



***Informe final de los resultados de
la 5ª convocatoria de acceso a
recursos HPC***

Rafael Mayo García - Coordinador

Introducción

La Red Iberoamericana de Computación de Altas Prestaciones (RICAP) tiene como objetivo dotar a la región de un servicio avanzado de TIC; en concreto, de una infraestructura estratégica en el ámbito de la computación de altas prestaciones a partir de una arquitectura avanzada que comprenda tanto la computación de alto rendimiento (HPC) como de alta productividad (HTC) a partir de computación en la nube.

RICAP es un consorcio financiado por la CYTED que aúna a varios centros de computación latinoamericanos –algunos de ellos los más grandes en sus respectivos países–, varios proveedores de casos de uso en distintos ámbitos científico-tecnológicos, una de las compañías productoras de supercomputación más grandes del mundo y un consorcio latinoamericano experimental en el ámbito de la física.

En este documento se describe el proceso llevado a cabo para realizar la cuarta convocatoria de acceso a recursos de supercomputación (HPC) a lo largo del primer semestre de 2020.

Diseño y proceso de convocatoria

La quinta convocatoria de acceso a recursos de supercomputación de la Red Iberoamericana de Computación de Altas Prestaciones (RICAP) se lanzó al inicio de diciembre de 2019 y tuvo como fecha límite de envío de propuestas el 29 de febrero de 2020.

A los autores seleccionados se les notificó la asignación de recursos el 4 de marzo de 2020, habilitándose los meses de abril y mayo posteriores para las ejecuciones de cada uno de ellos.

Con anterioridad, se diseñó una convocatoria y unas normas que fueran compatibles con los recursos que los centros de RICAP podían aportar y fuera al mismo tiempo compatible con unas políticas definidas de buen uso. Además, se estableció cómo se abordaría el acceso a los recursos tanto por grupos académicos sin ánimo de lucro como por entidades privadas.

Para todo este trabajo, se siguió los patrones que, con notable éxito, se han seguido en iniciativas como PRACE [1] o la Red Española de Supercomputación [2].

El resultado final de este documento se puede encontrar en la web de RICAP en el enlace <http://www.red-ricap.org/infraestructura> bajo el epígrafe “Normas de Acceso HPC”.

Para facilitar el envío de solicitudes por parte de los grupos interesados, se habilitó un correo electrónico. La decisión de hacerlo así en vez de a través de un formulario web se debió a facilitar el proceso de envío de solicitudes a las instituciones interesadas.

Toda la información relativa a esta convocatoria se encuentra igualmente colgada en el enlace anteriormente citado, tal y como se puede apreciar en la Fig. 1.

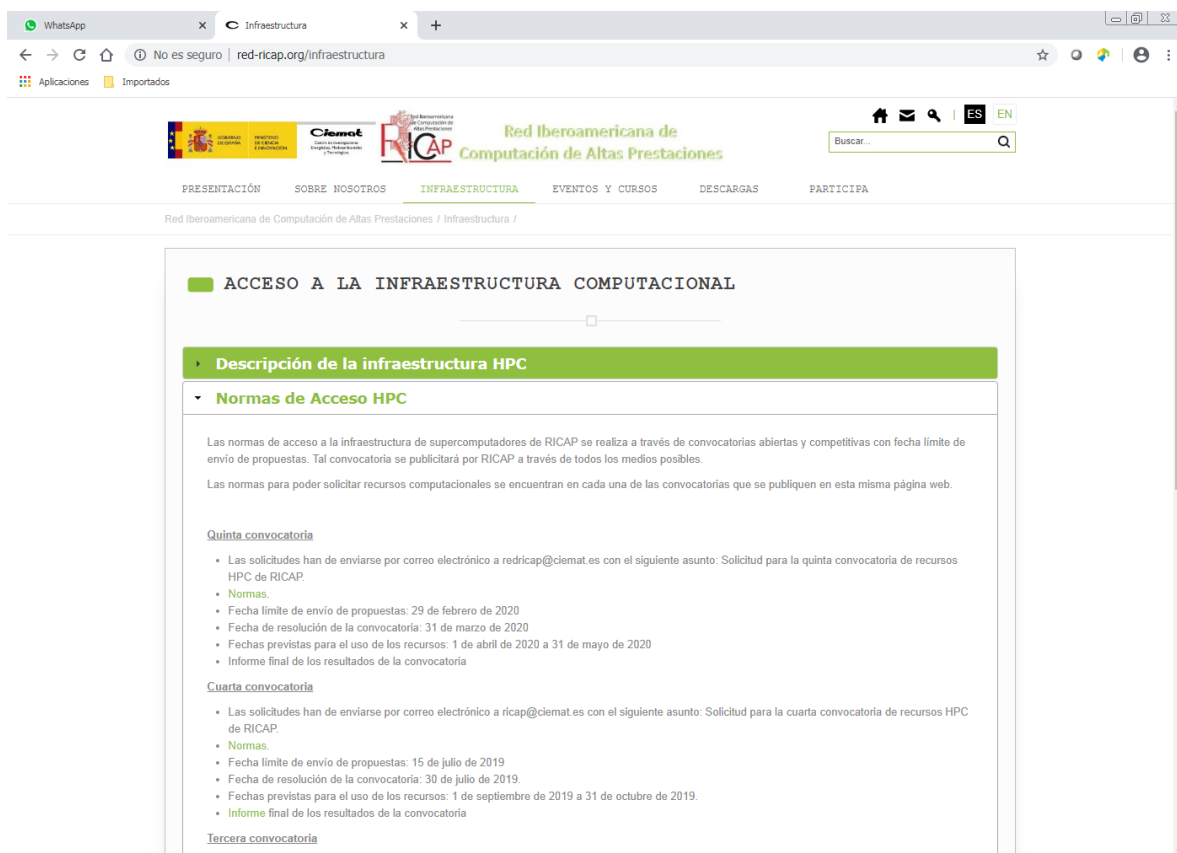


Fig. 1. Pantallazo con la información de la cuarta convocatoria de acceso a recursos de supercomputación de RICAP.

Resultado de la convocatoria

A la quinta convocatoria acudieron los siguientes grupos de investigación que se detallan en la Tabla I:

Grupo solicitante	Institución	País	Responsable	Horas empleadas
Unidad de Aplicaciones Médicas	CIEMAT	Es	Dr. Arce	~675.000 CPU
Colaboración LAGO	UFRGS	Int	Prof. Cogollo	~115.200 CPU
Fac. Ciencias Químicas	UNC	Ar	Prof. Mariscal	~161.000 CPU
Laboratorio de Química Computacional	IVIC	Ve	Prof. Ruetze	~252.400 CPU y ~10.000.000 GPU
Scientific IT Research Activities and Knowledge	CIEMAT	Es	Dr. García Müller	~240.000 CPU
Laboratorio de Química Física y Catálisis Computacional	IVIC	Ve	Prof. Sierraalta	~200.000 CPU
Laboratorio de Química Física y Catálisis Computacional	IVIC	Ve	Dra. Vidal	~151.200 CPU
Centro de Química Dr. Gabriel Chuchani	IVIC	Ve	Dr. Hurtado-Aular	~200.000 CPU
Departamento de Química, FCNMM	UTEM	Cl	Dra. Paredes	~161.000 CPU

Tabla I: Grupos solicitantes de la quinta convocatoria de acceso a recursos de supercomputación de RICAP

Todos los grupos obtuvieron acreditación de horas de cálculo en los recursos de RICAP. Las horas de CPU consumidas por estos grupos en los supercomputadores hasta el 31 de mayo de 2020 fueron ~2.156.000; por su parte, las horas de GPU fueron de ~10.000.000.

Divulgación científica derivada

Hasta la fecha de redacción de este informe, se habían publicado los siguientes 50 trabajos listados en la Tabla II:

Publicación
M. Rodríguez-Pascual, A.J. Rubio-Montero, J.A. Moríñigo, R. Mayo-García. Execution data logs of a supercomputer workload over its extended lifetime. <i>Data in brief</i> 28 (2020) 105006
M. Sánchez, F. Ruetter. Calculations of adsorption, coadsorption, diffusion, and reaction barriers of H atoms in the H ₂ formation on a positively charged coronene. <i>Chemical Physics Letters</i> (in print)
J. Marquina et al. Theoretical study of Mn doping effects and O or Zn vacancies on the magnetic properties in wurtzite ZnO. <i>Chinese Journal of Physics</i> 63, 63–69 (2020)
J.C. Jiménez, J.A. Olmos-Asar, E. Franceschini, M. Mariscal. Electrochemical area of graphene supported metal nanoparticles from an atomistic approach. <i>Journal of Applied Electrochemistry</i> (printed online, 2020)
J. A. Olmos-Asar, M. Mariscal. Avoiding oxidation with coating: graphene protected magnesium surfaces. <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> 21, 18660-18666 (2019)
F.R. Negreiros et. al. Ultrathin WO ₃ Bilayer on Ag(100): A Model for the Structure of 2D WO ₃ Nanosheets. <i>J. Phys. Chem. C</i> 123, 27584-27593 (2019)
F.R. Negreiros et. al. The unexpected effect of vacancies and wrinkling on the electronic properties of MoS ₂ layers, <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> 21, 24731-24739 (2019)
C. Gómez, J. Chavarriaga, H. Castro. Fault Characterization and Mitigation Strategies in Desktop Cloud Systems. <i>Communications in Computer and Information Science</i> , Volume 979, pp 322-335, March 2019
J. Chavarriaga, C. Gómez, D. Bonilla, H. Castro. Capacity of Desktop Clouds for Running HPC Applications: A Revisited Analysis. Iorez H., Leon M., Diaz-Nafria J., Belli S. (eds) <i>Applied Informatics. ICAI 2019, Communications in Computer and Information Science</i> , pp. 257-268, vol 1051. Springer, Cham.
M. Rodríguez-Pascual, J.A. Moríñigo, R. Mayo-García. Effect of MPI tasks location on cluster throughput using NAS. <i>Cluster Computing</i> 22, 1187–1198 (2019)
N. Molero-Puerto, R. Mayo-García. Using GPUs for determining the energy configuration of superconducting vortex lattices with stochastic methods. In: <i>Proc. 2019 Winter Simulation Conf</i> , 3277-3284 (2019)
J. Muraña et al. Characterization, modeling and scheduling of power consumption of scientific computing applications in multicores. <i>Cluster Computing</i> 22 (3), 839-859 (2019)
M. Alaniz, S. Neschmanow. A semi-automatic approach for parallel problem solving using the Multi-BSP model. <i>Programming and Computer Software</i> 45(8), 517-531 (2019)
S. Iturriaga et al. Evolutionary Algorithms for Optimizing Cost and QoS on Cloud-based Content Distribution Networks. <i>Programming and Computer Software</i> 45(8), 544-556 (2019)
R. Díaz et al. Aproximación numérica en un reactor de lecho empacado estructurado sobre la influencia de la transferencia de masa en la conversión química. <i>Proc. XXII Congreso Venezolano de Catálisis 2019</i> . ISBN: 978-980-12-3931-4
M. Fernández et al. Deslocalización de la densidad de espín del radical hidroxilo sobre el MgSO ₄ . Un estudio teórico. <i>Proc. XXII Congreso Venezolano de Catálisis 2019</i> . ISBN: 978-980-12-3931-4

M. Guarecuco et al. Estudio computacional de la adsorción de hidrógeno en átomos de níquel soportado en coroneno funcionalizado con grupos cetona y amino. Proc. XXII Congreso Venezolano de Catálisis 2019. ISBN: 978-980-12-3931-4
K. Serny et al. Evaluación de la conversión química en un reactor empacado usando modelos heurísticos de flujodinámica. Un acercamiento al comportamiento real. Proc. XXII Congreso Venezolano de Catálisis 2019. ISBN: 978-980-12-3931-4
J.G. Cisneros et al. Estudio de la modificación de las propiedades interfaciales del sistema agua-decano por distintos tipos de surfactantes mediante cálculos de Dinámica Molecular. Proc. XXII Congreso Venezolano de Catálisis 2019. ISBN: 978-980-12-3931-4
Y. Bentarcut et al. Una metodología para calcular energías del sólido (bulk) considerando la partición de la energía por capas. Aplicación en bloques (slabs) estequiométricos asimétricos tipo magnetita en la dirección [001]. Proc. XXII Congreso Venezolano de Catálisis 2019. ISBN: 978-980-12-3931-4
E.L. Padoin et al. Optimizing Water Cooling Applications on Shared Memory Systems. Proc. CARLA 2019
M. Rodríguez-Pascual et al. Job migration in HPC clusters by means of checkpoint/restart. The Journal of Supercomputing 75, 6517-6541 (2019)
A.M. Maliszewski et al. Minimizing Communication Overheads in Container-based Clouds for HPC Applications. Proc. ISCC 2019
E. Roloff et al. Exploring Instance Heterogeneity in Public Cloud Providers for HPC Applications. Proc. CLOSER 2019
O. Carvalho et al. GaruaGeo: Global Scale Data Aggregation in Hybrid Edge and Cloud Computing Environments. Proc. CLOSER 2019
J.A. Moríñigo et al. Benchmarking LAMMPS: Sensitivity to Task Location Under CPU-Based Weak-Scaling. Communications in Computer and Information Science 979, 224-238 (2019)
J.A. Moríñigo et al. On the modelling of optimal coordinated checkpoint period in supercomputers. The Journal of Supercomputing (2019) 75:930–954
M. Sánchez, F. Ruetter. Calculations of adsorption energies, coadsorptions, diffusion barriers, and H ₂ formation on a nanographene surface (coronene), International Journal of Quantum Chemistry. In press, https://doi.org/10.1002/qua.25893 (2019)
C. Gómez, J. Chavarriaga, H Castro, A. Tcherykh. Improving Reliability for Provisioning of Virtual Machines in Desktop Clouds. 12th Workshop on Resiliency in High Performance Computing (Resilience) in Clusters, Clouds, and Grids, EuroPar, Göttingen, Germany, August 2019
P. Arce, J.I. Lagares. CPU time optimization and precise adjustment of the Geant4 physics parameters for a VARIAN 2100 C/D gamma radiotherapy linear accelerator simulation using GAMOS. Phys. Med. Biol. 63, 035007 (2018)
D. Rojas, M.C. Alvarez, C. Ulloa, V. Nuñez, MP Delgado, S. Aguilera, H. Castro, C. Jaramillo, A. González. Intramolecular energies of the cytotoxic protein CagA of Helicobacter pylori as a possible descriptor of strains' pathogenicity level. Computational Biology and Chemistry, Vol 76, pp. 17-22, October 2018
C. Gómez, J. Chavarriaga, D. Bonilla, H. Castro. Global Snapshot File Tracker. Communications in Computer and Information Science, vol 942, pp 90-104, ICAI 2018, Bogotá, Colombia, November 2018
M. Fernández, J. Klapp, L. Sigalotti F. Ruetter, Hydration study of MgSO ₄ using different theoretical and model approaches. Is there a proton transfer?, Chemical Physics Letters, 713 (2018) 39-45.
Y.L. Bentarcut, F. Ruetter, M. Calatayud, J. Klapp, Periodic density functional theory study of maghemite (001) surface. Structure and electronic properties, Surface Science, 677 (2018) 239-253
P. Arce, J.I. Lagares. CPU time optimization and precise adjustment of the Geant4 physics parameters for a VARIAN 2100 C/D gamma radiotherapy linear accelerator simulation using GAMOS. Phys Med Biol. 2018 Jan 25, 63(3)
V. Martínez et al. Performance improvement of stencil computations for multi-core architectures based on machine learning. Procedia Computer Science 108, 305-314
C. Gómez et al. Fault Characterization and Mitigation Strategies in Desktop Cloud Systems.

Proc. CARLA 2018
V. Martínez et al. Performance evaluation of stencil computations based on source-to-source transformations. Proc. CARLA 2018
P.J. Pavan et al. Improving performance and energy efficiency of geophysics applications on GPU architectures. Proc. CARLA 2018
J.A. Moríñigo et al. Benchmarking LAMMPS: Sensitivity to Task Location under CPU-based Weak-scaling. Proc. CARLA 2018
V. Martínez et al. Performance Prediction of Geophysics Numerical Kernels on Accelerator Architectures. Proc. Energy 2018
M. Rodríguez-Pascual et al. Energy Determination of Superconducting Vortex Lattices with Stochastic Methods Calculated on GPUs. Proc. Energy 2018
E. Roloff et al. Exploiting Load Imbalance Patterns for Heterogeneous Cloud Computing Platforms. Proc. CLOSER 2018.
O. Carvalho et al. A Distributed Stream Processing based Architecture for IoT Smart Grids Monitoring. Proc. CloudAM 2017
E. Roloff et al. Exploiting Price and Performance Tradeoffs in Heterogeneous Clouds. Proc. CloudAM 2017
C. Gómez, H. Castro, C. Varela. Global snapshot of a distributed system running on virtual machines. Proc of the 29th International Symposium on Computer Architecture and High Performance Computing, SBAC-PAD 2017, pp. 169-176, Campinas, Brazil, October 2017
J. Chavarriaga, J. Padilla, C. Forero, A. Martínez, H. Castro. Scaling the deployment of Virtual Machines in UnaCloud. Mocskos E., Nesmachnow S. (eds) High Performance Computing. CARLA 2017, Buenos Aires, Argentina. Communications in Computer and Information Science, vol 796. Springer, Cham, pp 399-413, September 2017
O. Carvalho et al. IoT Workload Distribution Impact between Edge and Cloud Computing in a Smart Grid Application. Proc. CARLA 2017
V. Martínez et al. Performance Prediction of Acoustic Wave Numerical Kernel on Intel Xeon Phi Processor. Proc. CARLA 2017
E. Meneses. Exploring Application-Level Message-Logging in Scalable HPC Programs. Proc. CARLA 2017

Tabla II: Publicaciones derivadas del uso de los recursos asignados en la primera, segunda, tercera y cuartas convocatorias de acceso a recursos de supercomputación de RICAP

En el enlace de la web del proyecto <http://www.red-ricap.org/descargas> bajo el epígrafe “Lista de trabajos realizados con recursos de RICAP” se puede encontrar una copia de acceso libre de cada una de estas contribuciones.

Asimismo y como fácilmente se puede inferir por el proceso de análisis de las simulaciones, redacción de artículos y proceso de aceptación en revistas, se han mandado a publicar otros trabajos que aún no tienen respuesta por parte de los comités de revisión y que se incluirán en el informe relacionado con la tercera convocatoria de acceso a recursos de supercomputación de RICAP.

En relación a la presentación de 29 trabajos en conferencias, éstos aparecen en la Tabla III:

Título del Trabajo presentado y conferencia
Fault Characterization and Mitigation Strategies in Desktop Cloud Systems
CARLA 2018
Capacity of Desktop Clouds for Running HPC Applications: A Revisited Analysis.
ICAI 2019.
Using GPUs for determining the energy configuration of superconducting vortex lattices with stochastic methods

2019 Winter Simulation Conf.
Aproximación numérica en un reactor de lecho empacado estructurado sobre la influencia de la transferencia de masa en la conversión química
Congreso Venezolano de Catálisis 2019
Deslocalización de la densidad de espín del radical hidroxilo sobre el MgSO ₄ . Un estudio teórico
Congreso Venezolano de Catálisis 2019
Estudio computacional de la adsorción de hidrógeno en átomos de níquel soportado en coroneno funcionalizado con grupos cetona y amino
Congreso Venezolano de Catálisis 2019
Evaluación de la conversión química en un reactor empacado usando modelos heurísticos de flujodinámica. Un acercamiento al comportamiento real
Congreso Venezolano de Catálisis 2019
Estudio de la modificación de las propiedades interfaciales del sistema agua-decano por distintos tipos de surfactantes mediante cálculos de Dinámica Molecular
Congreso Venezolano de Catálisis 2019
Una metodología para calcular energías del sólido (bulk) considerando la partición de la energía por capas. Aplicación en bloques (slabs) estequiométricos asimétricos tipo magnetita en la dirección [001]
Congreso Venezolano de Catálisis 2019
Optimizing Water Cooling Applications on Shared Memory Systems
CARLA 2019
Minimizing Communication Overheads in Container-based Clouds for HPC Applications.
ISCC 2019
Exploring Instance Heterogeneity in Public Cloud Providers for HPC Applications
CLOSER 2019
GaruaGeo: Global Scale Data Aggregation in Hybrid Edge and Cloud Computing Environments
CLOSER 2019
Benchmarking LAMMPS: Sensitivity to Task Location Under CPU-Based Weak-Scaling
CARLA2018
Improving Reliability for Provisioning of Virtual Machines in Desktop Clouds
12th Workshop on Resiliency in High Performance Computing (Resilience) in Clusters, Clouds, and Grids, Europar.
Global Snapshot File Tracker
ICAI 2018
Fault Characterization and Mitigation Strategies in Desktop Cloud Systems
CARLA 2018
Performance evaluation of stencil computations based on source-to-source transformations.
CARLA 2018
Improving performance and energy efficiency of geophysics applications on GPU

architectures
CARLA 2018
Performance Prediction of Geophysics Numerical Kernels on Accelerator Architectures
Energy 2018
Energy Determination of Superconducting Vortex Lattices with Stochastic Methods Calculated on GPUs
Energy 2018
Exploiting Load Imbalance Patterns for Heterogeneous Cloud Computing Platforms.
CLOSER 2018.
A Distributed Stream Processing based Architecture for IoT Smart Grids Monitoring
CloudAM 2017
Exploiting Price and Performance Tradeoffs in Heterogeneous Clouds
CloudAM 2017
Global snapshot of a distributed system running on virtual machines.
SBAC-PAD 2017
Scaling the deployment of Virtual Machines in UnaCloud
CARLA 2017
IoT Workload Distribution Impact between Edge and Cloud Computing in a Smart Grid Application
CARLA 2017
Performance Prediction of Acoustic Wave Numerical Kernel on Intel Xeon Phi Processor.
CARLA 2017
Exploring Application-Level Message-Logging in Scalable HPC Programs
CARLA 2017

Tabla III: Presentaciones realizadas derivadas del uso de los recursos asignados en la primera, segunda, tercera y cuartas convocatorias de acceso a recursos de supercomputación de RICAP

Igualmente, el acceso a los recursos de RICAP ha posibilitado la realización de hasta 16 tesis.

Tesis
Tesis de Doctorado: Carlos Gómez. Confiabilidad en Sistemas Desktop Cloud
Tesis de Doctorado: Miguel A. Fernández Castellanos. Estudio teórico del efecto del MgSO ₄ sobre la peroxidación lipídica en membranas celulares: cálculos multi-escala de las interacciones entre lípidos de membrana, agua, radicales hidroxilo y MgSO ₄
Tesis de Doctorado: Juan A. Freitez. Estudio teórico de las reacciones de hidrogenación de asfaltenos en presencia de malteno sin catalizador.
Tesis de Doctorado: Yenner Bentarcurt. Estudio teórico de la hidrogenación de nitrobenzeno en estructuras de γ -Fe ₂ O ₃ , en grafeno N-Dopado usando la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)
Tesis de Doctorado: Raamsés Díaz. Integración de los fenómenos de transporte en poro en un lecho empacado fijo sobre un estudio multi-escala del coeficiente de flujo difusional.
Tesis de Maestría: Carlos Gómez. Diseño de una arquitectura para el manejo de

paquetes en ambientes HPC usando NiX
Tesis de Maestría. Otavio Carvalho. A model for distributed data aggregation in edge and cloud environments
Tesis de Maestría: Jonathan Guedez. Simulación en 2D de la formación de un trombo, en una sección de la arteria coronaria en presencia del campo de elasticidad mediante el método S.P.H.
Tesis de Grado: Luis Plazas. Opportunistic IaaS platform based on containers
Tesis de Grado: César Bernal. Implementación de una arquitectura de visualización remota sobre un esquema de Visualización como Servicio
Tesis de Grado: Miguel Antonio Fernández Castellanos. Estudio teórico del efecto del MgSO ₄ sobre la peroxidación lipídica en membranas celulares: cálculos multi-escala de las interacciones entre lípidos de membrana, agua, radicales hidroxilo y MgSO ₄ .
Tesis de Grado: María Remolina. Optimización y paralelización del diseño hidráulico de un sistema de alcantarillado.
Tesis de Grado: José Tamura. Detección y predicción de fallas a partir de métricas de performance en sistemas Desktop Cloud.
Tesis de Grado: Noelia Molero Puerto. Determinación de configuraciones de vórtices superconductores con procesos estocásticos con aceleradores gráficos en entornos de supercomputación.
Tesis de Grado: Andrés Muñoz. Optimización en transferencia de imágenes en la plataforma UnaCloud.
Tesis de Grado: Juan Molano. Configuración y despliegue automático de aplicaciones en UnaCloud.

Tabla IV: Tesis llevadas a partir de la primera, segunda, tercera y cuartas convocatorias de acceso a recursos de supercomputación de RICAP

Por último, reseñar que RICAP también ha realizado labores de divulgación científica relacionadas con la propia Red, las cuales no se incluyen en este informe por no ser relativas a la convocatoria de acceso a recursos, pero que pueden consultarse en <http://www.red-ricap.org/descargas> bajo los epígrafes “Publicaciones del Proyecto” y “Presentaciones del Proyecto”.

Referencias

1. Convocatoria de recursos de PRACE, disponible en <http://www.prace-ri.eu/prace-project-access/>
2. Convocatoria de recursos de RES, disponible en <https://www.res.es/es/acceso-a-la-res>

Agradecimientos

La Red Iberoamericana de Computación de Altas Prestaciones (RICAP, 517RT0529) está cofinanciada por el Programa Iberoamericano de Ciencia y Tecnología para el Desarrollo (CYTED).