proteins	800	200	15	15		UC
Marino Arroyo Balaguer	Bridging the scales in biomolecular mechanics: membranes and coiled-coils	230		1500	1000	1200	BSC/MN

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Marino Arroyo Balaguer	Phase field modeling of biomembrane dynamics and crack propagation	450		500	500	1000	BSC/MN
Mercedes Boronat	First-principles design of gold catalysts for C-C bond forming reactions: optimizing particle size and morphology for dissociation of C-X bonds with X = Cl, Br, I.	405	120	200	200		UV
Miquel Solà	Bingel-Hirsch additions on Endohedral Metallofullerenes. How are they affected by the metallic cluster, the strain energy and the solvent effects?	250	80	50	200	1000	BSC/MN
Miquel Solà	Computational exploration of fullerene and endohedral metallofullerenes charge transfer properties for organic photovoltaic devices	307		50	200	1000	BSC/MN
Nuria Lopez	Theoretical Modeling of Aquous Phase Reforming: 1st period	1200	300	1000	500	150	BSC/MN
Pablo Chacon	Study of the nucleotide conformational switch in bacterial cell division proteins by all-atom simulations	983		80	120	1000	BSC/MN
Pablo Fosalba	The MICE project -1. Mapping the high-redshift universe	360	190	40000	40000	60000	BSC/MN
Paolo Padoan	From the Galactic Fountain to Single Stars	40			200		BSC/Altix
Paolo Padoan	From the Galactic Fountain to Single Stars	1700		30000	30000	50000	BSC/MN
Peter Vincent	Developing Software for High-Order Simulation of Transient Compressible Flow Phenomena: Application to Design of Unmanned Aerial Vehicles	110	30	10000	200		BSC/MT
Prof. Adriana Zagazi	Study of Phe allosteric site of phenylalanine hydroxylase by molecular dynamics	100	31	1500	500		ITC
Ramiro Logares-Haurie	Microbial Oceanomics using Next-Generation Sequencing (454/Illumina)	360		6000	600	1000	BSC/MN
Ramon Crehuet Simon	Exploration of the unusual biophysics of Intrinsically Disordered Proteins using Monte Carlo simulations	250	75	1000	50		UMA

Lider	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site/Máquina
Ramon Crehuet Simon	Exploring the Small Molecule Binding effects in protein folding equilibrium	250	75	1000	50		UMA
Rebeca García Fandiño	Transmembrane Ion Transport through alpha, gamma-Peptide Nanotubes	650		2000	2000		IAC
roberto san jose	Fuel moisture content models to forest fire behaviour forecast	800	250	2000	4000	6000	BSC/MN
Ruben Perez	First principles simulations of Scanning Probe Microscopies experiments on graphene heterostructures and metal oxides	290	100	2000	1000	2000	BSC/MN
Santiago Badia	Improving the scalability of balancing substructuring domain decomposition methods for computational fusion	130	70	200	400	0	BSC/MN
Sascha Husa	Coalescence of Black Hole Binary systems	800		1000	2000	5000	BSC/MN
Teresa Parra	Mixing features of swirling flows in combustors	480	120	4000	6000		UV
Victor Martin Mayor	Random Field Ising Model in four spatial dimensions and beyond	600		200	20	0	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.