

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 2020

Barcelona, Octubre 2020

1. Introducción

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

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

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

2. Análisis

La RES ha asignado este período 206,4 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), Consorci de Serveis Universitaris de Catalunya (CSUC), CénitS-COMPUTAEX (CENITS), Fundación del Centro de Supercomputación de Castilla y León (SCAYLE), Universidad Autónoma de Madrid (UAM), Navarra de Servicios Y Tecnologías(NASERTIC) y Fundación Pública Galega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia (CESGA).

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 2020.

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

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

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

3. Comentarios sobre la evaluación

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

1. Reglas generales

- a. La relevancia del proyecto científico en que se enmarca la actividad propuesta (20 %)
- b. La justificación de la actividad propuesta y de los cálculos a realizar en la RES para la consecución del proyecto científico global (30 %)
- c. La calidad científica del grupo solicitante (10%)
- d. La experiencia y capacitación en el cálculo de alto rendimiento (10 %)
- e. La necesidad real de supercomputación para realizar el cálculo (20 %)
- f. La adecuación técnica del proyecto a la arquitectura de los recursos de la RES (10 %)

2. Evaluación de los resultados presentados por las actividades de continuación
 - a. Publicaciones presentadas como resultado del acceso de actividades anteriores
 - b. Resultados técnicos obtenidos en los periodos anteriores
3. Utilización adecuada y completa de los recursos asignados en los periodos anteriores
4. Participación de grupos españoles en las actividades solicitadas
5. Actividad específica dentro de un proyecto de investigación. El acceso a los recursos de la RES corresponde a actividades específicas dentro de un proyecto de investigación, y no corresponden a agrupaciones de diferentes actividades de investigadores de comunidades virtuales.
6. Seguir adecuadamente las obligaciones adquiridas en la utilización de MareNostrum y los otros recursos de la RES
 - a. Envío a la RES de copia electrónica de las publicaciones científicas en las cuales el uso de los recursos de la RES ha resultado determinante.
 - b. Mencionar explícitamente en las publicaciones científicas la ayuda del RES en su proyecto
 - c. Cumplimiento de las normas de utilización de los recursos de la RES y de las políticas de seguridad y confidencialidad determinados por la RES.
 - d. No hacer negocio con los resultados obtenidos en los recursos de la RES bajo el formato “Investigación Pública”
 - e. Proporcionar anualmente información y documentación, como vídeos, presentaciones, y cualquier otro material, para ser utilizado como material divulgativo de la RES.
7. Dada la alta competencia por recursos y la cantidad total disponible de estos, se recuerda a los proyectos que solicitan muchas horas que PRACE (www.prace-ri.eu) ofrece cantidades de horas a partir de 15 millones anuales, disponiendo de dos evaluaciones de proyectos anuales.

4. Consideraciones adicionales

4.1. Actividades industriales

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

4.2. Política de uso de disco

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

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

- Projects: para tener almacenados los resultados de las simulaciones que se necesitan durante todo el periodo de asignación
- Scratch: espacio necesario para realizar las simulaciones en cada momento. Se debe considerar que este es un espacio de disco que se debe liberar 7 días después de haber finalizado la simulación que lo ha producido

4.3. Paralelismo compulsivo

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

El equipo de soporte del BSC-CNS y equipo del Nodo Computacional del INB en el BSC, ofrecerán la ayuda necesaria para portar los códigos a esta tecnología.

Se debe contactar con support@bsc.es.

4.4. COVID-19

De acuerdo con el RD8/2020 de medidas urgentes extraordinarias para hacer frente al impacto económico y social del COVID-19, en el que se establecen medidas de apoyo a la investigación sobre el COVID-19 y en el que se identifica la lucha contra el COVID-19 como objetivo prioritario de la acción de Gobierno, fomentando la investigación sobre la enfermedad para el desarrollo de medicamentos eficaces y vacunas, que ayuden a contener el impacto de futuros brotes, se propone al Consejo de la RES la inclusión con carácter temporal en el protocolo de acceso de los siguientes criterios:

- para las actividades 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, ...desde luego se mantienen las premisas- para las actividades lideradas o con participación cierta de investigadores localizados en España- para la actividades que superen un mínimo umbral de calidad

Un total de 13 actividades relacionadas con COVID han obtenido acceso a los recursos de la RES, con más de 34 millones de horas, que significa un 18% de los recursos totales disponibles.

5. Listados y asignaciones

A continuación, se incluye la lista de las actividades que tendrán acceso a los diferentes nodos de la RES, con las asignaciones en miles de horas, y las capacidades en Gigabytes de los diferentes sistemas de ficheros. Las actividades asignadas se indican en miles de horas correspondientes a cada máquina (se ha considerado un rendimiento a la baja en cada máquina, de forma que el número de horas asignadas se corresponde en la mayoría de los casos con el correspondiente de las horas solicitadas). En el caso de acceso a BSC, se indica acceso a MareNostrum abreviado con MN, MareNostrum con Power9 y Volta100 abreviado como P9, y a MinoTauro abreviado con MT.

Lista de actividades aceptadas con acceso estándar.

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
-------	--------	---------------	---------------	----------	---------	--------------

Adrian Lozano-Duran	Wall-modeled large-eddy simulation of a realistic aircraft in high-lift configuration	4.500		4.096	4.096	BSC/MN
Albert Bruix	Cu- and Ni-based bimetallic nanoparticles: global optimization and propagation of exchange-functional error estimates	900		2.000	2.000	IAC
Albert Rimola	Dynamical effects on the formation of interstellar complex organic molecules. Energy dissipation versus chemical desorption	950		200	300	IAC
Alberto Otero de la Roza	Pressure-Temperature Phase Diagram and Free Energy Landscape of Carbon Dioxide	2.435		1.000	1.000	SCAYLE
Alejandro Luque Estepa	Electro-hydrodynamic simulation of the leader stepping mechanism in dry and humid air	2.324,74		1.000	4.000	BSC/MN
Alejandro Molina Sánchez	Magnetism, Topology and Dynamics of Novel 2D Materials	1.200		250	200	BSC/MN
Alexandre Fabregat Tomas	Numerical investigation of turbulent dispersion of infectious aerosol clouds generated by sneezes and other violent respiratory events.	3.000		1.500	1.500	BSC/MN
Alexandre Fabregat Tomas	Turbulent dispersion and surface deposition of pathogen-laden droplets in enclosed rooms.	3.000		1.500	1.500	BSC/MN
Alexandre Fabregat Tomas	Numerical Simulation of Non-Newtonian Fluid Flow with Heat and Mass Transfer at the Surface of a Single Gas Bubble	1.036		1.500	1.500	UAM

Alfonso Valencia	High-throughput model exploration of multi-scale simulations of SARS-CoV-2 infection	5.000		40.000	40.000	BSC/MN
Alvaro Villarroel	Understanding a novel mode of non-canonical CaM activation	172		200	50	CENITS
Andres Pacheco Pages	Monte Carlo Simulation for the ATLAS Experiment at the CERN LHC at the MareNostrum by IFAE/PIC Tier-1	4.300		5.000	5.000	BSC/MN
Andrés Vega-Hierro	Development of a Neural Network Potential to reproduce the potential energy landscape of gold AuN (N=10-120) anionic, cationic and neutral nanoclusters.	100	50	600	100	CENITS
Antonio Picón	Attosecond x-ray spectroscopy in Floquet topological insulators	1.150		1.000	300	UZ
Blanca Biel	Nucleobases mutation recognition by graphene-based biosensors by means of quantum mechanical simulations	430	100	1.000	1.000	IAC
Carlos Hernández-García	Development of structured attosecond pulses to be applied in ultrafast nanoscience	2.600		5.000	5.000	BSC/MN
		5		1.000	300	BSC/MT
Carme Rovira	Catalytic mechanisms of biomass-processing glycosidases	100	10	12.300	12.300	BSC/P9
		972		12.300	12.300	BSC/MN

Carme Rovira Virgili	Elucidating mechanisms of glycosidic bond biosynthesis	50	20	12.300	12.300	BSC/P9
		972		12.300	12.300	BSC/MN
César González	Reduction of the magnetization associated to the atomic fluctuations in Mn-alloyed cementite	125	125	1.000	1.000	SCAYLE
Daniel Ceverino Rodriguez	FirstLight: Simulations of the First Galaxies in the Early Universe	2.000		20.000	20.000	BSC/MN
Daniel Mira	Pollutant predictions of liquid biofuels for transportation under engine-like conditions	1.500		15.000	15.000	BSC/MN
David Mateos	Extreme Holography	1.500	1.500	10.000	10.000	BSC/MN
David Pardo Zubiaur	HPC Simulations for Advances in Earth's Subsurface Imaging	450		4.000	100	BSC/MN
Edilberto Sánchez González	Simulations of plasma turbulence in stellarators with EUTERPE	5.000		22.000	5.000	BSC/MN
Eduardo R. Hernández	Fully quantum mechanical simulations of an excess electron adsorbed in water clusters	750	750	10	10	UMA
Eliseo Ruiz Sabín	Chemical Exfoliation of 2D Materials	367		120	4	UV
Emilio Artacho	Post-irradiation dynamics in materials relevant for space exploration via first-principles methods	2.664		10.000	20.000	BSC/MN

F. Javier Luque	Searching for small compounds as stabilizers of the inactive spike protein in SARS-COV-2	2.500		8.000	2.000	BSC/MN
		16		4.000	2.000	BSC/MT
Fernando Martín García	Modification of physical chemistry properties of transition metal dichalcogenides induced by point-defects	450		300	500	BSC/MN
Fernando Martín García	Imaging, decoherence, and attosecond probing of ionization-induced charge migration in molecules	3.600	900	300	3.000	BSC/MN
Francesc Illas i Riera	Unravelling the origin of the excellent catalytic performance of supported molybdenum carbide nanoparticles for carbon dioxide activation	800	120	900	1.500	NASERTIC
Francesc Illas i Riera	Origin of the selectivity on the conversion of CO ₂ on ceria supported Ni catalyst from multiscale simulations	1.451		900	1.500	CENITS
Francesc Xavier Trias Miquel	Direct and Large-Eddy Simulation of buoyancy-driven turbulence in liquid metals	2.400		256	12.288	BSC/MN
Francesco Luigi Gervasio	Identification and Design of drugs for SARS-CoV2 nsp1 and the nsp1:40S ribosome complex	500		7.000	6.000	BSC/MN
Francisco Javier Salvador Rubio	Influence of the air velocity on the primary breakup of prefilming airblast atomization for aeronautical burners	5.625		16.000	36.000	BSC/MN

Francisco Javier Salvador Rubio	Direct Numerical Simulations of relatively high Weber Number sprays on different injection Reynolds conditions	960		18.000	20.000	BSC/MN
Gara Villalba Méndez	Modelling the impacts of green infrastructure on air quality and climate change	207,36		100	6.000	UMA
Gerasimos Konstantatos	Thermodynamic Stability and Defect Chemistry in Photovoltaic Material AgBiS ₂	350		1.000	800	NASERTIC
Gregorio Herdoíza	Charm and bottom physics on fine lattices: semileptonic decay form factors	3.900	3.900	80.000	80.000	BSC/MN
Grigory Astrakharchik	Ab initio simulation of impurities in quantum gases	200		100	100	BSC/MT
Hristiyan Aleksandrov Aleksandrov	DFT modeling of CO oxidation on Pt-CeO ₂ and Pt-Al ₂ O ₃ systems	924	396	500	400	SCAYLE
Ignacio Carol	Mechanics of materials and Geomechanical problems	798		100	2.000	BSC/MN
Ignacio Pagonabarraga	Emerging patterns in actuated and intrinsically non-equilibrium soft matter composites	3.500	3.500	40.000	40.000	BSC/MN
Iñaki Tuñón	MultiScale Simulations of the Activity of 3CL Protease of SARS-CoV-2	180	20	7.000	10.000	BSC/P9
		8.300		10.000	8.000	BSC/MN
Inés Corral	Photophysical and photochemical validation of alien genetic building blocks and N-nucleobases ancestors	2.810	300	900	1.500	CESGA

Isaac Salazar Ciudad	Models of gene networks in developmental biology and evolution		1.500	3.000	3.000	BSC/MN
J. Guilherme Vilhena	Meta-stable conformers of on-surface synthesized pi-conjugated 1D chains: mechanical stabilization and stereo-chemical control of tribological properties.	80	20	6.000	6.000	BSC/P9
Javier Carrasco Rodríguez	First-principles assessment of novel olivine LiFeSO ₃ N phases for positive electrodes in Li-ion batteries	640		650	600	BSC/MN
Javier Carrasco Rodríguez	First-principles study of oxygen evolution and diffusion on the surface of mixed Co ₃ -xMnxO ₄ spinel structures for thermochemical energy storage	810		700	550	SCAYLE
Javier García-Serrano	Modelling the Quasi-Biennial Oscillation in the tropical stratosphere and its predictability	921,60		5.000	10.000	BSC/MN
Javier Jimenez Sendin	Monte-Carlo study of causality in turbulent flows	150		2.000	500	BSC/P9
Jerónimo Escribano	High-resolution atmospheric dust reanalysis	9.268,45		60.000	200.000	BSC/MN
Jordi Juarez	Novel strategies for the in silico development of molecular glues.	200	200	5.000	5.000	BSC/MN
Jordi Villà-Freixa	Exploring peptide/MHC dissociation landscapes using Hierarchical Natural Move Monte Carlo	700		4.000	4.000	IAC
Jorge Macías Sánchez	Estimating the Economic Cost of Tsunamis for the Spanish National Insurance System.	80		800	50	BSC/P9

José Julio Gutierrez Moreno	Ab Initio Study of Defects in Tungsten from Linear Scaling Density Functional Theory Methods	2.093		100	1.000	BSC/MN
José M. Hernández Calama	MC Simulation for the CMS Experiment at the CERN LHC	1.000		100.000	10.000	BSC/MN
Jose Maria del Peso Malagon	ATLAS (LHC) simulation of detector response to proton-proton collisions (UAM Phase 0)	1.000		4.000	4.000	BSC/MN
José María García Oliver	Prediction of combustion and soot production in aero-engine burners using large -eddy simulations	1.590		5.000	10.000	BSC/MN
Josep Lluís Gelpí Buchaca	Analysis of the dynamic behavior, allosteric mechanism and pathogenicity of pyruvate kinase through biomolecular simulations	6.500		20.000	51.000	BSC/MN
Juan José Palacios	Topological properties of franckeite: a natural van der Waals heterostructure	2.000		5.000	7.000	UAM
Katarzyna ?widerek, PhD	QM/MM studies of the mechanism of autolysis, proteolysis, and inhibition of a key player in the cell protein quality control system, human 20S proteasome.	300,40	300,40	500	100	CSUC/PIR
Konstantin NEYMAN	Machine-learning adsorption energies on bimetallic surfaces	1.000		1.000	1.000	IAC
Manuel García-Villalba	Numerical simulations of flow in the human left atrium with moving walls	1.200		6.000	300	SCAYLE

Marco Ellero	Multiscale particle-based simulations of complex suspensions	1.905		40	2.000	BSC/MN
María Gonçalves Ageitos	Characterizing the atmospheric deposition of soluble iron into the ocean in past, present and future climates	2.328		136.800	50.000	BSC/MN
María Luisa S. Senent Diez	Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere	200		200	500	CESGA
Maria Veronica Ganduglia Pirovano	Study of the hydrogenation of CO2 to methanol and the role of Cu and Ga in the catalyst formulation	1.958		400	400	BSC/MN
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Study of Methane Steam Reforming on Ceria-based Bimetallic Ni/Pt Catalysts	662,40		400	400	BSC/MN
Mariano Curti	Computational design of chromophore - protein assemblies for sunlight conversion	144		2.000		BSC/P9
		128		1.000	500	CSUC/PIR
Marta Reynal Querol	Computing pixel based socio-economic measures to analyze economic development	300		8.000	8.000	BSC/MN
Martin Obergaulinger	Towards protomagnetar formation in stellar core collapse	2.600		3.000	10.000	BSC/MN
Miguel Ángel Fosas de Pando	Analysis and optimization of flow through linear cascades using adjoint-based methods	464		8.192	16.384	CESGA

Miquel Solà	Covalent charge transfer complexes of fullertubes. Density functional study of the reactivity of fullertubes in the Bingel reaction.	276		100	300	BSC/MN
Modesto Orozco	Exploring Covid19 Infectious Mechanisms and Host Selection Process	7.000		15.000	20.000	BSC/MN
Oscar Flores Arias	Direct Numerical Simulations of spanwise flexible wings in tandem configuration	1.300		4.800	1.200	CENITS
Pablo Gamallo Belmonte	CO2 conversion into light fuels activated by H/H2 over transition metal encapsulated in MFI zeolites (TM@S-1)	796	120	900	1.500	UMA
Pablo Ordejón	First principles simulations of amorphous GeSe compounds for memory selectors	250		500	500	BSC/MN
Pau Figueras	Exploring spacetime singularities	1.500	1.500	10.000	10.000	BSC/MN
Pedro Martí Gómez-Aldaraví	Droplet characterization of coughing and breathing	130		2.000	2.000	UV
Pedro Salvador Sedano	Understanding transition metal-nitrosyl bonding by high-level electronic structure methods	216		50	500	CSUC/CAN
Pilar Hernández	Properties of the flavor singlet in the large Nc limit	1.500	1.400	4.000	3.000	BSC/MN
Prof. Ernest Giralt	Rational hit-to-lead optimization of anti-PD-1 biological drugs	150		900	600	UMA
Prof. Giuseppe Battaglia	Imaging Dynamics combining liquid-phase electron microscopy and molecular dynamics	4.070		7.000	6.000	UV

Prof. Marcel Swart	Formation of diamond-core Fe(IV) ₂ (μ-O) ₂ complexes revisited	239,04	239,04	100	500	BSC/MN
Raffaello Bianco	High-pressure phase diagram of YH ₉ and YH ₁₀ from first principles: structural and superconducting properties including quantum anharmonic effects	3.000		480	8.000	UC
Ramon Crehuet	Biophysical determinants for the formation of membraness organelles by intrinsically disordered proteins	100		200		BSC/P9
Ramon Crehuet	Functional dynamics of human DNA polymerase delta	368,64		1.000	1.000	CENITS
Ricardo Díez Muiño	Attosecond streaking and time-dependent photoelectron emission from two dimensional materials	6.604,80		300	4.500	BSC/MN
Ruben Perez Perez	Understanding the structure and electron transfer properties of different single-protein junctions	218		6.000	6.000	BSC/MT
Sandra Rodríguez González	Assessment of quinoid-resonance structures in the electron transport through single molecule junctions	392	150	600	600	UMA
Santiago González de la Hoz	ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities (IFIC Phase VI)	3.300		4.000	4.000	BSC/MN

Sascha Husa	The end of an era - analysing the last gravitational wave detections before LIGO-Virgo design sensitivity	9.000		8.000	20.000	BSC/MN
		880		2.000	5.000	UMA
Sergio Contreras Hantke	Towards percent accuracy in rescaled simulations: on the way to constraining cosmology from future galaxy surveys	2.500		52.000	30.000	BSC/MN
Shimpei FUTATANI	Kinetic-MHD hybrid simulations for fast particle physics in tokamaks and stellarators	600	590	500	30.000	BSC/MN
Shimpei Futatani	Non-linear MHD modelling of pellet injection for ELM control in fusion plasmas	1.056		1.500	30.000	BSC/MN
Stefan Bromley	Design of 2D Covalent Organic Radical Frameworks with Electric Field-mediated Tunable Magnetic Properties	1.505		200	1.000	UV
Vicent Moliner	Computer Design of Inhibitors of SARS-CoV-2 Mpro by QM/MM Simulations: Towards the Design of Efficient COVID-19 Antiviral Drugs	1.108		500	100	CSUC/PIR
Victor Guallar Tasies	In silico toxicology prediction for compounds binding to the SARS-CoV-2 protease (continued)	3.600		4.000	4.000	BSC/MN
Victor Homar Santaner	Advanced ensemble generation strategies for hydrometeorological forecasting: Flash flood cases in Eastern Spain	1.300		35.000	500	BSC/MN
Xavier Barril	Finding leads in billion-sized chemical collections	100		5.000		BSC/P9
		160		5.000		BSC/MN

Xavier Luri Carrascoso	Gaia: Initial calibration of the astrometric instrument response and image parameters determination for the fourth Data Reduction Cycle (DRC-04)	200		100	100	BSC/P9
		6.000		800.000	600.000	BSC/MN
Xavier Vilasís Cardona	Porting LHCb-Dirac to BSC-HPC	50		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.