

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 2020

Barcelona, Junio 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 204,3 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), 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), Navarra de Servicios Y Tecnologías(NASERTIC) y Fundación Pública Galega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia (CESGA).

En fecha 6 de mayo de 2020, el Consejo de la RES ha aprobado la adhesión de NASERTIC como nuevo nodo de la Red Española de Supercomputación. Se incorpora con el sistema Urederra, con un rendimiento pico de 29 TFlops. El número de horas aportadas en este periodo es superior a 1,1 millones. Como todos los nodos de la RES, cuenta con un equipo de gestión de sistemas y soporte a usuarios que, con el soporte de los correspondientes equipos del resto de nodos de la RES, ofrece garantía a servicios para los trabajos de excelencia que acoge la RES.

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 Septiembre 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.

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 relacionadas con COVID-19. Lo debe marcar el investigador y validar el panel científico correspondiente, de forma temporal, y solo para la convocatoria que finaliza el 12 de mayo (período 2020-2) y que da acceso de Julio a Octubre de 2020, ambos incluidos
- para las actividades lideradas o con participación cierta de investigadores localizados en España
- para las actividades que superen un mínimo umbral de calidad

tendrán prioridad, hasta un 50% de la capacidad de la RES en dicho periodo, ante cualquier proyecto de otros temas

Un total de 16 actividades relacionadas con COVID han obtenido acceso a los recursos de la RES, con más de 43 millones de horas, que significa un 22% 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 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
-------	--------	-------------------------

Lista de actividades aceptadas con acceso estándar.

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Albert Poater	Computational chemistry from static and dynamic approaches to block the protease of COVID		2.000	50	200	BSC/MN
Alejandro Molina Sánchez	Magnetism, Topology and Dynamics of Novel 2D Materials	1.200		2.000	3.000	BSC/MN
Alexandre Fabregat Tomas	Particle surface wall deposition in confined turbulent natural convection flows	3.000		500	500	UC
Ambrus Both	The effect of fuel composition on swirl spray flame stability	737,28		5.000	5.000	BSC/MN
Andres Pacheco Pages	Monte Carlo Simulation for the ATLAS Experiment at the CERN LHC at the MareNostrum by IFAE/PIC Tier-1	4.000		5.000	5.000	BSC/MN
Andrés Vega-Hierro	Development of a Neural Network Potential to reproduce the potential energy landscape of gold AuN (N=10-70) anion nanoclusters.	1.140		500	100	NASERTIC
Ángel Morales García	Electronic and Optical Properties of Realistic WO ₃ Nanoparticles by Many-Body GW Calculations: Implication for Photocatalysis	170		600	500	CESGA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Anne DEJOAN	Numerical study of intrinsic flame instabilities in Hele-Shaw cells	1.152		2.500	1.500	UAM
Antonio Gil Megías	Performance evaluation of Individual protection equipment using High Fidelity Simulations	135		2.000	20.000	UV
Carlos Martí Gastaldo	Heterometallic Titanium-Organic Frameworks as Dual Metal Catalysts for Synergistic Non-Buffered Hydrolysis of Nerve Agent Simulants	933,12		800	800	BSC/MN
Carlos Vega de las Heras	'In silico' seawater: evaluating for the first time the physical properties of seawater from molecular dynamics simulations	648		800		UMA
Carme Rovira	Catalytic mechanisms of biomass-processing glycosidases	122		14.300	14.300	BSC/P9
		845		14.300	14.300	BSC/MN
Carmen Domene	Characterisation of the affinity of broadly neutralizing anti-HIV antibodies for the membrane interface.		300	500	500	BSC/MT
Carmen Jiménez	Numerical simulation of flames propagating in small devices: effect of differential diffusion, heat losses and gravity in acoustic instabilities.	850		2.500	1.000	UAM
César González	Reduction of the magnetization associated to the atomic fluctuations in Mn-alloyed cementite		250	500	1.000	SCAYLE

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Chantal Valeriani	Adhesion and Cohesiveness of biofilm to surfaces from in silico studies	7.296		20.000	20.000	BSC/MN
Cristina Díaz Blanco	The role of aromaticity in molecular conductance II		250	300	300	SCAYLE
Daniel Mira	Numerical investigation of liquid biofuels for transportation under engine-like conditions	3.000		10.000	10.000	BSC/MN
David Expósito Singh	Simulating COVID-19 propagation at a European-level	9.300		300	40	BSC/MN
Edilberto Sánchez González	Simulations of plasma turbulence in stellarators with EUTERPE	5.000		22.000	5.000	BSC/MN
Eduardo Sanz García	Antifreeze effect of ice-binding proteins	3.960		2.000	2.000	BSC/MN
Eliseo Ruiz Sabín	Room-Temperature Magnetoresistance in Devices based on Molecular-based 2D Materials	920		120	4	BSC/MN
Eneko Agirre	Cross-language Information Extraction Models	100	100	600	8	BSC/P9
Estelina Lora da Silva	Pressure-Induced phase-transitions of Bi ₂ Se ₃	4.336,13		100	4.000	BSC/MN
F. Javier Luque	Searching for small compounds as stabilizers of the inactive spike protein in SARS-COV-2	3.310		8.000	2.000	BSC/MN
		57		4.000	2.000	BSC/MT

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Fco. Javier Salvador Rubio	Using Direct Numerical Simulation (DNS) to study the influence of the surface tension on the atomization process	500		18.000	20.000	BSC/MN
Federico Calle-Vallejo	Designing Active Materials toward Formic Acid Reduction	550	50	300	300	CENITS
Fernando Martín García	Attosecond imaging and control of charge migration in molecular systems of biological, photovoltaic and atmospheric interest	4.608		350	5.500	BSC/MN
Fernando Martín García	Understanding the physical chemistry properties of transition metal dichalcogenides induced by the supporting substrate II	450		300	500	BSC/MN
Ferran Feixas	Unraveling the molecular basis of inhibitor selectivity in p38 kinases	115,20		5.000	5.000	BSC/MT
Francesc Illas Riera	Multiscale modeling of the selectivity of novel Ni/TiC catalysts towards CO2 conversion	1.313		900	1.500	BSC/MN
Francesc Illas Riera	Molybdenum carbide nanoparticles as an alternative to precious metals for catalytic hydrogenation reactions	1.278		900	1.500	BSC/MN
Francesc Viñes	Carbon Capture and Storage on Transition Metal Nitride and Nitride MXene Materials	150	150	300	500	UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Francesc Viñes Solana	Structure-Activity Relationships of Cu@Pt Nanoparticles towards CO Anchoring	898		300	500	SCAYLE
Francesc Xavier Trias Miquel	Direct and Large-Eddy Simulation of buoyancy-driven turbulence in liquid metals	2.600		256	10.240	BSC/MN
Francesco Luigi Gervasio	Identification and Design of drugs for SARS-CoV2 nsp1 and the nsp1:40S ribosome complex	4.942,08		7.000	6.000	BSC/MN
Francisco javier Llorca Martínez	Prediction of the phase-diagram of metallic alloys of technological interest from cluster expansion and statistical mechanics	1.000		2.000	1.000	SCAYLE
Gara Villalba Méndez	Modeling the urban atmosphere to determine the effect of green infrastructure on air quality and carbon footprint		150	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
Giuseppe Battaglia	Phenotypic targeting of COVID-19 spike protein ACE2 interface for safe drug delivery	3.664,56		7.000	6.000	BSC/MN
Gregorio Herdoíza	Charm and bottom physics on fine lattices: semileptonic decay form factors	6.500		80.000	80.000	BSC/MN
Grigory E. Astrakharchik	Quantum Monte Carlo simulation of ultradilute liquids	1.000		200	20	UAM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
gustavo yepes alonso	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	3.500		50.000	80.000	BSC/MN
Hristiyan Aleksandrov Aleksandrov	DFT modeling of CO oxidation on Pt-CeO ₂ and Pt-Al ₂ O ₃ systems	1.070		500	400	SCAYLE
Ignacio Pagonabarraga	Emerging patterns in actuated and intrinsically non-equilibrium soft matter composites	9.950		40.000	40.000	BSC/MN
Iñaki Tuñón	MultiScale Simulations of the Activity of 3CL Protease of SARS-CoV-2	200	200	8.000	6.000	BSC/P9
		8.000		10.000	8.000	BSC/MN
Inés Corral	Deciphering the mode of action of novel DNA-targeted antitumoral drugs	1.000		300	1.500	CESGA
Isaac Alonso Asensio	Testing and tuning a mesh-free hydrodynamic solver for astrophysical simulations	35,20		70	70	BSC/MN
		4,40		40	40	BSC/MT
Ivan Coluzza	Ultra-wide screening of ligand binding targets locking the SARS-cov-2 Glycoprotein S in the down conformation (COVID-LOCK)	2.100	100	1.500	2.000	UV
Ivette Rodríguez	On the flow and noise control of three-dimensional wakes		1.000	512	4.096	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
J. Guilherme Vilhena	Molecular Nanotribology: Tuning molecular friction and adhesion by atomic/chemical design	50	100	6.000	6.000	BSC/P9
Javier Carrasco Rodríguez	Polyethylene oxide matrix and active Li7La3Zr2O12 filler particles: Insights on the interfacial physics of composite solid electrolytes for next generation rechargeable batteries.	230		650	600	BSC/MN
Javier Carrasco Rodríguez	First-principles study of oxygen evolution and diffusion on the surface of mixed Co3-xMnxO4 spinel structures for thermochemical energy storage	600		600	550	SCAYLE
Joan Calafell Sandiumenge	Large Eddy Simulation of Micro-Atmospheric environment for accurate pollution distribution prediction	1.150		2.000	2.000	BSC/MN
Joaquim Rigola Serrano	Direct Numerical Simulation of mass transfer in turbulent bubbly flows in vertical channels		1.000	2.048	2.048	BSC/MN
Johannes Feist	Ultrafast atomic & molecular processes driven by classical & quantized light		30	500	200	BSC/P9
		800		5.000	2.000	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

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jorge Macías Sánchez	Development of the HPC aspects of a Probabilistic Tsunami Forecast (PTF) tool for the Mediterranean Sea. A pilot set up.	400		800	50	BSC/P9
Jose Angel Silva Guillén	Effect of strain in single- and few-layered transition metal chalcogenides	1.000		200	100	SCAYLE
José Carlos Conesa cegarra	GW electronic structure calculation of Cr-substituted hybrid lead halide perovskites	350		30		CESGA
Jose Javier Plata Ramos	Predicting thermoelastic properties of 2D materials		300	750	750	CENITS
José Luis Fernández Abascal	Desalination of seawater using membrane distillation (MD) based on carbon nanotube (CNT): a non-equilibrium molecular dynamics study	720		1.500		BSC/MN
José M. Hernández Calama	MC Simulation for the CMS Experiment at the CERN LHC	250		50.000	1.000	BSC/MN
Jose Maria Carazo	Structural analys by cryo EM of SARS Cov-2 Spike in complex with human neutralizing antibodies	20		4.000	500	BSC/P9
		120		4.000	500	BSC/MN
Jose Maria del Peso Malagon	ATLAS (LHC) simulation of detector response to proton-proton collisions (UAM Phase 0)	100		4.000	4.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
José María García Oliver	Reacting Multi-phase LES in Gas Turbine Sprays	1.244		5.000	5.000	BSC/MN
Juan Andrés Bort	Semiconductor oxide surface applications: catalytic, sensor and biological evaluation		167	396	136	BSC/MN
Juan Carlos Cuevas	The role of water in the electron transport through metal-protein-metal junctions	842		600	600	BSC/MN
Juan José Palacios Burgos	Topological and optoelectronic properties of franckeite: a naturally occurring van der Waals heterostructure.	2.000		8.000	10.000	BSC/MN
Konstantin Neyman	Striking chemical orderings in bimetallic nanoparticles with silver and gold atomic shells	536		1.000	1.000	UV
Lluís Blancafort	Unraveling melanin structure and photoprotection - optical and IR spectra of a library of melanin components	800		50	50	CSUC/PIR
Manuel Angel Ortuño Maqueda	Zr-based metal-organic frameworks for biomass valorization	350		500	1.000	CENITS
Manuel García-Villalba	Numerical simulations of flow in the human left atrium with moving walls	950	50	6.000	300	SCAYLE

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Marc Garcia-Borràs	Computational characterization of reactive intermediates for the discovery and design of new biocatalytic activities: unnatural oxidation catalytic pathways in P450s	81,38		5.000	5.000	BSC/MT
Marco Molinari	The interaction of hydrogen peroxide with carbonated and hydrated CeO ₂ surfaces	1.880,07		1.000	2.000	UV
María Luisa S. Senent Diez	Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere	504		200	500	CESGA
Maria Veronica Ganduglia Pirovano	Unraveling the Mechanism for Methane Steam Reforming on Ni-Ceria Catalysts	1.347,84		400	400	BSC/MN
Maria Veronica Ganduglia Pirovano	Study of the hydrogenation of CO ₂ to methanol and the role of Cu and Ga in the catalyst formulation	1.958,40		400	400	IAC
Marino Arroyo	Modeling coupled mechano-chemical dynamics of tissues and cells	200		5.000	200	BSC/MN
Marta Reynal Querol	Computing pixel based socio-economic measures to analyze economic development		100	7.000	300	BSC/MN
MERCEDES BORONAT ZARAGOZA	Ab initio molecular dynamics study of copper ion migration in Cu-CHA catalysts	2.600		30	200	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Miguel Ángel Aloy Torá	Magnetospheres of magnetars: Alfvén waves as mediators of energy dissipation	1.620		60.000	160.000	BSC/MN
Miguel Ángel Fosas de Pando	Analysis and optimization of flow through linear cascades using adjoint-based methods		350	8.192	16.384	CESGA
Miquel Solà	Hole transfer in novel “skinny” and “fat” containing double-stranded DNA stacks		450	50	200	IAC
Modesto Orozco	Exploring Covid19 Infectious Mechanisms and Host Selection Process	4.839		2.000	5.000	BSC/MN
Natalia Koval	Radiation-induced degradation of solar cell materials via first-principles methods	5.200		10.000	10.000	BSC/MN
Oscar Flores	DNS of collective motions for a pair of self-propelled flappers	1.150	50	7.000	2.560	UZ
Oscar Flores Arias	Direct Numerical Simulations of spanwise flexible wings in tandem configuration		1.000	2.400	600	BSC/MN
Pablo G. Lustemberg	HCl and Cl interaction on reduced CeO ₂ (111) with unexpected stoichiometry	300	84	400	400	IAC
Pablo Gamallo Belmonte	Efficient CO ₂ hydrogenation through transition metals encapsulated on MFI zeolites		1.000	900	1.500	BSC/MN
Pablo Ordejón	First principles simulations of amorphous GeSe compounds for memory selectors	2.500		500	500	CENITS

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Pablo Ordejon	Bias-Dependent Local Structure of Water Molecules at a Metallic Interfaces	750		500	500	UV
Pedro Martí Gómez-Aldaraví	Droplet characterization of coughing and breathing	135		2.000	20.000	UV
Prof. Ernest Giralt	Rational structure-based design of anti-PD-1 biological peptides	1.382		900	600	UMA
Prof. Francesc Viñes	Kinetics of Hydrogen Evolution as Electrocatalyzed by MXenes	216		300	500	CSUC/CAN
Prof. Marcel Swart	Formation of diamond-core Fe(IV) ₂ (μ-O) ₂ complexes	353,66		60	200	BSC/MN
Prof. Marcel Swart	High-valent reactivity of copper complexes		190	60	200	UAM
Raúl Payri Marín	Influence of the geometrical parameters of a Lean Direct Injection burner on the injection and atomization processes	400		500	18.000	BSC/MN
Riccardo Rossi	Scalable distributed Multilevel Monte Carlo workflow design	4.903		8.000	8.000	BSC/MN
Robert Castilla López	Aeroacoustic field computation of noise generated by HVAC inside a car	1.840		10.000	25.000	IAC
Roberto Robles Rodríguez	Gears at the nanoscale		690	1.000	2.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Roberto San José García	Numerical air quality simulations to support the international initiative AQMII-4		1.000	10.000	20.000	BSC/MN
Ruben Perez Perez	How Point-Mutations Alter Single-Protein Electron Transfer Properties	240		6.000	6.000	BSC/MT
Rubén Pérez Pérez	Deep Learning assisted Molecular Identification with High Resolution Atomic Force Microscopy	1.450		10.000	10.000	CESGA
Salvador Cardona Serra	Multiscale design of molecular materials for Neuromorphic Computing		200	100	100	BSC/MN
Sandra Rodríguez Gonzalez	Correlation between aromaticity and conductance in Single Molecule Devices		300	600	600	BSC/MN
Santiago González de la Hoz	ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities (IFIC Phase V)	3.900		4.000	4.000	BSC/MN
Santiago Ignacio Badia Rodriguez	Parallel performance and scalability assessment of the aggregated unfitted finite element method for fluid structure interaction and additive manufacturing problems	400		400	40.000	BSC/MN
Sascha Husa	The end of an era - analysing the last gravitational wave detections before LIGO-Virgo design sensitivity	9.200		8.000	20.000	BSC/MN
		1.000		2.000	5.000	UMA
Sergio Hoyas Calvo	Stratified Couette Flows	4.000		20	25.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Sergio Madurga Diez	Evaluation of the pH-dependence of the SARS-Cov-2 main protease by molecular dynamics simulations.	133		14	20	CSUC/PIR
Sofía Calero Díaz	Tailored magnetic properties in molecular magnets via guest-induced phase transitions: The case of M-MOF-74 (M=Fe, Co, Ni)	438		3.000	3.000	IAC
Sonsoles Martin-Santamaria	Computational simulations of liposomes as models for the study of AMR.	192		800	800	CSUC/PIR
Stefan Bromley	Understanding the Size Dependent Properties and Structure of Nano-TiC		600	1.000	1.000	UV
Stefan T. Bromley	Exploring the Electronic Phases of 2D Covalent Organic Radical Frameworks	552		500	500	UV
Valeriia Liakh	Solar prominence oscillations	1.400		16.384	16.384	BSC/MN
Vicent Moliner	Revealing the molecular mechanisms of catalysis and inhibition of SARS-CoV-2 Mpro: towards the design of a COVID-19 antiviral drug.	381,30		500	100	CSUC/PIR
Victor Guallar Tasies	In silico toxicology prediction for compounds binding to the SARS-CoV-2 protease	3.600		4.000	4.000	BSC/MN
Victor Homar Santaner	Advanced ensemble generation strategies for hydrometeorological forecasting: Flash flood cases in Eastern Spain	736		35.000	500	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Xavier Barril	Large-scale assessment of the druggability of E3 Ubiquitin Ligases	100		8.000		BSC/P9
		224		8.000		BSC/MN
Xavier Luri Carrascoso	Gaia: Fourth Data Reduction Cycle (DRC-04) and Early Data Release 3 publication (EDR3)	100		1.024	1.024	BSC/P9
		3.530		500.000	500.000	BSC/MN
Xavier Vilasís Cardona	Porting LHCb-Dirac to BSC-HPC	50		5.000	5.000	BSC/MN
Zeila Zanolli	Enhancing topological properties in TMDs by proximity interaction	5.115		100	100	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.