

www.bsc.es



**Barcelona  
Supercomputing  
Center**  
*Centro Nacional de Supercomputación*

# BSC-RES-PRACE, HPC resources 2012

Sergi Girona  
Operations Director BSC



## Índice

- « Centro Nacional de Supercomputación
  - [www.bsc.es](http://www.bsc.es)
- « RES, Red Española de Supercomputación
  - [www.res.es](http://www.res.es)
- « PRACE, Partnership for Advanced Computing in Europe
  - [www.prace-ri.eu](http://www.prace-ri.eu)



**BSC-CNS**

« El Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS) es el Laboratorio Nacional Español en Supercomputación.





« El BSC está constituido en forma de Consorcio

- El Gobierno Español – 51%
- El Gobierno Catalán – 37%
- La UPC – 12%





## Organización en el BSC

El BSC es la fusión de una estructura de soporte a la ciencia clásica y un centro de investigación.

```

    graph TD
      BT[BOARD OF TRUSTEES] --> SAB[SCIENTIFIC ADVISORY BOARD]
      BT --> EC[EXECUTIVE COMMISSION]
      BT --> BB[BUSINESS BOARD]
      EC --> DIR[DIRECTOR]
      EC --> AD[ASSOCIATE DIRECTOR]
      DIR --- ACC[ACCESS COMMITTEE]
      DIR --> CS[COMPUTER SCIENCES]
      DIR --> ES[EARTH SCIENCES]
      DIR --> LS[LIFE SCIENCES]
      AD --> CA[COMPUTER APPLICATIONS]
      AD --> OPS[OPERATIONS]
      AD --> MANS[MARENOSTRUM SUPPORT & SERVICES]
  
```




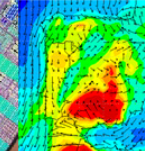
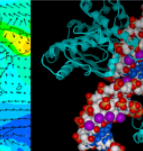
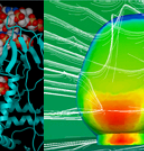
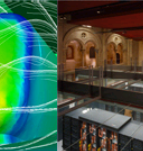




COMPUTER SCIENCES
EARTH SCIENCES
LIFE SCIENCES
COMPUTER APPLICATIONS
MARENOSTRUM SUPPORT & SERVICES

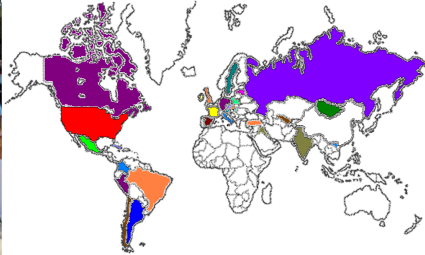




## BSC: Atractor de talento

COMPUTER SCIENCES
EARTH SCIENCES
LIFE SCIENCES
COMPUTER APPLICATIONS
MARENOSTRUM SUPPORT & SERVICES

Más de **350 personas** de más de **27 países**  
 (Argentina, Belgium, Brazil, Bulgaria, Canada, Colombia, Cuba, China, Cuba, Dominicana, France, Germany, India, Iran, Ireland, Italy, Jordania, Lebanon, Mexico, Pakistan, Poland, Russia, Serbia, Spain, Turkey, UK, USA)



## Investigación: Ciencias de los Computadores

**Computer architecture:**

- Massive multithreaded architectures
- Accelerator architectures (FPGA)
- Architectures for real-time
- Hw support to execution models
- Interconnection networks

**Programming models:**

- StarSs programming model
- Accelerators (CUDA, OpenCL)
- Influencing standards (OpenMP, OpenACC)
- Data movement- and power-conscious scheduling
- Hybrid MPI/task parallelism, dynamic load balancing

**System design:**

- Low-power supercomputing (PRACE prototype and Montblanc project)

GRID/Cloud

Multicore chip

On-board SMP

Large-scale shared-memory nodes

Large cluster systems

Future Exaflop systems

**Benchmarking, performance analysis and prediction tools:**

- Tracing scalability
- Pattern and structure identification
- Visualization and analysis
- Processor, memory, network

**Distributed and Cloud computing:**

- Programming models: COMPSs, MapReduce
- Parallel file system scalability and I/O for Cloud
- Resource management: virtualization in data centers, performance and power-aware job and application scheduling

Barcelona Supercomputing Center  
Centro Nacional de Supercomputación

## Computer Sciences: EU projects

A network for supporting the construction of non-volatile memory between storage and processing

**Computer Architecture (3 groups)**

**Programming Models**

**Storage Systems**

**Grid Computing and Clusters**

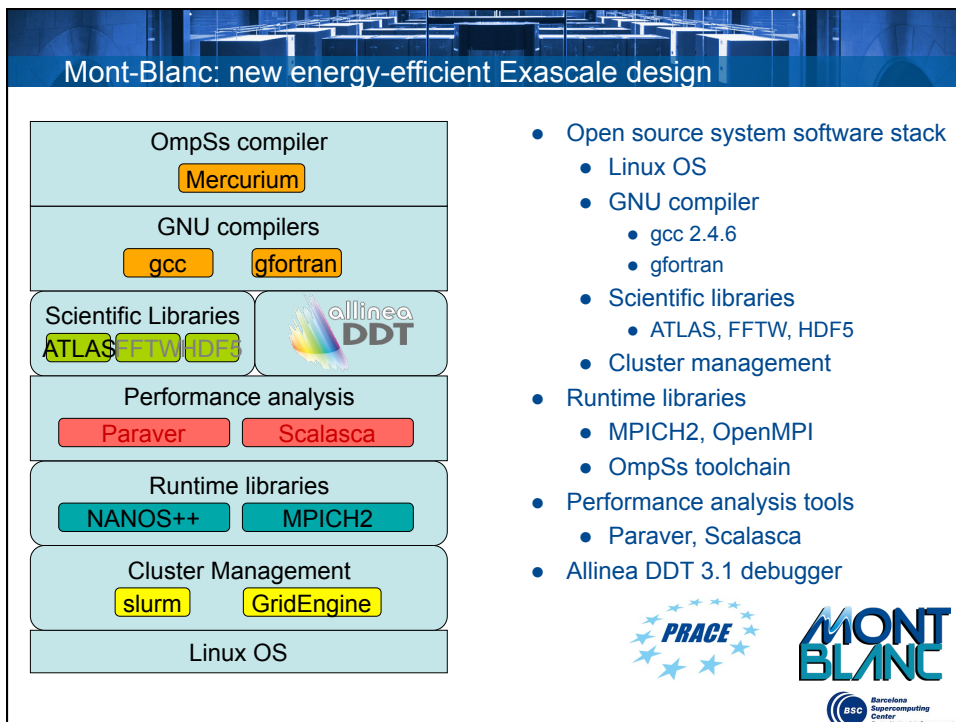
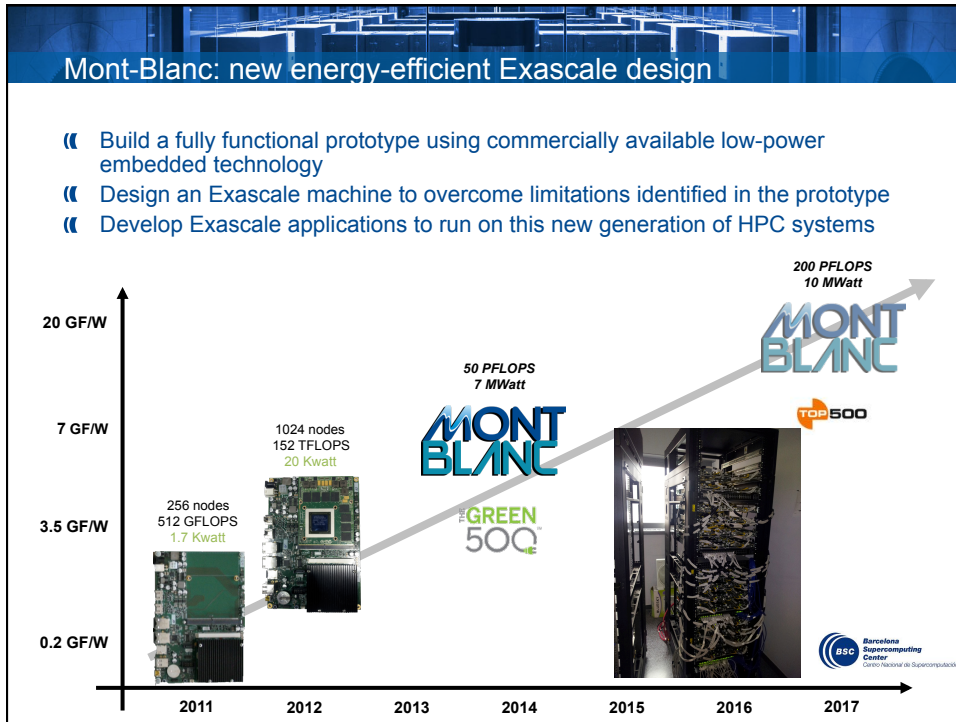
**Autonomic Systems and e-Business Platforms**

**Performance Tools**

SEVENTH FRAMEWORK PROGRAMME

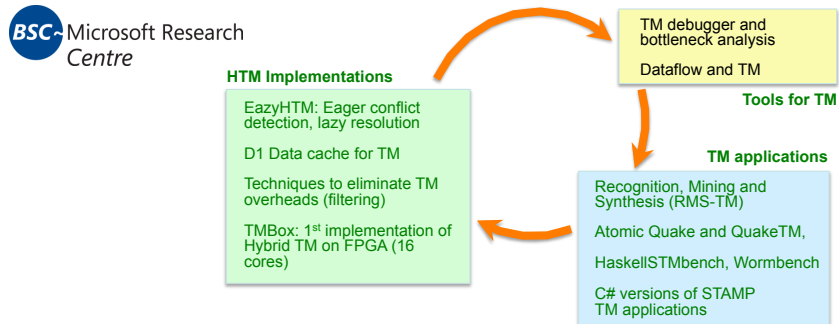
Barcelona Supercomputing Center  
Centro Nacional de Supercomputación





## Collaborations: BSC-Microsoft Research Centre

- « A major focus is on developing Transactional Memory (TM) applications, tools for productive TM application development and proposal of scalable HTM implementations





- « Also research on Hardware Support for Language Runtimes, Synchronization and Reliability, Low-power Vector Processors, and [OmpSs@Barrelfish](mailto:OmpSs@Barrelfish)

## Collaborations: Intel/BSC Exascale Laboratory

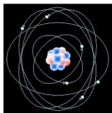

- « Objective: address the challenges on the way to Exascale: efficiency, variability, memory, faults, scale (concurrency, strong scaling) and complexity (hierarchy /heterogeneity)
- « Topics:
  - OmpSs as programming model to express algorithms and runtime system responsible for mapping them to resources (dynamic autotuning, resilience, reductions and load balance)
  - Avoid flying blind with the appropriate analysis tools: power monitoring and modeling added to the powerful BSC's analysis environment and prediction of taskification strategies
  - Applications and algorithms, the final target. Large applications and algorithmic developments having in mind asynchrony and complexity (hybrid MPI/OmpSs)
- « Activities started on November 2011

## Collaborations: CUDA Center of Excellence by NVIDIA

- « Recognition of BSC's broad-based research in leveraging the NVIDIA CUDA technology and GPU computing
- « Topics:
  - Programming models: A cluster-aware Global Memory for Accelerators (GMAC) runtime environment and the OmpSs programming model for clusters of hybrid CPU/GPU nodes and auto-vectorization
  - Applications: Reverse Time Migration, seismic imaging facility, Protein Energy Landscape Exploration, Finite Differences Time Domain and Network Analysis Open Source Toolkits
  - Build an education program on parallel programming using CUDA, OpenCL and StarSs and summer school
- « Awarded on November 2011, CUDA Research Center in 2010

## Investigación: Ciencias de la Vida

**Modelización atómica y electrónica de la bioquímica y la biofísica de las proteínas**

**Modelización micro y mesoscópica de macromoléculas**

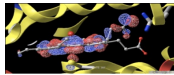

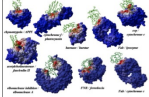
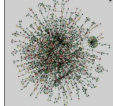

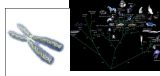
**Diseño de fármacos**


**Interacción proteína – proteína**

**Biología de Sistemas**

**Análisis de genomas y redes para modelar enfermedades, sistemas y la evolución de organismos vivos.**

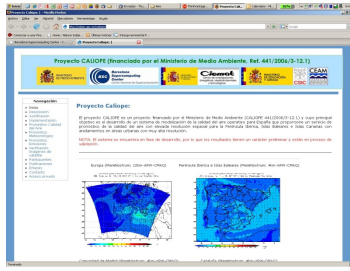
**Servicios vía web**



## Investigación: Ciencias de la Tierra

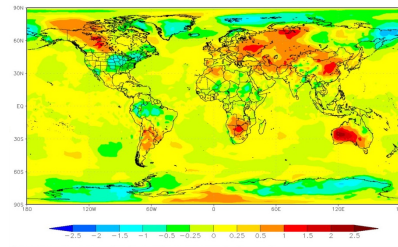
### Pronóstico de Calidad del Aire



Proyecto CAIQE (financiado por el Ministerio de Medio Ambiente, Ref. 441/2004/3-12.1)

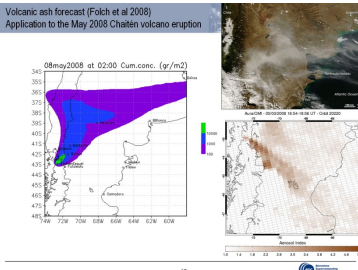
### Cambio climático

BSC-CNS Surface Temperature Anomaly C (1951-1980)  
Year 1956, BAU scenario - Global Res:2x2.5



### Transporte de polvo y cenizas

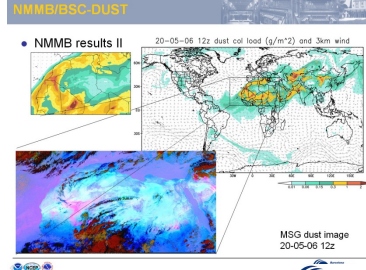
Volcanic ash forecast (Folch et al 2008)  
Application to the May 2008 Chaiten volcano eruption



### Desarrollo de un modelo global de polvo mineral

NMMB/BSC-DUST

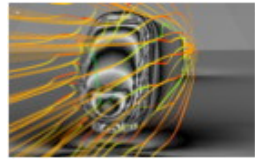
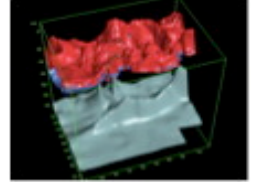
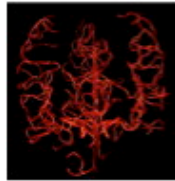

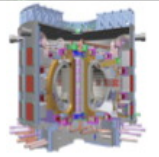
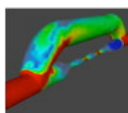
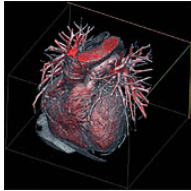

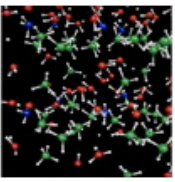

- NMMB results II



MSG dust image  
20-05-08 12z

## Investigación y Soporte: Aplicaciones Científicas y de Ingeniería

### Fluidodinámica, Geofísica, Dinámica Molecular, Física del plasma, Biomecánica



**Algunos proyectos de aplicaciones**

**Acoplamiento electromecánico del corazón**

*En colaboración con:*

**Debora Gil i Jaume García Barnés**  
 Centro de Visión por Computador  
 Universitat Autònoma de Barcelona (Spain)

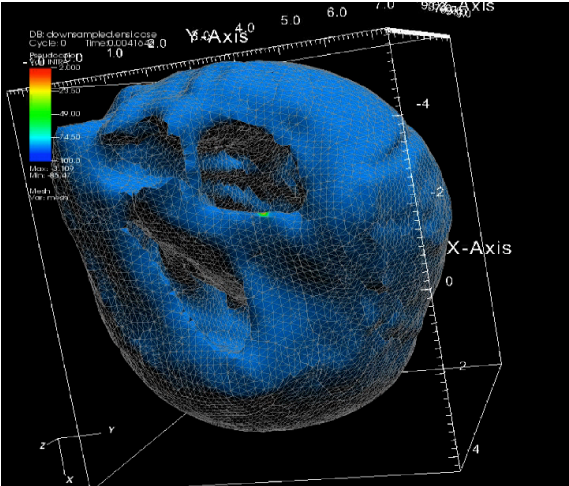
**Francesc Carreras**  
 Unitat Imatge Cardíaca  
 Hospital de Sant Pau (Spain)

**Manel Ballester**  
 Univ. de Lleida (Spain)

**Johan Hofmann i Jeannette Spuhler**  
 KTH (Sweden)

**Thomas Franz i Jeroen Kortsmith**  
 University of Cape Town (South Africa)

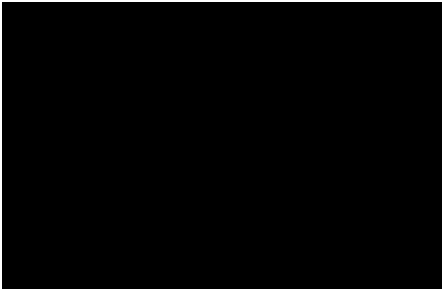
**Daniel Auger**  
 University of Cape Town (South Africa)



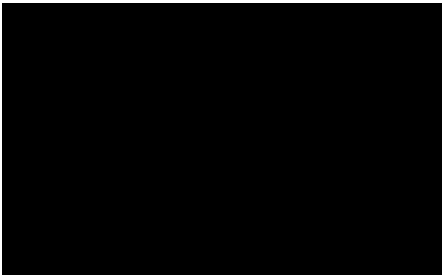
**BSC** Barcelona Supercomputing Center  
 Centro Nacional de Supercomputació

**Algunos proyectos de aplicaciones**

**Diseño de barcos de regatas**  
**Proyecto Industrial**



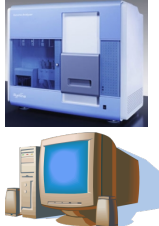
**Inodoro**  
**Proyecto Industrial con Roca**

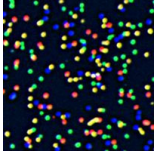


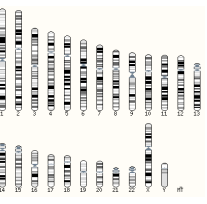
**BSC** Barcelona Supercomputing Center  
 Centro Nacional de Supercomputació

### CNAG, Centro Nacional de Análisis Genómico

- « National centre of Genomics analysis
- « BSC provides HPC and data IT services to CNAG
- « Next generation sequencing








Rapid sequencing of whole individuals, Detailed studies of cellular processes

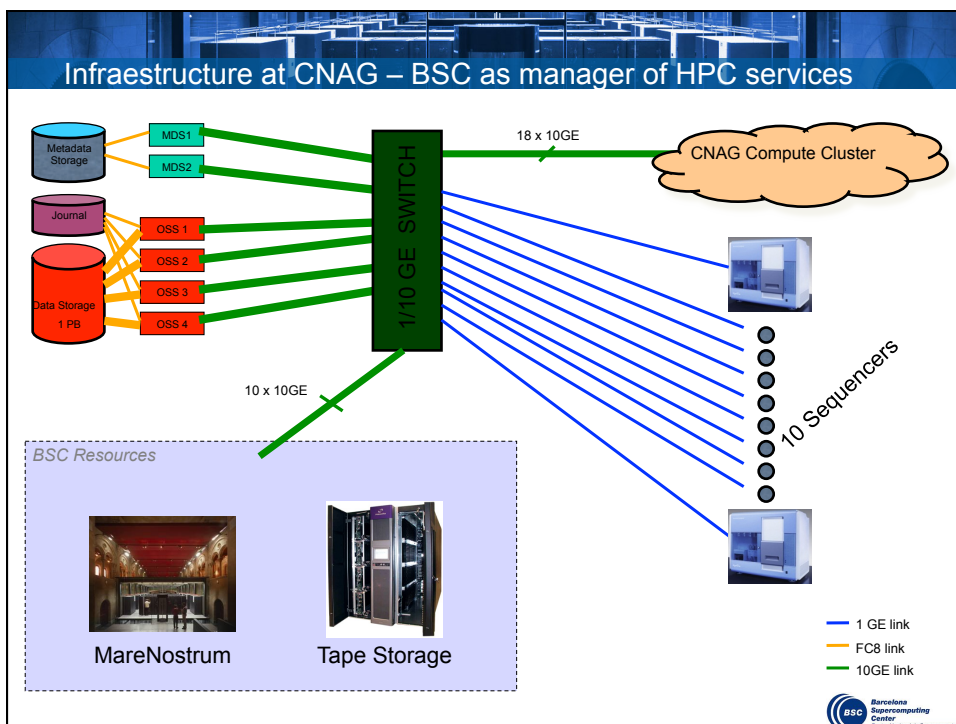
Raw Data:  
1-2TB/run  
2 runs/week  
10 machines

Image processing  
To generate  
sequence data

Sequence analysis,  
Alignment and  
clustering

Aligned results  
250-500 GB/run







## RES (Red Española de Supercomputación)

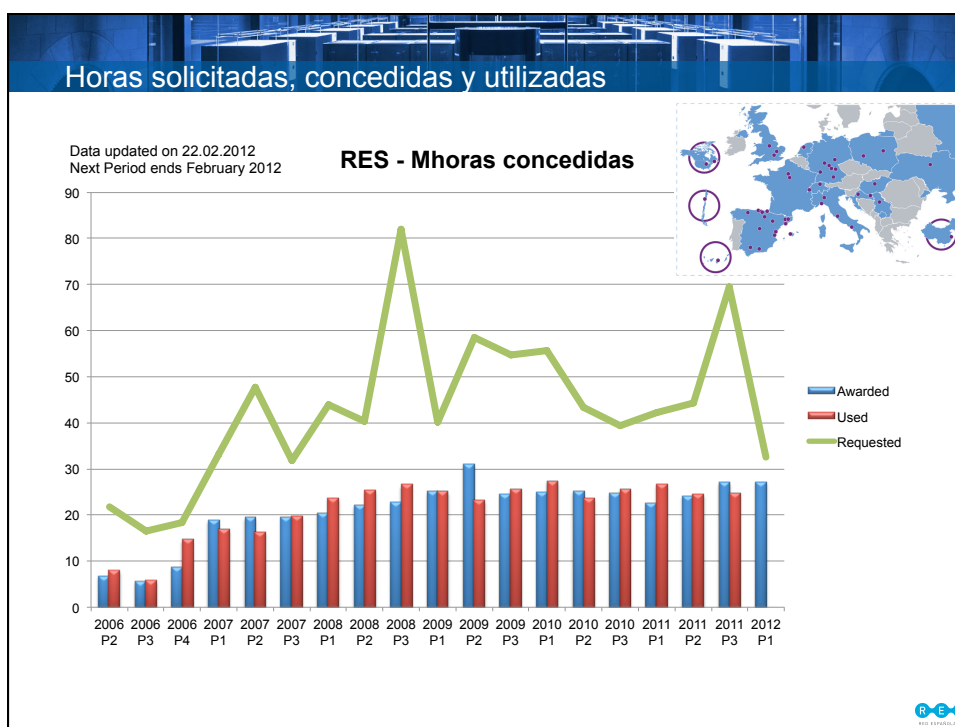
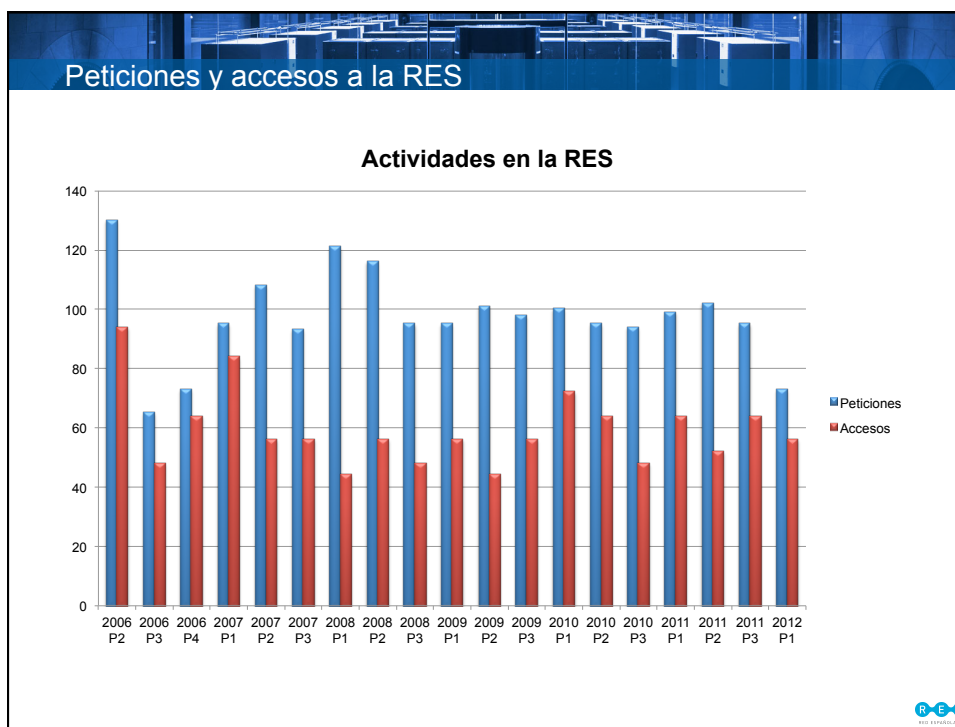
- « La Red Española de Supercomputación o RES, es una infraestructura virtual distribuida al servicio de la I+D en España consistente en la interconexión de un conjunto de supercomputadores que en régimen de trabajo compartido, gestionan de forma conjunta y eficiente su capacidad de cálculo.
- « La RES ofrece a la comunidad científica:
  - Recursos de supercomputación
  - Servicios de disco
  - Servicios de movilidad
  - Soporte técnico
  - Formación técnica para usuarios
  - Conferencias dirigidas a un área concreta de la ciencia
  - Disseminación de la investigación realizada
- « Desde su creación en julio de 2006, la RES ha contribuido al desarrollo de más de 1950 proyectos científicos a través de los recursos de supercomputación que gestiona.

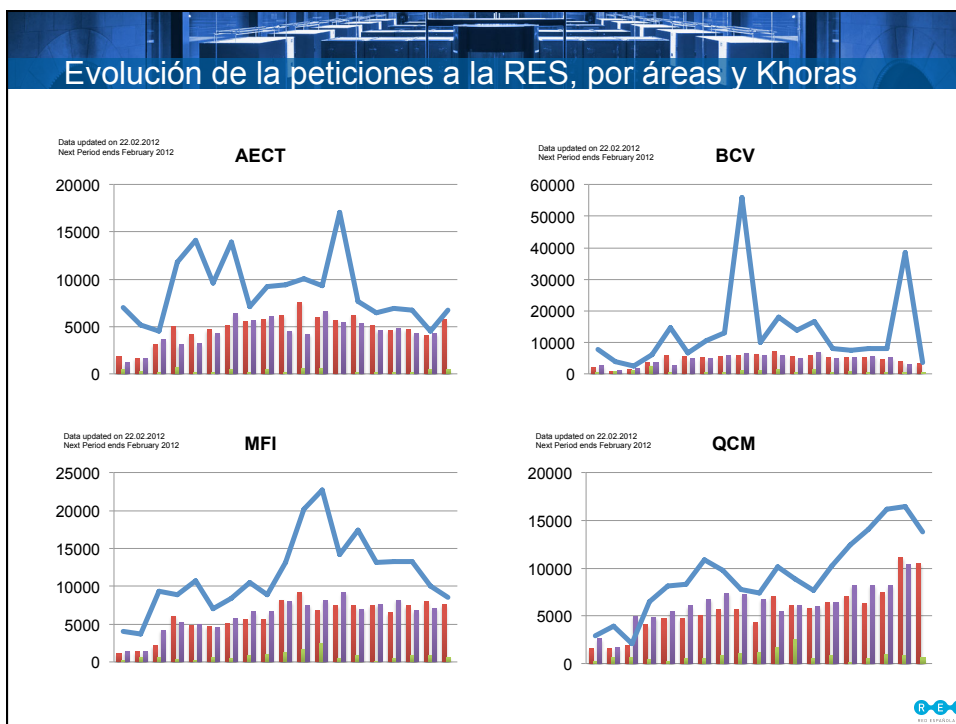
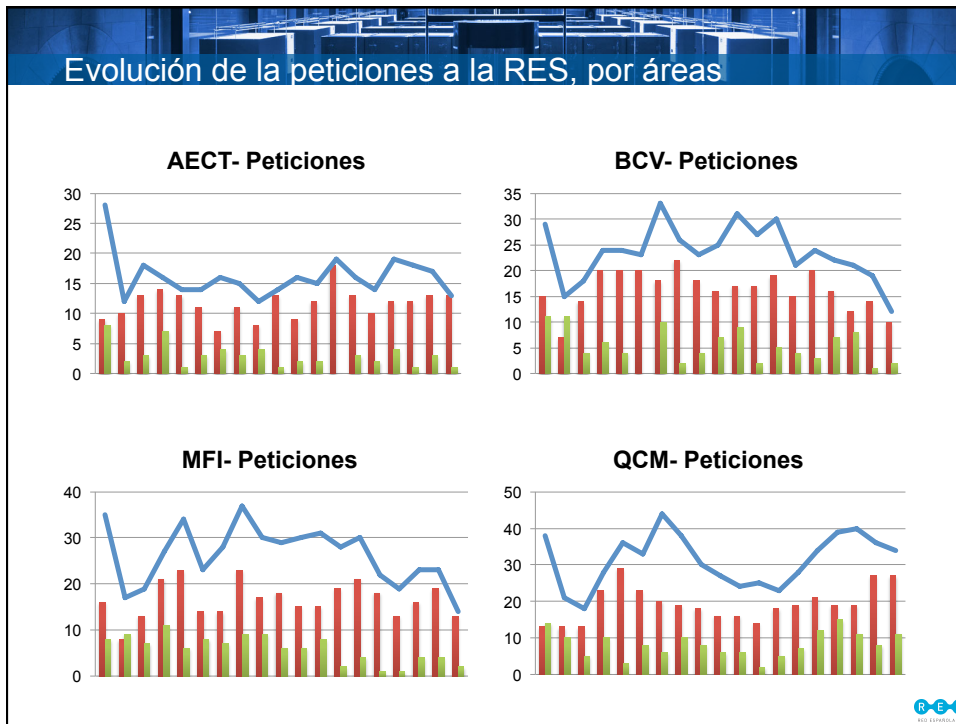


## Proyectos científicos con acceso a la RES


Astronomía, Espacio y Ciencias de la Tierra	12	17	12	16	21	14	14	11	14	12	14	11	14	18	16	12	16	13	16	14	275
Biomedicina y Ciencias de la Vida	20	26	18	18	26	24	20	28	24	22	23	26	29	24	19	23	23	20	15	12	410
Matemáticas, Física e Ingeniería	19	24	17	20	32	29	22	21	32	26	24	21	23	21	25	19	14	20	23	15	428
Química i Ciencia y Tecnología de los Materiales	21	27	23	18	33	32	31	26	29	26	22	22	16	23	26	33	34	30	35	38	524
IA BSC ITC	14	19	14	14	22	29	17	17	20	17	17	16	16	17	17	18	17	20	22	21	348
	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	1985													







## Instituciones y equipos que forman parte de la RES



**BSC-CNS (MareNostrum)**  
 Processor: 10240 PowerPC 970 2.3 GHz  
 Memory: 20 TB  
 Disk: 280 + 90 TB  
 Network: Myrinet


**BSC-CNS (MinoTauro)**  
 Processor: 128 nodes: 2 Nehalem + 2 M2090  
 Memory: 3 TB  
 Network: IB QDR


**BSC-CNS (Altix)**  
 Processor: SMP 128 cores  
 Memory: 1,5 TB

**UPM (Magerit II - renovado en 2011)**  
 Processor: 3.920 (245x16) Power7 3.3 GHz  
 Memory: 8700 GB  
 Disk: 190 TB  
 Network: IB QDR

**IAC, UMA, UC, UZ, UV (LaPalma, Picasso, Altamira, Caesaraugusta, Tirant)**  
 Processor: 512 PowerPC 970 2.2 GHz  
 Memory: 1 TB  
 Disk: 14 + 10 TB  
 Network: Myrinet

**Gobierno de Islas Canarias - ITC (Atlante)**  
 Processor: 336 PowerPC 970 2.3 GHz  
 Memory: 672 GB  
 Disk: 3 TB  
 Network: Myrinet





## Supercomputadores de la RES



MareNostrum  
BSC-CNS



CaesarAugusta  
Universidad de Zaragoza



Magerit  
Universidad Politécnica de Madrid



Tirant  
Universitat de València



Atlante  
Instituto Tecnológico de Canarias



La Palma  
Instituto Astrofísico de Canarias



Picasso  
Universidad de Málaga


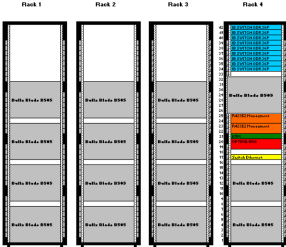



Altamira  
Universidad de Cantabria



### MinoTauro: Bull system with Intel+NVIDIA

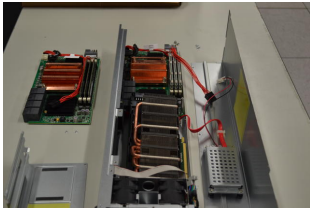
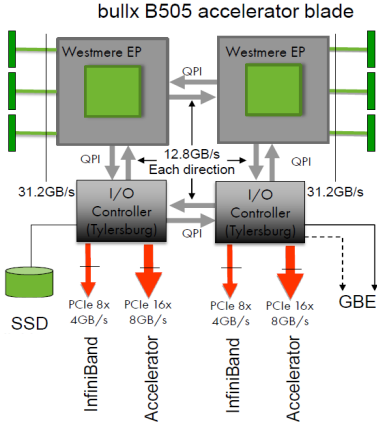
- ☞ 128 compute nodes
  - 2 Intel chips
  - 2 GPU NVIDIA M2090
  - 1 SSD 250GB
- ☞ Most power efficient system in Europe
- ☞ Most performing system in Spain
  - 15 Tflops peak en x86\_64
  - 167 Tflops peak en GPU
- ☞ 2 logins
- ☞ 2 admin Servers
- ☞ Networks
  - Administration
  - File system, 10GE
  - IB-QDR non-blocking







### Compute node on MinoTauro

- ☞ Bull Blade B505
  - 2 processors E5649 2,53 GHz 6-Cores
  - 24 GB RAM DDR3
  - 2 NVIDIA M2090
  - 1x SSD 250 GB
  - Network interfaces
    - 2x IB HCA QDR (GPUDirect)
    - 2x 1 Gb Eth (admin / GPFS)





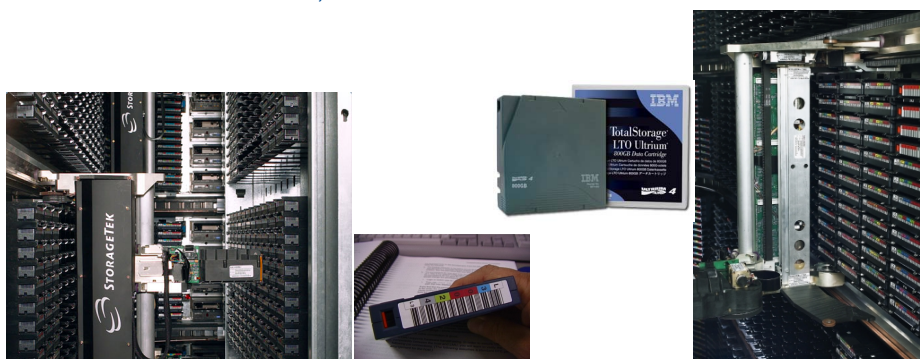
## Magerit-2

- « La arquitectura básica sigue siendo la misma: un cluster.
- « Multicomputador de memoria distribuida bajo SLES:
  - Compuesto por 245 nodos (en lugar de 1200 en Magerit 1)
  - Cada nodo es un SMP de 16 CPUs (vs. 2-4 CPUs en Magerit 1)
  - 3920 cores en total.
  - Cada nodo con 32 GB de memoria (vs. 4-8 GB)
- « Infiniband QDR 40 Gb/s, 0.1-0.5  $\mu$ s (vs. Myrinet 2 Gb/s, 2.6-3.2  $\mu$ s)
- « Además de 10 Gb/s Ethernet y red de control.
- « 190 TB de disco on line bajo GPFS.
- « Performance
  - Peak: 103.4 TFlops
  - Linpack: 72,5 TFlops



## Robot SL8500: HSM / Backup

- « 7500 cintas LTO4 de 800 GB cada una  $\approx$  6 PB nativos
- « 8 Brazos trabajando en 4 niveles de altura
- « 23 Unidades lectoras LTO 4
- « 5 Servidores (Sun Fire v445, 4 CPU UltraSPARC III, 8 GB RAM)
- « Armario de discos, 35 TB



### BSC/HPC as Data Centers

**BSC Force10 E1200i 10G Switch**

Component	Read (GB/s)	Write (GB/s)
Data BB1	5.7	4.7
Data BB2	5.7	4.7
Data BB3	5.7	4.7
MetaData	5.7	4.7
Switch (Total)	17.1	14.1

### Servicio de almacenamiento ofrecido por la RES

« Algunos de los servicios de disco son los siguientes:

- Transferencias masivas de datos entre centros de la RES
- Acceso desde otros centros de la RES y/o Internet al sistema de archivos HSM del BSC
- En el futuro, también servicio de compartición de códigos, aplicaciones y recursos entre nodos de la RES.

**Uso de disco y almacenamiento en el 3er periodo de 2011**

Categoría	GB Usado en Scratch	GB Usado en Projects
Química y Ciencia y Tecnología de los Materiales	~25000	~10000
Matemáticas, Física e Ingeniería	~45000	~20000
Biología y Ciencias de la Vida	~15000	~20000
Astronomía, Espacio y Ciencias de la Tierra	~75000	~50000

## Soporte técnico ofrecido por la RES

- « Principalmente se ofrece la optimización de código para su uso en los supercomputadores:
  - Mejora de la paralelización y escalabilidad
  - Optimización de Entrada/Salida
  - Portabilidad de código (Arquitectura, procesador, aceleradores, GridSuperscalar, StarSs, ...)
  - Depuración de código (Totalview, Paraver, DDT...)
  
- « Pero también:
  - Formación a usuarios
  - Resolución de incidencias técnicas y administrativas
    - Creación de cuentas de usuario
    - Asesoramiento para completar las peticiones de acceso
    - Informes semanales de la evolución de su actividad



## Servicios de movilidad

- « Actividades de test
  - Permiten la ejecución del código en un nodo de la RES para probar su funcionamiento y optimizarlo.
  - Mediante el formulario de solicitud de acceso a RES: [www.bsc.es/RES](http://www.bsc.es/RES)



- « Movilidad ICTS
  - Ofrece la oportunidad de visitar el nodo asignado para recibir soporte técnico in-situ.
  - Más información en: [www.bsc.es/ayuda-mobilidad-icts](http://www.bsc.es/ayuda-mobilidad-icts)

- « Programa de movilidad HPC- Europa2
  - Permite invitar a colaboradores europeos a la investigación conjunta y ofrecer acceso al nodo de la RES del anfitrión.
  - Más información en: [www.hpc-europa.eu](http://www.hpc-europa.eu)

**HPC-Europa2**  
Pan-European Research Infrastructure on High Performance Computing



## Organización y participación en eventos técnicos y científicos

- « Reuniones de usuarios
- « Cursos para usuarios
- « Seminarios científicos
- « Cursos para los equipos técnicos de la RES
- « Además, ofrece colaboración para seminarios y conferencias:
  - Compartiendo experiencia y proporcionando expertos
  - Realizando cursos de formación específica
  - Co-financiando la celebración de eventos para promover la ciencia



Suscripción RSS en <http://www.bsc.es/hpc-events-trainings.xml>



## Organización de formación específica para usuarios

- « RES Training Days
  - 21 y 22 de abril de 2008, Barcelona.
  - Información en: <http://www.bsc.es/RES/res-training-days-2008>
- « Modelos de programación (STARs), 1ª edición
  - 20 y 21 de septiembre de 2010, Barcelona.
  - Información en: <http://www.bsc.es/RES/programming-models-2010>
- « Computación paralela
  - 5 de noviembre de 2010, Santander.
  - Información en: [www.bsc.es/RES/parallel-computing-seminar](http://www.bsc.es/RES/parallel-computing-seminar)
- « RES Diffusion Sessions in the Canary Islands
  - 27 y 28 de septiembre de 2011, Las Palmas de Gran Canaria y La laguna (Tenerife).
  - Información en: <http://www.bsc.es/RES/jornadas-canarias-2011>
- « Modelos de programación (STARs), 2ª edición
  - 27 y 28 de octubre de 2011, Valencia.
  - Información en: [www.bsc.es/RES/programming-models-2011](http://www.bsc.es/RES/programming-models-2011)
- « Requesting Access to RES and PRACE
  - 13 diciembre 2011, Barcelona.
  - Información en: [www.bsc.es/RES/access-request-2011](http://www.bsc.es/RES/access-request-2011)



Suscripción RSS en <http://www.bsc.es/hpc-events-trainings.xml>





## Organización de seminarios científicos

- « Simulaciones paralelas en la red
  - 30 de noviembre de 2010, Zaragoza.
  - Información en: [http://www.bsc.es/plantillaA.php?cat\\_id=656](http://www.bsc.es/plantillaA.php?cat_id=656)
  
- « Secuenciación de nueva generación
  - 17-18 de marzo de 2011, Málaga.
  - Información en: <http://www.bsc.es/res/NGS-seminar>
  
- « Sesión de supercomputación en Lattice-QDC en Ibergrid 2011
  - 9 de junio de 2011, Santander.
  - Información en: <http://www.ibergrid.eu/2011>



Suscripción RSS en <http://www.bsc.es/hpc-events-trainings.xml>



## Organización de seminarios técnicos

- « Implementación de la metodología ITIL en la gestión de los servicios técnicos de la RES
  - 18 y 19 de mayo de 2010, Santander.
  - Información en: [http://www.bsc.es/plantillaA.php?cat\\_id=633](http://www.bsc.es/plantillaA.php?cat_id=633)
  
- « Gestión de la Energía y Refrigeración de un CPD
  - 19 y 20 de mayo de 2010, Santander.
  - Información en: [http://www.bsc.es/plantillaA.php?cat\\_id=633](http://www.bsc.es/plantillaA.php?cat_id=633)
  
- « Gestión del almacenamiento en la RES
  - 14 de septiembre de 2010, Barcelona.
  - Información en: [http://www.bsc.es/plantillaA.php?cat\\_id=652](http://www.bsc.es/plantillaA.php?cat_id=652)
  
- « Funcionamiento y aplicación de Perfminer
  - 15 de septiembre de 2010, Barcelona.
  - Información en: [http://www.bsc.es/plantillaA.php?cat\\_id=652](http://www.bsc.es/plantillaA.php?cat_id=652)
  
- « Gestión de clusters e introducción a la tecnología Infiniband
  - 3 y 4 de mayo, Barcelona.
  - Información en: <http://www.bsc.es/RES/clusters-and-infiniband-seminar>
  
- « Visualización y Realidad Virtual
  - 14 y 15 de diciembre de 2011, Madrid.
  - Información en: <http://www.bsc.es/RES/visualization-seminar>
  
- « Reunión técnica: Gestión de recursos con SLURM
  - 15 de diciembre de 2011, Madrid.



## Organización de reuniones de usuarios

- ☞ I Jornada de Usuarios de la RES
  - 23 de abril de 2008, Barcelona.
  - Información en: [http://www.bsc.es/plantillaA.php?cat\\_id=669](http://www.bsc.es/plantillaA.php?cat_id=669)
- ☞ II Jornada de Usuarios de la RES
  - 23 de septiembre de 2009, Santander.
  - Información en: [http://www.bsc.es/plantillaA.php?cat\\_id=666](http://www.bsc.es/plantillaA.php?cat_id=666)
- ☞ III Jornada de Usuarios de la RES
  - 1 de julio de 2010, Zaragoza.
  - Información en: [http://www.bsc.es/RES/tercera\\_jornada\\_usuarios\\_2010](http://www.bsc.es/RES/tercera_jornada_usuarios_2010)
- ☞ IV Jornada de Usuarios de la RES
  - 15 de diciembre 2010, Madrid.
  - Información en: [http://www.bsc.es/RES/cuarta\\_jornada\\_usuarios\\_2010](http://www.bsc.es/RES/cuarta_jornada_usuarios_2010)
- ☞ V Jornada de Usuarios de la RES
  - 26 de octubre de 2011, Valencia.
  - Información en: <http://www.bsc.es/RES/quinta-jornada-usuarios-2011>
- ☞ VI Jornada de Usuarios de la RES & HPC Advisory Council Spain Conference 2012
  - 12 y 13 de septiembre de 2012, Málaga.
  - Información en: <http://www.bsc.es/res-and-hpcac-spain-conference-2012>




## Método de petición de acceso a la RES

A través de la RES Área ([www.bsc.es/RES](http://www.bsc.es/RES))

- ☞ Publicación de convocatorias para acceso a la RES
- ☞ Consulta de términos y condiciones de uso
- ☞ Registro de usuarios
- ☞ Accounting, reporting, etc.
- ☞ Envío de peticiones de acceso
  - Título de la actividad
  - Descripción del proyecto y de la actividad
  - Librerías numéricas y software
  - Descripción del equipo de investigación
  - Recursos solicitados
  - Resumen de la actividad para su publicación

RES-Red Española de Supercomputación: Login

**New User**


Please, enter your username (e\_mail) and your password:

Username:

Password:


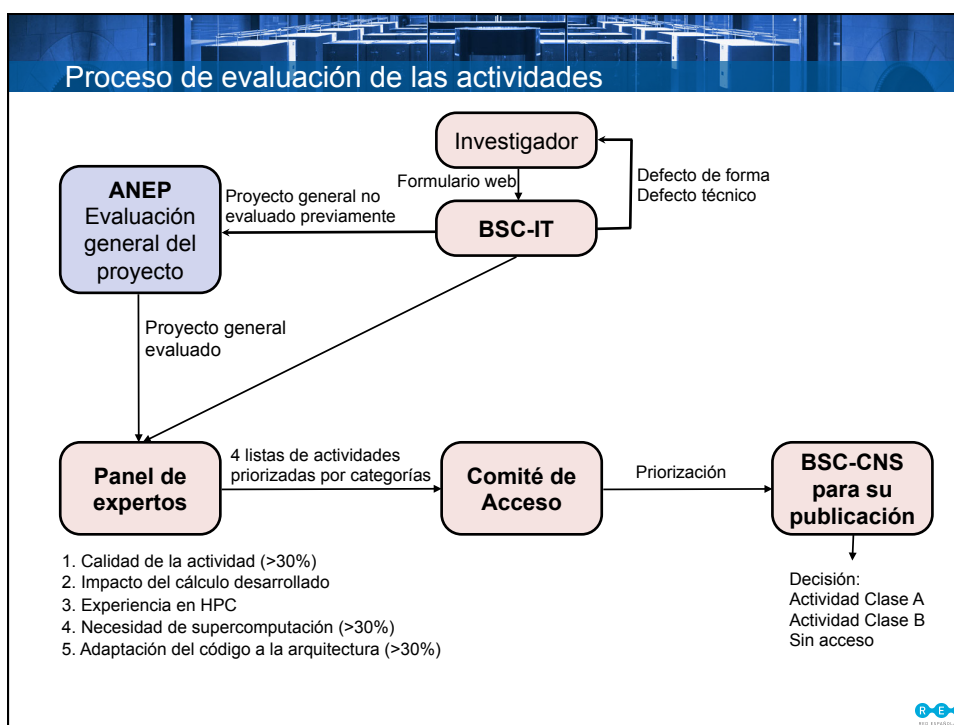
Check here if you forgot your password

**Submit**



## Comité de Acceso único

- ❧ Core Team
- ❧ 4 Paneles de expertos (10 en cada panel):
  - Astronomía, Espacio y Ciencias de la Tierra
  - Biomedicina y Ciencias de la Vida
  - Matemáticas, Física e Ingeniería
  - Química y Ciencia y Tecnología de los Materiales
- ❧ Designado por el MICINN, independiente del BSC-CNS
  - Renovación trienal
- ❧ Asesoramiento técnico por parte del BSC-CNS
- ❧ Asignación de acceso cuatrimestral
- ❧ Distribución del uso de recursos
  - Generalmente, el 20% para el uso propio de cada nodo de la RES
  - El 80% se asigna por el Comité de Acceso

## Comité de Usuarios de la RES

- « Historia
  - El CURES se estableció en febrero de 2010
- « Distribución del uso de recursos
  - Transmitir la opinión e interés de los usuarios y asesorar al coordinador de la RES sobre los servicios y recursos disponibles.
  - Promover el uso efectivo de los recursos de la RES compartiendo la información sobre la experiencia de los usuarios y sugiriendo futuras líneas de investigación.
- « Miembros del CURES
  - 8 científicos (2 de cada área de la RES) que hayan sido Investigadores Principales de actividades desarrolladas en la RES.
  - Asistidos por un representante de la RES
- « Encuesta sobre calidad de servicios a usuarios



## Diseminación de las investigaciones científicas

- « Difusión en la página web del BSC-CNS



- « Publicación de un informe anual incluyendo los proyectos desarrollados



- « Difusión de artículos en las publicaciones más prestigiosas



## Diseminación de las investigaciones científicas

### « Conferencias

- ISC
- SC
- ...



**BSC** *Barcelona Supercomputing Center*  
Centro Nacional de Supercomputación

**PRACE, PARTNERSHIP FOR ADVANCED COMPUTING IN EUROPE**  
[WWW.PRACE-RI.EU](http://WWW.PRACE-RI.EU)



**EXCELENCIA SEVERO OCHOA**

The image features a blue-tinted background of server racks. In the top left, the BSC logo is displayed. The center contains the PRACE logo and website information. In the bottom left, the 'EXCELENCIA SEVERO OCHOA' logo is visible.





## PRACE Research Infrastructure

- « Establishment of the legal framework
  - PRACE AISBL created with seat in Brussels in April (Association Internationale Sans But Lucratif)
  - 24 members representing 20 European countries
    - Hosting members: France, Germany, Italy, Spain
  - Inauguration in Barcelona on June 9, 2010

- « Funding secured for 2010 - 2015
  - 400 Million € from France, Germany, Italy, Spain Provided as Tier-0 services on TCO basis
  - 70+ Million € from EC FP7 for preparatory and implementation Grants INFSO-RI-211528 and 261557 Complemented by ~ 60 Million € from PRACE members

## Working for PRACE




## PRACE AISBL goals

- « The development and provision of an Infrastructure at European level which allows the scientific communities, including those within industry, to access European High-end Computing (HeC) systems (Tier-0);
- « The management of the coordination between the Infrastructure and existing national computation centres (Tier-1) and also, if agreed, regional computation centres (Tier-2), to allow for the establishment of relationships with the HeC user communities; and
- « The provision and rationalization of access to the Infrastructure by qualified European and international scientific communities, either academic or industrial, whose projects may be evaluated for such purpose.



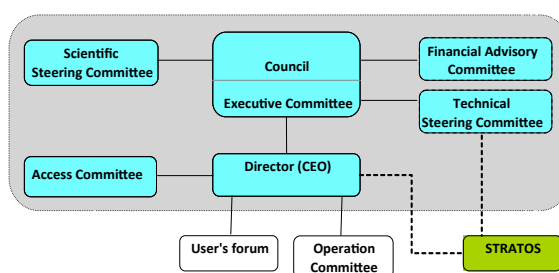
## Funding Principles for the Association

- « Funding of Tier-0 resources
  - Each hosting member commits to provide Tier-0 resources worth 100 Mio. € based on TCO in the next 5 years
  - National procurements of Tier-0 systems follow an agreed procurement plan
  - Meeting requirements of the user communities with previously identified technology options
- « Funding of the HQ operation
  - All partners provide equal cash contributions
- « User support, training and other tasks
  - Provided in kind by members on as-needed basis
  - Supported by the planned Implementation Phase project – where eligible



## Governance of the Association

- ☞ Modelled after successful examples of existing RIs
  - Council as main decision making body
  - Director with strong managing mandate
  - Scientific Steering Committee and Access Committee to give scientific advice and to steer the Peer Review process
  - Further committees will be instantiated by the Council as needed



## Scientific Steering Committee

- ☞ The SSC is responsible for giving opinions on all matters of a scientific and technical nature
- ☞ Maximum of 21 members
- ☞ Members appointed by Council based on a list of candidates prepared by the SSC
- ☞ Two year term (renewable twice)
- ☞ Proposes the members of the Access Committee
- ☞ Resolutions by simple majority

Richard Kenway (UK, particle physics), Chair  
 Jose M. Baldasano (Spain, environment)  
 Kurt Binder (Germany, statistical physics)  
 Paolo Carloni (Italy, biological physics)  
 Giovanni Ciccotti (Italy, statistical physics)  
 Dann Frenkel (Netherlands, molecular simulations)  
 Sylvie Joussaume (France, environment)  
 Ben Moore (Switzerland, astrophysics)  
 Gernot Muenster (Germany, particle physics)  
 Risto Nieminen (Finland, materials)  
 Modesto Orozco (Spain, life sciences)  
 Maurizio Ottaviani (France, plasma physics)  
 Michelle Parrinello (Switzerland, chemistry)  
 Olivier Pironneau (France, mathematics)  
 Thierry Poinot (France, engineering)  
 Simon Portegies Zwart (Netherlands, astrophysics)  
 Kenneth Ruud (Norway, chemistry)  
 Wolfgang Schroeder (Germany, engineering)  
 Luis Silva (Portugal, plasma physics)  
 Alfonso Valencia (Spain, bioinformatics)

## IBM Blue Gene/P – JUGENE hosted by GCS in Jülich, Germany

- ☛ Composed of 294912 processing cores with 4 cores forming a node with 2 GB of memory for a total of 147 TB.
- ☛ Performance
  - Peak: 1 PFlop/s
  - HPL: 825.5 TFlop/s
- ☛ <http://www.fz-juelich.de/jsc/jugene>



## Bull Bullx cluster – CURIE Hosted by GENCI in TGCC/CEA, Bruyères-Le-Châtel, France

- ☛ Composed by 3 different partitions:
  - A fat node partition open to PRACE calls since January 2011 and composed by 360 nodes with 32 cores per nodes, for a peak performance of 105 TeraFlops
  - A thin node partition, open to PRACE calls in Q1 2012 and composed by 5040 blades with 16 cores per node, for a peak performance of up to 1.5 PetaFlops
  - A hybrid node partition, open to PRACE preparatory Access Calls only and composed by 144 blades with 8 scalar cores and 2 GPU per node, for a peak performance of 200 TeraFlops
- ☛ <http://www-hpc.cea.fr/en/complex/tgcc-curie.htm>





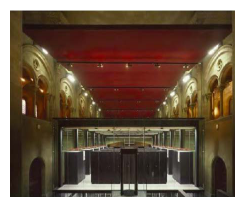
## Cray XE6 – HERMIT, hosted by GCS in HLRS, Stuttgart, Germany

- « HERMIT has a peak performance of 1 Petaflops and is designed for sustained application performance and highly scalable applications. It is composed of 3552 dual socket nodes equipped with AMD Interlagos Processors leading to overall 113664 processing cores. Nodes are equipped with 32GB or 64GB main memory.
- « Performance
  - Peak: 1.045 PFlop/s
  - HPL: 831.4 TFlop/s
- « <http://www.hlrs.de/systems/platforms/cray-xe6-hermit/>



## Systems coming 2012Q2

- « SuperMUC – hosted by GCS in LRZ, Garching, Germany
  - <http://www.lrz.de/services/compute/super muc/systemdescription/>
  - SuperMUC is based on the Intel Xeon-Architecture and will provide a peak performance of about 3 Petaflops
- « MareNostrum – hosted by BSC in Barcelona, Spain
  - Details will be made available at <http://www.bsc.es/MareNostrum>
  - MareNostrum will be announced shortly. It will be a system with 1 PetaFlops peak performance, equipped with general-purpose processors.
- « FERMI – hosted by CINECA in Casalecchio di Reno, Italy
  - Details will be made available at [www.cineca.it/en/hardware/FERMI](http://www.cineca.it/en/hardware/FERMI)
  - FERMI will be a highly scalable system without accelerators. The system will deliver 2 PetaFlops peak performance, configured with in excess of 150.000 cores processors, with 1 GByte of main memory per core.





## Access Committee

- ❧ Responsible for giving opinions on the scientific use of Tier-0 Infrastructure, and providing recommendations on the allocation of Association computational resources based on the Peer Review process
- ❧ Proposed by the SSC based on their personal experience in the areas of science
- ❧ Appointed by the Council
- ❧ Minimum of 5 members
- ❧ Two years term (renewable once)
- ❧ Half of the members shall be replaced every year

Kenneth Ruud (Chair)  
 Roberto Capuzzo Dolcetta (Astrophysics)  
 Peter Nielaba (Chemistry and Materials)  
 Manuel Peitsch (Life Sciences)  
 Andreas Schaefer (Particle Physics)  
 Jean-Claude Andre (Environment)  
 Hester Bijl (Engineering and applied mathematics)



## Call for proposals

- ❧ Preparatory Access
  - Intended for preliminary resource use required to prepare proposals for Project Access
  - Technical review
- ❧ Project Access
  - Intended for individual researchers and research groups including multi-national research groups
  - Technical and Scientific review
- ❧ Multi year access
  - Available to major European projects or infrastructures that can benefit from PRACE resources
  - Planned for 2 years allocation
  - Test on the next call

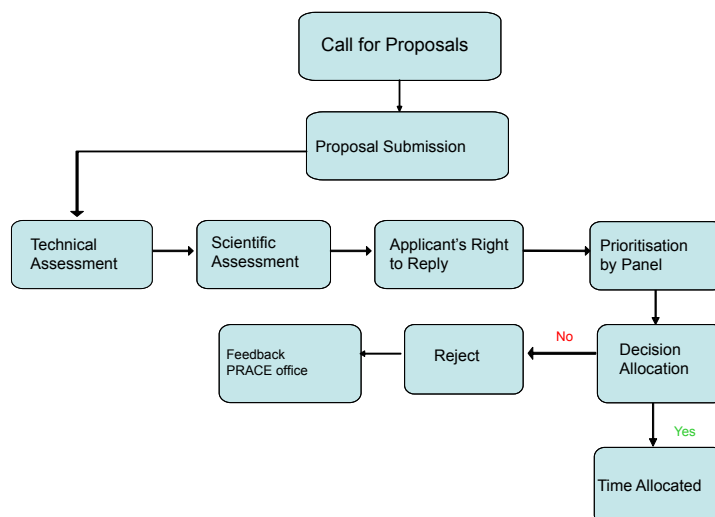


## Peer review principles

- « Transparency
- « Fairness
- « No parallel assessment
- « Avoiding conflict of interests
- « Reviews by non-conflicted experts
- « Confidentiality
- « Right to appeal technical and scientific evaluations



## Peer Review Process



## Technical Assessment

- ☞ All proposals will undergo a technical assessment. The technical assessment can result in three outcomes:
  - Feasible, very well suited
  - Feasible, not ideal for the requested resources
  - Proposal for rejection



## Criteria for technical assessment

- ☞ The **need** to use a PRACE resource
- ☞ **Software availability** on the requested resource
  - The codes necessary for the project must be available on the system requested and/or, in case of codes developed by the applicants and Project and Programme Access proposals sufficiently tested for efficiency, high scalability, and suitability.
  - For Project and Programme Access Proposals proof of successful tests must be submitted together with the proposal;
- ☞ **Feasibility** of the requested resource. The requested system must be suitable for the proposed project. The technical assessment may redirect projects to a more appropriate system.
- ☞ These criteria should be **fully addressed** in the application.



## Scientific Assessment

- ⌘ Scientific review is performed by internationally recognized experts in the field of research of the proposal
- ⌘ Maximum one expert selected from the proposed by the applicant
- ⌘ During the scientific assessment an increase or decrease in the requested resources can be recommended for consideration in resource allocation.
- ⌘ Technical assessment is available to scientific reviewers



## Criteria for scientific assessment

- ⌘ **Scientific excellence.** Demonstrate scientific excellence and a potential for high European and international impact
- ⌘ **Novelty and transformative qualities.**
  - Proposals should be novel, develop an important scientific topic of major relevance to European research
  - describe possible transformative aspects, and expected advances
- ⌘ **Relevance** to the call if a specific scope is stated in the call
- ⌘ **Methodology**
- ⌘ **Dissemination**
  - The planned channels and resources for dissemination and knowledge exchange
  - List of recent publications relevant to the proposed project.
- ⌘ **Management.** Solid management structure in the project
- ⌘ These criteria should be **fully addressed** in the application.



## Resource Allocation

- ☞ Access Committee makes a recommendation for resource allocation to the PRACE Board of Directors
- ☞ Composed of eminent scientists
- ☞ Analyse
  - Technical and scientific review reports
  - Applicants' response
- ☞ Produce
  - A single and unique ranked list for each call
  - Project and Programme proposals are ranked in the same list
  - Takes into account the advice regarding amounts of resources
  - Possible decision on cut-off threshold for granting of proposals



## Propuestas españolas

- ☞ Preparatory Access: Type A:
  - Septiembre 2011:
    - Project name: Large-scale O(N) DFT simulations of defects in metal oxides
      - Leader: Pérez Rubén, Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, Spain
  - Julio 2011
    - Project name: NMMB/BSC-CTM porting and scalability test – extension
      - Leader: Oriol Jorba, Barcelona Supercomputing Center - Centro Nacional de Supercomputación, Barcelona, Spain
  - Marzo-Mayo 2011
    - Project name: NMMB/BSC-CHEM
      - Leader: Oriol Jorba, Barcelona Supercomputing Center, Barcelona, Spain
    - Project name: First principles design of a biocatalyst for water oxidation
      - Leader: Carme Rovira, Parc Científic de Barcelona, Barcelona, Spain
    - Project name: Linear-scaling Density Functional Theory of heterogeneous proteins with Conquest
      - Leader: Antonio Sánchez Torralba, Spanish National Cancer Research Centre (CNIO), Madrid, Spain






Propuestas españolas

« Preparatory Access: Type C:


- Marzo-Mayo 2011
  - Project name: Self organization, pattern formation and morphological instabilities in suspensions of microswimmers
    - Leader: Ignacio Pagonabarraga, University of Barcelona, Barcelona, Spain
  - Project name: New algorithms in Octopus for Petaflop computing
    - Project leader: Joseba Alberdi Rodriguez, Universidad del Pais Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, Donostia-San Sebastian, Spain
- Primera y segunda ronda de evaluación:
  - Project name: Parallel uniform mesh subdivision in Alya
    - Leader: Guillaume Houzeaux, Barcelona Supercomputing Center, Spain



Propuestas españolas

« 3rd Regular Call:

- Project name: Modeling gravitational wave signals from black hole binaries
  - Leader: Sascha Husa, Universitat de les Illes Balears, Spain
- Project name: Branch point motion in star polymers and their mixtures with linear chains
  - Leader: Angel Rubio, CSIC-UPV/EHU, Spain
- Project name: Ligth quark mass dependence of two-hadron energies in Lattice QCD
  - Leader: Assumpta Parreño, University of Barcelona, Spain
- Project name: First principles design of a biocatalyst for water oxidation
  - Leader: Carme Rovira, University of Barcelona, Spain



## Propuestas españolas

### « 2nd Regular Call:

- Project name: Large Scale simulations of Ly-alpha and Ly-break galaxies in the high-z universe: Probing the epoch of reionization.  
Leader: Gustavo Yepes, Universidad Autonoma de Madrid, Spain
- Project name: The molecular bases of the transport cycle of APC antiporters  
Leader: Modesto Orozco, Institute for Research in Biomedicine Structural and Computational Biology, Spain

### « 1st Regular Call:

- Project name: Entrainment effects in rough-wall boundary layers  
Leader: Javier Jimenez, Universidad Politecnica Madrid, Madrid, Spain
- Project name: Non diffusive transport in ITG plasma turbulence  
Leader: Edilberto Sánchez, EURATOM-CIEMAT Association, Madrid, Spain



## 4th regular call, Tier-0

- « Evaluation process identical to 3<sup>rd</sup> call, submission via web
- « IBM Blue Gene/P "JUGENE" (GCS@Jülich, Germany)
  - Scalability: at least 8192 compute cores
  - Available capacity in this call is 360 million compute core hours
- « Bull BULL Bullx cluster "CURIE" (GENCI@CEA, France)
  - Scalability: at least 512 cores for the fat nodes partition and above 2048 cores for the thin nodes partition
  - Available capacity
    - On the thin nodes partition: 188 million compute core hours
    - On the fat nodes partition: 28 million compute core hours
- « Cray XE6 "HERMIT" (GCS@HLRS, Germany)
  - Scalability: at least 2048 compute core
  - Available capacity in this call is 120 million compute core hours.
- « "SuperMUC" (GCS@LRZ, Germany)
  - Scalability: at least 4096 compute core
  - Available capacity in this call is 200 million compute core hours.
- « "FERMI" (CINECA, Italy)
  - Available capacity in this call is 300 million compute core hours.
- « "MareNostrum" (BSC, Spain)
  - Scalability: at least 2048 compute core
  - Available capacity in this call is 135 million compute core hours.



#### 4th regular call: Tier-0

##### ☞ Eligibility for Tier-0 resources

- For this call, proposals from academia are eligible, as long as the project leader is a senior researcher employed in a research organisation. The employment contract of the project leader with the research organisation must be valid to at least 3 months after the end of the allocation period.
- Industry will be eligible for access through collaborations with academia, i.e. industry must have the role of collaborators in academic projects. Full access to industry will begin later in 2011 and will be announced at the PRACE website.

##### ☞ For this call, proposals asking for resources on a single machine or on multiple machines are allowed.

##### ☞ Please note that a proposal asking for resources on multiple machines has to justify the need to access several machines. The proposal will be awarded or rejected in totality (no subpart of the proposal will be awarded).



#### Past project access calls for proposals (in million core hours)

Call	Access time	Requested Hours	Requested Projects	Awarded Hours	Awarded projects
Early Access	July 2010 March 2011	1870	68	324	10
1 <sup>st</sup> Call	Nov. 2010 Oct. 2011	2900	59	362	9
2 <sup>nd</sup> Call	May. 2011 April 2012	1250	47	398	17
3 <sup>rd</sup> Call	Nov. 2011 Oct. 2012	1700	53	721	24
<b>Total</b>		<b>7720</b>	<b>227</b>	<b>1805</b>	<b>59</b>



Soporte desde el BSC-CNS

- « Preparación técnica de solicitudes
  - Mejorar el *success ratio* de las solicitudes
- « Realización pruebas de escalabilidad en supercomputadores del Centro
- « Ayuda en el acceso y ejecución
  - Porting de código
  - Transferencia de entrada/salida
  - Acceso a sistema de colas
  - Rendimiento de aplicaciones
- « Transferencia de datos
  - Durante y después del acceso

