

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 2019

Barcelona, Febrero 2019

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 187,6 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 2019. En la próxima convocatoria, se espera un pequeño incremento de recursos disponibles, al hacer el ajuste final de los recursos que el Centro Nacional de Supercomputación realiza a PRACE y a la RES. Con esta redistribución se espera dar cabida a

mayor número de actividades o actividades con requerimientos de mayor capacidad. Se espera así una disponibilidad de horas para el siguiente periodo de 200 millones de horas, con lo que animamos a todos los investigadores a presentar propuestas de actividades de gran relevancia científica con gran utilización de recursos de computación.

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 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. 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, y a MinoTauro abreviado con MT.

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Adrià Gil Mestres	Interaction of metal complexes with regular DNA and G-quadruplexes for medical applications.	2.300		500	500	BSC/MN
Agustí Lledó	Enzyme-like catalysis with synthetic molecular receptors	100		5.000	5.000	BSC/MT
Alejandro Luque Estepa	Electro-hydrodynamic simulation of the streamer-to-leader transition in lightning and other long electric discharges	6.160		1.000	2.500	BSC/MN
Alicia Palacios Cañas	Multiphoton two-color schemes for attosecond time-resolved images of atomic ionization and molecular excitation	252		300	1.500	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Ambrus Both	Large eddy simulation of n-heptane swirl spray flame approaching blow-off		500	5.000	5.000	BSC/MN
Ana Martín Sómer	Time resolved investigation of UV-induced bond creation and dissociation in biologically relevant systems: from fragmentation of peptides to photolesion production in modified DNA.	1.721		300	1.500	CESGA
Ángel Morales García	Effect of Water Coverage on the Properties of Realistic Anatase TiO ₂ Nanoparticles: Impact on the Photocatalytic Activity	507		300	600	CESGA
Anne DEJOAN	Direct numerical simulations of inertial particles settling in homogeneous turbulence	1.082		7.000	2.000	IAC
Anne Gosset	Two-phase Large Eddy Simulation of the jet wiping process	800		6.000		UV
Antoni Ramos Buades	Highly accurate gravitational wave signals from spinning eccentric black hole mergers	1.900		7.000	12.000	BSC/MN
Blanca Biel	Ab initio simulations of point-like defects in Janus 2D materials: electronic and STM characterization properties	95		1.000	1.000	IAC
Camilo Ruiz Méndez	Correlated double ionization on attosecond scale times with intense MidIR laser pulses	600		500	500	UV
Carles Serrat Jurado	Amplification of X-ray attosecond pulses	500		2.000	4.000	CSUC/PIR

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Carlos Hernández-García	Towards a new generation of X-ray lasers with controlled light angular momentum	3.000		4.000	4.000	BSC/MN
Carlos Martí Gastaldo	Titanium-organic frameworks based on siderophore-type linkers and effect over photocatalytic activity	414,72		800	800	BSC/MN
Carme Rovira	Elucidating mechanisms of glycosidic bond biosynthesis	717		10.300	10.300	BSC/MN
		132		10.300	10.300	BSC/P9
Carme Rovira Virgili	Mechanisms of carbohydrate-degrading enzymes for biomass conversion	717		12.300	12.300	BSC/MN
		131		12.300	12.300	BSC/MT
Carmen Jiménez	Direct numerical simulation of flames propagating in small devices: intrinsic and acoustic instabilities.	1.024		8.000	2.000	BSC/MN
César González	Kagome lattice instability in a Sn decorated Si(111) surface doped with alkali atoms	280		500	500	UAM
Cláudia Maria Pereira Cardoso	Electronic and structural properties of van der Waals layered materials	510		250	500	UZ
Coen de Graaf	Polioxovanadates adsorbed on Au(111): Conductivity as function of the oxidation state	1.000		40	100	BSC/MN
Cristina Díaz Blanco	Study of multiple conductance pathways in diphenylanthracene-like molecules	366		600	600	SCAYLE

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Cristina Montañola Sales	Distributing data for parallelizing multiblock mode B algorithms		20	5	2	BSC/MN
Daniel Argüeso Barriga	Maritime Continent rainfall characteristics in a warmer climate		1.000	20.000	4.000	BSC/MN
Daniel Mira	Study of primary atomization with an entropy stable conservative level set method in the context of large-eddy simulation	1.200		10.000	15.000	BSC/MN
Daniel Muñoz-Santiburcio	Post-excitation dynamics of water ice irradiated by protons in space conditions		4.000	10.000	2.000	BSC/MN
Daniele Viganò	Relativistic compressible MHD turbulence for neutron star mergers	2.065		15.000	20.000	BSC/MN
David Torrents Arenales	Computation of the risk of disease associated with genomic variants using the largest genome-phenome public datasets	3.000		30.000	30.000	BSC/MN
David Torrents Arenales	CHARACTERIZATION OF STRUCTURAL GENOMIC VARIABILITY IN POPULTATION COHORTS		1.000	50.000	50.000	BSC/MN
Dr Anna Kimmel	Modelling defects at functional interfaces	8.053		50	300	BSC/MN
Edilberto Sánchez González	Gyrokinetic turbulence simulations in stellarators with EUTERPE	4.000		18.000	2.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Eliseo Ruiz Sabin	Spintronic Devices based on Monolayers of Spin-Crossover Molecules deposited on Graphene/Cu substrates and E-GaN top electrodes	1.000		120	40	BSC/MN
Ernest Giralt	Discovery of p53 tetramer stabilization peptides	500		800	500	CENITS
Estelina Lora da Silva	COmputational Modelling under EXtreme conditions	1.400		20	64	BSC/MN
Eusebio Valero	Direct Numerical Simulation of turbulent wavy channel.	4.000		2	10	BSC/MN
F. Javier Luque	Mechanisms of protein regulation: Isoform selectivity in the activation of AMPK by direct activators	2.488		1.000	1.000	BSC/MN
		77		4.000	1.500	BSC/MT
Fco. Javier Salvador Rubio	Using Direct Numerical Simulation to study the smallest turbulent structures on the atomization process.		500	10.000	12.000	BSC/MN
Federico Calle-Vallejo	Tuning Cu surfaces for carbon monoxide electroreduction to C2 species	1.209,60		200	300	SCAYLE
Fernando Martín	Molecule dynamics on graphene/Ru(0001)	475		300	500	BSC/MN
Fernando Martín García	Atomic and molecular dynamics induced by attosecond pulses	1.500		300	2.500	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Francesc Illas i Riera	Boosting the catalytic activity of transition metal carbides towards methane activation by nanostructuring	1.428		800	1.500	BSC/MN
Francesc Illas Riera	Two dimensional transition metal carbides (MXenes) as potential catalysts for CO2 conversion to CO	622		300	600	IAC
Francesc Viñes Solana	Deoxygenation Reactions on Mo2C Based Catalysts	651		300	500	UMA
Francesc Viñes Solana	Oxidation Landscape on Transition Metals	216		300	500	CSUC/CAN
Francesc Viñes Solana	Unraveling the Morphological and Topological Key Aspects of Metal Nanoparticles Stability		1.500	300	600	BSC/MN
Francesc Xavier Trias Miquel	Exploring nonlinear subgrid-scale heat flux models for buoyancy driven flows	1.700		256	4.096	BSC/MN
Francesca Peiró	DFT simulations on the study of the dielectric function of novel nanostructured materials	100		1.000	1.000	CESGA
Francesco Luigi Gervasio	Aurora kinase A: towards the understanding of inhibition mechanism	2.592		5.000	7.000	BSC/MN
Gemma Boleda	AMORE: A distributional MOdel of Reference to Entities	27	50	800	24	BSC/MT

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Geraint Pratten	Waveform Systematics for Golden Binary Black Holes in O3	5.644,80		5.000	25.000	BSC/MN
Gerasimos Konstantatos	Engineering of non-toxic chalcogenide materials for low cost and efficient photovoltaic applications	750		1.000	500	BSC/MN
German Sastre	CO2 reduction using supported graphene as catalyst	307,20		100	100	BSC/MN
Gregorio García	Relationship between thermoelectric features and dimensionality in monochalcogenide compounds	714,24		500	1.000	CENITS
Grigory E. Astrakharchik	Bose polarons in ultracold atoms	400		100	10	BSC/MN
Gustavo Yepes Alonso	The Marenstrum Numerical Cosmology Project: Grand Challenge simulations of structure formation in the Universe	3.000		45.000	45.000	BSC/MN
Horacio Pérez-Sánchez	Discovery and design of conformational modulators in blood coagulation	500		5.000	5.000	BSC/P9
Hristiyan Aleksandrov Aleksandrov	Surface and Subsurface Diffusion of Monoatomic Carbon Species on Transition Metal Surfaces and Nanoparticles	890		400	300	UC
Ignacio Pagonabarraga	Emerging morphologies and pattern formation in active matter	4.900		20.000	20.000	BSC/MN
Ion Errea	Quantum Effects on Superconducting Hydrides	5.400		400	2.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Ivette Rodríguez	Effects of dimples on the boundary layer development of airfoils at moderate Reynolds number	2.212		2.000	11.000	BSC/MN
Ivone Jiménez-Munt	Geodynamic modelling of the Westernmost Mediterranean and the Iberia Peninsula region- Part 2 - Period 2	1.500		2.400	2.400	BSC/MN
Javier Carrasco Rodríguez	Insights into transition metal migration in layered oxide cathodes for Na-ion batteries: NaFeO ₂ as a case study	405		450	375	BSC/MN
Javier Carrasco Rodríguez	Role of Ti doping in the enhancement of Na-ion mobility in Na _{2/3} Mn _{0.9} Fe _{0.05} Ti _{0.05} O ₂ cathodes for Na-based batteries	600		450	500	BSC/MN
Javier LLorca	Multiscale Modelling of Precipitation Strengthening in Metallic Alloys	1.000		1.000	500	UMA
Javier Principe	Embedded multilevel Monte Carlo for uncertainty quantification in complex random domains	200		500	5.000	BSC/MN
Javier Trujillo Bueno	The scattering polarization of the H-alpha line as a diagnostic tool of the upper solar chromosphere	2.000		9.000	150	BSC/MN
Joan Torras Costa	Modeling of biological processes for blood analysis and their interaction with the sensing surface	55		768	640	BSC/MT
Joaquim Rigola Serrano	DNS of mass transfer in bubbly flows with high Peclet number		1.000	2.048	2.048	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Joaquin Mateo	Barcelona		50	10.000	2.000	BSC/MN
Jordi Martí Rabassa	Anchorage of a GDP-bound K-RAS protein at a di-myristoil-phosphatidyl-choline cell membrane	7.000		2.000	200	BSC/MN
JOSE A MARTINEZ GONZALEZ	Understanding the Dynamical Behaviour of Water Close to Phospholipid Monolayers using Classical Dynamics Simulations	120		1.024	500	UC
José Carlos Conesa Cegarra	Computing Electron Paramagnetic Resonance parameters for superoxide species on ceria surfaces	120		20	40	CSUC/PIR
Jose Guilherme Vilhena Albuquerque D'Orey	Nanotribology of aromatic molecular chains over a gold surface	180		3.000	3.000	BSC/P9
José Manuel García Regaña	High-Z impurity neoclassical transport in W7-X	4.000		2.000	2.000	BSC/MN
Josep Lluís Gelpí Buchaca	Analysis of the dynamic behavior, allosteric mechanism and pathogenicity of pyruvate kinase through biomolecular simulations	2.268		18.000	18.000	BSC/MN
Josep M Bergada Granyo	Evaluation Of The Feedback Channels Performance On Fluidic Oscillators, Compressible Flow Effects Under Subsonic Conditions At High Mach Numbers. Extension.	1.400		6.192	6.192	SCAYLE

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Josep M Bergadà Granyó	Square cylinder with a detached splitter plate in front of it and with several velocity ratios	518		2.048	2.048	SCAYLE
Juan Ignacio Beltrán Fínez	Ab-initio based data mining techniques for studying the emergent phenomena in La _{1-x} Sr _x MnO ₃ /BaTiO ₃ heterojunctions	200		100	700	CENITS
Juan Ignacio Beltrán Fínez	Role of disorder in emergent phenomena at ruthenate oxide heterojunctions	160		100	700	CSUC/PIR
Julio García Espinosa	Simulation of Ship Navigation in Ice	480		2.048	4.000	UV
Konstantin NEYMAN	Atomic ordering in bimetallic nanoparticles of fcc-type: Pt-Ni	499,20		1.200	1.200	UV
Linda Angela Zotti	Incorporating single proteins in solid-state devices		400	600	600	BSC/MN
Lluís Blancafort	Modelling morphochromism in tetrafurylethylene	600		100	100	CSUC/PIR
Luis González MacDowell	Computer aided design of chiral gold nanocrystals for plasmonic applications.	1.150		2.048	2.048	BSC/MN
Luis Rodríguez Santiago	Modeling the Oxygen evolution reaction on MO ₂ (M = Ru or Ir) rutile like nanoparticles	500		500	1.500	BSC/MN
Manel Soria	On the aeroacoustic noise radiated by a cavity at low Mach number		500	1.024	11.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Manuel A. Ortuño	Metal-Organic Frameworks for Electrochemical Applications	903,17		500	500	BSC/MN
Manuel Garcia-Villalba	Numerical simulation of fast transverse maneuvers	632		8.000		BSC/MN
María Jesús Esteban Parra	Near-term climate change: Regionalized decadal prediction for the Iberian Peninsula. Soil-atmosphere interactions on water resources	983		6.000	3.000	UV
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	CO2 valorisation via the reversed water-gas shift reaction	1.497,60		500	500	BSC/MN
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Searching for improved catalysts for the direct conversion of methane to methanol	1.079,68		400	400	BSC/MN
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	CeO2 facet-dependent CO adsorption	1.973,38		400	400	IAC
Marta Reynal Querol	Computing pixel base socio-economic measures to analyze economic development	300		10.000	10.000	BSC/MN
Martin Obergaulinger	Extreme stellar core collapse across the mass range	1.200		100	10.000	UV
Martine Bosman	Monte Carlo Simulation for the ATLAS Experiment at the CERN LHC (phase II)		700	3.000	3.000	BSC/MN
Michele Iovieno	The role of thermal inertia on the condensational growth of droplets in turbulent flows.	600		5.000	7.000	IAC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Miguel Alonso Pruneda	Enhanced Oxygen Ionic Transport on Manganite Surfaces	920		80	50	BSC/MN
Miguel Alonso Pruneda	Carbon-based porous nanostructures in complex environments for gas detection	1.380		80	50	BSC/MN
Miguel Ángel Aloy Torás	The force-free evolution of magnetospheres of compact objects	900		100	1.000	BSC/MN
Modesto Orozco López	MODEL-tox. Construction of an MD library of toxicology relevant proteins in the human proteome - HROT	3.360		1.000	1.000	BSC/MN
Octavio Roncero Villa	Quantum dynamics of reactions of complex organic molecules at the low temperatures of interstellar media	2.000		50	50	SCAYLE
Paolo Padoan	The Effect of Ambipolar Drift on the Stellar Initial Mass Function	4.900		80.000	45.000	BSC/MN
Patricia Tissera	Chemo-dynamical properties of galaxies and the cosmic web - CIELO	7.372,80		400	500	BSC/MN
Pau Figueras	Instabilities of rotating higher dimensional black holes: the final picture	2.500		8.000	8.000	BSC/MN
Pedro José Martínez Ferrer	Numerical Simulations of Shock-Induced Combustion Phenomena: Effects of Thermochemical Properties and Transport	400		18.000	18.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Pep Covas	All-sky searches of continuous gravitational-wave signals from spinning neutron stars in binary systems	100		4.000	4.000	BSC/P9
Pilar Hernández	Meson Interactions at large Nc	1.300		3.000	1.000	BSC/MN
Raffaele Bernardello	The Coupled Climate-Carbon Cycle Model Intercomparison Project (C4MIP). BSC contribution with the Earth System Model EC-Earth.	4.800		2.000	10.000	BSC/MN
Ramon Bevide	Evaluation of Interconnection Networks based on Random Graphs	40		20	10	BSC/MN
Ramón Cuadrado del Burgo	Long-range magnetic order enhancement in core/shell bi-magnetic nanosystems	150,59		100	4	BSC/MN
Raúl Payri Marín	Suitability of different atomization and breakup models for LES numerical simulations of the fuel injection in a LDI burner	300			10.000	UC
Riccardo Rossi	Scalable distributed MultiLevel MonteCarlo workflow design	300		2.000	2.000	BSC/MN
Roberto Iglesias	Influence of grain boundaries on the behavior of hydrogen and helium coexisting in tungsten	640		2.000	1.000	UZ
Roberto Robles Rodríguez	Ab-initio study of the dynamics of supramolecular assemblies.	1.140		200	20	CESGA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Roger Estrada-Tejedor	Structural Basis for Activation of ZAP-70, a key target for targeting peripheral T-cell lymphomas	35		1.000	200	BSC/MT
Roger Guimera	Deep learning for metabolite annotation	32		10	10	BSC/MT
Ruben Perez Perez	Sequence dependence of the structural properties of dsRNA	247		6.000	6.000	BSC/MT
Rubén Pérez Pérez	Non-covalent molecular interactions studied by atomic force microscopy: hydrogen and halogen bonds	116		3.000	3.000	BSC/MN
Santiago González de la Hoz	ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities (Phasell)	2.000		3.000	3.000	CENITS
Santiago I. Badia Rodríguez	Leveraging parallel adaptive mesh refinement and unfitted finite element methods for the high-fidelity heat transfer analysis of metal additive manufacturing	400		400	4.000	BSC/MN
Sascha Husa	Modelling a competition of mass ratio and spin terms for gravitational waves from coalescing black holes	3.600		8.000	12.000	BSC/MN
Sergio HoyasCalvo	Passive scalars in turbulent channel flow	4.500		200	5.000	BSC/MN
Shimpei FUTATANI	Non-linear MHD modelling of pellet injection for ELM control in fusion plasmas	720		1.500	20.000	BSC/MN
Shimpei FUTATANI	Kinetic-MHD hybrid simulations for fast particle physics in tokamaks and stellarators		500	500	15.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Stefan Bromley	Probing 2D Materials based on Radical Building Blocks under Realistic Conditions	1.520		1.000	3.000	UV
Stefan Bromley	Understanding the structure and vibrational spectra of realistic silicate nanoparticles: linking theory and observation	1.040		1.000	1.000	UMA
Stefan Bromley	Developing Realistic Models of Titanium Carbide Nanoparticles	490		1.000	1.000	UMA
Victor Homar Santaner	Probabilistic forecasts of severe weather in the Western Mediterranean: Benefits of stochastic physics	3.560		30.000	500	BSC/MN
Xavier Barril	Structural stability as a predictor of activity cliffs in protein-ligand complexes	500		3.000		BSC/MN
		200		5.000		BSC/P9
Xavier Cartoixà Soler	Electron-phonon interaction in van der Waals layered materials	1.700		480	120	UC
Xavier Luri Carrascoso	Gaia: Cyclic Data Processing and Catalogue Simulations	1.296		450.000	350.000	BSC/MN

6. Siguietes 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.