

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 2011

Barcelona, Octubre 2011

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 29,5 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, 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 2012.

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 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 videos, presentaciones, y cualquier otro material, para ser utilizado como material divulgativo 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

4.4 Actualizaciones de infraestructuras de CPD

Algunas de las instalaciones de los superordenadores de la RES se actualizarán dentro de este periodo de cuatro meses. Los equipos de soporte avisarán de forma adecuada de estas paradas. En el momento de realizar las asignaciones se han tenido en cuenta estos periodos sin servicio, de forma que no debe afectar a la posibilidad de utilizar todos los recursos concedidos.

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	Phosphine dissociation from Grubbs's catalysts in toluene: an explicit solvent ab initio molecular dynamics modeling	750		200	800	200	BSC
Albert Cirera Hernández	FP7-NMP-245977: Equilibrium and Transport Properties of Silicon Quantum Dots for Tandem Solar Cells	280		30	30		IAC
Alejandro Perez Paz	Optical, electronic and dynamical properties of confined water in carbon nanotubes	500		2000	1500	2000	BSC
Alicia Palacios	Time-resolved electron dynamics in atoms using X-Ray Free Electron Lasers and Ultra-short pulses	74		200	400		UZ

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Angel Rubio	Optical response of silver nanoparticles to femto- and attosecond pulses: the role of the nanoparticle size and geometry		125	500	500	1000	BSC
Angel Rubio	Defects mediated enhancement of TiO ₂ photocatalysis in the visible range: understanding of the wet electron states by ab initio techniques		300	500	400	1000	BSC
Angel Rubio	First principles study of the Supramolecular assembly of conductive 1D Pt-based structures		200	1200	800	8000	BSC
Angel Rubio	Towards a novel oxide electronics": ab initio many body calculation of the electronic properties of interfaces between transition metal oxides"	900		700	500	1000	BSC
Antoni Planas	Amphipathic helices discovery on Mycoplasma genitalium glycosyltransferase structure by means of explicit membrane molecular dynamics simulations.	200		700	700		UV

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Assensi Oliva	Numerical simulations of massive separated flows: flow over a stalled NACA airfoil	152		600	1400		UPM
Assensi Oliva	Exploring new frontiers in turbulent natural convection flows	800		150	800	2048	BSC
Assumpta Parreno García	SAIL: lighth quark mass dependence of two-hadron energies in Lattice QCD	1843		2000	2500	4000	BSC
Avelino Corma Canós	Gold-catalyzed C-C bond forming reactions: identification of the selective active sites	690		100	200	100	BSC
Carles Serrat	Scaled Attosecond Physics	1000		3000	2200	3000	BSC
Carme Rovira	Ab initio metadynamics simulations of the binding of peptides to gold nanoparticles	250		1200	1500	3000	BSC
Carme Rovira	The molecular mechanism of trehalose-6-phosphate synthase	300		1200	1500	3000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Carmen Domene	Interactions between Peptides and Membranes Studied by all-atom free Energy Calculations	350		50	50		UPM
Christian Lorenz	Molecular dynamics simulations of the sintering and coalescence of CuAg core-shell nanoparticles		115	100	200	100	BSC
Daniel Stich	Time reversal imaging of continuous seismic sources		18	300	300		UMA
Elena Khomenko	Magneto-convection and wave simulations of solar and stellar atmospheres	300		2800	2400	8192	BSC
Eliseo Ruiz	Single-Molecule Magnets: Magnetism on Surfaces and Quantum Transport	750		60	10	100	BSC
Emilio Artacho	Interplay between local interface chemistry and longer-range structure	200		200	150		IAC
Enrique Martinez Gonzalez	Constraints on inflationary models of the universe based on CMB data	200		350	500		UC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Ernest Blade	Numerical simulation of urban storm drain structures using SPH		0,2	50	100	1000	BSC
F. Javier Aoiz	Simulations of chemical reactions of diverse interest		120	5	5	100	BSC
Fabien Godeferd	Simulations of turbulence in geophysical flows including added dynamical and topological complexity	200		1000	1000	3000	BSC
Federico Gago	SIMULATION OF THE ENZYME REACTION MECHANISM IN HELICOBACTER PYLORI TYPE II 3-DIHYDROQUINASE TRIMER USING QM/MD HYBRID METHODS	345		450	500	500	BSC
Felipe J. Llanes Estrada	Three-body problem in non-relativistic Chromodynamics and with the Cornell model	250		25	25		UPM
Fernando Martin	Nuclear and electron dynamics in diatomic molecules probed with attosecond pulse trains and infrared pulses	800		250	500	1000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Francesc Illas	Testing Au/TiC as a potential catalyst for CO2 hydrogenation	507		100	300	400	BSC
Francesca Fanelli	Virtual Screening towards the Discovery of Pharmacological Chaperons with Therapeutic Potential for Retinitis Pigmentosa		200	500	50	1000	BSC
Francesco Gervasio	Modelling Protein-protein interactions in protein kinases with a multiscale molecular dynamics approach.	200		3000	2000	2000	BSC
Francisco J. Doblas-Reyes	Sea ice initial conditions for seasonal to decadal predictions	300		300	3500	5000	BSC
Francisco Jarvia Garcia de Abajo	Ab initio calculation of linear responses in graphene nanostructures	32,4		350	350		IAC
Francisco José Olmo Reyes	Light scattering properties of nonspherical atmospheric aerosols for radiative transfer applications: the ALFA database (extension)		82,5	20	100		UPM
Gregori Ujaque	"Palladium-catalyzed oxidations in water"		120	100	600	200	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Gustavo Yepes	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	900		4800	4800	85000	BSC
Helvi Witek	Black hole dynamics in alternative theories of gravity		260	750	750	2000	BSC
Heribert Reis	Molecular design of high-grade nonlinear optical materials: alkides and electrides		100	50	300	100	BSC
Ignacio Pagonabarraga	Self organization and structure formation in biomimetic active suspensions	500		500	500	1000	BSC
James Sharpe	Generating a design space for somitogenesis	300		500	250		UMA
Javier Fdez Sanz	Electronic Properties of CdSe Quantum Dots Used as Light Captors in Sensitized Solar Cells	325		700	750		UPM
Javier Jimenez Sendin	Simulation of the Entrainment Effects in Turbulent Boundary Layers	20		500	1500	200000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Javier Jimenez Sendin	Time-resolved evolution of vorticity and momentum cascades in turbulent channels	320		4000	4000	25000	BSC
Javier Junquera	Calculation of the thermoelectric properties of the SrZrO ₃ (5)/SrRuO ₃ (1) heterostructure and its variation with temperature	110		50	50		ITC
Javier Junquera	Strain tuning of ferroelectric-antiferrodistortive coupling in PbTiO ₃ /SrTiO ₃ superlattices	145		75	50		UC
Javier Junquera	First-principles studies of two-dimensional electron gases in complex oxides superlattices	196		100	100		IAC
Javier Luque Garriga	Structure-based drug design studies against influenza A virus	460		400	200	200	BSC
JJ Barbero	QM/MM metadynamics Studies on the β -Galactosidase Catalytic Mechanism	345		1200	1500	3000	BSC
Johannes Jaeger	Reverse-engineering embryo segmentation patterning in flies: exploring different scenarios	175		500	20	1000	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Jon Saenz	Mesoscale atmospheric reanalysis IPRA using 3DVAR over the Iberian Peninsula	55,3		1500	1000		UPM
Jordi José	The link between multidimensional and spherically symmetric simulations: characterization of convection in 3D and the role of the chemical composition and stellar mass on mixing in classical novae	450		2200	2200	10000	BSC
Jordi Torra i Roca	Gaia: Simulation of Telemetry Stream	200		100	2500	15000	BSC
Jose E. Roman	New CG-type Eigensolvers in the SLEPc Library	25		200	200		UZ
Juan Jose Novoa Vide	Accurate methods for the theoretical prediction of polymorphic crystalline materials of technological interest: magnetic materials having bistable properties	230		5	40	100	BSC
Konstantin M. Neyman	Computer Modeling to Gain an Atomistic Insight into the Energy Storage Processes Mediated by Ceria	400		200	200		UZ

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Luis Garcia Gonzalo	Physical mechanisms involved in transport and in confinement transitions in plasmas	600		300	50	1000	BSC
Manel Perucho Pla	Relativistic Outflows: Dynamics, mass-load and high-energy emission.	500		1500	1500	5000	BSC
Manuel Alcamí	Self-assembly of TCNQ and TCNQ derivatives on Graphene and metal surfaces.	350		200	150		UV
Marc Balcells	The sizes of massive galaxies from redshift 2.5 to the present	40		400	400		UV
Marcel Swart	Reversal of spin-state preferences	285,7		50	200	100	BSC
Marcel Swart	Study of reactivity and regioselectivity of La@C _{2v} (9)-C ₈₂	322,56		50	100		UV
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Modelling Ni/ceria systems as potential water-gas shift catalysts for hydrogen production	600		300	200	200	BSC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Mark S.P. Sansom	MULTI-SCALE SIMULATIONS OF DERIVATIZED CARBON NANOTUBES – INTERACTIONS WITH MEMBRANES, WATER AND IONS	231		1500	1000	2000	BSC
Mercedes Boronat	Search for a silver based selective catalyst for propylene epoxidation with molecular O ₂	365		150	750		UPM
Milton Ruiz	Electromagnetic and Gravitational Emissions from Compact Objects		400	500	200	3000	BSC
Natalia Skorodumova	First-principle study of the steel cutting process		310	20	50	1000	BSC
Nuria Lopez	Growth of Gold Nanoparticles and Nanorods and Wires: DFT Study	615		400	300	150	BSC
Oscar Paz	Dynamics and formation processes of defect complexes in magnesium oxide from first-principles order-N simulations	400		50	75	100	BSC
Oswaldo Diéguez	First-principles study of new supertetragonal phases in perovskite oxides	256		8	200		UC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Pablo Ordejón	Quantitative prediction of Charge Density Wave instabilities in low dimensionality crystals	83		500	200	100	BSC
Pablo Palacios Clemente	Theoretical Characterization of the optimized geometry and energy levels in an hybrid nanostructure.		50	200	400		UPM
Patricia Tissera	The Chemical Evolution of the Universe	148		600	750	1400	BSC
Perla Wahnón	Design and Characterization of Advanced Photovoltaic Materials with High Efficiency		20	200	300		UPM
Pilar Hernandez Gamazo	Flavour Physics from Mixed-action Lattice QCD	60		1250	2000	20000	BSC
Ramiro Logares-Haurie	Diversity, distributions and function in aquatic microbes investigated with next-generation sequencing technologies	272		400	100	100	BSC
Ramon Reigada	Formation and stabilization of electropores in cell membranes: a Molecular Dynamics study	200		200	100		IAC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Rebeca García Fandiño	Study of the transport properties of nanotubes in solution and lipid bilayers	75		2000	1000		UPM
Riccardo Rossi	Extending Parallel CFD capabilities of Kratos, a general purpose FE solver.	100		50	150		ITC
Roderic Guigó	Use of TBLASTX to find regions of homology among multiple large-size full genomes	20		50	15		UZ
Rosa Domínguez	GALACTICA: GALaxies interACTing In a Cosmological hAbitat	203		500			BSC/Altix
Ruben Perez	First-principles Forces and Currents to characterize carbon nanostructures and oxide surfaces	200		1000	800		UPM
Sascha Husa	Methods for evolving black hole binaries	370		1000	1000	5000	BSC
Slawomir Filipek	The structure and dynamics of neuropeptides in cell membranes	499,2		100	50		UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	HSM	Site
Stefan Bromley	Structure and reactivity of silicate nanoparticles	200		200	400		UC
Toni Gabaldon	Emergence of virulence in human fungal pathogens	80		90	20		UZ
Ulrich Sperhake	Numerical simulations of black-hole dynamics for use in experiment and observation	300		100	700		UZ
Umberto De Giovannini	Ab-initio study of electronic and optical properties of metal-free dyes on ZnO substrate for dye-sensitized solar cells	500		1000	1000	2000	BSC
Yang Wang	Tailoring molecular reactivity on monolayers of Cu adsorbed on Ru(0001)	40		100	200		UMA

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