

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 2022

Barcelona, Febrero 2022

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 222,9 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), 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 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.

Un número no menor de actividades del pasado periodo no han utilizado los recursos asignados, que han visto reducido su asignación en este periodo. Esto ha permitido dar cabida a muchas actividades adicionales, que de otra forma no hubieran podido conseguir recursos. Se deben ajustar las peticiones a los recursos que se necesitan, y a las capacidades propias de gestionar el gran número de simulaciones y datos generados.

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 2022.

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, pero 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 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 necesitan grandes volúmenes de recursos, que la infraestructura europea PRACE (www.prace-ri.eu) 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 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.

4.4. COVID-19

De acuerdo con el RD8/2020 de medidas urgentes extraordinarias para hacer frente al impacto económico y social del COVID-19, en el que se establecen medidas de apoyo a la investigación sobre el COVID-19 y en el que se identifica la lucha contra el COVID-19 como objetivo prioritario de la acción de Gobierno, fomentando la investigación sobre la enfermedad para el desarrollo de medicamentos eficaces y vacunas, que ayuden a contener el impacto de futuros brotes, se propone al Consejo de la RES la inclusión con carácter temporal en el protocolo de acceso de los siguientes criterios:

- para las actividades lideradas o con participación cierta de investigadores localizados en España
- para la actividades que superen un mínimo umbral de calidad
- tendrán prioridad con carácter temporal indefinido, hasta que el Consejo decida finalizarlo, hasta alcanzar el 50% de la capacidad de cada periodo. Si en algún momento se superara este límite, el Comité de Acceso, podría decidir cómo proceder respecto al exceso: ejecutarlo, o priorizarlo, o demorarlo al periodo siguiente, etc. En cualquier caso, se mantienen los requisitos generales: actividades lideradas o con participación cierta de investigadores localizados en España, y que superen el umbral de calidad establecido por el Comité de Acceso.

En esta convocatoria, un total de 10 actividades relacionadas con COVID han obtenido acceso a los recursos de la RES, con casi 14,6 millones de horas, que significa un 7% de los recursos totales disponibles.

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 se marca con un * al final del Título de la actividad aquellas que son relacionadas con COVID19.

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Adam Hospital	Data processing for COVID-19 related MD simulations in the BioExcel-CV19 database - Extension*	2.995		20.000	30.000	BSC/MN
Albert Poater Teixidor	Greenhouse conversion on single atom metals embedded on two-dimensional g-C3N4	600		500	500	UC
Alberto BROATCH	COMBUSTION NOISE ASSESSMENT IN LDI COMBUSTORS OF GAS TURBINES	880		5.000	10.000	UMA
Alicia Palacios Cañas	Survival of electronic coherences against nuclear motion in ultrafast molecular processes	1.800		100	4.000	UAM
Alvaro Meseguer	High performance computation of coherent hydrodynamic structures in canonical flow geometries	300		4.000	2.000	CSUC/PIR

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Andrea Perdomo García	Realistic 3D Radiative MHD Simulations of Cool Stars: The Origin of the Basal Stellar Magnetic Fields	3.500		16.384	16.384	UMA
Andres Pacheco Pages	Monte Carlo Simulation for the ATLAS Experiment at the CERN LHC at the MareNostrum by IFAE/PIC Tier-1	5.050		5.000	5.000	BSC/MN
Antonio Picón	Excitons in the time domain		500	1.000	300	SCAYLE
Arturo Gonzalez-Escribano	Applications of new techniques and models for distributed heterogenous computing	20		20	10	BSC/P9
		5		20	10	BSC/MT
Assumpta Parreño	Variational study of the baryon-baryon system in the strange sector		5.600	10.000	10.000	BSC/MN
Beatriz Trénor Gomis	Computational Mechano-Electric Model of the Human Diseased Heart	1.056		10.000	1.000	BSC/MN
Carles Serrat Jurado	Coherent hard X-ray core nonlinear selective cancellation of the effect of biological target molecules	2.000		1.000	4.000	UC
Carme Rovira	Unveiling mechanisms of heparin precursor biosynthesis	150		40.600	40.600	BSC/P9
		1.728		40.600	40.600	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Carme Rovira	Elucidating molecular mechanisms of disease-related glycosidases		150	38.600	30.600	BSC/P9
			150	40.600	30.600	BSC/MN
César González	Simulations of carbon-based electrodes for a new generation of more efficient bateries	277		500	500	CENITS
Claudio Cazorla	Superfluidity in quantum solids under extreme pressure	1.650	350	100	200	UAM
Daniel Muñoz-Santiburcio	Understanding the phase effect in proton irradiation of water via first-principles methods	960		10.000	20.000	BSC/MN
David Expósito Singh	Multi-source and multi-method prediction to support COVID-19 policy decision making *	370		500	40	UV
David Exposito Singh	Analysis tool for COVID-19 vaccination scenarios *	400		500	100	UV
David Mateos	Extreme Holography	900	1.500	10.000	10.000	UMA
Dr. Chervin F. P. Laporte	Exploring the Large Magellanic Cloud induced disequilibrium in the Milky Way with realistic (dark matter and stellar) halos	996		14.000	4.000	BSC/MN
Edilbereto Sánchez González	Electrostatic and electromagnetic simulations of plasma turbulence in stellarators with EUTERPE	2.750	1.250	22.000	15.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Eduardo Javier Pérez Sánchez	Application of the Conditional Moment Closure combustion model to the analysis of a sooting turbulent counterflow flame	1.689		10.000	10.000	BSC/MN
Eduardo Sanz García	Nucleation of water bubbles and drops in cavitation and condensation.	2.880		2.000	2.000	IAC
Eleni Karnezi	Understanding dust emission and transport across key source regions	4.978,37		60.000	200.000	BSC/MN
Elisa Jimenez Izal	PtGe bimetallic catalyst to fight the CO poisoning		2.764	400	1.500	BSC/MN
Eliseo Ruiz Sabín	New Spin-Crossover Metal-Organic Frameworks	800		1.200	4.000	BSC/AMD
Eneko Agirre	Language models for clinical and scientific texts *	250		600	8	BSC/P9
Etienne Tourigny	Near-term predictions of atmospheric CO ₂ using the emission-driven configuration of EC-Earth-CC	5.581		20.480	51.200	BSC/MN
F. Javier Luque	Mechanism of the antiviral activity of novel aryl sulfonamides that inhibit entry of influenza virus	1.440		5.000	2.000	BSC/MN
Federico Calle-Vallejo	Oxygen Evolution Reaction Activity of Pyrochlore structures	105		300	300	CIEMAT/TURGALIUM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Fernando Martín	Attosecond charge transfer dynamics in donor-acceptor molecular systems	7.970		300	12.000	BSC/MN
Fernando Martín García	Molecular conductance of diradical indenofluorene complexes	1.750		600	600	CIEMAT/XULA
Francesc Illas i Riera	New materials for the electroreduction of ethylene oxide	1.296		900	1.500	BSC/MN
Francesc Viñes	Carbon Dioxide Electrocatalysis on As-Synthesized MXenes	681		300	500	UC
Francesc Viñes Solana	Bare MXene Surfaces as Supports for Single Atom Catalysts	1.244		400	600	BSC/MN
Francesc Viñes Solana	Probing CO Adsorption and Reactivity on Transition Metals	1.500		400	600	NASERTIC
Francesc Xavier Trias Miquel	Direct and Large-Eddy Simulation of buoyancy-driven turbulence at high Prandtl numbers	2.250		256	12.288	BSC/MN
Francisco Javier Salvador Rubio	Influence of the computational domain and mesh size on DNS simulations of pressure-swirl atomizers	980		18.000	20.000	BSC/MN
Gara Villalba	Modelling the impacts of green infrastructure on air quality and climate change at the urban scale	445,44		100	15.000	UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Giuseppe Battaglia	Kinetic Ensembles for oligomer formation in misfolded protein disease using liquid-phase microscopy videos	4.800		7.000	6.000	SCAYLE
Gregorio García	Towards high-efficient and stable all-inorganic perovskites as sun-light absorber materials		300	500	1.000	CENITS
Inacio Pagonabarraga	Active suspensions in heterogeneous and responsive media	800		60.000	60.000	CESGA/FT3 GPU
		5.000		60.000	60.000	CESGA/FT3
Iñaki Tuñón	Computational Redesign of Novel Inhibitors of the SARS-CoV-2 Main Protease Using Classical and QM/MM Free Energy Methods *	300		10.000	10.000	BSC/P9
		7.000		10.000	10.000	BSC/MN
Inés Corral	In silico design of light propelled molecular machines for the scrutiny and control of biological processes.	2.250		900	1.500	CENITS
Irina Lebedeva	Enhancing topological properties in Transition Metal Di-Chalcogenides by magnetic proximity effect	800		100	100	CSUC/PIR
Israel García García	Simulation of failure across scales in thermoplastic composites	360		1.000	1.500	UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Javier Carrasco Rodríguez	Reactive dynamics exploration of doped argyrodite electrolytes to enhance their interfacial Li-ion mobility in solid-state batteries	900		900	700	UZ
Javier Carrasco Rodríguez	First-principles study of ionic intercalation in the (Fe,Ni)PO ₄ -Na(Fe,Ni)PO ₄ system as cathode material for Na-ion batteries	650		850	650	SCAYLE
Jesús González Vázquez	Electronic and structural elements that regulate the photostability of pyrimidine nucleobase derivatives: in the search for viable protonucleobases	1.600		900	1.500	IAC
Joan Calafell Sandiumenge	Improving pollutant dispersion prediction in urban environments through the use of advanced deep learning techniques	2.160		10.000	25.000	UMA
Johannes Feist	Ultrafast chiral and polaritonic spectroscopy	2.256		12.000	800	BSC/MN
Jordi Faraudo	MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF THE INTERACTION BETWEEN THE SARS-CoV-2 VIRUS AND SURFACES OF DIFFERENT MATERIALS *	300		400	600	BSC/MT
Jordi Villà Freixa	EVB simulations of compensatory adaptations in mammalian oxidoreductases		500	2.000	200	IAC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jorge Macías Sánchez	Improvement of the Spanish Tsunami Early Warning System using Machine Learning techniques	800		14.500	1.500	CESGA/FT3 GPU
Jose Javier Plata	Combining high-throughput calculations and Machine Learning for exploring the thermoelectric efficiency of large chemical spaces: quaternary metallic chalcogenides.	750		900	900	CENITS
Jose López Miralles	3D RMHD simulations of subparsec jets in the microquasar SS433.	4.000		10.000	20.000	UMA
José M. Hernández Calama	MC Simulation for the CMS Experiment at the CERN LHC	6.700		200.000	10.000	BSC/MN
Jose Maria del Peso Malagon	ATLAS (LHC) simulation of detector response to proton-proton collisions (UAM_m3y2022)	1.500		2.000	3.000	BSC/MN
Juan Manuel Rius Casals	Studying the statistical properties of clusters of photonic particles by communication-free parallel Monte Carlo simulations		70	2.000	2.000	CENITS
Konstantin NEYMAN	Studying CO Oxidation on Nanoporous Gold Using Static DFT and ab initio Molecular Dynamics Simulations	240		1.100	1.100	CIEMAT/TURGALIUM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Linda Angela Zotti	Proton transport in peptide nanotubes	238		600	600	CESGA/FT3
		145		600	600	CESGA/ FT3 GPU
Lluís Blancafort	Oxygen evolution reaction on bismuth vanadate from an exciton perspective	100		250	2.500	CSUC/PIR
Maciej Lewenstein	Entanglement transitions and topology in equilibrium and non-equilibrium quantum many-body systems	2.400		2.000	2.000	BSC/MN
Manuel Alcamí	Theoretical prediction of the environmental impact of pesticides	120		2.048	2.048	CENITS
Marcel Swart	High-valent organometallic iron	217		600	600	CSUC/CAN
María Jesús Esteban Parra	Near-term climate change: Regionalized decadal predictions over the Iberian Peninsula. An assessment of the influence of land-atmosphere interactions on water resources.	375		16.000	8.000	UMA
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Tuning C-H and O-H Bond Breaking by Oxide-Supported NiAu Bimetallic Catalysts	2.547,84		400	400	BSC/MN
Mariano Curti	Design of novel protein secondary structures through non-canonical amino acids	9,40		2.000		CESGA/FT3 GPU
		50		1.000	750	CESGA/FT3

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Marino Arroyo	Mechanics of healthy and pathological cells and tissues	220		10.000	200	UZ
Massimiliano Stengel	First Principles Theory of Flexomagnetoelectricity in 2D materials		150	700	700	CSUC/PIR
Matteo Zennaro	Towards constraining neutrino mass from galaxy clustering measurements	2.400		20.000	20.000	UMA
Mercedes Boronat	Ab initio molecular dynamics study of bimolecular processes in acid zeolites	2.000		48	300	BSC/MN
Miquel Solà	Photoinduced electron transfer in host-guest complexes of tubularenes with electron-deficient aromatics	320		100	1.000	BSC/MN
Miquel Solà Puig	Homogenizing 2D-heterogeneous catalyst: towards more active and selective catalysts for greenhouse gases conversion	548		900	1.000	BSC/MN
Miquel Solà Puig	Elucidating fullerene-perovskite interactions by means of first-principles calculations: Towards a rational desing of low cost solar cells	2.304		900	1.000	BSC/MN
Modesto Orozco	Reprogramming the Synthetic Xeno-Nucleic Acid Catalyst to Galvanize its Cancer-Suppressor Activity	8.000		7.000	7.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Modesto Orozco	Benchmarking and Validation of Improved General-Purpose Nucleic Acid Force Fields	600		1.000	1.000	BSC/P9
		7.500		3.000	3.000	BSC/MN
Modesto Orozco	Investigation on DNA Liquid-Liquid phase separation	1.714		2.000	700	BSC/MN
Nuria Lopez	Dynamic behavior of Earth-abundant heterogeneous (electro)-catalysts - 3rd period	10.533,89		4.096	4.096	BSC/MN
Oriol Jorba	Unraveling the role of nitrogen oxides and volatile organic compounds reactivity in the formation of tropospheric ozone: towards the design of ozone mitigation strategies	4.980		60.000	150.000	BSC/MN
Pablo Llombart Gonzalez	Hysteresis processes involved during the formation of biological membranes.	320		2.048	2.048	CSUC/PIR
Pablo Ordejón	First principles simulations of amorphous GeSe compounds for memory selectors	2.000		10.000	10.000	BSC/MN
Pablo Ordejón	Dielectric properties of confined water: insights into electrified metallic-aqueous interfaces from a multiscale approach	4.500		800	800	BSC/MN
Qinghua Liao	Elucidating mechanisms of glycogen biosynthesis by human glycogenin 1 (hGYG1) using computer simulations	153,60		16.800	16.800	CESGA/FT3 GPU
		691,20		16.800	16.800	CESGA/FT3

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Raffaele Bernardello	Acceleration of ocean biogeochemical models with the transport matrix method	3.213,53		40.000	9.000	BSC/MN
Raul Angulo	Simulating the internal structure of halos in warm dark matter	2.600		16.000	16.000	BSC/MN
Riccardo Rurali	Dynamical tuning on the thermal conductivity of a ferroelectric perovskite	1.000	1.000	40	80	CESGA/FT3
Riccardo Rurali	Tuning the thermal conductivity of Si nanowires with intrinsic defects: the case of vacancies	600		30	50	CESGA/FT3
Roberto San José García	AQMII-4 air quality simulations with WRF/Chem over North America *	2.612		20.000	30.000	BSC/MN
Roderic Guigó Serra	Identification of genetic variants associated to multivariate phenotypes	8.000		1.000	4.000	BSC/MN
Rubén Pérez Pérez	Deep Learning assisted Molecular Identification with High Resolution Atomic Force Microscopy	384		8.000	10.000	CESGA/FT3
		90		9.000	9.000	CESGA/FT3 GPU
Santiago Gonzalez De La Hoz	ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities (IFIC Phase VIII)	3.550		4.000	4.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Sascha Husa	Compact binary models for the ground based gravitational wave detectors at design sensitivity	9.680		12.000	35.000	BSC/MN
		1.000		3.000	7.000	UMA
Shimpei FUTATANI	Kinetic-MHD hybrid simulations for fast particle physics in tokamaks and stellarators	1.252,32		500	30.000	BSC/MN
Shimpei Futatani	Non-linear MHD modelling of pellet injection for ELM control in fusion plasmas	1.440		500	30.000	BSC/MN
Simona Achilli	Antiferromagnetic spinterfaces for new-concept Information Technology devices.		150	8.000	10.000	NASERTIC
Stefan Bromley	Towards a rational tuning of magnetic interactions in diradicals and 2D covalent organic radical framework materials	1.505		200	1.000	UV
Tomás Raúl Rodríguez Frutos	Modern Description of the Atomic Nucleus and its Applications	1.120		1.000	1.000	CIEMAT/TURGALIUM
Victor Guallar Tasies	Computational modeling of target hijacking drugs	3.800	600	7.000	5.000	UV
Xavier Barril	A new pan-coronavirus therapeutic concept to address present and future infections: targeted degradation of the conserved main protease *	200		5.000		BSC/P9
		160		5.000		BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Xavier Luri Carrascoso	Gaia: Calibration and Image parameters determination iterations for the fourth data reduction cycle and early cycle five processing	25		100	100	BSC/P9
		2.500		500.000	500.000	BSC/MN
Xavier Solans Monfort	Role of core composition and shell thickness on the catalytic activity of hybrid (M1M2@IrO2) core shell materials for the oxygen evolution reaction.	720		500	1.500	UC
Xavier Vilasís Cardona	Porting LHCb-Dirac to BSC-HPC	50		5.000	5.000	BSC/MN

La actividad de Joan Torras Costa, con el Título "Computational study of the aggregation propensity of the peptides/peptidomimetics scaffolds for regenerative medicine", ha sido aceptada como actividad con pre-reserva, pendiente de su aprobación a nivel europeo, con un total de 40 millones de horas en procesador de propósito general (x86) y 2 millones en aceleradores gráficos, durante 2 años.

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.