

Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación

Resolución Comité de Acceso, Asignación de Horas de Supercomputación para la Red Española de Supercomputación (RES) 2o período 2024

Barcelona, Junio 2024

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 537,1 millones de horas, que se obtienen sumando todas las horas de las diferentes arquitecturas, incluyendo las horas con prioridad y sin prioridad. 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 completo 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 Septiembre de 2024.

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 400.000 horas en cuatro meses, no utiliza cerca de 100 mil horas el primer mes, su asignación para el periodo completo será reducida a 300.000. 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 400.000 horas en cuatro meses, se utiliza cerca de 200.000 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 y núcleos asignados. Por ejemplo, si se debe asignar el uso en exclusiva de un nodo (que tiene varios núcleos, 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 mediante la frase "The author thankfully acknowledges RES resources provided by [centro] in [equipo] to [ID de actividad]"
 - c. Cumplimiento de las normas de utilización de los recursos de la RES y de las políticas de seguridad y confidencialidad determinados por la RES.
 - d. No hacer negocio con los resultados obtenidos en los recursos de la RES bajo el formato "Investigación Pública"

e. Proporcionar anualmente información y documentación, como vídeos, presentaciones, y cualquier otro material, para ser utilizado como material divulgativo de la RES.

7. Dada la alta competencia por recursos y la cantidad total disponible de estos, se recuerda a los proyectos que necesitan grandes volúmenes de recursos, que la infraestructura europea EuroHPC (https://eurohpc-ju.europa.eu/participate/access-our-supercomputers_en) ofrece proyectos de cómputo a partir de 30 millones de horas de CPU anuales, disponiendo de cinco convocatorias anuales para propuestas (Regular Access y Extreme Scale Access).

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 ofrecerá 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 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
Aaron Call Barreiro	Extreme-data processing platforms to analyze the interaction of genomic variants and their association to common diseases	8.192		500.000	1.024	BSC/MN5-GPP
Adeline de Villardi de Montlaur	Investigation on wall-modeled large-eddy simulations of sheared daytime atmospheric boundary layers over smooth and rough surfaces for wind-energy applications	3.085,20		2.400	1.200	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Aitor Soroa	Curriculum learning for adapting LLMs to low resource languages	3.630,06		25.000	100.000	BSC/MN5-ACC
Albert Elias López	3D MHD dynamo in Hot Jupiters at different evolutionary time	2.322		20	2.000	BSC/MN5-GPP
Albert Poater	Valorization of CO2 as economical feedstock to produce value-added products	657		600	600	BSC/MN5-GPP
Albert Poater	CO2 reduction reaction post Hydrogen evolution reaction: Ni single atom as promising candidate	662		500	500	BSC/MN5-GPP
Albert Poater	Unraveling Coordination Geometry Control in Metallo-Supramolecular Polymer Networks through Macroscopic Rheological Patterns: Bridging Supramolecular and Periodic Calculations	1.382		500	500	BSC/MN5-GPP
Albert Rimola	Binding Energy and Diffusion Barrier Distribution for Relevant S-bearing Species on Interstellar Ice Grains	2.700		500	3.000	BSC/MN5-GPP
Albert Solé-Daura	Atomistic picture of the molecular and solvent rearrangements during energy transfer processes in photocatalysis	2.013,87		256	256	UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Alberto Otero de la Roza	Phase diagrams and reactivity of CO ₂ and carbonate minerals under extreme temperature and pressure conditions (DenseCarbon)	1.989		1.000	1.000	BSC/MN5-GPP
Alberto Rodríguez González	Characterization of quantum chaos in a system of interacting bosons	1.100		100	4	CESGA/FT3
Alicia Palacios Cañas	Exploring quantum entanglement and non-linear effects induced by XUV and X-Ray coherent light sources	1.025		150	6.000	BSC/MN5-GPP
Andres Pacheco Pages	Monte Carlo Simulation for the ATLAS Experiment at the CERN LHC at the MareNostrum by IFAE/PIC Tier-1	5.700		9.000	9.000	BSC/MN5-GPP
Ángel Morales García	Estimation of Excited States Lifetimes in Photoactive Hydrated TiO ₂ Nanostructures	324		500	500	CESGA/FT3
Ángel Morales García	CO methanation on metal surfaces	414		300	300	CENITS
Anne Gosset	CFD simulation of floating platforms and support vessels for offshore wind turbines	420		80.000	1.000	CESGA/FT3
Antonio Picón	Modelling attosecond reflectivity in monolayer MoS ₂	3.500		2.000	2.000	UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
António T. Costa	Spin-charge dynamics in CrSBr heterostructures	4.301		1.024	4.096	BSC/MN5-GPP
Aurelio Gallardo	Computational characterization of the on-surface synthesis of Dipyridophenazine based quantum molecular networks.	416		500	300	IAC
Blanca Biel Ruiz	Irradiation-induced defects in alpha-Fe materials for nuclear fusion	1.059,84		4.000	4.000	IAC
Carlos Hernández-García	High harmonic generation and attosecond pulse shaping in novel quantum materials	150		500	100	CESGA/FT3-GPU
Carlos Hernández-García	High harmonic generation and attosecond pulse shaping in novel quantum materials	100		500	100	BSC/MN5-ACC
Carlos Hernández-García	High harmonic generation and attosecond pulse shaping in novel quantum materials	1.000		500	200	BSC/MN5-GPP
Carlos Palenzuela	Magnetic field amplification during the accretion disk formation in black hole-neutron star mergers	420		20.000	20.000	BSC/MN5-ACC
		19.300		80.000	80.000	BSC/MN5-GPP
Carme Rovira	Modeling the hydrolysis of macroalgae polysaccharides by marine bacteria	358		60.000	60.000	BSC/MN5-ACC
		6.384		60.000	60.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Carme Rovira Virgili	Modeling protein glycosylation mechanisms	336		60.000	60.000	BSC/MN5-ACC
		6.216		60.000	60.000	BSC/MN5-GPP
César González Pascual	Dissociation of water molecules over defective 2D materials for hydrogen production	83		1.000	1.000	UC
CHANTAL VALERIANI	DYNAMICS OF BIOPHYSICAL SYSTEMS AT THE MESOSCALE	2.957		7.500	7.500	BSC/MN5-GPP
Clara Suñer Navarro	TBMod-4PH (TB Modelling for Public health)	40		20	20	NASERTIC
Claudia Soriano Guerrero	MHD simulations of Hot Jupiters atmospheres, part II: winding and local turbulence with background profiles from state-of-the-art global circulation models.	1.755,76		20.000	2.000	BSC/MN5-GPP
Claudio Cazorla	Discovery of new caloric materials using graph convolutional neural networks and first-principles simulations	9.250		500	900	BSC/MN5-GPP
Coloma Ballester	Streamlining Text-to-Video Generation: A Diffusion-Free Approach	16,70		1.000	1.000	BSC/MN5-ACC
Cristina Díaz	Exploring Molecular Junctions with Machine Learning Techniques	2.825		800	800	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Daniel Argüeso Barriga	Urban areas and their impact on local climate extremes	2.650		30.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Daniel Ceverino Rodriguez	FirstLight: Simulations of the First Galaxies in the Early Universe	942		11.000	11.000	UAM
		2.016		40.000	40.000	BSC/MN5-GPP
		1.200		40.000	40.000	CSUC/PIR
Daniel García Figueroa	Gravitational waves from dark matter string networks	3.880		20.000	20.000	BSC/MN5-GPP
David Expósito Singh	Development of a simulator that simulates the spread of COVID-19, influenza-like illnesses (ILI), and acute respiratory infections (ARI)	400		500	500	UZ
David Keitel	In-depth gravitational lensing studies with the LVK network at O4 sensitivity and beyond	960		2.000	5.000	UMA
David López Durán	Computational research on new and promising aromatic photovoltaics to fight against the climate change.	1.094,40		200	200	BSC/MN5-GPP
Diego Garrido Martin	SNV-pairs analysis to detect pathogenic digenic combinations in rare diseases	6.000		1.000	5.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Dominique M.-A. Meyer	Plerionic supernova remnants for the Cherenkov Telescope Array era	2.000		100	100	BSC/MN5-GPP
Dr. Carlos Martí-Gastaldo	Enhancing the water stability of Titanium Organic Frameworks with grafted amines for CO2 Capture	1.175		1.500	1.600	BSC/MN5-GPP
Dr. Daniel Hernangómez Pérez	Excitonic properties of monolayer, bilayer and bulk CrSBr	3.371,25		16.000	16.000	BSC/MN5-GPP
Edgardo Saucedo	Modeling defective chalcogenide-based solar cells with first-principles simulations and machine learning techniques	2.000		300	700	BSC/MN5-GPP
Edilberto Sánchez González	Simulation of electromagnetic turbulence in stellarators with EUTERPE	5.400		25.000	20.000	BSC/MN5-GPP
Elena Akhmatskaya	Multiscale Modelling of Composite Polymer Electrolytes Incorporating High Entropy Oxides: the Impact of Strong Dielectric Fillers	600		500	600	BSC/MN5-ACC
Elena B. Martín Ortega	CFD Database Generation for Reduced Order Modeling of Rotating Detonation Engines	1.000		20.000	20.000	CIEMAT/XULA
Elena Khomenko	Sun-To-Earth Extreme Plasma Eruptions	36.800				BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Elisa Jimenez-Izal	Size-selected Pt clusters deposited on Au(111)	3.225,60		1.500	2.000	BSC/MN5-GPP
Eliseo Ruiz	High-Throughput Density Functional Study combined with Neural Networks for Sublimation Properties of Molecular Materials	1.680		120	10	BSC/MN5-GPP
Elixabete Rezabal Astigarraga	Understanding the Molecular Structure of Choline Geranate (CAGE) in Water: Insights from DFT-based Molecular Dynamics Simulations	775		150	150	UZ
Enrique Marcos Benteo	Computational design of antigen-binding loops in de novo immunoglobulin-like frameworks	1.320		2.000	4.000	CESGA/FT3
Enrique Ortí	In silico-assisted discovery of hole-transporting materials for perovskite solar cells	2.300		20.000	20.000	UC
Ernane de Freitas Martins	Enhancing the longevity and durability of steel structures with recycled Al alloy coatings	2.460	140	3.000	3.000	CESGA/FT3
Esteban Ferrer	Wind turbine aeroacoustic simulations using high order solvers	6.000		4.000	1.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Estefania German Gorosito	Investigation of fullerene supported single-atom-catalysts (SAC) and single-cluster-catalysts (SCC) for the water splitting reaction to produce green hydrogen.	900		1.000	1.000	BSC/MN5-GPP
Fabio Del Sordo	Global High-Resolution simulations of stellar dynamos: the effect of tidal star-planet interaction	5.250		2.000	20.000	BSC/MN5-ACC
Felipe J. Blas	Effect of thermodynamic promoters and NaCl on nucleation of carbon dioxide and nitrogen hydrates from computer simulation	8.300		6.000	6.000	BSC/MN5-GPP
Fernando Martín	Intramolecular attosecond electron dynamics induced by ultrashort laser pulses	9.746,40		500	105.000	BSC/MN5-GPP
Fernando Martín García	Optical properties of acceptor-molecule-donor complexes adsorbed on Graphene/SiC(0001)	4.472		1.500	8.000	BSC/MN5-GPP
Ferran Feixas	Time-evolution of dynamic conformational ensembles of allosterically regulated proteins in response to external stimuli	46		5.000	5.000	CESGA/FT3-GPU
Francesc Illas i Riera	Inspecting the role of undercoordinated sites in electrocatalytic ethylene oxide reduction	672		800	1.500	BSC/MN5-GPP
Francesc Illas Riera	Modelling Thermo-Photo Valorization of CO2 by novel Co/In2O3 catalysts.	1.330		900	1.500	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Francesc Viñes Solana	Structural and electronic study of M2C MXene flakes for photocatalytic purposes	968		600	1.000	BSC/MN5-GPP
Francesc Viñes Solana	Nurturing a Machine Learning Tool for Pourbaix Diagrams	1.088		600	800	BSC/MN5-GPP
Francesc Viñes Solana	Terminated MXenes as Supports for Single Atom Catalysts	881		800	1.000	BSC/MN5-GPP
Francesc Xavier Trias Miquel	Assessment of a new stable regularization of the gradient model for Large-Eddy Simulation of thermal turbulence	6.150		256	40.960	BSC/MN5-GPP
Francisco Javier Salvador Rubio	Using an Adaptive Mesh Refinement code for the DNS study of the atomization process of a pressure-swirl atomizer	2.000		18.000	20.000	BSC/MN5-GPP
Gara Villalba	Modelling the impacts of green infrastructure on future heat wave episodes and greenhouse gas fluxes at the urban scale.	880		10.000	15.000	UMA
Giuseppe Battaglia	A computational study on the MRC1-mUNO interaction and the calculation of the binding free-energy	1.200		2.000	2.000	BSC/MN5-GPP
Giuseppe Battaglia	LRP1's extended glycosylation may affect the protein's quaternary structure formation and stability	1.800		3.000	3.000	UAM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Horacio Andres Vargas Guzman	Viruses Spike Proteins and Glycans Adsorption onto Functionalized Surfaces of Manifold Polarities in drastic deformation environments	90		7.000	7.000	CESGA/FT3
			15	12.000	12.000	CESGA/FT3-GPU
Horacio Pérez-Sánchez	Discovery of novel compounds from large chemical spaces targeting fascin for inhibiting colorectal cancer	5.000		5.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Horacio Saggion	Creation of Catalan, Italian and Spanish text simplification tools	10		30	30	BSC/MN5-GPP
Humberto Bustince Sola	Optimization of a Large-Scale Transformer for Protein Design from a Natural Language Processing Approach	64,51		2.500	2.500	BSC/MN5-ACC
ICREA PROF. VICTOR GUALLAR	AlchemicalPELE Benchmarking for Drug Discovery	7.000		15.000	6.000	BSC/MN5-GPP
Ignacio Pagonabarraga	Emerging phases and morphologies in active and actuated matter	9.900		100.000	100.000	BSC/MN5-GPP
Iñaki Tuñón	From Chemistry to Motion in Biological Motors. The Zika NS3 Helicase	300		15.000	16.000	BSC/MN5-ACC
Iñaki Tuñón	From Chemistry to Motion in Biological Motors. The Zika NS3 Helicase	3.300		15.000	16.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Inés Corral	Photochemical and photophysical profile of the artificial Hachimoji nucleobase Z	2.800		900	1.500	BSC/MN5-GPP
Ion Errea	Prediction of high-temperature superconductivity in the Rubidium-Phosphorus-Hydrogen system at ambient pressure	5.050		100.000	100.000	BSC/MN5-GPP
Isaac Salazar Ciudad	The requirements that gene networks need to fulfill to lead to the formation of complex phenotypes	4.000		2.200	2.000	BSC/MN5-GPP
Ivette Rodríguez	Deep reinforcement learning - based strategy for active flow control of separated flows	1.322		2.048	10.000	BSC/MN5-ACC
Jana Selent	AlphaGPCR - Large-scale simulation and analysis of AI-derived GPCR structures	8.000		3	10	BSC/MN5-ACC
Javier Carrasco	Advancing Atomistic Design for Optimal Li-Metal/Solid Electrolyte Interfaces in All-Solid-State Lithium-Ion Batteries	460		950	750	CIEMAT/TURGALIUM
Javier García Marín	Computational insights into the scaffolding activation of a pseudokinase by a small molecule	2.016		600	800	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Javier LLorca	Prediction of the Al-Co-Ni phase diagram including configuration and vibrational entropy and magnetic enthalpy from first-principles simulations	1.000		2.000	1.000	IAC
Javier LLorca	High-Throughput Discovery of New Catalysts for the Hydrogen Economy by Combining Ab Initio Calculations and Machine Learning	572,54		300	2.500	UMA
Jeremías Likerman	Modeling the geodynamics of subduction zones and mantle plumes	1.781		2.400	4.800	BSC/MN5-GPP
Jiri Stepan	3D Inversions of the Upper Solar Atmosphere	2.500		100	35	BSC/MN5-GPP
Joan Torras Costa	Computational study of the aggregation propensity of the peptides/peptidomimetics scaffolds for regenerative medicine: Conformational study	333		6.144	1.536	BSC/MN5-ACC
		6.667		6.144	1.536	BSC/MN5-GPP
Johannes Feist	Harnessing Extreme Light-Matter Interactions	60	220	4.000	8.000	BSC/MN5-ACC
		2.240		10.000	16.000	BSC/MN5-GPP
Jonathan Frazer	Predicting Pathogenic Variation for Conservation	40		1.000	1.000	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jordi Martí	Simulation and modelling of biosystems with applications to medicine (1): drug design for the treatment of cancers of the RAS family	4.000		200	100	BSC/MN5-GPP
Jordi Martí	Simulation and modelling of biosystems with applications to medicine (2): exploring the structural diversity of the MYC protein and its implications for in-silico design of anti-cancer drugs	4.000		200	100	BSC/MN5-GPP
Jordi Ribas Ariño	Controlling magnetism in 2D organic materials by electric field modulation of energy levels	698,88		400	1.000	UZ
Jordi Villà-Freixa	Benchmarking of Empirical Valence Bond Simulations as filtering tools for enzyme design protocols	300		3.000	20	IAC
Jorge Kohanoff	Finding electronic-mediated nuclear stopping power in proton irradiated water-DNA	832		10.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Jorge Kohanoff	Understanding the dynamical properties of H+ and OH- in heavy vs light water from ab initio simulations	1.533,30		10.000	10.000	UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jorge R. Espinosa	Inhibition of aberrant liquid-to-solid transitions in biomolecular condensates: From sequence mutations and domain reordering to small peptide insertion	2.399		1.000	150	BSC/MN5-GPP
Jose Angel Silva Guillén	Transition metal chalcogenides: A DFT study of their different polytypes and charge density waves.	3.000		1.000	2.000	BSC/MN5-ACC
Jose Angel Silva Guillén	Precise characterization of the low temperature structures of vanadium oxides	5.000		1.000	10.000	BSC/MN5-ACC
José Antonio Moríñigo	Optimization and Scalability of a Randomized SVD for EoCoE3	205		250	500	BSC/MN5-GPP
Jose Guilherme Vilhena Albuquerque D'Orey	Quantifying the thermophoretic effect in 2D materials with Friction Force Microscopy: Bridging heat transport with friction	480		6.000	8.000	UMA
José Ignacio ROJAS GREGORIO	Optimization of turbine blade efficiency via active flow control (OBLEA) – Work Package WP1: 2D-CFD baseline simulations RANS + LES	3.646,10		1.024	1.024	BSC/MN5-GPP
Jose Javier Plata Ramos	Predicting the lattice thermal conductivity of high-entropy stabilized skutterudites	962		2.000	2.000	CENITS

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jose Javier Ruiz Pernía	Modelling Asparaginases for Leukemia Treatment. Multiscale Simulations To Elucidate Binding Affinity and Reaction Mechanism.	300		16.000	18.000	BSC/MN5-ACC
Jose Javier Ruiz Pernía	Modelling Asparaginases for Leukemia Treatment. Multiscale Simulations To Elucidate Binding Affinity and Reaction Mechanism.	2.100		16.000	18.000	BSC/MN5-GPP
José Manuel García Regaña	Optimal impurity concentration for turbulence reduction in magnetically confined fusion plasmas	2.695		20.000	20.000	BSC/MN5-GPP
Jose Manuel Morgado Chavez	Lattice QCD analysis of heavy pseudoscalar-meson 3D structure: tPDFs	6.530		4.000	100.000	BSC/MN5-GPP
Jose Manuel Ruiz Franco	Poroelasticity in Soft network Materials Immersed in Viscous Fluid Media	500		10.000	960	CESGA/FT3
		1.000		10.000	960	BSC/MN5-GPP
Jose Maria del Peso Malagon	ATLAS (LHC) simulation of detector response to proton-proton collisions (UAM_m7y2024)	1.850		1.500	4.000	BSC/MN5-GPP
José María García Oliver	Investigation of hydrogen-enriched gas-turbine burner by Partially-Stirred Reactor Large Eddy Simulations (PaSR-LES)	3.200		5.000	5.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jose Oñorbe Bernis	Cosmological mock datasets for WEAVE-QSO	50		2.000	2.000	BSC/MN5-GPP
Josep Flix Molina	MC Simulation for the CMS Experiment at the CERN LHC	8.800		2.000.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Josep M Bergadà Granyó	Optimum Active Flow Control implementation in a large scale wind turbine to enhance its efficiency at a wind speed of 10m/s	2.887		2.048	2.048	BSC/MN5-GPP
Josep M Canals	Single-cell analysis of Huntington's disease during development	25		10.000	250	BSC/MN5-ACC
Juan José Palacios Burgos	Excitonic effects in the non-linear optical response of 2D materials	3.000		500	1.000	UMA
Kirill Zinovjev	Efficient embedding of Machine Learning potentials for biomolecular simulations	570		2.000	2.000	BSC/MN5-ACC
		600		10.000	20.000	BSC/MN5-GPP
Leonardo Manuel Pachano Prieto	Numerical investigation of soot production in a two-phase gas turbine combustor model	2.500		5.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Leonardo Pardo	Applying computational structural biology tools to study pharmacodynamic processes involving G-Protein Coupled Receptor oligomerization	540		2.000	10.000	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Lluís Brotons	Pipeline implementation of modeling and predicting the distribution, population trends, and changes in distribution of bird species across Europe	120		1.000	200	BSC/MN5-GPP
Lucía Romero Pérez	Electromechanical simulations for cardiac precision medicine	2.500		35.000	15.000	BSC/MN5-GPP
M. Angeles Perez Garcia	Many-body elastic properties of ultradense matter and Gravitational waves in isolated and binary coalescence events.	86		10	1	CIEMAT/TURGALIUM
		86		10	1	CESGA/FT3
		192		10	1	BSC/MN5-ACC
M. Veronica Ganduglia-Pirovano	Metal Oxides in Catalysis and Nanozymology Advancements	12.338,06		5.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Mafalda Dias	Generative modelling for disease risk prediction	80		1.000	1.000	BSC/MN5-ACC
Maite Alducin	Mechanism of plasmon-induced dissociation of molecules on metal nanoparticles for catalysis	2.000		10.000	2.000	BSC/MN5-GPP
Manuel Alcamí	Prediction of degradation products of pesticides	2.400		4.096	2.048	BSC/MN5-ACC
Marcel Swart	Exohedral reactivities of endohedrally doped fullerenes	2.355,84		600	600	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Marcelo Sanchez Ortega & Coloma Ballester	MultiView Face blind restoration	16,70		3	3	BSC/MN5-ACC
Marcos Carreres Talens	Curvature-based approach to post-process droplet data from primary breakup VOF-LES simulations of pressure-swirl aero engine atomizers	850		8.000	16.000	BSC/MN5-GPP
Maria Capa Corrales	High-resolution climate change maps for the Balearic Islands with expected multidisciplinary applications.	1.930		20.000	10.000	BSC/MN5-GPP
María Gema Llorens	Unraveling rock deformation history in mantle subduction zones	1.500		2.400	2.400	BSC/MN5-GPP
María Luisa Senent Diez	Pollutants and greenhouse gases in the atmosphere - understanding gas-gas and gas-solid interactions towards a cleaner atmosphere	484,56		200	200	CESGA/FT3
Marta Colleoni	Testing state-of-the-art gravitational waveform models for the fourth LIGO-Virgo-KAGRA observational period	300		6.000	12.000	UMA
Marta Villegas	SciNoBo Foundry and SciNoBo LLMs	4.177,92				BSC/MN5-ACC
Marta Villegas	Ibero-LLM: Optimal Data Distribution, Training and Instruction	9.584,64		10.000	10.000	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Martin Calvelo Souto	Impact of Lipid Cell Composition on Beta-Amyloid Aggregation: Exploring Novel Therapeutic Targets for Alzheimer's Disease	1.080		4.000	4.000	CESGA/FT3
Martin Crocce	Preparing the cosmological analysis of Euclid Data Release 1	6.000		1.000	1.000	BSC/MN5-GPP
Matias Martinez	Creating small language models for source code to achieve sustainable development process of software applications	16,70		1.000	1.000	BSC/MN5-ACC
Matias Martinez	Ai-guided Migration of Java to Kotlin source code based on supervised and unsupervised learning	16,70		1.000	1.000	BSC/MN5-ACC
MERCEDES BORONAT ZARAGOZA	Optimizing CeO ₂ -ZrO ₂ solid solutions as catalysts for alkane oxidative dehydrogenation	502		96	250	UMA
MERCEDES BORONAT ZARAGOZA	ML-based AIMD simulations of the Cu ⁺ /Cu ²⁺ redox cycle involved in N ₂ O decomposition and partial methane oxidation reactions catalysed by Cu-exchanged zeolites	375	77	64	500	CESGA/FT3-GPU
Michael Gabler	Long-time simulations of magneto-rotational Supernovae	1.900		2.000	60.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Miguel Alonso Pruneda	Magnetic exchange interactions in High Entropy Alloys	396		500	500	BSC/MN5-GPP
Miguel Alonso Pruneda	Phonon trapping and relaxation at grain boundaries in nanocrystalline silicon.	1.982		1.000	1.000	BSC/MN5-GPP
Miguel Alonso Pruneda	Electron-phonon interactions at interfaces of nanostructures	730		4.000	1.000	BSC/MN5-GPP
Milton Ruiz	Studies In Theoretical Astrophysics and General Relativity	4.500		100.000	100.000	BSC/MN5-ACC
Miquel Solà Puig	Data driven investigation on fullerene-perovskite systems for solar cell applications	806		900	1.000	BSC/MN5-GPP
Modesto Orozco	Fitting the Newly Developed Nucleic Acid Force Field with the NMR constraints from RNA Tetraloops	750		20.000	20.000	CESGA/FT3-GPU
Modesto Orozco López	Towards the Rational Optimization of Xenonucleotide-Based Enzymes	3.072		3.072	5.120	BSC/MN5-GPP
Nestor Balcazar-Arciniega, and Joaquim Rigola	DNS of mass transfer in gravity-driven turbulent bubble swarms: Effect of Eötvös number	3.100		3.072	3.072	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Nicoletta Liguori	Understanding light-harvesting regulation in photosynthetic organisms with molecular dynamics simulations	140		5.000	5.000	CIEMAT/TURGALIUM
Nuria Lopez	Computational Advances for efficient Hydrogen production via halide perovskite technology	230		1.024	1.024	BSC/MN5-ACC
		5.115,26		6.144	6.144	BSC/MN5-GPP
Nuria Lopez	Advanced simulation of complex catalytic interfaces for CO2 reduction - 2nd period	8.038,28		6.144	6.144	BSC/MN5-GPP
Oriol Jorba Casellas	Quantifying the air pollution climate penalty in Spain compared to other European regions	4.513,33		60.000	200.000	BSC/MN5-GPP
Oriol Lehmkuhl	Towards high-fidelity simulations of full-scale urban flows	281		2.048	20.000	BSC/MN5-ACC
		645		2.048	20.000	BSC/MN5-GPP
Pablo Germán Lustemberg	Enhanced CO2 Valorization through Reversed Water-Gas Shift Reaction using Machine Learning Accelerated Methods	1.232,93		5.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Pablo M. Piaggi	Understanding crystallization with machine-learning-augmented first principles molecular dynamics simulations	138		5.000	5.000	BSC/MN5-ACC
Pablo Ordejón	Corrosion inhibition from first principles: the role of the oxide	4.423		2.000	3.500	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Petia Radeva	Boosting the limits of Data-centric Deep Learning for Visual Food Computing	270,72		16.384	16.384	BSC/MN5-ACC
prof. Maciej Lewenstein	Ergodicity, localization and measurement-induced phenomena in quantum many-body physics	2.800		5.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Raimon Luna i Perelló	Exotic Compact Objects in Einstein-Proca-Scalar Theories	3.000		4.096	512	BSC/MN5-GPP
Ramon Crehuet	Studying alpha-synuclein mutations and conformations beyond therapeutic peptides	750		500	100	BSC/MN5-ACC
Ramón Cuadrado del Burgo	High-throughput data generation on the electronic configurations of 2D covalent organic frameworks	152,90		150	10	BSC/MN5-GPP
Ransel Barzaga	Modelling infrared spectroscopy of amorphous carbonaceous solids in the interstellar medium	800		200	400	UAM
Raul Angulo	Hydrodynamical resimulations for cosmological inferences	4.600		4.000	4.000	BSC/MN5-GPP
Reisel Millan Cabrera	Machine learning based multiscale simulation of zeolites nucleation under hydrothermal conditions	530		200	800	CESGA/FT3-GPU

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Riccardo Rurali	Phonon Database for Data Driven Materials Discovery: dynamically disordered materials and ferroelectric phase change materials	7.200		1.000	4.000	BSC/MN5-GPP
		7.224		1.000	4.000	BSC/MN5-GPP
Robert Castilla López	Numerical simulation of two-phase flow in a water-steam ejector	1.000	280	2.000	10.000	UC
Roberta Farris	Thermal Properties of all-inorganic 2D perovskites	1.000		400	200	BSC/MN5-GPP
Roberto San Jose García	Production of localized climate and air pollution scenarios for future socio-economic scenarios using dynamical downscaling techniques to support EU project DISTENDER activities	4.106		20.000	30.000	CSUC/PIR
Rodrigo Garcia-Muelas	Towards a circular economy for Li-ion batteries: Effect of recycling impurities in NiMnCo electrodes	2.258		500	4.000	BSC/MN5-GPP
Rodrigo Gil-Merino y Rubio	Extremely large microlensing magnification patterns for extragalactic strong gravitational lenses studies	120		30.000	50.000	UMA
Ruben Perez Perez	Defect identification in Ceria systems with High Resolution Atomic Force Microscopy, Simulations and water markers	1.434		600	600	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Santi Roca-Fabrega	HARKONENS: The Arrakihs simulations to unveil the nature of Dark Matter	10.000		500	250	BSC/MN5-GPP
Santiago González de la Hoz	ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities (IFIC Phase XI)	4.000		4.000	4.000	BSC/MN5-GPP
Sara Rastello	N-body simulations of Star clusters with PeTar code	778	222	5.000	200	CIEMAT/TURGALIUM
Sascha Husa	Exploring the phenomenology of eccentric coalescences of black hole binaries	60		2.000	3.000	BSC/MN5-ACC
		7.000		12.000	35.000	BSC/MN5-GPP
Sascha Husa	Preparations for the Spanish Contribution to the LISA Distributed Data Processing Centre	85		2.000	3.000	BSC/MN5-ACC
		985		2.000	4.000	BSC/MN5-GPP
Sergi Castellvi-Bel	Analysis and storage of human multiomic data	1.000		20.000	500	BSC/MN5-ACC
Sergi Ruiz-Barragan	Selective Inactivating pathogen with hard X-ray	1.400		500	500	UMA
Sergio Contreras Hantke	GalaxyEmu: An emulator for galaxy clustering, galaxy-galaxy lensing, and higher-order statistics as a function of cosmology	2.500		3.000	3.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Sergio Madurga Díez	Targeting Bacterial DNA Replication: Investigating Elvitegravir's Inhibition of Topoisomerase IV	170		1.000	2.000	BSC/MN5-GPP
Sergio Madurga Díez	Integrated Analysis of Metabolic Pathways, Patient Classification, and Knock-Out Strategies in Colorectal Cancer	180		1.000	2.000	BSC/MN5-GPP
Sergio Posada Pérez	Ultra-dense Noble gases storage in small pore hydridic framework	576		500	500	BSC/MN5-GPP
Sergio Posada Pérez	Determining active single atom catalysts on C3N4 surfaces: Alternatives to Rh active sites	605		500	500	BSC/MN5-GPP
Sílvia Osuna Oliveras	Exploring the enantioconvergent polycyclization of linear terpenoids catalyzed by Squalene Hopene Cyclase	7.200		500	500	BSC/MN5-GPP
Tanausú del Pino Alemán	Modeling the polarization of the chromospheric Ca I 4227 Å line in 3D models of the solar atmosphere with partial frequency redistribution	2.000		2.000	400	BSC/MN5-GPP
Tomas Andrade	Numerical relativity simulations for eccentric binary black holes with high mass ratios	3.628		100	3.500	BSC/MN5-GPP
Tomas Ramos	Extending the limits of superconducting qubit measurement at strong readout pulses	615		500	25	UC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Xavier Luri Carrascoso	Gaia: Final data reduction cycle	3.000		750.000	1.000.000	BSC/MN5-GPP
Xavier Serra	Large-scale Self-supervised Audio Representation Models for Music Understanding	504		50.000	1.000	BSC/MN5-ACC
Xavier Vilasis-Cardona	LHCb-Dirac at the BSC-HPC	1.000		2.000	2.000	BSC/MN5-GPP
Yseut Bahuet	Expanding High-Resolution WRF Dataset for AI Training and Testing of a Novel Cyclone Detection Tool	910		30.000	10.000	BSC/MN5-GPP

Lista de proyectos PRE-RESERVADOS aprobados dentro de esta resolución :

Líder	Título	Recursos pre-reservados
Elena Khomenko	Sun-To-Earth Extreme Plasma Eruptions	56.800
Marta Villegas	SciNoBo Foundry and SciNoBo LLMs	4.177

6. Siguiendo 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.