

# 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 2023

Barcelona, Febrero 2023

## 1. Introducción

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

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

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

## 2. Análisis

La RES ha asignado este período 316,0 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-CNS), 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 Mayo 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, el cual 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](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 dos 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](mailto: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 se han asignado 26 millones de horas de cómputo a las 5 peticiones relacionadas COVID-19 recibidas, lo que representa un 8% 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	200		500	1.000	UV
Albert Bruix	Grand canonical global optimization of late transition metal particles under reaction conditions	871,20		1.000	1.000	BSC/MN
Albert Poater	Improving Ziegler-Natta catalysts for polyolefin production	580,60		600	600	BSC/MN
Albert Poater	Single atom metals embedded on two-dimensional g-C <sub>3</sub> N <sub>4</sub> for Hydrogen evolution reaction: Surface or Monolayer?	691		600	600	BSC/MN
Albert Rimola	Heterogeneous Astrocatalysis of Space-Abundant Transition Metals. A computational Approach	1.200		200	300	BSC/MN
Albert Rimola	Computational modeling of interstellar olivine surfaces and their interaction and reactivity with HCN	1.500		200	300	IAC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Alicia Palacios	Non-linear effects in ultrafast molecular processes induced by free electron lasers	2.000		100	5.000	BSC/MN
Anders Lanzén	Assembly of metagenome and metatranscriptome sequence data for the microbial ecology focussed project MicroMon	50		5.000	20.000	BSC/MN
Andres Pacheco Pages	Monte Carlo Simulation for the ATLAS Experiment at the CERN LHC at the MareNostrum by IFAE/PIC Tier-1	5.550		8.000	8.000	BSC/MN
Ángel Morales García	Structural and Electronic Properties of TiO <sub>2</sub> /MXenes Heterostructures	705		500	500	SCAYLE
Angel Morales-García	CO dissociation on MXenes: Implications in Heterogeneous Catalysis	743		300	500	SCAYLE
Anne DEJOAN	Numerical study of the propagation patterns of ultra-lean hydrogen-air flames in Hele-Shaw chambers	2.160		3.500	3.500	BSC/MN
António Costa	Dynamical magneto-electric effect in 2D materials and heterostructures	333		50	500	BSC/MN
Antonio Picón	Excitonic corrections to the bulk photovoltaic effect in two-dimensional crystals	921,60		2.000	2.000	BSC/MN
Beatriz Trénor Gomis	Computational Mechano-Electric Model of the Human Diseased Heart	4.750		20.000	10.000	BSC/MN



Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Carles Calero Borralló	Self-thermophoresis at the nanoscale	702		100	30	UZ
Carme Rovira	Unveiling mechanisms of heparin precursor biosynthesis	2.688		40.600	30.600	BSC/MN
Carme Rovira	Modeling the hydrolysis of macroalgae polysaccharides by marine bacteria	80	50	40.600	30.600	BSC/P9
		3.584		40.600	30.600	BSC/MN
Carolina Estarellas	Metadynamics simulations for the study of the mechanical plasticity: towards the understanding of isoform selectivity	845		3.000	2.000	BSC/MN
César González	Simulations of carbon-based electrodes for a new generation of more efficient bateries	110		500	500	UC
Claudio Cazorla Silva	Nano-structured multifunctional materials for solid-state cooling	6.000		200	400	BSC/MN
Coen de Graaf	GronOR, a massively parallel and GPU-accelerated code for non-orthogonal configuration interaction	5,50		2.000	2.000	BSC/AMD
Daniel Argüeso	Mesoscale air-ocean interactions and their role in precipitation extremes over the western Mediterranean	1.000		30.000	10.000	UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Daniel Argüeso Barriga	New modelling approaches to investigate precipitation extremes in the Mediterranean.	2.000	600	30.000	10.000	BSC/MN
Daniel Muñoz-Santiburcio	Electron Irradiation of water by first-principles simulations	1.728		10	20	UMA
David Expósito Singh	Modelling COVID-19 propagation scenarios for health authority decision making	400		500	500	UV
David Keitel	Gravitational-wave parameter estimation and identifying candidates for gravitational lensing	1.700		2.000	5.000	UMA
David Soriano Hernández	Magnon spintronics in van der Waals heterostructures	100		2.000	3.000	BSC/MN
Dra. Isabel Suárez Fernández	Critical Phenomena in the collapse of vacuum gravitational waves.	300		1.000	20.000	UMA
Edilberto Sánchez González	Simulating turbulent transport in stellarators with the global gyrokinetic code EUTERPE	70	90	24.000	20.000	BSC/P9
		6.000		24.000	20.000	BSC/MN
Eduardo Moreno-Chamarro	How sensitive is the North Atlantic climate to the magnitude of future ice sheet melting in ultra high resolution coupled models?	9.972,80		1.000	40.000	BSC/MN
Elena B. Martín Ortega	Segregation assessment in the manufacturing process of metal powder cored-wire	2.500		10.000	5.000	CENITS

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Elisa Jimenez Izal	Fight the CO poisoning on the catalysts to improve the performance of proton exchange membrane fuel cells	1.500		1.500	4.096	NASERTIC
Eliseo Ruiz	Transport in Single-Junction Devices with viologen/TCNQ@cucurbituril Systems	950	100	120	4	BSC/AMD
Enza Di Tomaso	Benchmarking ensemble data assimilation of atmospheric composition for reanalysis applications	4.543,81		60.000	200.000	BSC/MN
Ernane de Freitas Martins	Electron transfer in self-assembled monolayers: insights from a multiscale approach	900		2.000	2.000	BSC/MN
FABIO PASIN	Database mining for deep plant virome evolutionary tracing and synthetic biology applications (DeeVir)	195		150	20.000	CSUC/CAN
Felix Garcia Carballeira	Development and Evaluation of Ad-hoc Storage Parallel File systems II	210		2.048	4.096	BSC/ARM
		1.024		4.096	4.096	BSC/MN
		192		2.048	4.096	UMA
Fernando Martín García	Attosecond electron dynamics in molecules	2.700		500	55.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Fernando Martín García	Engineering electric conductivity in indenofluorene	1.602		300	900	BSC/MN
Francesc Viñes Solana	Alkyne and olefin selective hydrogenation using Mo <sub>2</sub> C MXene; hydrogenation vs. diffusion	1.484		500	700	BSC/MN
Francesc Viñes Solana	Stacking and Partial Oxidation Effects on the Reverse Water Gas Shift Reaction by MXenes	456		300	500	SCAYLE
Francesc Viñes Solana	Excited State Water Splitting on ZnO Surfaces	1.880		400	600	BSC/MN
Francesc Xavier Trias Miquel	Can we hit the ultimate regime of thermal turbulence using LES simulations at low Prandtl numbers?	4.850		256	24.576	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	300		100	20.000	UMA
Gregorio García	STUDY OF HOST-GUEST INCLUSION COMPLEXES BETWEEN THE $\beta$ -CYCLODEXTRIN AND DRUGS EMPLOYED AGAINST ALZHEIMER'S DISEASE	450		500	1.000	UZ

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Grigory Astrakharchik	Ab initio simulation of impurities in quantum gases	2.000		100	20	UC
Horacio Andres Vargas Guzman	Adsorption Energies for the Spike Protein RBD of the WT, Delta and Omicron variants onto Substrates with manifold polarities and Salt dependent Environments	69,55		6.000	7.000	CESGA/FT3
		129,17		6.000	7.000	CESGA/FT3-GPU
Hussien Helmy Hassan Osman	High pressure studies of promising AGa <sub>2</sub> X <sub>4</sub> (A = Eu, Pb, Ca, Sr; X = S, Se) hosts for phosphor materials	2.672,64		300	5.000	SCAYLE
Ignacio Pagonabarraga	Complex flows and emerging structures in active and driven soft matter	20	30	20.000	2.000	BSC/P9
		10.000		100.000	100.000	BSC/MN
Iñaki Tuñón	Fighting Resistance Mechanisms in SARS-CoV-2 Main Protease. Design of Inhibitors for Enzyme Variants.	260		12.000	14.000	BSC/P9
		8.000		12.000	14.000	BSC/MN
Inés Corral Pérez	Disclosing the complete photodynamical profile of the native nucleobase uracil	1.200		900	1.500	BSC/MN
Irina Lebedeva	Achievement of quantum anomalous Hall effect in transition metal dichalcogenides by magnetic proximity effect	500		100	100	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Isaac Alcón	Evaluating nanoporous graphenes as future platforms for carbon integrated single-molecule electronics	230,40		1.000	250	UV
Iván Carrillo-Berdugo	Linear siloxane-based nanofluids: a look at the relation between thermal properties and chemical interactions at solid-liquid interfaces	1.000		512	1.024	UC
Ivette Rodriguez	Coherent structures identification on a high-lift wing	537		2.000	20.000	BSC/MN
Javier Carrasco Rodríguez	Modelling reactive interfaces in solid-state batteries	505		900	700	SCAYLE
Jeremias Likerman	Geodynamic modeling of subduction zones. Case studies: Andes cordillera flat slabs and slab tearing.	1.250		2.400	4.800	BSC/MN
Jessica Rodriguez Villar	Nucleosomal DNA binding by artificial transcription factors	115,20		1.000	1.000	CESGA/FT3-GPU
Joan Calafell Sandiumenge	Urban flow and pollutant dispersion prediction in urban environments with vegetative canopy effects through advanced deep learning techniques	2.898		6.000	10.000	BSC/MN
Joaquim Rigola, and Nestor Balcazar-Arciniega	DNS of mass transfer in gravity-driven turbulent bubble swarms: Effect of density ratio and viscosity ratio	3.100		3.072	3.072	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jordi Solé Ollé	Biogeochemical Climate Projections across the NW Mediterranean Sea	284		50.000	2	BSC/MN
Jordi Ventosa Molina	Vortex breakdown in a circular cylinder wake and transition to far wake	700		1.024	10.240	UC
Jordi Villà Freixa	EVB simulations of compensatory adaptations in mammalian oxidoreductases	400		4	4	IAC
Jorge Macías Sánchez	Improvement of the Spanish Tsunami Early Warning System using Machine Learning techniques	920		14.500	1.500	BSC/P9
Jose Angel Silva Guillén	Precise characterization of the low temperature structures of vanadium oxides	9.998,40		500	10.000	BSC/MN
Jose J. Plata	Computational modelling of the lattice thermal conductivity of skutterudites under pressure	800		1.000	1.000	CENITS
Jose Maria del Peso Malagon	ATLAS (LHC) simulation of detector response to proton-proton collisions (UAM_m3y2023)	1.700		1.500	4.000	BSC/MN
Josep Flix Molina	MC Simulation for the CMS Experiment at the CERN LHC	7.500		200.000	10.000	BSC/MN
Juan José Palacios Burgos	Phonon-assisted ballistic current in photovoltaic topological materials	1.500		20	500	UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Juan Vicente Alegre Requena	A Computational Study of the Photophysical Properties of Oxazolones	300		200	500	CESGA/FT3
Kacper Drużbicki	Metastable and active carbon-based materials for the storage and management of clean energy	1.364		2.000	2.000	CIEMAT/XULA
Karolina Zofia Milowska	A search for new 2D surfactants	180		10.000	10.000	CIEMAT/TURGALIUM
Konstantin NEYMAN	Studying Dynamic Formation of Ordered Oxygen Phases on Nanoporous Gold Using Static DFT and ab initio Molecular Dynamics Simulations	360		1.100	1.100	SCAYLE
Leonardo Manuel Pachano Prieto	Numerical study on the effect of hydrogen enrichment of a lean natural gas flame in a gas turbine model combustor	2.500		5.000	5.000	BSC/MN
Leonor Chico	Theoretical modeling of the optoelectronic properties of the transition metal dichalcogenide ReS <sub>2</sub>	20		150	80	CESGA/FT3
Lluís Jofre Cruanyes	Direct numerical simulations of microconfined high-pressure transcritical fluid turbulence	500		1.024	10.240	CESGA/FT3-GPU
M Ángeles Pérez García	Advancing many-body properties of Neutron Star crusts: Equation of State and transport coefficients at finite temperature	40	40	10	10	CIEMAT/TURGALIUM



Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Maciej Lewenstein	Entanglement transitions and topology in equilibrium and non-equilibrium quantum many-body systems II	2.500		4.000	4.000	BSC/MN
Marcel Swart	A new twist to an old story: reactivity of the first characterized high-valent metal-oxo species	864		500	600	UMA
Marcel Swart	Metal-metal bonds waiting to be discovered	272,16		600	600	UMA
Marcos Carreres Talens	Gathering data on kerosene primary breakup through VOF-LES in simplex pressure-swirl atomizers toward the evaluation of Sustainable Aviation Fuels	800		8.000	12.000	BSC/MN
Maria Fumanal	Molecular Engineering of 2D Covalent Organic Frameworks for Optoelectronic Applications	573		200	1.000	CSUC/PIR
María Gonçalves Ageitos	Significance of mineral dust composition towards aerosol radiative forcing in Earth System Models	3.949		51.440	170.800	BSC/MN
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Tuning Selectivity in the Direct Conversion of Methane to Methanol over NiAu/CeO <sub>2</sub> catalysts: The roles of geometric ensemble effects and water	1.765,44		500	500	BSC/MN
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	CO <sub>2</sub> hydrogenation to methanol over Cu- and Ga-containing catalysts: Insights into the roles of metal and promoter	921,60		500	500	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Study of the hydrogen peroxide reactivity on Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> (111) and (001) surfaces in an aqueous environment	1.029,12		500	500	IAC
Marisa Montoya	Modelling climate-cryosphere interactions	150		5.000	10.000	UC
Martin Obergaulinger	Early jets in magnetorotational core-collapse supernovae	4.500		2.000	30.000	BSC/MN
Miguel Pruneda	nanocrystalline silicon for opto-electro-mechanical applications	1.382		1.000	1.000	BSC/MN
Miguel Pruneda	DX centers in LAO/STO quantum wells	319		1.000	1.000	BSC/MN
Mikel Valle	Cryo-EM guided development of antiviral compounds for chemical control of flexible filamentous plant viruses	36		15.000	2.000	CESGA/FT3-GPU
Milton Ruiz	Studies In Theoretical Astrophysics and General Relativity	6.912		50.000	30.000	BSC/MN
Miquel Solà Puig	Data driven investigation on fullerene-perovskite systems for solar cell applications	1.088		900	1.000	BSC/MN
Miquel Solà Puig	Creating functional nanoscale devices based on 2D materials	465		600	600	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
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	Exploring medium-size membrane-containing viruses by high-resolution cryo-electron microscopy	1.267,20		3.000	3.000	UMA
Nicolas Guil	Lightweight Structure-Aware Attention for Visual Understanding	543	185	5.000	1.000	CESGA/FT3-GPU
Nuria Lopez	Modeling of materials for chemical and energy applications: from detailed atomistic knowledge to reactor function	11.142,14		6.144	6.144	BSC/MN
Oriol Lehmkuhl	On the development of new data driven models for improving pollutant dispersion modeling in urban environments	527,83		12.000	12.000	CESGA/FT3-GPU
Pablo Gamallo	DFT study of CO2 methanation on Ni <sub>x</sub> /CeO <sub>2</sub> catalyst	990,72		900	1.500	CSUC/PIR
Pablo Ordejon	Electrode's potential effects on the interaction between corrosion inhibitors and metallic/aqueous interfaces	4.424		2.000	3.500	BSC/MN
Pedro Alejandro Sánchez Murcia	Computer-aided protein design based on the calculations of reaction energy barriers	1.200		41.920	41.920	CIEMAT/TURGALIUM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Pedro Velarde Mayol	Inertial Confinement Fusion and Astrophysics Laboratory targets simulations	1.200		200	100	UMA
Pere Santamaria Vilanova	Epigenetic and transcriptional regulation of a novel T-follicular helper (TFH)-to-T-regulatory type-1 (TR1) cell differentiation pathway	22		10.000	1.000	CSUC/CAN
Pilar Hernández	Tetraquark resonances at large Nc	2.680		8.000	6.000	BSC/MN
Qinghua Liao	Elucidating mechanisms of glycogen biosynthesis by human glycogenin 1 (hGYG1) using computer simulations	864		16.800	16.800	BSC/MN
Raimon Luna i Perelló	Compact Object Binaries in Einstein-Proca and Einstein-Scalar Theories	2.000		8.192	1.024	BSC/MN
Ricardo Díez Muiño	Attosecond-resolved photoemission from two-dimensional materials	5.736		1.000	5.000	BSC/MN
Riccardo Rurali	Phonon Database Generation and Analysis for Data Driven Materials Discovery	7.502,40		500	4.000	CESGA/FT3
Riccardo Rurali	Thermal conductivity of paramagnetic systems	4.608		500	5.000	UMA
Robert James Perry	Calculation of Fourth Mellin Moment of Pion Light Cone Distribution Amplitude from Lattice Quantum Chromodynamics	3.760	2.000	3.072		BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Roberto San Jose García	Localized climate and air pollution scenarios from CMIP6 global climate model outputs using dynamical downscaling techniques to support EU project DISTENDER activities	4.152,40		20.000	30.000	UV
Salomé Llabrés Prat	Unravelling the mechanism of cholesterol transport through the NPC1L1 protein	1.800		6.000	3.000	BSC/MN
Salvador Cardona Serra	Theoretical Design of Molecule-based Materials	300		250	1.000	UV
Santiago Avila	A new cosmological simulation to validate the capability of Euclid and DESI to measure the initial conditions of the Universe.	1.000		74.000	44.000	BSC/MN
Santiago González de la Hoz	ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities (IFIC Phase IX)	3.850		4.000	4.000	BSC/MN
Sascha Husa	Simulations of the coalescence of high mass ratio precessing black hole binaries	9.800		12.000	35.000	BSC/MN
Sergio Posada Pérez	Predictive catalysis: From hydroformylation reaction to general applications in catalysis	797		600	600	BSC/MN
Sergio Posada Pérez	Interfacial properties of fullerene-perovskites using Non-collinear DFT calculations	870,90		900	900	IAC
Sergio Zlotnik	Real-time dynamic prediction of wind-induced forces in vehicle platooning	400		30	8.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Silvia Acosta Gutiérrez	Ligand-induced allostery controls membrane deformation and endocytosis	3.480		7.000	6.000	UAM
Silvia Bonoli	Simulating the birth-site of the first galaxies and supermassive black holes	2.000		3.000	3.000	BSC/MN
Stefan T. Bromley	Electric Field Control of Magnetism in 2D Organic Materials	783		400	800	UV
Stefano Olivieri	Influence of free-stream turbulence on the aerodynamics of flapping wings	1.080		2.000	2.000	UMA
Thomas C. Blum	Light quark vacuum polarization at the physical point and contribution to the muon's anomalous magnetic moment	8.000		100	400.000	BSC/MN
Tomas Andrade	Numerical Relativity simulations for eccentric black hole mergers and their gravitational waves	1.920		100	3.500	BSC/MN
Tomas Marques Bonet	Primate Conservation Genetics Consortium	6.000	3.000	1.000	700	BSC/MN
Vasilis Riziotis	High-fidelity aeroelastic simulations of a wind turbine blade undergoing vortex induced vibrations (VIV)	6.000		5.000	20	BSC/MN
Vicent Moliner	Towards the Design of Efficient Inhibitors of SARS-CoV-2 Mpro Variants	6.739,20		500	2.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Victor Guallar Tasies	Integrative computational modeling pipeline to detect molecular glues	120	100	9.000	5.000	BSC/P9
		2.000		15.000	6.000	BSC/MN
Weiguang Cui	The THREE HUNDRED GALAXY CLUSTERS PROJECT: Next generation of high-resolution galaxy cluster simulations with GIZMO-SIMBA	5.529		150.000	60.310	BSC/MN
Xavier Barril	Discovery of novel VHL binders for the development of better PROTAC molecules	160		5.000		BSC/MN
Xavier Luri Carrascoso	Gaia: Calibration and Image parameters determination iterations for the fourth data reduction cycle and early cycle five processing	8		100	100	BSC/P9
		5.725		500.000	500.000	BSC/MN
Xavier Vilasis-Cardona	LHCb-Dirac at the BSC-HPC	1.200		1.000	5.000	BSC/MN
Xurxo Costoya	Dynamical downscaling of global climate models from CMIP6 project in the North Atlantic	800		30.000	30.400	IAC

## 6. Sigüientes pasos

Se dispone de un entorno web para poder acceder durante el periodo a toda la información relacionada con la actividad.

Está disponible a través de la web: <http://www.bsc.es/RES>. Es una zona protegida, que puede accederse con el correo electrónico del líder de la actividad, o de la persona que presentó la solicitud.

Desde esta zona, que está en construcción y evolución, se puede:

- Dar de alta a los usuarios/investigadores que participan en esta actividad. Se hace de forma automática, pero es imprescindible firmar el documento y devolverlo por correo antes de 15 días de dar el alta. De otra forma se anulará el acceso al sistema hasta que se reciba la documentación. Esto debe realizarse tanto para los usuarios de actividades de continuación como para actividades nuevas.
- Consultar la información proporcionada por el comité de acceso.
- Consultar los recursos asignados para la actividad. Es importante comprobar que no hay errores en estos datos, ya que serán los que se apliquen en los diferentes sites.
- Analizar el consumo semanal de recursos.

Una vez rellenada la información, el equipo de soporte local del site de asignación se pondrá en contacto con los usuarios para proporcionar la información necesaria.