

Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación

Resolución Comité de Acceso, Asignación de Horas de Supercomputación para la Red Española de Supercomputación (RES) 1er período 2024

Barcelona, Febrero 2024

1. Introducción

El Comité de Acceso del Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS) es un órgano asesor del Director que informará sobre las peticiones de acceso recibidas de investigadores y grupos de investigación. El Comité propondrá al Director, en base a la calidad científica y técnica de las peticiones recibidas, una lista razonada y priorizada de las solicitudes. Corresponde al Director la decisión sobre los accesos autorizados.

El acceso es conjunto para los equipos de la Red Española de Supercomputación (RES), e incluye MareNostrum. La asignación entre los diferentes equipos se hace con motivos de necesidad y eficiencia de las actividades.

El protocolo de acceso aprobado por la Comisión Ejecutiva del BSC-CNS está publicado en la página de web del BSC, <http://www.bsc.es/RES>

2. Análisis

La RES ha asignado este período 201,5 millones de horas, que se obtienen 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), Instituto Astrofísico de Canarias (IAC), Universidad de Cantabria (UC), Universidad de Málaga (UMA), Universidad de Valencia (UV), Universidad de Zaragoza (UZ), Fundación Pública Galega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia (CESGA), Consorci de Serveis Universitaris de Catalunya (CSUC), CénitS-COMPUTAEX (CENITS), Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE), Universidad Autónoma de Madrid (UAM), Navarra de Servicios y Tecnologías (NASERTIC), y Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT).

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 completo 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, con lo que no se puede garantizar que puedan usar las horas asignadas).

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 de 2023.

Al estar utilizando procesadores de la misma familia x86, pero con diferentes rendimientos, se ajustan las horas asignadas en función de la máquina indicada en la petición y la que finalmente se ha podido asignar. Esto puede aparecer como un incremento o decremento de horas, el cual se indica en las observaciones de la revisión.

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 400.000 horas en cuatro meses, no utiliza cerca de 100 mil horas el primer mes, su asignación para el periodo completo será reducida a 300.000. 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 400.000 horas en cuatro meses, se utiliza cerca de 200.000 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 y núcleos asignados. Por ejemplo, si se debe asignar el uso en exclusiva de un nodo (que tiene varios núcleos, dependiendo de la máquina) durante 1 hora, se considerará el uso de 48, 24, 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 mediante la frase "The author thankfully acknowledges RES resources provided by [centro] in [equipo] to [ID de actividad]"
 - 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 necesitan grandes volúmenes de recursos, que la infraestructura europea EuroHPC (https://eurohpc-ju.europa.eu/participate/access-our-supercomputers_en) ofrece proyectos de cómputo a partir de 30 millones de horas de CPU anuales, disponiendo de cinco convocatorias anuales para propuestas (Regular Access y Extreme Scale Access).

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 siempre que las actividades no sean incluyan en el concepto de Open R&D. 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 también 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 dos 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

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 (<https://www.bsc.es/research-and-development/software-and-apps/software-list/comp-superscalar>). El envío de trabajos secuenciales al sistema se limitará.

El equipo de soporte del BSC-CNS ofrecerá 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 nodos con mas de una máquina, se indica también la máquina específica asignada.

Lista de actividades aceptadas con acceso estándar.

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Abelardo Margolles Barros	Unveiling mechanisms of microbial carbohydrate esterases to tailor precision prebiotics	3.584		40.600	30.600	BSC/MN
Alicia Palacios Cañas	Exploring quantum entanglement and non-linear effects induced by XUV and X-Ray coherent light sources	1.510		150	6.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Andres Pacheco Pages	Monte Carlo Simulation for the ATLAS Experiment at the CERN LHC at the MareNostrum by IFAE/PIC Tier-1	5.700		9.000	9.000	BSC/MN
Carles Eduard Curutchet Barat	Exploring the impact of phosphorylation on the conformational ensemble of Sic1 through enhanced sampling and multiscale FRET simulations	150,32		15.000		CESGA/FT3-GPU
Carlos Palenzuela Luque	Formation of magnetically dominated jets in binary neutron star mergers with realistic initial magnetic fields	100		20.000	20.000	BSC/AMD
		8.850		60.000	60.000	BSC/MN
Carme Rovira Virgili	Modeling protein glycosylation mechanisms		300	40.600	40.600	BSC/P9
		4.992		40.600	40.600	BSC/MN
Carme Rovira Virgili	Modeling the hydrolysis of macroalgae polysaccharides by marine bacteria		273	40.600	40.600	BSC/P9
		4.224		40.600	40.600	BSC/MN
Celia Pérez Souto	High-res UTLS simulations to disentangle role and feedbacks on atmospheric structure and composition	3.024		90.000	200	CESGA/FT3
Claudio Cazorla	Discovery of new caloric materials using graph convolutional neural networks and first-principles simulations	9.250		300	700	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Daniel García Figueroa	Gravitational waves from dark matter string networks	2.590		15	15	BSC/MN
Dario Garcia Gasulla	Multimodal Medical Model	15		10.000	10.000	CESGA/FT3-GPU
David Expósito Singh	Development of a simulator that simulates the spread of COVID-19, influenza-like illnesses (ILI), and acute respiratory infections (ARI)	128	115	500	500	UZ
Edgardo Saucedo	Modeling defective chalcohalide-based solar cells with first-principles simulations and machine learning techniques	2.000		300	700	BSC/MN
Eduardo Javier Pérez Sánchez	Preferential diffusion and thermal radiation modelling in an industrial steel furnace fed with hydrogen-methane blends	2.215	455	10.000	10.000	IAC
Elena B. Martín Ortega	CFD Database Generation for Reduced Order Modeling of Rotating Detonation Engines	1.789	179	10.000	10.000	CIEMAT/XULA
Enrique Marcos Benteo	Computational design of antigen-binding loops in de novo immunoglobulin-like frameworks	1.980		2.000	4.000	BSC/MN
Enrique Ortí	In silico-assisted discovery of hole-transporting materials for perovskite solar cells	4.000		40.000	60.000	UC
Esteban Ferrer	Wind turbine aeroacoustic simulations using high order solvers	1.752	4.248	4.000	1.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Felipe J. Blas	Effect of thermodynamic promoters and NaCl on nucleation of carbon dioxide and nitrogen hydrates from computer simulation	9.998		6.000	6.000	UMA
Felix Garcia Carballeira	Development and evaluation of malleability techniques for parallel file systems	1.024		4.096	4.096	UZ
Fernando Martín	Intramolecular attosecond electron dynamics induced by ultrashort laser pulses	9.746,40		500	105.000	BSC/MN
Fernando Martín García	Optical properties of acceptor-molecule-donor complexes adsorbed on Graphene/SiC(0001)	3.052		1.500	8.000	CSUC/PIR
Ferran Feixas	Time-evolution of dynamic conformational ensembles of allosterically regulated proteins in response to external stimuli	115,20		5.000	5.000	CESGA/FT3-GPU
Francesc Illas Riera	Modelling Thermo-Photo Valorization of CO ₂ by novel Co/In ₂ O ₃ catalysts.	889		900	1.500	BSC/MN
Francesc Xavier Trias Miquel	Assessment of a new stable regularization of the gradient model for Large-Eddy Simulation of thermal turbulence	7.550		256	30.720	BSC/MN
Francisco Javier Salvador Rubio	Using an Adaptive Mesh Refinement code for the DNS study of the atomization process of a pressure-swirl atomizer	2.000		18.000	20.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Gara Villalba	Modelling the impacts of green infrastructure on future heat wave episodes and greenhouse gas fluxes at the urban scale.	127	753	15.000	15.000	UMA
Hervé Petetin	Characterizing the main emission sectors driving the production of O3 across Spain and the associated O3 chemical regime using chemistry-weather modeling in support of the Spanish O3 mitigation plan	5.002		60.000	150.000	BSC/MN
Horacio Andres Vargas Guzman	Viruses Spike Proteins and Glycans Adsorption onto Functionalized Surfaces of Manifold Polarities in drastic deformation environments	70				CESGA/FT3
		130	158	14.000	16.000	CESGA/FT3-GPU
Ignacio Pagonabarraga	Self-assembly in confined active and actuated matter	9.900		100.000	100.000	BSC/MN
Iñaki Tuñón	From Chemistry to Motion in Biological Motors. The Zika NS3 Helicase		300	15.000	16.000	BSC/P9
		2.400		15.000	16.000	BSC/MN
Inés Corral Pérez	Dynamic characterization of the ring-opening mechanism of DNA/RNA photosensitizer 2-oxopurine.	2.850		900	1.500	BSC/MN
Javier Carrasco	Optimization of composition and interfacial properties of halide solid electrolytes	680		900	700	CENITS

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jesús Giraldo	Molecular simulations of ligand binding and cooperativity in a GPCR heterodimer	220		2.000	20	CESGA/FT3-GPU
Joan Torras Costa	Computational study of the aggregation propensity of the peptides/peptidomimetics scaffolds for regenerative medicine: Conformational study	333		6.144	1.536	BSC/P9
		6.667		6.144	1.536	BSC/MN
Jordi Juárez-Jiménez	Multiple-copy association studies (MAS) as a tool for Computer-Aided Drug Design.	130		5.000	5.000	CESGA/FT3-GPU
Jordi Villà Freixa	EVB simulations of compensatory adaptations in oxidoreductases	300		1.000	20	IAC
Jorge Ejarque Artigas	Effect Of manufacturing defects on the mechanical behavior of composites	4.608		9.000	9.000	BSC/MN
Jose Guilherme Vilhena Albuquerque D'Orey	Abnormal Heat Transport Between Two Separated Bodies in Ultra-High-Vacuum	650		6.000	12.000	UMA
Jose Javier Ruiz Pernía	Modelling Asparaginases for Leukemia Treatment. Multiscale Simulations To Elucidate Binding Affinity and Reaction Mechanism.		200	15.000	15.500	BSC/P9
		1.106		15.000	15.000	BSC/MN
Jose Maria del Peso Malagon	ATLAS (LHC) simulation of detector response to proton-proton collisions (UAM_m3y2024)	1.850		1.500	4.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Josep Flix Molina	MC Simulation for the CMS Experiment at the CERN LHC	8.800		200.000	10.000	BSC/MN
Juan José Palacios Burgos	Excitonic effects in the non-linear optical response of 2D materials	1.500		20	500	UMA
Leonardo Manuel Pachano Prieto	Numerical investigation of soot production in a two-phase gas turbine combustor model	2.500		5.000	5.000	BSC/MN
Lluís Blancafort	Reactivity principles for electrocatalyzed hydrogen evolution on P-doped carbons	123		250	2.000	CSUC/PIR
Lucía Romero Pérez	Electromechanical simulations for cardiac precision medicine	3.000		35.000	15.000	BSC/MN
Martin Obergaulinger	Novel progenitor stars in stellar core collapse	4.000		2.000	64.000	BSC/MN
MERCEDES BORONAT ZARAGOZA	ML-based AIMD simulations of the Cu+/Cu2+ redox cycle involved in N2O decomposition and partial methane oxidation reactions catalysed by Cu-exchanged zeolites	490		64	500	CESGA/FT3-GPU
MERCEDES BORONAT ZARAGOZA	Optimizing CeO2-ZrO2 solid solutions as catalysts for alkane oxidative dehydrogenation	497		64	500	UMA
Modesto Orozco	Benchmarking and Validation of New General-Purpose Nucleic Acid Force Fields	600		20.000	20.000	CESGA/FT3-GPU

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Nestor Balcazar-Arciniega, and Joaquim Rigola	DNS of reactive mass transfer in gravity-driven bubbly flows: Effect of the Schmidt number	3.100		3.072	3.072	BSC/MN
Nicoletta Liguori	Understanding light-harvesting regulation in photosynthetic organisms with molecular dynamics simulations	1.440		5.000	5.000	CIEMAT/TURGALIUM
Nuria Lopez	Advanced simulation of complex catalytic interfaces for CO2 reduction	7.934,98		6.144	6.144	BSC/MN
Pablo Llombart González	Modelling Gold Nanocrystals as functionalized patchy colloids	2.400		2.048	2.048	BSC/MN
Pablo Ordejón	Corrosion inhibition from first principles: the role of the oxide	3.320	400	2.000	3.500	CENITS
prof. Maciej Lewenstein	Ergodicity, localization and measurement-induced phenomena in quantum many-body physics	1.494		4.000	5.000	NASERTIC
Riccardo Rurali	Phonon Database for Data Driven Materials Discovery: dynamically disordered materials and ferroelectric phase change materials	4.842	1.000	1.000	4.000	CESGA/FT3
Ruben Perez Perez	Defect identification in Ceria systems with High Resolution Atomic Force Microscopy, Simulations and water markers	990		600	600	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Sascha Husa	Preparations for a catalog of generic gravitational wave signals from binary black hole coalescence	2.135	500	12.000	35.000	CSUC/PIR
Sergio Díaz-Tendero Victoria	Ultrafast charge transfer in DNA nucleotides adsorbed on a gold surface.	750		800	800	UAM
Sílvia Osuna	Exploring the versatility of squalene-hopene cyclase	2.000		500	500	UMA
Sonia Raquel Gámiz Fortis	Regionalized decadal climate prediction for the Iberian Peninsula	2.040		5.120	15.360	IAC
Victor Guallar Tasies	In silico mechanistic study of carnitine palmitoyltransferase activity	1.230		15.000	5.000	UMA
Weiguang Cui	The300 galaxy clusters -- the high-resolution runs	3.550	430	20.000	20.000	UAM
Xavier Luri Carrascoso	Gaia: Final data reduction cycle	4.580		500	750	BSC/MN
Xavier Vilasís Cardona	LHCb-Dirac at the BSC-HPC	500		1.000	1.000	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.