



***Informe final de los resultados de
la 4^a 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 segundo semestre de 2019.

Diseño y proceso de convocatoria

La cuarta convocatoria de acceso a recursos de supercomputación de la Red Iberoamericana de Computación de Altas Prestaciones (RICAP) se lanzó al inicio de mayo de 2019 y tuvo como fecha límite de envío de propuestas el 15 de julio de 2019.

A los autores seleccionados se les notificó la asignación de recursos antes del 30 de julio de 2019, habilitándose los meses 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.

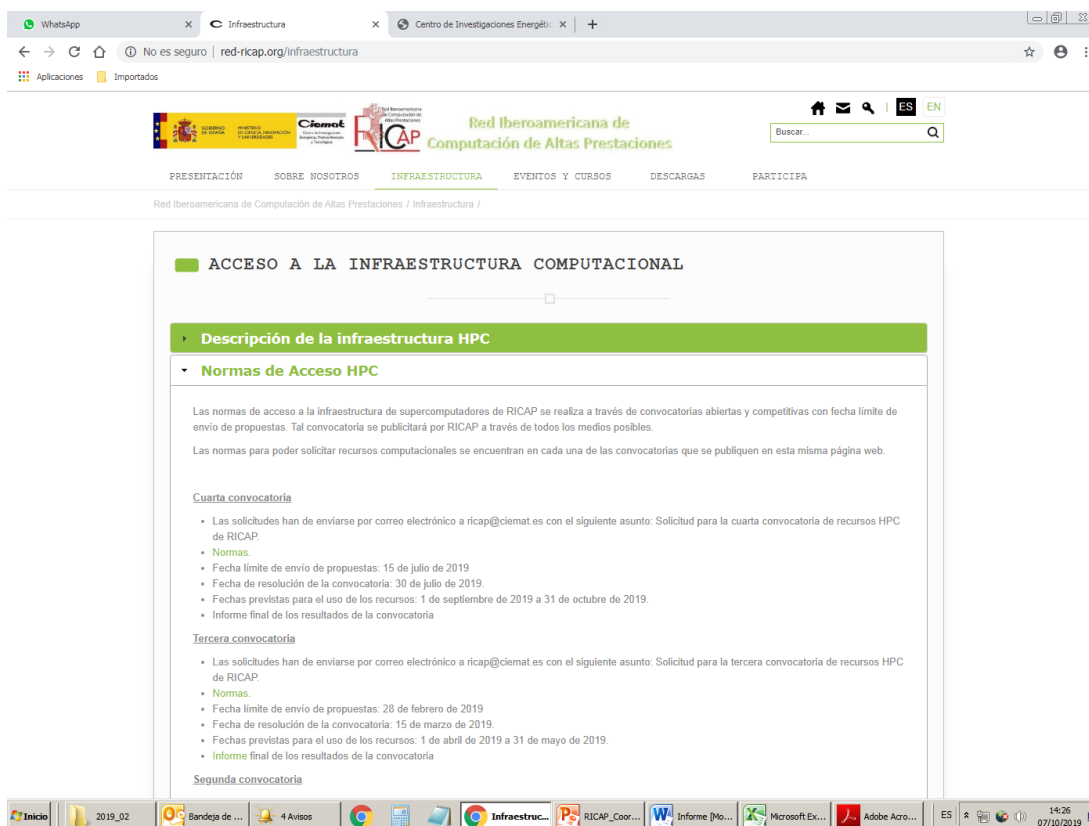


Fig. 1. Pantallazo con la información de la cuarta convocatoria de acceso a recursos de supercomputación de RICAP.

Resultado de la convocatoria

A la tercera 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	~877.000 CPU
Instituto de Física	UFRGS	Br	Prof. Cogollo	~174.720 CPU
Fac. Ciencias Químicas	UNC	Ar	Prof. Mariscal	~240.000 CPU
Laboratorio de Química Computacional	IVIC	Ve	Prof. Ruetter	~374.400 CPU
Scientific IT Research Activities and Knowledge	CIEMAT	Es	Dr. García Müller	~172.000 CPU
Dpto. Física	UNC	Co	Prof. Oquendo	~620.000 CPU
Instituto de Ciencias	UNGS	Ar	Prof. Carusela	~151.200 CPU
Unidad Oncología Molecular	CIEMAT	Es	Dr. García Escudero	~2.400 CPU
Escuela de Ciencia y Tecnología	UNSAM	Ar	Prof. Ascittuto	7.250.000 GPU

Tabla I: Grupos solicitantes de la tercera 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 diciembre de 2019 fueron ~2.611.000; por su parte, las horas de GPU fueron de ~7.250.000.

Divulgación científica derivada

Hasta la fecha de redacción de este informe, se habían publicado los siguientes 21 trabajos listados en la Tabla II:

Publicación
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)
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. Bentarcurt, 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, JI 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) (23pp)
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
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 <i>et al.</i> A Distributed Stream Processing based Architecture for IoT Smart Grids Monitoring. Proceedings. CloudAM 2017

E. Roloff <i>et al.</i> Exploiting Price and Performance Tradeoffs in Heterogeneous Clouds. Proceedings. CloudAM 2017
O. Carvalho <i>et al.</i> IoT Workload Distribution Impact between Edge and Cloud Computing in a Smart Grid Application. Proceedings. CARLA 2017
V. Martínez <i>et al.</i> Performance Prediction of Acoustic Wave Numerical Kernel on Intel Xeon Phi Processor. Proceedings. CARLA 2017
E. Meneses <i>et al.</i> Exploring Application-Level Message-Logging in Scalable HPC Programs. Proceedings 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 15 trabajos en conferencias, éstos aparecen en la Tabla III:

Título del Trabajo presentado	Conferencia
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
Exploiting Load Imbalance Patterns for Heterogeneous Cloud Computing Platforms.	The 8th International Conference on Cloud Computing and Services Science, CLOSER 2018
Fault Characterization and Mitigation Strategies in Desktop Cloud Systems.	Latin American Conference on High Performance Computing – CARLA 2018
Performance evaluation of stencil computations based on source-to-source transformations.	Latin American Conference on High Performance Computing – CARLA 2018
Improving performance and energy efficiency of geophysics applications on GPU architectures.	Latin American Conference on High Performance Computing – CARLA 2018
Benchmarking LAMMPS: Sensitivity to Task Location under CPU-based Weak-scaling.	Latin American Conference on High Performance Computing – 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
A Distributed Stream Processing based Architecture for IoT Smart Grids Monitoring	International Workshop on Clouds and (eScience) Applications Management – CloudAM 2017

Exploiting Price and Performance Tradeoffs in Heterogeneous Clouds. Proceedings.	International Workshop on Clouds and (eScience) Applications Management – CloudAM 2017
IoT Workload Distribution Impact between Edge and Cloud Computing in a Smart Grid Application.	Latin American Conference on High Performance Computing – CARLA 2017
Performance Prediction of Acoustic Wave Numerical Kernel on Intel Xeon Phi Processor.	Latin American Conference on High Performance Computing – CARLA 2017
Exploring Application-Level Message-Logging in Scalable HPC Programs.	Latin American Conference on High Performance Computing – 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 7 tesis.

Tesis
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: 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: Noelia Molero Puerto. Determinación de configuraciones de vórtices superconductores con procesos estocásticos con aceleradores gráficos en entornos de supercomputación.
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 .

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).