

Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación

Resolución Comité de Acceso, Asignación de Horas de Supercomputación para la Red Española de Supercomputación (RES) 1er período 2020

Barcelona, Febrero 2020

1. Introducción

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

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

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

2. Análisis

La RES ha asignado este período 207,2 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), Instituto Astrofísico de Canarias (IAC), Universidad de Cantabria (UC), Universidad de Málaga (UMA), Universidad de Valencia (UV), Universidad de Zaragoza (UZ), 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) y Fundación Pública Galega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia (CESGA).

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 teórico de las máquinas de la RES para el próximo período de 4 meses. Algunas actividades calificadas como excelentes no han podido recibir recursos por la gran cantidad de demanda recibida, y sólo han podido recibir horas sin prioridad.

A la mayoría de actividades que han obtenido recursos, se han asignado horas de uso de las máquinas de la RES con utilización preferente. El resto de actividades que han obtenido recursos, es con utilización no preferente (es decir, utilizando las horas cuando estas no sean usadas por las actividades preferentes, con lo que no se puede garantizar que puedan usar las horas asignadas).

Las actividades que no reciben horas de utilización al sistema no podrán disponer de acceso al mismo. Todas estas actividades recibirán un e-mail indicando que no ha sido posible concederles acceso a las máquinas en esta oportunidad. Se anima a todos los solicitantes a presentar solicitud de acceso para la siguiente convocatoria, que iniciará la evaluación el próximo mes de Mayo de 2020.

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 mil horas en cuatro meses, no utiliza cerca de 100 mil horas el primer mes, su asignación para el periodo completo será reducida a 300 mil. 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 mil horas en cuatro meses, se utiliza cerca de 200 mil 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 asignados. Por ejemplo, si se debe asignar el uso en exclusiva de un nodo (que tiene varios procesadores, 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 solicitan muchas horas que PRACE (www.prace-ri.eu) ofrece cantidades de horas a partir de 15 millones anuales, disponiendo de dos evaluaciones de proyectos anuales.

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 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 tres 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 acceso a BSC, se indica acceso a MareNostrum abreviado con MN, MareNostrum con Power9 y Volta100 abreviado como P9, y a MinoTauro abreviado con MT.

Lista de actividades aceptadas con acceso a recursos pre-reservados para convocatorias futuras del programa marco H2020

Líder	Título	Recursos pre-reservados
Javier Fernández Sanz	The challenge of microelectronics based on the SiC-graphene system. Computational simulations.	5.500

Lista de actividades aceptadas con acceso estándar.

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Agustí Lledó Ponsati	Synthetic molecular receptors with bioinspired functions: development of rational design tools		50	5.000	5.000	BSC/MT
Albert Rimola	Adsorption and Diffusion Properties of Astrochemically-Relevant Species on Interstellar Water Ice Surfaces	800		250	300	BSC/MN
Alexandre Fabregat Tomas	Particle surface deposition in confined turbulent natural convection flows	1.500		500	500	UC
Alfonso Valencia	Inference of Transcription Factors binding sites and DNA binding protein clusters	3.620		750	2.500	SCAYLE
Ambrus Both	The effect of fuel composition on swirl spray flame stability		1.000	5.000	5.000	BSC/MN
Andrea Perdomo García	Realistic 3D Radiative MHD Simulations of Cool Stars: The Origin of the Basal Stellar Magnetic Fields	4.760		16.384	16.384	BSC/MN
Anne Dejoan	Numerical study of intrinsic flame instabilities in Hele-Shaw cells	1.267,20		2.500	2.500	UAM
Antonella Meninno	Ab initio study of possible metastable occupation of tetrahedral sites in Palladium Hydride compounds	1.000		160	6.400	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Antonio Picón	Attosecond x-ray spectroscopy in 2D materials	530		1	1	BSC/MN
Arnau Miró Jané	Large eddy simulations of impinging synthetic jets		980	1.500	2.500	BSC/MN
Carles Bona Casas	Divergence-conforming splines in microvascular fluid-structure interaction, hydrodynamic lift in Couette flow		1.000	10.000	10.000	BSC/MN
Carlos Martí Gastaldo	Heterometallic Titanium-Organic Frameworks as Dual Metal Catalysts for Synergistic Non-Buffered Hydrolysis of Nerve Agent Simulants	829,44		800	800	CESGA
Carme Rovira	Elucidating mechanisms of glycosidic bond biosynthesis	72		12.300	12.300	BSC/P9
		973		12.300	12.300	BSC/MN
Carme Rovira	Engineering glycosidase enzymes for phosphorylation reactions	72		12.300	12.300	BSC/P9
		972		12.300	12.300	BSC/MN
Carmen Domene	Characterisation of the affinity of broadly neutralizing anti-HIV antibodies for the membrane interface.	1.800		500	2.000	BSC/MN
Carmen Jiménez	Numerical simulation of flames propagating in small devices: effect of differential diffusion, heat losses and gravity in acoustic instabilities.	850		5.000	1.000	UAM
Chantal Valeriani	Adhesion and Cohesiveness of biofilm to surfaces from in silico studies	6.800		20.000	20.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Coen de Graaf	Polioxovanadates adsorbed on Au(111): Conductivity as function of the oxidation state		1.300	1.000	1.000	BSC/MN
Cristina Díaz Blanco	The role of aromaticity in molecular conductance		500	300	300	SCAYLE
Daniel Mira	Numerical investigation of liquid biofuels for transportation under engine-like conditions	2.500		20.000	20.000	BSC/MN
David Mateos	Extreme Holography	3.000		10.000	10.000	BSC/MN
Dr. Sergi Beltran	Genomic analysis of 15,000 individuals for the diagnosis of rare diseases		750	100.000	100.000	BSC/MN
Edilberto Sánchez González	Gyrokinetic particle-in-cell simulations of plasma turbulence in stellarators	2.000		20.000	2.000	BSC/MN
Eduardo Sanz García	Antifreeze effect of ice-binding proteins	2.903		2.000	2.000	BSC/MN
Elena Khomenko	Highest resolution 3D solar magneto-convection simulations up to the chromospheric heights.	4.300		48.000	48.000	BSC/MN
Elena Khomenko	Numerical modelling of MHD and partial ionization effects in the solar atmosphere	1.300		16.384	16.384	BSC/MN
Eneko Agirre	Cross-language Natural Language Processing Models	180	50	500	8	BSC/P9

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Estelina Lora da Silva	Pressure and Temperature induced effects of the Cmcn and Pnma phases of SnSe	1.800		100	4.000	BSC/MN
Etienne Tourigny	Global carbon-cycle simulations with the EC-Earth Earth System Model	5.057		20.480	40.960	BSC/MN
F. Javier Luque	Towards a predictive model of BBB permeability based on 3D distribution of atomic fractional hydrophobicities	187		4.000	2.000	BSC/MT
F. Javier Luque	Design of novel influenza A inhibitors targeting hemagglutinin: chemical modification of N-Benzyl 4,4-disubstituted piperidines	2.500		6.000	2.000	BSC/MN
Fco. Javier Salvador Rubio	Using Direct Numerical Simulation (DNS) to study the influence of the surface tension on the atomization process	740		18.000	20.000	BSC/MN
Federico Calle-Vallejo	Oxygen Evolution Reaction Activity of Sr2MlrO6 Double Perovskites		350	300	300	BSC/MN
Fernando Martín García	Attosecond imaging and control of charge migration in molecular systems of biological, photovoltaic and atmospheric interest	4.608		300	3.000	BSC/MN
Fernando Martín García	Interaction of acenes with graphene/Ru(0001): Site-dependence adsorption II	600		300	500	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Francesc Illas Riera	Multiscale modeling of the selectivity of novel Ni/TiC catalysts towards CO2 conversion	1.296		900	1.500	BSC/MN
Francesc Illas Riera	Molybdenum carbide nanoparticles as an alternative to precious metals for catalytic hydrogenation reactions	1.132		900	1.500	BSC/MN
Francesc Viñes	Carbon Capture and Storage on Transition Metal Nitride and Nitride MXene Materials		300	300	500	UMA
Francesc Viñes Solana	Structure-Activity Relationships of Cu@Pt Nanoparticles towards CO Anchoring	576		300	500	SCAYLE
Francesc Xavier Trias Miquel	DNS of a vertically falling film		1.800	256	8.192	BSC/MN
Francesco Luigi Gervasio	Combining Machine Learning and Metadynamics for Absolute Binding Free Energies	3.444,48		7.000	6.000	BSC/MN
Froila María Palmeiro Núñez	Past, present and future modulations of sudden stratospheric warmings		900	5.000	10.000	BSC/MN
Gara Villalba Méndez	Modeling the urban atmosphere to determine the effect of green infrastructure on air quality and carbon footprint	1.658,88		100	10.000	UMA
Gerasimos Konstantatos	Designing environmentally friendly perovskites with optoelectronic properties for non-toxic and efficient solar cell devices		750	1.000	500	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Gustavo Yepes	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	3.400		50.000	80.000	BSC/MN
Hristiyan Aleksandrov Aleksandrov	Modeling of Diffusion (Surface-Subsurface and Subsurface-Subsurface) of Monoatomic Carbon Species on Transition Metal Surfaces and Nanoparticles	1.000		500	400	SCAYLE
Ignacio Pagonabarraga	Patterns and structures in active and actuated flowing matter	9.900		40.000	40.000	BSC/MN
Inés Corral	Deciphering the mode of action of novel DNA-targeted antitumoral drugs	1.500		300	1.500	CESGA
Ivan Coluzza	CD81 plasticity and its implication in pathological processes.	2.200		1.500	2.000	UV
J. Guilherme Vilhena	Molecular Nanotribology: Tuning molecular friction and adhesion by atomic/chemical design	100	50	6.000	6.000	BSC/P9
Javier Carrasco	First-principles study of continuous solid solutions of mixed cobalt and manganese oxides for thermochemical energy storage		300	600	550	CESGA
Javier Carrasco Rodríguez	Polyethylene oxide matrix and active Li ₇ La ₃ Zr ₂ O ₁₂ filler particles: Insights on the interfacial physics of composite solid electrolytes for next generation rechargeable batteries.	154		600	550	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Javier Fdez. Sanz	The challenge of microelectronics based on the SiC-graphene system. Computational simulations.	2.482,18		1.000	900	
Joan Calafell Sandiumenge	Large Eddy Simulation of Micro-Atmospheric environment for accurate pollution distribution prediction	2.100		2.000	20.000	BSC/MN
Joaquin Mateo	High-resolution whole-genome sequencing (WGS) analysis to define structural rearrangements and copy number-based signatures associated with DNA repair deficiencies in metastatic castration resistant prostate cancer (mCRPC)	25		32.000	4.000	BSC/MN
Johannes Feist	Ultrafast atomic & molecular processes driven by classical & quantized light	30		400	100	BSC/P9
		800		1.000	300	BSC/MN
Jordi Villà Freixa	Exploring peptide/MHC dissociation landscapes using Hierarchical Natural Move Monte Carlo	675		4.000	4.000	CSUC/PIR
Jorge Macías Sánchez	Development of the HPC aspects of a Probabilistic Tsunami Forecast (PTF) tool for the Mediterranean Sea. A pilot set up.	19		800	50	BSC/P9
Jose Javier Honrubia Checa	Fast ignition of inertial confinement fusion targets driven by ion beams		525	100	2.000	BSC/MN
José Javier Plata Ramos	Exploring the role of K as a promoter in the water-gas shift reaction and methanol synthesis.	163	320	500	750	CENITS

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
José María García Oliver	Reacting Multi-phase LES in Gas Turbine Sprays	2.074		5.000	5.000	BSC/MN
Josep Fortuny	Analysis of European Miocene ape basicranial anatomy using deformation-based 3D geometric morphometrics	55,50		30	10	BSC/MT
Josep M Bergada Granyó	Optimization of five Active Flow Control parameters on a SD7003 wing profile at several angles of attack from 4 to 16 and at Reynolds number 60000 (second period)	5.087,20		2.048	2.048	BSC/MN
Juan Carlos Cuevas Rodriguez	Solid-state electrical devices based on biomolecules	900		700	700	BSC/MN
Juan José Palacios Burgos	Topological and optoelectronic properties of franckeite: a naturally occurring van der Waals heterostructure.	1.700		5.000	5.000	BSC/MN
Konstantin NEYMAN	Machine-learning adsorption energies on bimetallic surfaces	840		1.000	1.000	IAC
Lluís Blancafort	Unraveling melanin photoprotection - optical absorption spectra of a library of melanin components	300		50	50	CSUC/PIR
Lucas Alados Arboledas	WRF-Chem simulations for aerosol cloud interaction research (REINFORCE)	3.225,60		19.000	19.750	CENITS

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Manel Soria	Numerical simulation of the atmospheric activity observed by the Cassini mission on Saturn's southern Storm Alley	933		15.000	15.000	BSC/MN
Manuel A. Ortuño	Metal-Organic Frameworks for Electrochemical Applications	368,64		500	1.000	BSC/MN
Marco Molinari	Radiation Damage in Nanostructured Materials		550	1.000	2.000	UV
Marco Molinari	Modelling Surface Phase Diagrams of Graphene – Strontium Titanate Composite Thermoelectric Materials	2.200		500	1.500	UV
María Jesús Esteban Parra	Near-term climate change: An assessment of the influence of land-atmosphere interactions on regionalized decadal predictions over the Iberian Peninsula.	1.648,68		16.000	8.000	UV
María José López Santodomingo	Reactivity of Rhodium-fullerene complexes towards deuterium	640		300	150	BSC/MN
María Ruth Martínez Casado	Novel paradigms in functional nano-oxides of wide band gap.	25	40	100	100	UV
Maria Veronica Ganduglia Pirovano	Unraveling the Mechanism for Methane Steam Reforming on Ni-Ceria Catalysts	1.791,36		400	400	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Rational Design of Ceria-Supported Ni-Cu Nanoalloys as Catalysts for the Selective Direct Conversion of Methane to Methanol	1.625,28		400	400	BSC/MN
Marta Reynal Querol	Computing pixel based socio-economic measures to analyze economic development	450		8.000	8.000	BSC/MN
Martina Klose	Addressing a key dust model uncertainty: haboob dust storms	8.975,37		50.000	200.000	BSC/MN
Martine Bosman	Monte Carlo Simulation for the ATLAS Experiment at the CERN LHC at the MareNostrum	2.000		5.000	5.000	BSC/MN
MERCEDES BORONAT ZARAGOZA	Ab initio molecular dynamics study of copper ion migration in Cu-CHA catalysts	3.800		30	200	BSC/MN
Miguel Ángel Aloy Torás	Magnetospheres of compact objects: high-resolution and new methods	2.600		6.000	16.000	BSC/MN
Miguel Ángel Fosas de Pando	Stability analysis and derivative-free optimization of unsteady flow through a linear cascade	280		8.192	16.384	CESGA
			50	2.000	10.000	BSC/MT
Modesto Orozco López	MD database for in silico toxicology profiling (continuation)	3.600		2.000	2.000	BSC/MN
Natalia Koval	Radiation-induced degradation of solar cell materials via first-principles methods	8.000		10.000	10.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Nicola G.A. Abrescia	Sub-tomogram averaging of enveloped proteins bound to antibodies	17		1.000	1.000	BSC/P9
Octavio Roncero	Pressure effects in reactions of complex organic molecules at low temperatures: a quantum ring polymer molecular dynamics study		1.500	1.000	200	BSC/MN
Oriol Jorba Casellas	Air Quality modeling with the NMMB-MONARCHv1.0 model: research and developments to fulfill the Copernicus Atmosphere Monitoring Service requirements on air quality and emission modeling	2.500		60.000	60.000	BSC/MN
Oscar Flores	DNS of collective motions for a pair of self-propelled flappers	750		6.400	2.560	UZ
Pablo G. Lustemberg	HCl and Cl interaction on reduced CeO ₂ (111) with unexpected stoichiometry	403,20		400	400	UZ
Pablo Gamallo Belmonte	Efficient CO ₂ hydrogenation through transition metals encapsulated on MFI zeolites	2.580		900	1.500	BSC/MN
Pablo Ordejon	Bias-Dependent Local Structure of Water Molecules at a Metallic Interfaces	200		500	500	BSC/MN
Pau Figueras	Generic violations of the weak cosmic censorship conjecture in higher dimensions.	2.000		5.000	5.000	BSC/MN
Pilar Hernández	Properties of the flavor singlet in the large N _c limit	2.200		3.000	2.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Prof. Ernest Giralt	Discovery of new peptides to rescue the mutated p53 tetramer	645		500	500	BSC/MN
Prof. Francesc Viñes	Kinetics of Hydrogen Evolution as Electrocatalyzed by MXenes	299		300	500	SCAYLE
Prof. Marcel Swart	High-valent reactivity of iron complexes	322,56		60	200	CESGA
Prof. Marcel Swart	Competition between superoxo and peroxy species	216		60	200	CSUC/CAN
Rafael Delgado Buscalioni	Virtual AFM experiments for compression of virus nanoreactors	300	100	4.000	4.000	BSC/MT
Raúl Payri Marín	Influence of the geometrical parameters of a Lean Direct Injection burner on the injection and atomization processes	555		500	18.000	UC
Riccardo Rossi	Scalable distributed Multilevel Monte Carlo workflow design	1.216		4.000	4.000	BSC/MN
Roberto D'Agosta	Optical properties of metallic nano clusters from real time dynamics	540	180	2.000	2.000	CSUC/PIR
Roberto San José García	Numerical air quality simulations to support the international initiative AQMII-4	2.600		8.000	16.000	BSC/MN
Ruben Perez Perez	How Point-Mutations Alter Single-Protein Electron Transfer Properties	150		6.000	6.000	BSC/MT

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Rubén Pérez Pérez	Deep Learning assisted Molecular Identification with High Resolution Atomic Force Microscopy	600		8.000	8.000	CESGA
Salvador Cardona Serra	Multiscale design of molecular materials for Neuromorphic Computing	516		200	200	UMA
Santiago González de la Hoz	ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities (Phase V)		2.000	4.000	40.000	BSC/MN
Santiago Ignacio Badia Rodriguez	Parallel performance and scalability assessment of the aggregated unfitted finite element method for the solution of elliptic interface problems	50	350	400	40.000	BSC/MN
Sascha Husa	Testing models for gravitational waves from coalescing black holes with generic configurations	7.200		8.000	20.000	BSC/MN
		1.000		3.000	6.000	UMA
Sergio Hoyas Calvo	Stratified Couette Flows	5.000		50	20.000	BSC/MN
Shimpei Futatani	Non-linear MHD modelling of pellet injection for ELM control in fusion plasmas	1.056		1.500	30.000	BSC/MN
Simona Achilli	DFT ab initio calculation of twisted 2D bilayers with long range Moiré	4.000		2.000	1.000	BSC/MN
Simona Achilli	Ab initio spin transport properties of Co4/CNT	953	300	500	400	UC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Sofía Calero Díaz	Tailored magnetic properties in molecular magnets via guest-induced phase transitions: The case of M-MOF-74 (M=Fe, Co, Ni)		395	3.000	3.000	BSC/MN
Stefan Bromley	Understanding the Size Dependent Properties and Structure of Nano-TiC	990		1.000	1.000	IAC
Stefan T. Bromley	Exploring the Electronic Phases of 2D Covalent Organic Radical Frameworks	891		1.000	1.000	UAM
Valeriia Liakh	Solar prominence oscillations and eruptions	1.000		16.384	16.384	BSC/MN
Xavier Barril	Large-scale assessment of the druggability of E3 Ubiquitin Ligases	400		5.000		BSC/P9
		128		5.000		BSC/MN
Xavier Luri Carrascoso	Gaia: Fourth Data Reduction Cycle (DRC-04) and Early Data Release 3 publication (EDR3)	200		100	100	BSC/P9
		3.312		700.000	600.000	BSC/MN
Zeila Zanolli	Enhancing topological properties in TMDs by proximity interaction	2.725		100	100	IAC

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.