

# 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 2021

Barcelona, Octubre 2021

## 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 207,4 millones de horas, que se obtienen sumando todas las horas de las diferentes arquitecturas, incluyendo las horas de prioridad A y prioridad B. Estas horas incluyen las máquinas instaladas en Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación (BSC), Instituto Astrofísico de Canarias (IAC), Universidad de Cantabria (UC), Universidad de Málaga (UMA), Universidad de Valencia (UV), Universidad de Zaragoza (UZ), Fundación Pública Galega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia (CESGA), Consorci de Serveis Universitaris de Catalunya (CSUC), CénitS-COMPUTAEX (CENITS), Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE), Universidad Autónoma de Madrid (UAM), Navarra de Servicios y Tecnologías (NASERTIC), y Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT).

Todas las actividades han sido evaluadas por los paneles de expertos, clasificando las solicitudes según si eran excelentes, muy buenas y buenas. Adicionalmente, se han tomado en consideración los criterios de evaluación descritos en la Sección [Comentarios sobre la evaluación](#).

Con las actividades excelentes de mayor prioridad, se cubre el uso teórico de las máquinas de la RES para el próximo período de 4 meses. Algunas actividades calificadas como excelentes no han podido recibir recursos por la gran cantidad de demanda recibida, y sólo han podido recibir horas sin prioridad.

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

A la mayoría de actividades que han obtenido recursos, se han asignado horas de uso de las máquinas de la RES con utilización preferente. El resto de actividades que han obtenido recursos, es con utilización no preferente (es decir, utilizando las horas cuando estas no sean usadas por las actividades preferentes, con lo que no se puede garantizar que puedan usar las horas asignadas).

Las actividades que no reciben horas de utilización al sistema no podrán disponer de acceso al mismo. Todas estas actividades recibirán un e-mail indicando que no ha sido posible concederles acceso a las máquinas en esta oportunidad. Se anima a todos los solicitantes a presentar solicitud de acceso para la siguiente convocatoria, que iniciará la evaluación el próximo mes de Enero de 2022.

Al estar utilizando procesadores de la misma familia x86, pero con diferentes rendimientos, se ajustan las horas asignadas en función de la máquina indicada en la petición y la que finalmente se ha podido asignar. Esto puede aparecer como un incremento o decremento de horas, pero se indica en las observaciones de la revisión.

Para mejorar como se comparten los recursos asignados entre las diferentes actividades, y evitar así las concentraciones de uso de máquinas en determinados periodos de tiempos, se requiere la utilización proporcional de los recursos asignados. Así, si una actividad no utiliza la parte proporcional asignada en un periodo determinado, quedará reducida la asignación total de forma proporcional. Por ejemplo, si de una asignación de 400 mil horas en cuatro meses, no utiliza cerca de 100 mil horas el primer mes, su asignación para el periodo completo será reducida a 300 mil. De la misma forma, se reducirá la prioridad de acceso a las actividades que sobrepasen su asignación proporcional en cada periodo de tiempo. Por ejemplo, si de una asignación de 400 mil horas en cuatro meses, se utiliza cerca de 200 mil horas el primer mes, se irá reduciendo la prioridad de los diferentes trabajos en el sistema para que la prioridad regularice el consumo.

Así mismo, las horas no consumidas en el período no se pueden acumular para próximas convocatorias.

La utilización se medirá según "*elapsed time*", considerando la utilización por el número de procesadores asignados. Por ejemplo, si se debe asignar el uso en exclusiva de un nodo (que tiene varios procesadores, dependiendo de la máquina) durante 1 hora, se considerará el uso de 48, 24, 16, 8, 4 o 2 horas, dependiendo de la máquina.

### 3. Comentarios sobre la evaluación

El Comité de Acceso del BSC-CNS ha seguido los siguientes criterios para la evaluación de las actividades:

#### 1. Reglas generales

- a. La relevancia del proyecto científico en que se enmarca la actividad propuesta (20 %)
- b. La justificación de la actividad propuesta y de los cálculos a realizar en la RES para la consecución del proyecto científico global (30 %)

- c. La calidad científica del grupo solicitante (10%)
  - d. La experiencia y capacitación en el cálculo de alto rendimiento (10 %)
  - e. La necesidad real de supercomputación para realizar el cálculo (20 %)
  - f. La adecuación técnica del proyecto a la arquitectura de los recursos de la RES (10 %)
2. Evaluación de los resultados presentados por las actividades de continuación
- a. Publicaciones presentadas como resultado del acceso de actividades anteriores
  - b. Resultados técnicos obtenidos en los periodos anteriores
3. Utilización adecuada y completa de los recursos asignados en los periodos anteriores
4. Participación de grupos españoles en las actividades solicitadas
5. Actividad específica dentro de un proyecto de investigación. El acceso a los recursos de la RES corresponde a actividades específicas dentro de un proyecto de investigación, y no corresponden a agrupaciones de diferentes actividades de investigadores de comunidades virtuales.
6. Seguir adecuadamente las obligaciones adquiridas en la utilización de MareNostrum y los otros recursos de la RES
- a. Envío a la RES de copia electrónica de las publicaciones científicas en las cuales el uso de los recursos de la RES ha resultado determinante.
  - b. Mencionar explícitamente en las publicaciones científicas la ayuda del RES en su proyecto
  - c. Cumplimiento de las normas de utilización de los recursos de la RES y de las políticas de seguridad y confidencialidad determinados por la RES.

- d. No hacer negocio con los resultados obtenidos en los recursos de la RES bajo el formato “Investigación Pública”
  - e. Proporcionar anualmente información y documentación, como vídeos, presentaciones, y cualquier otro material, para ser utilizado como material divulgativo de la RES.
7. Dada la alta competencia por recursos y la cantidad total disponible de estos, se recuerda a los proyectos que necesitan grandes volúmenes de recursos, que la infraestructura europea PRACE ([www.prace-ri.eu](http://www.prace-ri.eu)) ofrece proyectos de cómputo a partir de 30 millones de horas de CPU anuales, disponiendo de dos convocatorias anuales para propuestas.

## 4. Consideraciones adicionales

### 4.1. Actividades industriales

Cualquier actividad industrial está sujeta a las mismas condiciones de calidad que las actividades de investigación pública. Todos los usuarios con actividades industriales, y con acceso a las máquinas de la RES deben pagar por el acceso a los recursos siempre que las actividades no sean incluyan en el concepto de Open R&D. El precio se calcula para cada una de las actividades que lo indiquen, teniendo en cuenta los recursos solicitados (humanos y técnicos) y el interés científico/económico de la actividad.

### 4.2. Política de uso de disco

En la actual resolución, se ha realizado asignación no sólo de tiempo de CPU, sino también de espacio de almacenamiento. Se ha tenido en cuenta el espacio solicitado, así como el espacio disponible y la eficiencia en la utilización de los recursos.

Para cada actividad, se ha asignado capacidad en tres espacios diferentes:

- Projects: para tener almacenados los resultados de las simulaciones que se necesitan durante todo el periodo de asignación

- Scratch: espacio necesario para realizar las simulaciones en cada momento. Se debe considerar que este es un espacio de disco que se debe liberar 7 días después de haber finalizado la simulación que lo ha producido

### 4.3. Paralelismo compulsivo

Para mejorar la eficiencia de los sistemas, es necesario que todas las actividades que han planteado simulación que requieren paralelismo compulsivo (muchas ejecuciones del mismo programa, con variación de los datos de entrada), utilicen la herramienta COMPSs (<https://www.bsc.es/research-and-development/software-and-apps/software-list/comp-superscalar>). El envío de trabajos secuenciales al sistema se limitará.

El equipo de soporte del BSC-CNS y equipo del Nodo Computacional del INB en el BSC, ofrecerán la ayuda necesaria para portar los códigos a esta tecnología. Se debe contactar con [support@bsc.es](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 la actividades que superen un mínimo umbral de calidad
- tendrán prioridad con carácter temporal indefinido, hasta que el Consejo decida finalizarlo, hasta alcanzar el 50% de la capacidad de cada periodo. Si en algún momento se superara este límite, el Comité de Acceso, podría decidir cómo proceder respecto al exceso: ejecutarlo, o priorizarlo, o demorarlo al periodo siguiente, etc. En cualquier caso, se mantienen los requisitos generales: actividades lideradas o con participación cierta de investigadores localizados en España, y que superen el umbral de calidad establecido por el Comité de Acceso.

En esta convocatoria, un total de 6 actividades relacionadas con COVID han obtenido acceso a los recursos de la RES, con casi 10 millones de horas, que significa un 5% 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
Alberto García	Computation of thermal-transport coefficients using the Green-Kubo formalism within Density-Functional Theory	300		400	350	UAM
Alejandro García Gil	Shallow Hydro-geothermal reservoir modelling	70		400	100	IAC
Alicia Palacios Cañas	Survival of electronic coherences against nuclear motion in ultrafast molecular processes	2.250		100	4.000	SCAYLE
Andres Pacheco Pages	Monte Carlo Simulation for the ATLAS Experiment at the CERN LHC at the MareNostrum by IFAE/PIC Tier-1	4.900		5.000	5.000	BSC/MN
Ángel Morales García	Investigation of the Reverse Water-Gas Shift Reaction Mechanisms Catalyzed by the Ti <sub>3</sub> C <sub>2</sub> MXene	384		300	500	UC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Anne Gosset	High-fidelity CFD simulation of the jet wiping process at industrial scale	6.000		5.000	100	CESGA
Antonio J. Peña	EPEEC: Productivity at Exascale	1.000		1.500	2.048	BSC/MN
Antonio Picon	Core-resolved-state Bloch equations by using Wannier orbitals	921,60		1.000	300	BSC/MN
Arturo González Escribano	Scalability of heterogeneous partitioned address spaces (II)	24		20	10	BSC/P9
		6,62		20	10	BSC/MT
Beatriz Trenor Gomis	Computational Mechano-Electric Model of the Human Heart to Design Personalized Therapies (meHeart)	2.404,80		10.000	1.000	BSC/MN
Carles Bona Casas	Polyelectrolyte brushes as a glycocalyx surrogate	1.287		20.000	10.000	IAC
Carme Rovira	Unveiling mechanisms of heparin precursor biosynthesis	128		40.600	30.600	BSC/P9
		1.216		10.600	10.600	BSC/MN
Carme Rovira	Elucidating molecular mechanisms of disease-related glycosidases	128		40.600	30.600	BSC/P9
		1.408		40.600	30.600	BSC/MN



Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Carolina Estarellas	Elucidating activation mechanism of AMPK by direct activators. Which factors control isoform selectivity?	38,90		6.000	3.000	BSC/P9
Daniel Mira	Evaluation of flashback resistance of a hydrogen flame in technically premixed conditions	1.600		15.000	15.000	BSC/MN
David Expósito Singh	Evaluation of COVID19 mitigation and vaccination strategies	200		500	40	UV
David Mateos	Extreme Holography	3.000		10.000	10.000	BSC/MN
Dr. Sergi Beltran	Genomic analysis of 2,000 Whole Genome Sequencing data sets for the diagnosis or undiagnosed rare disease patients across Europe	216		200.000	200.000	CSUC/CAN
Edilbereto Sánchez González	Electrostatic and electromagnetic simulations of plasma turbulence in stellarators with EUTERPE	5.000		22.000	10.000	BSC/MN
Eduardo Javier Pérez Sánchez	Modelling of the Cambridge swirling burner with the Conditional Moment Closure model in the frame of Large Eddy Simulations	663	400	10.000	10.000	SCAYLE

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Elena Khomenko	3D solar magneto-convection simulations up to the chromospheric heights including partial ionization.	9.999		20.000	20.000	BSC/MN
Elisa Jimenez Izal	PtGe bimetallic catalyst to fight the CO poisoning	2.764		800	1.500	BSC/MN
Eliseo Ruiz	Single-Molecule Magnets under Pressure	900		120	400	BSC/AMD
Emilio Artacho	Radiation damage on realistic DNA models via first-principles methods	1.272		10.000	20.000	BSC/MN
Enrique Marcos Benteo	Exploring alternative antibody frameworks by computational protein design	1.700		1.000	2.000	UC
Esteban Ferrer	Aeroacoustics using a high order Discontinuous Galerkin solver	9.000		4.000	1.000	BSC/MN
F. Javier Luque	Mechanism of the antiviral activity of novel aryl sulfonamides that inhibit entry of influenza virus	16		5.000	2.000	BSC/P9
		2.142		5.000	2.000	BSC/MN
Fernando Martín García	Attosecond charge transfer dynamics in the building blocks of optoelectronic systems	6.900		300	12.000	BSC/MN
Fernando Martín García	Graphene/Ru electrodes: playground for next generation electrodes for single molecule devices	2.660		600	600	UAM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Francesc Illas	Role of interfacial sites in the CO <sub>2</sub> hydrogenation by novel Ni/TiC catalysts	968		800	1.500	BSC/MN
Francesc Viñes	Carbon Dioxide Electrocatalysis on As-Synthesized MXenes	614		300	500	UC
Francesc Viñes Solana	Bare MXene Surfaces as Supports for Single Atom Catalysts	622		300	500	SCAYLE
Francesc Viñes Solana	Epitaxial Growth of Nitrogen and Metal Layers on MXene Seed Structures	1.394		300	500	NASERTIC
Francisco javier Llorca Martínez	Prediction of the phase-diagram of metallic alloys of technological interest from cluster expansion and statistical mechanics	1.460		2.000	1.000	UMA
Francisco Javier Salvador Rubio	Study of the influence of eccentricity factor in elliptical nozzles on primary atomization using Direct Numerical Simulation	270		18.000	20.000	BSC/MN
Gara Villalba Méndez	Modelling the impacts of green infrastructure on air quality and climate change	414		100	10.000	UMA
Giuseppe Battaglia	Kinetic Ensembles for oligomer formation in misfolded protein disease using liquid-phase microscopy videos	3.916,80		7.000	6.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Inacio Pagonabarraga	Active suspensions in heterogeneous and responsive media	50		20.000	20.000	BSC/P9
		7.000		60.000	60.000	BSC/MN
Iñaki Tuñón	Computational Redesign of Novel Inhibitors of the SARS-CoV-2 Main Protease Using Classical and QM/MM Free Energy Methods	240		9.000	10.000	BSC/P9
		8.000		10.000	10.000	BSC/MN
Inés Corral	In silico design of light propelled molecular machines for the scrutiny and control of biological processes.	1.682		900	1.500	CIEMAT/XULA
J. Guilherme Vilhena	Thermo-mechanical engineering giant thermal expansion of a two-dimensional supramolecular networks	125		9.000	9.000	BSC/P9
Javier Carrasco Rodríguez	First-principles assessment of Na <sub>3</sub> Li <sub>3</sub> M <sub>2</sub> F <sub>12</sub> phases for positive electrodes in Li-ion batteries	500		900	700	SCAYLE
Javier García-Serrano	Simulating the extratropical teleconnections of Tropical Atlantic Variability	939,60		5.000	10.000	BSC/MN
Javier LLorca	Design of new catalysts with improved performance for the oxygen reduction reaction through first principles simulations and elastic strain engineering	200		100	500	BSC/P9

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Javier Sancho Sanz	Fining tune molecular dynamics-based approaches to address proteins thermodynamics and stability	7.870		3.000	250	BSC/MN
Jesús Giraldo	Molecular Dynamics Simulations of the Heteromerization of Opioid Receptors	240		2.000	20	BSC/MT
Jesús González Vázquez	Electronic and structural elements that regulate the photostability of pyrimidine nucleobase derivatives: in the search for viable protonucleobases	1.300		900	1.500	BSC/MN
Joan Calafell Sandiumenge	Improving pollutant dispersion prediction in urban environments through the use of advanced deep learning techniques	2.780		15.000	25.000	BSC/MN
Joaquim Rigola	DNS of mass transfer in gravity-driven bubbly flows: Effect of confinement ratio	2.000		3.072	3.072	BSC/MN
Joaquin Mateo	Genomic signatures of homologous recombination defects in prostate cancer	3.088		15.000	15.000	CENITS
Johannes Feist	Ultrafast atomic & molecular processes driven by classical & quantized light	1.200		2.000	800	BSC/MN
Jordi Juarez	Novel strategies for the in silico development of molecular glues.	130		5.000	5.000	BSC/P9

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jose Angel Silva Guillén	Precise characterization of the low temperature structures of vanadium oxides	5.068,80		200	200	BSC/MN
Jose Javier Plata Ramos	Accelerated high-throughput prediction of the figure of merit of Skutterudites.	300		750	750	CENITS
José M. Hernández Calama	MC Simulation for the CMS Experiment at the CERN LHC	5.000	1.000	100.000	10.000	BSC/MN
José Manuel García Regaña	Stellarator turbulence simulation	1.250		10.000	10.000	BSC/MN
Jose Maria del Peso Malagon	ATLAS (LHC) simulation of detector response to proton-proton collisions	1.400		2.000	3.000	BSC/MN
José María García Oliver	Numerical soot modelling in aeronautical gas turbine burners	750		10.000	10.000	BSC/MN
Josep Lluís Gelpí Buchaca	Analysis of the dynamic behavior, allosteric mechanism and pathogenicity of pyruvate kinase through biomolecular simulations	4.500		15.000	35.000	BSC/MN
Juan José Palacios Burgos	Topological phase transition in two-dimensional ferroelectric In <sub>2</sub> Se <sub>3</sub>	200		3.000	3.000	UAM
Konstantin NEYMAN	Studying CO Oxidation on Nanoporous Gold Using Static DFT and ab initio Molecular Dynamics Simulations	769		1.100	1.100	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Lluís Blancafort	Oxygen evolution reaction on bismuth vanadate from an exciton perspective	226		250	2.500	CSUC/PIR
Manuel Angel Ortuño Maqueda	Rare-earth metal-organic framework catalysts for organic transformations	145		500	1.000	NASERTIC
Marcel Swart	s21gd3 validation and camS21hd3 parameterization	691,20		300	600	CSUC/PIR
Marcos Carreres Talens	Influence of the ambient pressure on the primary breakup of prefilming airblast atomization for aeronautical burners	6.000		24.000	48.000	BSC/MN
Margarida Moragues Ginard	High-fidelity simulations of jet noise using a high-order discontinuous Galerkin method	3.500		5.000	5.000	BSC/MN
María Jesús Esteban Parra	Near-term climate change: Regionalized decadal predictions over the Iberian Peninsula. An assessment of the influence of land-atmosphere interactions on water resources.	717		16.000	8.000	UV
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Study of Methane Steam Reforming on Ceria-based Bimetallic Ni/Cu Catalysts	1.510,08		100	750	BSC/MN
Marino Arroyo	Mechanics of healthy and pathological cells and tissues	400		10.000	200	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Marino Arroyo Balaguer	Intermediate filament networks: from biological function to biomimetic material resilience	70		100	250	SCAYLE
MARIO MARTINEZ PEREZ	Calculation of the False Alarm Rate for the detection of Gravitational Waves using Convolutional Neural Networks.	75,20		7.000	7.000	BSC/MT
Marta Reynal Querol	Computing pixel based socio-economic measures to analyze economic development	10		8.000	8.000	BSC/MN
Martí Galí Tàpias	OPERA (Organic Particle Export, Remineralization and Advection in the North Atlantic mesopelagic layer)	3.120		3.000	15.000	BSC/MN
Martin Obergaulinger	The long and winding road to black-hole formation in stellar core collapse	3.326	600	3.000	12.000	UMA
Miguel Alonso Pruneda	Tuning octahedral rotations in perovskites by defect engineering	690		500	500	UC
Miquel Duran-Frigola	The Ersilia Model Hub: an AI/ML repository for drug discovery in infectious and neglected tropical diseases		10	1.000	2.000	BSC/P9



Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Miquel Solà Puig	Elucidating fullerene-perovskite interactions by means of first-principles calculations: Towards a rational desing of low cost solar cells	1.152		900	1.000	BSC/MN
Mireia Peral Millán	Geodynamic modeling of subduction zones. Case studies: Western and Central Mediterranean and Andes Cordillera.- PART 2	1.400		2.400	4.800	BSC/MN
Pablo G. Lustemberg	Vibrational Frequencies of CO on Reduced Cerium Oxide Surfaces: A Challenge for Conventional DFT Methods	967,68		50	750	IAC
Pablo G. Lustemberg	CO2 hydrogenation to methanol over Cu- and Ga-containing catalysts: Insights into the roles of metal and promoter	1.958,40		400	400	IAC
Pablo Ordejón	First principles simulations of amorphous GeSe compounds for memory selectors	2.000		1.000	1.000	BSC/MN
Pablo Ordejón	Dielectric properties of confined water: insights into electrified metallic-aqueous interfaces from a multiscale approach	4.500		500	500	BSC/MN
Pablo Ortega	Improvement of mean-state ocean biases and variability with ultra high resolution coupled climate modeling		2.000	1.000	30.000	BSC/MN

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Pedro José Martínez Ferrer	Numerical simulations of shock-induced auto-ignition in compressible mixing layers	600		5.000	5.000	SCAYLE
Prof. Marcel Swart	Superoxide dismutase activity in water-soluble porphyrins	1.457,28		200	800	BSC/MN
Qinghua Liao	Elucidating mechanisms of glycogen biosynthesis by human glycogenin 1 (hGYG1) using computer simulations	124,80		16.800	16.800	BSC/P9
			432	16.800	16.800	BSC/MN
Riccardo Rossi	High Performance Workflows for the construction of Reduced Order Models	150		300	400	BSC/MN
Roberto Iglesias	Competition between interstitials and helium in the presence of hydrogen leading to eventual grain boundary decohesion and failure in nanostructured tungsten	613		2.000	1.000	UC
Ruben Perez Perez	Tuning the hydration induced mechanical response of ssDNA thin films via the packing density	30	84	9.000	9.000	BSC/MT
Rubén Pérez Pérez	Deep Learning assisted Molecular Identification with High Resolution Atomic Force Microscopy	600		8.000	10.000	CESGA
Salomé Llabrés Prat	Unravelling the mechanism of cholesterol transport through the NPC1L1 protein	1.122		6.000	3.000	UZ

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Salvatore Assenza	Understanding the effect of cytosine methylation on the mechanical properties of DNA	40		2.000	2.000	BSC/P9
Santiago Avila	Simulating Non-Gaussian initial conditions: what can Euclid, DESI or SKA tell us about the primordial Universe?	540	1.623	10.000	20.000	BSC/MN
Santiago González de la Hoz	ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities (IFIC Phase VII)	3.500		4.000	4.000	BSC/MN
Sascha Husa	Compact binary models for the ground based gravitational wave detectors at design sensitivity	8.000		12.000	35.000	BSC/MN
		800		3.000	7.000	UMA
Shimpei FUTATANI	Kinetic-MHD hybrid simulations for fast particle physics in tokamaks and stellarators		1.900	500	30.000	BSC/MN
Stefan Bromley	Enhancing magnetic interactions in 2D materials based on organic radicals	1.505		400	800	UV
Tomás Raúl Rodríguez Frutos	Modern Description of the Atomic Nucleus and its Applications	1.400		2.000	2.000	CIEMAT/TURGALIUM
Victor Guallar Tasies	Construction of predictive toxicology models for the minimal panel relevant proteins	3.650		4.000	4.000	UV

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Xavier Barril	A new pan-coronavirus therapeutic concept to address present and future infections: targeted degradation of the conserved main protease	200		5.000		BSC/P9
		160		5.000		BSC/MN
Xavier Luri Carrascoso	Gaia: Second run of the Calibration and Image parameters determination for Data Reduction Cycle (DRC-04)	5.000		500.000	500.000	BSC/MN
Xavier Solans Monfort	Role of core composition and shell thickness on the catalytic activity of hybrid (M1M2@IrO <sub>2</sub> ) core shell materials for the oxygen evolution reaction.	540		500	15.000	CSUC/PIR
Xavier Vilasís Cardona	Porting LHCb-Dirac to BSC-HPC	100		5.000	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.