

# Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación

## Resolución Comité de Acceso, 2o período 2010

Barcelona, Junio 2010

## 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 27 millones de horas, 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.

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 Mayo.

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 solicita el uso en exclusiva de un nodo (que tiene cuatro o dos procesadores, dependiendo de la maquina) durante 1 hora, se considerará el uso de 4 ó 2 horas.

### 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 calidad del proyecto científico global en la que se incluye la actividad (20%)
- b. La importancia de la actividad propuesta, así como de los cálculos realizados en MareNostrum y las máquinas de la RES para la consecución del objetivo del proyecto (30%)
- c. Las credenciales científicas del grupo solicitante (10%)
- d. Experiencia en High Performance Computing (10%)
- e. Necesidad de supercomputadores para la realización de los cálculos (20%)
- f. La conveniencia técnica de la actividad a la arquitectura de MareNostrum y de los equipos computacionales disponibles en la RES (el 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. Enviar al BSC-CNS una copia electrónica de cualquier publicación científica que provenga de la utilización de los recursos de la RES.
  - b. Cita explícita en estas publicaciones de que se han utilizado dichos recursos. En la página web del BSC, se puede encontrar el texto que se debe incluir.
  - c. Seguimiento de las reglas de uso del MareNostrum y las políticas de seguridad y confidencialidad de la RES.
  - d. Garantizar que no se utilizarán los resultados obtenidos usando recursos de la RES BSC-CNS para cualquier propósito con beneficios, solamente utilizables bajo términos de la "investigación pública"
  - e. Proporcionar la información y documentación adicionales, como videos, presentaciones y cualquier material, etc. para ser usado como material de la difusión de la RES.

## 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 GRID superscalar (<http://www.bsc.es/grid/gridsuperscalar>). 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.

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Agustí Lledós	Simulation of catalytic processes in aqueous media	750		500	1500	1000	BSC
Albert Compte Braquets	Neuromodulation of prefrontal cortical circuits implicated in cognition and its role in schizophrenia and other neurological disorders		200	400	20	1000	BSC
Alfonso Jaramillo	Synthesis and Characterization of a Synthetic RNA-based Regulatory Network in E. coli		200	10	50	1000	BSC
Angel Rubio	Optical and Charge Transfer Properties of Hybrid Organic-Dye/Oxide Nanostructure and Interface Systems for Solar Cells Application (ETSF activity)	180		1500	2000		UPM
Antonio Morreale	Using VSDMIP in the search of new inhibitors: hepatitis C virus and calcineurin as new targets.	1000		1000	1000	1000	BSC
Assensi Oliva Llena	Direct Numerical Simulation of turbulent flows in bodies of revolution using unstructured meshes. Flow past a sphere.	300		150	1000	5000	BSC
Assumpta Parreno García	Study of SubAtomic Interactions through Lattice Quantum Chromo Dynamics on Mare Nostrum (SAIL)	900		2000	2500	5000	BSC
Atsushi Urakawa	New computational methods in spin-crossover transitions of molecules and materials		50	200	200	1000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Avelino Corma Canós	Searching selective catalysts for a phosgene-free synthesis of aromatic polyuretanés	450		100	250	1000	BSC
Carles Bo Jane	Chemical reactions in cavities: Insight into Rhodium catalyzed mechanisms and NMR studies.		200	30	30	1000	BSC
Carles Serrat	Scaled Attosecond Physics	600		1000	1000	2000	BSC
Carlos Sanz Navarro	QM/MM simulations of protein immobilization on surfaces via metallic clusters	200		30	5		UMA
Carme Rovira	Unraveling the reaction and drug activation mechanisms in catalase-peroxidases by means of QM/MM Car-Parrinello simulations	550		1200	2000	2500	BSC
Carme Rovira	Molecular modeling of enzyme-substrate interactions and reaction mechanisms in carbohydrate-bound enzymes and aldo-keto reductases	200		1200	1200	2000	BSC
Cristina Diaz	Molecular reactivity on superstructures and monolayers adsorbed on metal substrates		40	120	200	1000	BSC
Daniel Stich	IBERREF: A 3D seismic reference model for the Iberian lithosphere		20	200	20		UMA
Edilberto Sánchez	Influence of the turbulent flows on transport in fusion plasmas	100		1250	300	2000	BSC
Elena Khomenko	Magneto-convection and wave simulations of solar and stellar atmospheres	300		2000	2000	4096	BSC
Eliseo Ruiz	Magnetic Properties of large Single Molecule Magnets	800		40	20	1000	BSC
Emilio Artacho	Ferroic complex oxide heterostructures	400		180	100		UPM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Enrique Martinez Gonzalez	Study of the non-Gaussianity of the CMB		100	500	500		UC
Ernest Giralt Lledó	Design of ligands able to recognize protein surfaces	120		100	200	1000	BSC
F. Javier Luque	Mechanism of NO transport by nitrophorins	360		300	300	1000	BSC
Federico Gago	Exploration of longitudinal interactions in assembled bacterial ftsz using molecular dynamics and search for the binding site of small-molecule inhibitors of its gtp-ase activity	475		400	500		IAC
Federico Mescia	Kaon Physics on Lattice QCD for up, down, strange and charm dynamal quarks	1000		500	1000	1000	BSC
Fernando Martin Garcia	Probing molecular nuclear and electron dynamics through ionization induced by attosecond xuv pulses and free electron lasers	500		300	1000	1000	BSC
Fernando Moreno-Insertis	Eruptive phenomena in the atmosphere of the Sun and cool stars.	50		1000	1000	3000	BSC
Francesc Illas	Computational design of new catalysts based on nanoparticles	400		300	500	1000	BSC
Francisco J. Doblas-Reyes	Assessment of the limit of initial-condition useful skill in interannual climate prediction	600		100	500	1000	BSC
German Sastre Navarro	Gas storage on metal-organic frameworks	32		100	100		UZ
Gianfranco Pacchioni	Metal clusters on oxide ultra-thin films: the way towards new materials with unprecedented properties	100		100	100		IAC
Gustavo Yepes Alonso	The Marenostum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	1200		4000	4000	75000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Ignacio Pagonabarraga	Multiscale dynamics in complex fluids: self assembly, instabilities and molecular specificity	80		500	500	1000	BSC
Iñaki Ruiz-Trillo	Phylogenomics of Opisthokonts	100		10	10		UC
Jaime Rubio Martinez	Understanding protein-protein interactions: towards the design of inhibitors for the Bcl-2 protein family		100	500	500		UPM
Jaume Casademunt	Turbulent bubble suspensions in microgravity (Test Activity II)	20		300	300	1000	BSC
Javier Fdez Sanz	Dye-Sensitized Solar Cells: Model Quantum Simulations of the Electrode Structure and Dye-Electrode interactions.		200	750	1200		UPM
Javier Garcia Blas	Hierarchical scalable file cache solution for clusters and supercomputers	18		50	1000		UPM
Javier Jimenez Sendin	Simulation of Turbulent Boundary layers	200		500	2500	100000	BSC
Javier Junquera	First-principles estimations of the screening-length at metal/oxide interfaces	225		100	100		UC
Johannes Jaeger	Reverse-engineering embryo segmentation patterning in flies	333		500	20	1000	BSC
Jordi José	Multidimensional simulation of stellar explosions: classical and primordial novae, and type I X-ray bursts	256		1500	1250	3000	BSC
Jordi Solé Ollé	Evaluation of ocean data assimilation model scheme in Alboran Sea area.		40	500	1000	4000	BSC
Jordi Torra i Roca	Gaia: Simulation of Telemetry Stream	400		100	4000	15000	BSC
José Luis Velasco	Calculation of the bootstrap current profile in TJ-II stellarator with NEO-MC		200	5	5		ITC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
José M. Saá	Exploring Supersandwich Organolithium Compounds as Cathodic Materials for Lithium-ion Batteries	150		200	500	1000	BSC
Jose Ranilla Pastor	Search for Commutative Semifields of order 128 (Final phase)	1000		50	50		UPM
Juan Jose Novoa Vide	Accurate methods for the theoretical prediction of polymorphic crystalline materials of technological interest: magnetic materials having bistable properties	50		5	10	1000	BSC
Luigi Cavallo	Ab initio Molecular Dynamics Simulations of Ru-Catalyzed Olefin Metathesis Reactions	400		30	100	1000	BSC
Luis Garcia Gonzalo	Physical mechanisms involved in transport and in confinement transitions in plasmas	600		300	15		UC
Maguel jngel Bañares Gonzalez	Modeling and experimental study of molecular structure and reactivity of alkali-doped alumina-supported vanadium oxide at submonolayer coverage		10	4	2	1000	BSC
Manel Perucho Pla	Relativistic Outflows: Dynamics and Feedback in Galactic Evolution.	700		2000	2000		UPM
Manuel Alcamí	Self-assembly of molecules on surfaces.	200		300	500		UMA
Manuel Palacin Prieto	The molecular bases of the transport cycle of APC antiporters.	400		400	400		UV
Marcel Swart	Spin-state reactivity studies	245		50	200		ITC
Marcel Swart	Study of the effects of Xe <sub>2</sub> encapsulation inside fullerene compounds		100	50	200	1000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Mariona Sodupe Roure	Structure of water at crystalline and amorphous silica surfaces from ab initio molecular dynamics simulations	80		30	500		UV
Mark S.P. Sansom	Multi-Scale Simulations of Derivatized Carbon Nanotubes - Interactions with Membranes, Water and Ions	308		1000	1000	2000	BSC
Massimiliano Stengel	First-principles study of multifunctional perovskite systems	500		300	500	2000	BSC
Matteo Palassini	Monte Carlo simulation of disordered electronic systems		100	100	100		UZ
Matthieu Verstraete	Electron phonon and anharmonic effects in Antimony under pressure	300		1000	1000		UPM
Mercedes Boronat	Metal supported nano-particles over carbon based nanostructure catalysts for oxygen and hydrogen activation	600		200	400		UPM
Miguel Angel Aloy	Explaining blazars and gamma-ray bursts with numerical relativistic ideal and resistive magnetohydrodynamics	900		256	1000	4000	BSC
Miguel Gonzalez Perez	Molecular dynamics study of ligands binding into the active site of human and yeast dipeptidyl-peptidase III	300		350	100		UPM
Nuria Lopez	HCN synthesis on metals and complex materials: a Density Functional Theory approach: Third period	550		250	200		UMA
Oswaldo Dieguez	First-principles calculations of ferroelectric and magnetoelectric effects in perovskite oxides	200		64	64		IAC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Pablo Fosalba	Large numerical simulations for dark-energy surveys	50		2000	2000	50000	BSC
Pablo J. Ordejón	Electronic Transport in Organic Electronics Materials	480		100	200	1000	BSC
Pedro Reche	Computational modelling of peptide-MHC binding	150		300	300		UZ
Pilar Hernandez Gamazo	Flavour Physics from Mixed-action Lattice QCD	200		1300	2000	20000	BSC
Ramon Reigada	Molecular Dynamics simulations of electroporation in cholesterol-containing membranes: effect of membrane fluidizing agents	400		400	200		UZ
Rebeca García Fandiño	Study of the transport properties of nanotubes in solution and lipid bilayers	231		1000	1000	2000	BSC
Roberto San Jose	BRIDGE Sustainable Urban planning Decision support accounting for urban metabolism	682		2000	2000	10000	BSC
Roderic Guigó	Use of TBLASTX to find regions of homology among multiple large-size full genomes		20	50	15		UV
Roger Guimera	Supercomputation for network reconstruction and feature extraction	10		20	5		UZ
Ronen Zangi	Recognition of hemi-methylated DNA by UHRF1	436		100	100	1000	BSC
Ruben Perez	Reactivity, Synthesis and Storage properties of nanostructures characterized by first-principles calculations and scanning probe techniques.	200		600	400		UV
Sascha Husa	Coalescence of Black Hole Binary systems	500		1000	1000	5000	BSC
Sofyan Iblisdir	Quantum Error Correcting Codes from Matrix Product States		40	500	500	2000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Thomas Schaefer	Molecular dynamics simulation of nucleic acids in ionic liquids		100	200	500		UPM
Toni Gabaldon	Emergence of virulence in human fungal pathogens	318		60	10		UZ
Victor Martin Mayor	Site-Diluted Antiferromagnets in a Magnetic Field: an effective potential approach.	100	500	1000	100	1000	BSC
Vitor Cardoso	High energy collisions of black holes	400		2500	2500		UPM
Xavier Barril	Elucidating allosteric regulation of protein kinases	180		200	50		IAC

Adicionalmente, los siguientes investigadores y proyectos tienen acceso a recursos de memoria compartida

Líder	Título	Khoras	Disk space	Site
Javier Jiménez Sendin	Simulation of Turbulent Boundary layers	20	200	BSC
Rosa Domínguez	Galaxy Formation at Different Epochs and in Different Environments: Comparison with Observational Data (GALFOBS-II)	180	400	BSC

## 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.