

Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación

Resolución Comité de Acceso, Asignación de Horas de Supercomputación para la Red Española de Supercomputación (RES) 2o período 2023

Barcelona, Junio 2023

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 322,3 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 Septiembre 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
 - 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 dos convocatorias anuales para propuestas.

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 y equipo del Nodo Computacional del INB en el BSC, ofrecerán la ayuda necesaria para portar los códigos a esta tecnología. Se debe contactar con support@bsc.es.

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
Albert Poater	M1/C3N4 for CO2RR: Next step after predicting the performance of the competitive Hydrogen evolution reaction	1.324	58	500	500	CSUC/PIR

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Albert Rimola	Modeling and theoretical characterization of interstellar porous ice models and their reactivity with the carbon dimer (CC) molecule	1.000		200	300	BSC/MN
Albert Rimola	Quantum mechanical simulations of the physico-chemical features of the silicate/water interface in interstellar nanograins	1.600		200	300	BSC/MN
Alberto García	High-throughput study on the thermal properties of insulators from first principles	1.500		400	200	BSC/MN
Alejandro López	CFD-DEM simulation of powder flow of cohesive powders	450		10.000	10.000	UC
Alfonso Valencia	Comprehensive benchmark of PerMedCoE tools scalability in tumour and infection use cases	9.000		40.000	40.000	BSC/MN
Alicia Palacios	Non-linear effects in ultrafast molecular processes induced by free electron lasers	2.000		150	6.000	BSC/MN
Anamaria Navarro Noguera	3D solar magneto-convection simulations extended to the corona with the MANCHA3D code	2.439		20.000	20.000	CENITS

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Andrés Ayuela Fernández	Optical properties of cement phases - an ab initio study	810		10.000	10.000	SCAYLE
		1.900		11.000	11.000	BSC/MN
Andres Pacheco Pages	Monte Carlo Simulation for the ATLAS Experiment at the CERN LHC at the MareNostrum by IFAE/PIC Tier-1	5.550		8.000	8.000	BSC/MN
Anne DEJOAN	Numerical study of the propagation patterns of ultra-lean hydrogen-air flames in Hele-Shaw chambers	2.052		2.000	2.000	BSC/MN
Antonio Picón	Excitonic bulk photovoltaic effects in 2D dichalcogenides materials	1.500		2.000	2.000	UMA
Anurag Surapaneni	A 2D manifold method for partially-premixed combustion	1.494		6.000	6.000	NASERTIC
Beatriz Trénor Gomims	Electromechanical simulations of atrial fibrillation, myocardial infarction, and heart failure	3.000		30.000	10.000	BSC/MN
Carles Calero Borralló	Self-thermophoresis at the nanoscale	1.200		100	30	CIEMAT/XULA
Carles Eduard Curutchet Barat	Using molecular dynamics simulations to investigate the allosteric inhibition mechanism of I2 ligands in MAO-B	100		10.000		BSC/P9

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Carlos Palenzuela	Amplification of magnetic fields in accretion disks produced in binary black hole-neutron star mergers	2.555		40.000	40.000	IAC
Carlos Palenzuela Luque	Magnetic field amplification and jet formation beyond 100 ms after a binary neutron star merger	4.500		40.000	40.000	BSC/MN
Carlos Pérez García-Pando	Constraining global dust emissions and their effect upon climate based on data assimilation of satellite optical depth retrievals	4.072,99		60.000	150.000	BSC/MN
Carme Rovira	Molecular basis of bacterial N-glycosylation	204		40.600	30.600	BSC/P9
		3.840		40.600	30.600	BSC/MN
Carme Rovira	Modeling the hydrolysis of macroalgae polysaccharides by marine bacteria	204		40.600	30.600	BSC/P9
		4.147		40.600	30.600	BSC/MN
Carolina Estarellas	Challenging protein isoform selectivity: combining computational techniques for optimizing drug design	174		4.500	3.000	CESGA/FT3-GPU
César González Pascual	Unraveling the electronic structure of Cu(Bi)(111) with density functional theory	193		500	500	UC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
CHANTAL VALERIANI	DYNAMICS OF BIOPHYSICAL SYSTEMS AT THE MESOSCALE	3.000	6.285	7.500	7.500	BSC/MN
Claudio Cazorla	Predicting ionic diffusion in solid-state electrolytes from first-principles simulations and machine learning models	9.000		200	500	BSC/MN
Cristina Díaz Blanco	Optical properties of organic acceptor molecules on Graphene/metal substrates	3.538		2.500	2.500	UMA
Daniel Argüeso Barriga	Simulation of extreme rainfall case studies over the Western Mediterranean with a coupled Ocean-Atmosphere model at high resolution	550		20.000	10.000	BSC/MN
Daniel Muñoz-Santiburcio	Electron Irradiation of water by first-principles simulations	1.920		10.000	20.000	BSC/MN
Daniele Viganò	MHD simulations of Hot Jupiters atmospheres: winding and turbulence	1.721		2.000	20.000	BSC/MN
David Expósito Singh	Fine-grained COVID-19 forecasting	400		500	500	UV
David Keitel	Gravitational-wave parameter estimation and identifying candidates for gravitational lensing	1.500		2.000	5.000	UMA
Dr. Carlos Martí-Gastaldo	Titanium-Organic Frameworks for CO2 Capture	4.976		500	700	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Dr. Matthew Orkney	Genetically modified cosmological hydrodynamical simulations of Milky Way-like galaxies	1.843		9.000	2.000	BSC/MN
Eduardo Moreno-Chamarro	How will the projected warming of the Gulf Stream impact the European climate? An assessment of the role of ocean mesoscale forcing	7.100		1.000	40.000	BSC/MN
Elena Akhmatskaya	Multiscale simulation of polymer - halide composite polymer electrolytes using machine learning potentials	520		300	300	BSC/MN
Elena B. Martín Ortega	Reduced Order Modeling of Rotating Detonation Engines using HPC simulations	1.566		10.000	10.000	UMA
Ernane de Freitas Martins	Electron transfer in self-assembled monolayers: insights from a multiscale approach	900		2.000	2.000	BSC/MN
Estíbaliz Merino Marcos	Computational Studies: elucidation of the electronic structure of organobismuth complexes	2,92		64	1	CESGA/FT3
Eusebio Valero	Direct Numerical Simulation of compressible turbulent wavy channel.	3.690	6.300	1	1	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Fabio Del Sordo	Global High-Resolution simulations of stellar dynamos: the effect of tidal star-planet interaction	4.296		2.000	20.000	SCAYLE
Federico Calle-Vallejo	Novel 2D materials for the electrocatalytic reduction of nitrate	885		900	1.500	BSC/MN
Felipe Jiménez Blas	Nucleation of methane, carbon dioxide, hydrogen, and nitrogen hydrates from computer simulation	8.300		2.000	2.000	BSC/MN
Fernando Martín García	Laser induced attosecond electron dynamics in atoms and molecules	8.724		500	55.000	BSC/MN
Fernando Martín García	Engineering electric conductivity in indenofluorene	1.990		300	1.600	BSC/MN
Francesc Illas Riera	Electrocatalytic conversion of acetylene	858		900	1.500	BSC/MN
Francesc Viñes Solana	Excited State Water Splitting on ZnO Surfaces	3.318		600	800	BSC/MN
Francesc Viñes Solana	Targeting the Photocatalytic Water Splitting on Surface Modified MXenes	1.267		600	800	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	1.000		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 air quality and climate change at the urban scale.	898,56		200	20.000	UMA
Herbert Owen	Participation in the High Lift prediction workshop	6.400		250	500	BSC/MN
Horacio Andres Vargas Guzman	Adsorption Energies for the Spike Protein RBD of the WT, Delta and Omicron variants onto Substrates with manifold polarities and Salt dependent Environments	70		7.000	7.000	CESGA/FT3
		150		7.000	8.000	CESGA/FT3-GPU
Ignacio Carol	Durability mechanics of concrete and cement in Civil and Geomechanical applications	667		100	2.000	UAM
Ignacio Pagonabarraga	Complex flows and emerging structures in active and driven soft matter	60		20.000	20.000	BSC/P9
		9.600		100.000	100.000	BSC/MN
Iñaki Tuñón	Fighting Resistance Mechanisms in SARS-CoV-2 Main Protease. Design of Inhibitors for Enzyme Variants.	210		14.000	15.000	BSC/P9
		7.800		14.000	15.000	BSC/MN
Javier Carrasco Rodríguez	Modelling reactive interfaces in solid-state batteries	340		900	700	SCAYLE

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Javier LLorca	Prediction of the Al-Co-Ni phase diagram including configuration and vibrational entropy and magnetic enthalpy from first-principles simulations	1.400		2.000	1.000	CIEMAT/TURGALIUM
Javier Llorca	High-Throughput Discovery of New Catalysts for the Hydrogen Economy by Combining Ab Initio Calculations and Machine Learning	380		200	20	CESGA/FT3-GPU
Jeremías Likerman	Modeling the geodynamics of subduction zones. Case studies: Andean cordillera supersize flat slab	1.781		2.400	4.800	BSC/MN
JESUS FERNANDEZ FERNANDEZ	Next-generation CORDEX-CMIP6 simulations with WRF over Europe	3.358		20.000	10.000	UC
JESUS FERNANDEZ FERNANDEZ	Convection-permitting climate simulations over Europe with WRF	4.455		50.000	10.000	UMA
Jesús Giraldo Arjonilla	Exploring the Structural Aspects of the Partial Agonism in Opioid Receptors	115,20		2.000	50	BSC/AMD
João Antônio Silveira do Amarante	Exploring the impact of the Sagittarius galaxy on the chemodynamical evolution of the Milky Way	1.720		10.000	5.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jon Serrano	Transition metal screening and structure stability analysis in high-voltage transition metal layered oxide for the cathode of Na-ion batteries	314,88		400	400	UV
Jordi Juárez Jiménez	Exploring Structure-Activity Relationships of VRAC channel inhibition	1.135		3.000	3.000	BSC/MN
Jordi Martí Rabassa	Identifying mechanisms of activation and signalling of RAS oncogenic proteins and designing strategies for tumour blocking	9.000		2.500	200	BSC/MN
Jordi Solé Ollé	Biogeochemical Climate Projections across the NW Mediterranean Sea	140		60.000	2	BSC/MN
Jordi Ventosa Molina	Vortex breakdown in a circular cylinder wake and transition to far wake	800		1.024	10.240	BSC/MN
Jorge García Tíscar	Modelling the noise pollution of multipropeller UAVs	972		5.000	15.000	BSC/MN
Jorge Macías Sánchez	Fast Tsunami Forecast Workflows (FTFW)	600		12.000	100	BSC/P9
Jose Angel Silva Guillen	Precise characterization of the low temperature structures of vanadium oxides	9.964		500	10.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jose Javier Plata Ramos	Computational modelling of the effect of pressure on the electronic transport properties of skutterudites	950		2.000	2.000	CENITS
Jose Maria del Peso Malagon	ATLAS (LHC) simulation of detector response to proton-proton collisions (UAM_m7y2023)	1.700		1.500	4.000	BSC/MN
Jose Oñorbe Bernis	Impact of Resolution on Gaseous Dynamical Friction	946		15.000		UV
Josep Flix Molina	MC Simulation for the CMS Experiment at the CERN LHC	7.500		200.000	10.000	BSC/MN
Josep M Canals	Single-cell analysis of Huntington's disease during development	60		100	50	BSC/AMD
Juan José Palacios Burgos	Phonon-assisted ballistic current in photovoltaic topological materials	1.050		30	200	UAM
Juan José Vilatela	Electronic structure of intercalated bundle metamaterials	1.824		250	50	UMA
Juan Vicente Alegre Requena	Modification of Tumor Microenvironment through Amino Acid Transamination Enabled by Cu Nanocatalysis	930		3.000	3.000	UAM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Leonardo Manuel Pachano Prieto	Assessment of soot particle size distributions and soot intermittency in a gas turbine combustor model	2.500		5.000	5.000	BSC/MN
Lluís Blancafort	Identifying surface excitons and their photocatalytic reactivity in BiVO4	192		250	2.000	CSUC/PIR
Lluís Jofre Cruanyes	Direct numerical simulations of microconfined high-pressure transcritical fluid turbulence	490		1.024	10.240	BSC/AMD
Maciej Lewenstein	Computational explorations of equilibrium and non-equilibrium phenomena in quantum many-body systems	3.500		4.000	5.000	BSC/MN
Marcos Carreres Talens	Evaluating the atomization performance of a FT-SPK Sustainable Aviation Fuel through VOF-LES simulations in simplex pressure-swirl atomizers	700		8.000	12.000	BSC/MN
María José López Santodomingo	Investigation of fullerene supported single-atom-catalysts (SAC) and single-cluster-catalysts (SCC) for the water splitting reaction to produce green hydrogen.	865		300	150	BSC/MN
MERCEDES BORONAT ZARAGOZA	Ab initio molecular dynamics study of copper-ammonia and copper-water migration in zeolites with the AEI structure	220		48	400	CESGA/FT3-GPU

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Miguel Pruneda	Structural and thermal properties of nanocrystalline Silicon	1.797		1.000	1.000	BSC/MN
Milton Ruiz	Studies In Theoretical Astrophysics and General Relativity	6.912		75.000	100.000	BSC/MN
Miquel Solà Puig	Endohedral fullerene-perovskite systems for solar cell applications	774		900	1.000	UZ
Modesto Orozco	Development and Validation of Nucleic Acid Force Fields with Modern Machine Learning Techniques	160		20.000	20.000	CESGA/FT3-GPU
Nestor Balcazar-Arciniega, and Joaquim Rigola	DNS of reactive mass transfer in gravity-driven bubbly flows: Effect of the Damköhler number	3.100		3.072	3.072	BSC/MN
Nuria Lopez	Modeling of materials for chemical and energy applications: from detailed atomistic knowledge to reactor function - 2nd period	36	140	1.024	1.024	BSC/P9
		10.930,18		6.144	6.144	BSC/MN
Pablo Llombart González	Modelling Gold Nanocrystals as functionalized patchy colloids	1.106		2.048	2.048	BSC/MN
Pablo Ordejon	Electrode's potential effects on the interaction between corrosion inhibitors and metallic/aqueous interfaces	5.254		2.000	3.500	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Pere Santamaria Vilanova	Epigenetic and transcriptional regulation of a novel T-follicular helper (TFH)-to-T-regulatory type-1 (TR1) cell differentiation pathway	35		10.000	15.000	CSUC/CAN
Petia Radeva	Boosting the limits of Data-centric Deep Learning for Visual Food Recognition	137		16.384	16.384	CESGA/FT3-GPU
Qinghua Liao	Uncovering molecular mechanisms of hydrolysis by human iduronidase using computer simulations	204		16.800	16.800	CESGA/FT3-GPU
		220	600	16.800	16.800	CESGA/FT3
Raimon Luna i Perelló	Compact Object Binaries in Einstein-Proca and Einstein-Scalar Theories	1.000		4.096	512	UV
Ransel Barzaga	Modelling infrared spectroscopy of amorphous carbonaceous solids in the interstellar medium	182		200	400	CSUC/CAN
Raul Angulo	Emulating the large-scale structure in the Universe	6.000		15.000	15.000	BSC/MN
Riccardo Rurali	Phonon Database Generation and Analysis for Data Driven Materials Discovery	7.502,40		300	4.000	CESGA/FT3

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Roberto San Jose García	Localized climate and air pollution scenarios from CMIP6 global climate model outputs using dynamical downscaling techniques to support EU project DISTENDER activities	2.000		20.000	30.000	IAC
Salome Llabres	Multiscale modelling of a tripartite efflux pump of Gram-negative bacteria	1.000		6.000	3.000	BSC/MN
Salvador Cardona Serra	Theoretical Design of Molecule-based Materials	500		50	50	UV
Salvatore Assenza	Effect of cytosine methylation on DNA flexibility in experimentally-studied systems	202		6.000	6.000	CESGA/FT3-GPU
Santiago Avila	A new cosmological simulation to validate the capability of Euclid and DESI to measure the initial conditions of the Universe.	2.120		54.000	54.000	BSC/MN
Santiago González de la Hoz	ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities (IFIC Phase X)	3.850		4.000	4.000	BSC/MN
Sascha Husa	Simulations of the coalescence of high mass ratio precessing black hole binaries	9.500		12.000	35.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Sergi Vela	Computational Large-scale Characterization of Spin Crossover Molecular Switches. Towards an Atlas for Materials Discovery (SCOPE)	835		800	200	UAM
Sergio Madurga Díez	Unveiling the Phenylalanine Coaggregation Mechanism for a Deep Understanding of Phenylketonuria Disease	164		1.000	2.000	CIEMAT/XULA
Shimpei FUTATANI	Kinetic-MHD hybrid simulations for fast particle physics in tokamaks and stellarators	1.474		1.000	30.000	BSC/MN
Sonia Raquel Gámiz Fortis	Regionalized decadal climate prediction for the Iberian Peninsula	2.174,80		5.120	10.240	UV
Stefan Bromley	How substitution affects 2D organic sp ² -based quantum materials	737		1.000	1.000	UV
Stefano Olivieri	Influence of free-stream turbulence on the aerodynamics of flapping wings	720		2.000	2.000	UMA
Toni Gabaldon	Phylogenetic analysis of the Last eukaryotic common ancestor	3.500		10.000	5.000	BSC/MN
Vasilis Riziotis	High-fidelity aeroelastic simulations of a wind turbine blade undergoing vortex induced vibrations (VIV)	3.600		5.000	20	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Victor Guallar Tasies	Integrative computational modeling pipeline to detect molecular glues	756		17.000	10.000	BSC/MN
Weiguang Cui	The THREE HUNDRED GALAXY CLUSTERS PROJECT: Next generation of high-resolution galaxy cluster simulations with GIZMO-SIMBA	9.723		200.000	200.000	BSC/MN
Xavier Barril	Development of an Open Source implementation for Dynamic Undocking	224		10.000	10.000	CESGA/FT3-GPU
		73		10.000	10.000	CESGA/FT3
Xavier Luri Carrascoso	Gaia: Early processing of final data reduction cycle	3.500		500.000	650.000	BSC/MN
Xavier Solans Monfort	Determining the role of size, shape and shell composition on CdSe Quantum Dots optical properties	412		500	15.000	UZ
Xavier Vilasis-Cardona	LHCb-Dirac at the BSC-HPC	300		1.000	1.000	BSC/MN
Yetli Rosas Guevara	The physics behind bar formation connected with galaxy evolution	800		7.000	1.500	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.