

Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación

Resolución Comité de Acceso, Asignación de Horas de Supercomputación para la Red Española de Supercomputación (RES) 3er período 2022

Barcelona, Octubre 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 321,5 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.

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 Enero 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, 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 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 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 las 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 6 actividades relacionadas con COVID han obtenido acceso a los recursos de la RES, con casi 32 millones de horas, que significa casi un 10% 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.

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Gregorio García	Metallogenic Liquid Crystal Mixtures with columnar segregation: A quantum chemical insight on the mesophase structure at the molecular level	400		500	1.000	UZ
Adrián Pandal Blanco	Numerical modelling of biomass dust explosions in industrial silos	950		10.000	10.000	UC
Albert Poater	Single atom metals embedded on two-dimensional g-C ₃ N ₄ for Hydrogen evolution reaction: Surface or Monolayer?	691		500	500	BSC/MN
Albert Poater Teixidor	Selectivity of harmful gases by azole based ionic liquids	1.382		500	500	UV
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		1.000	2.000	UAM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Alberto BROATCH	COMBUSTION NOISE AND MODAL DECOMPOSITION IN LDI COMBUSTORS OF GAS TURBINES	1.175		5.000	10.000	BSC/MN
Alicia Palacios	Free electron lasers applications for ultrafast molecular physics	1.500		100	4.000	BSC/MN
Andres Pacheco Pages	Monte Carlo Simulation for the ATLAS Experiment at the CERN LHC at the MareNostrum by IFAE/PIC Tier-1	5.300		7.000	7.000	BSC/MN
Angel Morales Garcia	Effect of water coverage on the stability of realistic TiO2 Nanoparticles	980		1.000	1.000	CESGA/FT3
Angel Morales-García	CO dissociation on MXenes: Implications in Heterogeneous Catalysis	438		300	500	SCAYLE
Antonio Picón	Coherent excitonic dynamics	921,60		1.000	300	UMA
Arturo Gonzalez-Escribano	Adaptative scalable computations on distributed heterogeneous systems	25		20	10	CESGA/FT3
		30		20	10	CESGA/FT3-GPU
Carles Calero Borrillo	Self-thermophoresis at the nanoscale	750		500	50	UZ

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Carlos Hernández-García	Generation of structured x-ray lasers through the use of neural networks	400		500		SCAYLE
		1.000		500		BSC/MN
Carlos Palenzuela Luque	Magnetic field amplification and neutrino transport in the 100 ms after a binary neutron star merger	7.815,16		30.000	30.000	BSC/MN
Carme Rovira	Unveiling mechanisms of heparin precursor biosynthesis	164		40.600	30.600	BSC/P9
		2.688		40.600	30.600	BSC/MN
Carme Rovira	Computer simulation of disease-related carbohydrate-active enzymes: glycoside phosphorylases	120		40.600	30.600	BSC/P9
		2.160		40.600	30.600	BSC/MN
Carolina Estarellas	Metadynamics simulations for the study of the mechanical plasticity: towards the understanding of isoform selectivity	1.245		4.000	3.000	BSC/MN
César González	Simulations of carbon-based electrodes for a new generation of more efficient bateries	95		1.000	500	UC
Claudio Cazorla Silva	Nano-structured multifunctional materials for solid-state cooling	5.850		200	400	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Daniel Argüeso	Mesoscale air-ocean interactions and their role in precipitation extremes over the western Mediterranean	1.840		20.000	10.000	UMA
Daniel Argüeso Barriga	Contribution to CORDEX HRSST initiative to investigate the impact of small-scale structures on the regional climate	1.180		18.000	10.000	BSC/MN
Daniel Muñoz-Santiburcio	Understanding the phase effect in proton irradiation of water via first-principles methods	1.040		10	20	BSC/MN
David Expósito Singh	Modelling COVID-19 propagation scenarios for health authority decision making	400		500	500	UV
David Mateos	Holography in the Gravitational-Wave Era	3.000		4.000	5.000	UMA
David Soriano Hernández	Magnon spintronics in van der Waals heterostructures	1.200		2.000	3.000	BSC/MN
Edilberto Sánchez González	Global particle in cell simulations of turbulence in stellarators with EUTERPE	150		15.000	15.000	BSC/P9
		6.000		24	20	BSC/MN
Eduardo Javier Pérez Sánchez	Simulation and analysis of a sooting turbulent jet by applying the Conditional Moment Closure combustion model and the Discrete Sectional Method	1.610		10.000	10.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Eduardo Sanz García	Nucleation of water bubbles and drops in cavitation and condensation.	2.822,40		2.000	2.000	BSC/MN
Eleftheria Exarchou	Wind stress impact on seasonal prediction of ocean biogeochemistry using EC-Earth3-CC	4.715		20.480	25.000	BSC/MN
Elena Akhmatskaya	An atom-eye view of Solid Electrolyte Interphase Formation in Li-ion Batteries under realistic operating conditions	298		100	200	BSC/MN
Elena B. Martín Ortega	Segregation assessment in the manufacturing process of metal powder cored-wire	4.329		10.000	5.000	BSC/MN
Elisa Jimenez Izal	Fight the CO poisoning on the catalysts to improve the performance of proton exchange membrane fuel cells	3.072		1.500	4.096	BSC/MN
Eliseo Ruiz Sabín	Electron Transport in Covalent Organic Frameworks for Chemical Sensing	950		120	4	BSC/AMD
Eliseo Ruiz Sabín	Improving Hysteresis in Spin-Crossover Fe(III) Compounds	980		120	4	BSC/MN
Enrique Marcos Benteo	Molecular dynamics screening of de novo designed protein-based inhibitors	1.100		2.000	4.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Enza Di Tomaso	Benchmarking ensemble data assimilation of atmospheric composition for reanalysis applications	3.364,45		20.000	50.000	BSC/MN
Esteban Ferrer	Aeroacoustics using a high order Discontinuous Galerkin solver	4.200		4.000	1.000	BSC/MN
Etienne Tourigny	Adaptive Emission Reduction Approach (AERA) simulations with the EC-Earth3-CC model.	4.682,70		15.480	40.960	BSC/MN
Felix Garcia Carballeira	Development and Evaluation of Ad-hoc Storage Parallel File systems II	112		1.024	1.024	BSC/ARM
		384		2.048	2.048	BSC/MN
Fernando Martín García	Attosecond electron dynamics in molecules	8.100		500	45.000	BSC/MN
Fernando Martín García	Engineering single-molecule conductance by chemical disubstitution	1.524		600	600	BSC/MN
Francesc Viñes Solana	Alkyne and olefin selective hydrogenation using Mo ₂ C MXene	759		500	700	CESGA/FT3
Francesc Viñes Solana	Stacking and Partial Oxidation Effects on the Reverse Water Gas Shift Reaction by MXenes	466		400	600	SCAYLE

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Francesc Xavier Trias Miquel	Can we hit the ultimate regime of thermal turbulence using LES simulations at low Prandtl numbers?	4.650		256	20.480	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
Gara Villalba	Modelling the impacts of green infrastructure on air quality and climate change at the urban scale	450		100	20.000	UMA
Gregorio García	Triphenylene-based molecules as Organic Spacers for tuning structure and electronic properties of 2D perovskites materials	500		200	200	CENITS
Grigory Astrakharchik	Quantum Monte Carlo simulation of dipolar gases in one-dimensional optical lattices	1.000		100	20	IAC
Ignacio Pagonaabrraga	Emerging patterns and instabilities in active materials		100	10.000	10.000	BSC/P9
		7.000		20.000	40.000	BSC/MN
Iñaki Tuñón	Impact of Mutations on the Inhibition of SARS-CoV-2 Main Protease with Paxlovid	150		10.000	12.000	BSC/P9
		8.000		10.000	12.000	BSC/MN
Inés Corral Pérez	Disclosing the complete photodynamical profile of the native nucleobase uracil	900		900	1.500	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Ion Errea	Anharmonicity and non-linear electron-phonon coupling in palladium and rubidium hydrides	5.000		70.000	70.000	BSC/MN
Ivette Rodríguez	Actuation strategies of a 3-element high lift wing: the role of coherent structures	2.900		2.048	15.000	BSC/MN
J. Guilherme Vilhena	Friction Engineering via 2D Materials Twistronics: the Critical Slip of Moiré Tiles	80		6.000	6.000	CESGA/FT3-GPU
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	717		850	650	SCAYLE
Jeremias Likerman	Geodynamic modeling of subduction zones. Case studies: Andes cordillera flat slabs and slab tearing.	1.781		2.400	4.800	BSC/MN
Jessica Rodriguez Villar	Nucleosomal DNA binding by artificial transcription factors		100	2.000	2.000	CESGA/FT3-GPU
Jinxuan You	Achievement of quantum anomalous Hall effect in transition metal dichalcogenides by magnetic proximity effect	1.004		100	100	UC
Jon Serrano	Transition metal screening and structure stability analysis in high-voltage transition metal layered oxide for the cathode of Na-ion batteries	334,08		700	600	UV

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jordi Villà Freixa	Misfolding and aggregation of human Tau hexapeptide PHF6* under the influence of acetylation as a major Post-translational modification	100		2	4	CESGA/FT3-GPU
Jorge Macías Sánchez	Fast Tsunami Forecast Workflows (FTFW)	810		12.000	100	BSC/P9
Jose Angel Silva Guillén	Precise characterization of the low temperature structures of vanadium oxides	8.524		500	10.000	BSC/MN
Jose Antonio Seoane Fernandez	Targeting synthetic lethality in Chromatin Regulatory Genes	600		20.000	1.000	BSC/MN
Jose J. Plata	Computational modelling of the lattice thermal conductivity of alloys with thermoelectric applications.	740		900	900	CENITS
José Manuel García Regaña	Stellarator turbulence simulation	4.700		20.000	20.000	BSC/MN
Jose Maria del Peso Malagon	ATLAS (LHC) simulation of detector response to proton-proton collisions (UAM_m11y2022)	1.600		2.000	3.000	BSC/MN
José María García Oliver	Advanced modelling of combustion and soot production in aero-engine burners	1.762		10.000	10.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jose Oñorbe Bernis	Cosmological mock datasets for WEAVE-QSO	20		2.000	2.000	CSUC/CAN
		20		2.000	2.000	CIEMAT/XULA
		20		2.000	2.000	CIEMAT/XULA
		20		2.000	2.000	CIEMAT/XULA
		20		2.000	2.000	CIEMAT/XULA
Josep Flix Molina	MC Simulation for the CMS Experiment at the CERN LHC	7.100		40.000	10.000	BSC/MN
Julia Contreras García	Quantum approach to the formation of the first molecules for life in Volcanic Hydrothermal Systems	21		1.000	1.000	UC
Karolina Zofia Milowska	Combining low-dimensional carbon structures with organic-inorganic hybrid perovskites for sustainable energy generation	1.935,36		10.000	10.000	BSC/MN
Konstantin NEYMAN	Studying Dynamic Formation of Ordered Oxygen Phases on Nanoporous Gold Using Static DFT and ab initio Molecular Dynamics Simulations	955		1.100	1.100	UAM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Llabrés Prat	Modelling the NPC1-NPC2 protein-protein interaction using AlphaFold Multimer and Molecular dynamics simulations	1.994		6.000	3.000	CENITS
Luis Gimeno Presa	Transport moisture in the Atmosphere-Simulations (TRAMO-SIMULATIONS)	1.036,80		70.000	70.000	CESGA/FT3
M Ángeles Pérez García	Computation of many-body properties of Neutron Star crusts	500		100		SCAYLE
Maciej Lewenstein	Entanglement transitions and topology in equilibrium and non-equilibrium quantum many-body systems II	3.500		4.000	4.000	BSC/MN
Manuel Alcamí Pertejo	Theoretical prediction of the environmental impact of pesticides	155		2.048	2.048	CENITS
Marcos Carreres Talens	VOF-LES coupled simulations of the internal flow and spray behavior in a simplex pressure-swirl atomizer for aeronautical burners	500		4.000	8.000	NASERTIC
Maria Fumanal	Molecular Engineering of 2D Covalent Organic Frameworks for Optoelectronic Applications	432		200	1.000	CSUC/PIR
María Gema Llorens	Seismic anisotropy of mantle rocks in subduction zones	1.781		2.400	4.800	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
María Gonçalves Ageitos	Significance of mineral dust composition towards aerosol radiative forcing in Earth System Models	3.755,50		50.000	150.000	BSC/MN
María Luisa Senent Diez	Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere	234	90	200	200	CESGA/FT3
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	CO2 hydrogenation to methanol over Cu- and Ga-containing catalysts: Insights into the roles of metal and promoter	1.977,60		500	500	IAC
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Tuning Selectivity in the Direct Conversion of Methane to Methanol over NiAu/CeO2 catalysts: The roles of geometric ensemble effects and water	3.518,40		500	500	BSC/MN
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Study of the hydrogen peroxide reactivity on Fe3O4(111) and (001) surfaces in an aqueous environment	1.378,56		500	500	IAC
Marisa Montoya	Modelling climate-cryosphere interactions	150		5.000	5.000	UC
Martin Obergaulinger	Early jets in magnetorotational core-collapse supernovae	2.500		2.000	40.000	BSC/MN
Miguel Ángel Aloy Torás	X-ray flares from non-ideal dynamics of twisted magnetar magnetospheres	3.594,24		10.000	6.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Miguel Pruneda	nanocrystalline silicon for opto-electro-mechanical applications	1.538		1.000	1.000	BSC/MN
Milton Ruiz	Studies In Theoretical Astrophysics and General Relativity	700		50	30	UC
		1.100		50	40	BSC/MN
		1.100		50	40	BSC/MN
Miquel Solà Puig	Data driven investigation on fullerene-perovskite systems for solar cell applications	864		900	1.000	BSC/MN
Modesto Orozco	ABCix: Describing the structural and dynamical properties of duplex B-DNA under physiological conditions	500		100	100	BSC/MN
Modesto Orozco	Computational investigation on DNA polyelectrolytes mediated condensation	1.051,31		10.000	10.000	BSC/MN
Modesto Orozco	Massive Evaluation of Protein-Antibody Complex Stability Using Metadynamics Metainference and Cryo-EM data	9.500		25.000	25.000	BSC/MN
Nicola GA Abrescia	Cryo-EM 3D reconstruction of a novel giant virus	2.300		3.000	3.000	UMA
Nicolas Guil	Lightweight Structure-Aware Attention for Visual Understanding	62		5.000	1.000	CESGA/FT3-GPU

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Nicolas Moreno	Lagrangian Heterogeneous Multiscale Modelling of Blood Coagulation	4.420		200	2.000	BSC/MN
Nuria Lopez	Data-driven investigation of oxygenated heterogeneous (electro)-catalysts - 2nd period	11.344,90		6.144	6.144	BSC/MN
Octavio Castillo Reyes	Cronos: Supercomputación para datos termocronológicos en sistemas petrolíferos: el caso de Colombia y su impacto en la transición energética	580		10	4	UC
Oriol Lehmkuhl Barba	High-fidelity simulations of thermal turbulent boundary layers under strong temperature gradients	1.800		2.048	14.000	BSC/MN
Pablo Ordejon	Thermal properties of amorphous GeSe compounds from First-Principles	2.000		1.000	1.000	BSC/MN
Pablo Ordejón	Towards a realistic description of the electrical double layer in metallic-aqueous interfaces from a multiscale approach	4.500		2.000	3.500	BSC/MN
Pedro Alejandro Sánchez Murcia	Computer-aided protein design based on the calculations of reaction energy barriers	1.453		41.000	41.000	CIEMAT/TURGALIUM
Pedro Coto	Theoretically Optimized Bio-LED	1.500		1.000	1.000	CIEMAT/XULA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Qinghua Liao	Elucidating mechanisms of glycogen biosynthesis by human glycogenin 1 (hGYG1) using computer simulations	796,80		12.800	12.800	CSUC/PIR
Raimon Luna i Perelló	Charged Compact Object Binaries in a Plasma Environment	3.000		8.192	1.024	UV
Ricardo Díez Muiño	Attosecond-resolved photoemission from two-dimensional materials	5.736		1.000	5.000	BSC/MN
Riccardo Rossi Bernecoli	Creating Reduced Order Models with High Performance Workflows	200		300	400	BSC/MN
Riccardo Rurali	Impact of doping on the thermal conductivity of organic semiconductors: the case of P3HT	570,24		300	1.000	CESGA/FT3
Riccardo Rurali	Phonon-based detection of ultralight dark matter	1.451		500	3.000	CESGA/FT3
Roberta Farris	Thermal properties of twisted MoSe2	1.000		800	800	NASERTIC
Roberto D'Agosta	Photocatalytic properties of gold-rhodium nanoalloy	1.352		2.000	2.000	BSC/MN
Rocío Carratalá Sáez	Multi-GPU and multithreaded flowmap and FTLE computation in distributed heterogeneous environments fluid dynamics applications	290		40	15	CESGA/FT3
		240		40	15	CESGA/FT3-GPU

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Rubén Pérez	Multiscale Molecular Simulations of Adsorption of the Spike Protein S1 onto Substrates with Manifold Polarities	1.400		22.000	30.000	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.	1.700		10.000	20.000	BSC/MN
Santiago González de la Hoz	ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities (IFIC Phase IX)	3.700		4.000	4.000	BSC/MN
Saray Busto Ulloa	Modelling and numerical simulation of the cardiovascular system using hybrid methods: a way towards personalized medicine	2.500		200	4.000	CESGA/FT3
Sascha Husa	Preparing for the fourth observation run of gravitational wave detectors	10.000		12.000	35.000	BSC/MN
		1.100		4.000	8.000	UMA
Sergio Diaz-Tendero Victoria	Modelling redox properties of DNA strands	256		500	500	UAM
Sergio Hoyas	Turbulent Boundary Layers revisited.	7.200		100	50	BSC/MN
Sergio Posada Pérez	Screening electrode materials for Li-ion aqueous batteries: The oxygen evolution reaction	502		600	600	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Sergio Posada Pérez	Ultra-dense hydrogen and noble gases in small pore hydridic framework	576		500	500	BSC/MN
Sergio Zlotnik	Real-time dynamic prediction of wind-induced forces in vehicle platooning	3.440		30	8.000	BSC/MN
Shimpei FUTATANI	Kinetic-MHD hybrid simulations for fast particle physics in tokamaks and stellarators	1.252,32		500	30.000	BSC/MN
Silvia Acosta Gutiérrez	Ligand-induced allostery controls membrane deformation and endocytosis	4.213,04		7.000	5.000	BSC/MN
Sílvia Osuna Oliveras	Computational exploration and design of squalene-hopene cyclases for efficient cationic cyclizations	2.500		2.000	2.000	UMA
Sonia Raquel Gámiz Fortis	Climate change impacts on extreme precipitation events in Andalusia by using regional modelling at very high resolution. Evaluation of land-atmosphere feedbacks	2.711,50		20.000	20.000	UMA
Stefan T. Bromley	Electric Field Control of Magnetism in 2D Organic Materials	783		400	1.000	UV
Tomas Andrade	Numerical Relativity simulations for eccentric black hole mergers and their gravitational waves	1.180		50	2.500	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Vicent Moliner	Towards the Design of COVID-19 Antiviral Drugs from QM/MM Simulations on the Inhibition of SARS-CoV-2 Mpro	7.838,20		500	2.000	BSC/MN
Victor Guallar Tasies	Integrative computational modeling pipeline to detect molecular glues	3.000		15.000	6.000	SCAYLE
Vladimir Lapin	Quantifying the benefits of coupled data assimilation in seasonal climate prediction	4.000		2.000	10.000	BSC/MN
Weiguang Cui	The THREE HUNDRED GALAXY CLUSTERS PROJECT: Next generation of high-resolution galaxy cluster simulations with GIZMO-SIMBA	9.216		25.000	40.000	BSC/MN
Xavier Luri Carrascoso	Gaia: Calibration and Image parameters determination iterations for the fourth data reduction cycle and early cycle five processing	20		100	100	BSC/P9
		1.750		600.000	600.000	BSC/MN
Xavier Vilasís Cardona	Porting LHCb-Dirac to BSC-HPC	1.000	200	1.000	5.000	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.