

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 2024

Barcelona, Octubre 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 430,8 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 Enero 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
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	2.500		1.200	4.400	BSC/MN5-GPP
Adrià Gil Mestres	Computational Studies in the transition between Low-Spin and High Spin States in Innovative Spin-Crossover Materials	200		500	1.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Adrián Gutiérrez Adame	The PNG-UNITverses: a suite of N-body simulations for the validation of PNG-clustering models.	271,87		50.000	50.000	CESGA/FT3-GPU
Adrián Gutiérrez Adame	The PNG-UNITverses: a suite of N-body simulations for the validation of PNG-clustering models.	45		20.000	20.000	CESGA/FT3
Albert Poater	Carbon dioxide conversion by means of single metal atom catalysts	1.140		900	1.000	BSC/MN5-GPP
Albert Poater	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
Alberto Otero de la Roza	Phase diagrams and reactivity of CO ₂ and carbonate minerals under extreme temperature and pressure conditions (DenseCarbon)	750		1.000	1.000	BSC/MN5-GPP
Alejandro Molina Sánchez	Spin waves in two-dimensional magnetic materials using ab initio methods	800		4.000	8.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Alessio Notari	Reliable numerical calculation of Gravitational Waves from the Early Universe for Pulsar Timing Array experiments.	200		100		CESGA/FT3-GPU
Alicia Palacios Cañas	Attosecond pulse shaping in XUV and X-Ray sources for nonlinear coherent control of electron dynamics	1.005		150	6.000	BSC/MN5-GPP
Alicia Palacios Cañas	Approaching a full quantum mechanical description for Attochemistry.	600		100	100	BSC/MN5-ACC
Allan D. Mackie	Coarse-Grain ssDNA simulations with Dissipative Particle Dynamics using MARTINI "Lego" approach	48		1.000	2.000	BSC/MN5-ACC
		224		1.000	2.000	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	6.500		9.000	9.000	BSC/MN5-GPP
Ángel Morales García	Estimation of Excited States Lifetimes in Photoactive Hydrated TiO2 Nanostructures	756		500	500	NASERTIC
Anna Heffernan	Initial Data for High-Mass-Ratio Compact Binaries	1.935,60		12.000	35.000	BSC/MN5-GPP
Anne Dejoan	Numerical study of the propagation patterns of ultra-lean hydrogen-air flames in Hele-Shaw chambers	2.448		4.500	3.500	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Antonio José Cuesta Vázquez	Cosmological constraints from baryonic acoustic oscillation measurements	120		3.000	3.000	BSC/MN5-GPP
Antonio Picón	Modelling attosecond reflectivity in monolayer MoS2	3.500		2.000	2.000	UMA
Bo Chen	Helium Compression Chamber: an in silico tool to investigate benzene nanothread formation mechanisms under pressure	1.000		15.000	1.000	BSC/MN5-GPP
Carlos Hernández-García	High harmonic topological spectroscopy at the attosecond timescale	150		500	100	CESGA/FT3-GPU
Carlos Hernández-García	High harmonic topological spectroscopy at the attosecond timescale	100		500	100	BSC/MN5-ACC
Carlos Hernández-García	High harmonic topological spectroscopy at the attosecond timescale	1.000		500	200	BSC/MN5-GPP
Carlos Palenzuela	Unified picture of the post-merger magnetic field evolution in compact binary mergers involving neutron stars	200		20.000	20.000	BSC/MN5-ACC
		8.400		140.000	120.000	BSC/MN5-GPP
Carlos-David Pérez-Segarra	Assessment of Large-Eddy Simulation models for urban environment simulations	1.200		256	40.960	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Carme Rovira	Modelling protein glycosylation mechanisms	336		60.000	60.000	BSC/MN5-ACC
		6.720		60.000	60.000	BSC/MN5-GPP
Carme Rovira	Modeling the degradation of macroalgae polysaccharides by marine bacteria	358		60.000	60.000	BSC/MN5-ACC
		7.156		60.000	60.000	BSC/MN5-GPP
Celia Pérez Souto	High-res UTLS simulations to disentangle role and feedbacks on atmospheric structure and composition	2.900	124	20.000	100.000	CESGA/FT3
Claudio Cazorla	Unravelling the polymorphism and ion-transport properties of HfO ₂ at finite temperatures using first-principles calculations and machine learning potentials	9.700		300	800	BSC/MN5-GPP
Coloma Ballester	Contrastive Co-Clustering Mutual Information (C3MI): A Novel Approach to Multimodal Self-Supervised Learning	120		1.000	1.000	CESGA/FT3-GPU
Cristina Díaz Blanco	Exploring Molecular Junctions with Machine Learning Techniques II	2.825		800	800	BSC/MN5-GPP
Daniel Argüeso Barriga	Urban areas and their impact on local climate extremes	2.650		30.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Daniel Muñoz-Santiburcio	Ab initio determination of the pK _w of water at extreme conditions	382,50		10.000	10.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
David Dalmau Ginesta	Finding of Unprecedented Norbornadienes for Energy Storage	500		200	500	CESGA/FT3
David Keitel	In-depth gravitational lensing studies with the LVK network at O4 sensitivity and beyond	800		2.000	5.000	UMA
Dr. Carlos Martí-Gastaldo	Enhancing the water stability of Titanium Organic Frameworks with grafted amines for CO2 Capture	1.238		1.500	1.700	BSC/MN5-GPP
Dr. Daniel Hernangómez Pérez	Electronic and excitonic properties of paramagnetic monolayer, bilayer and bulk CrSBr	4.351,49		32.000	32.000	BSC/MN5-GPP
Dr. María Camarasa Gómez	Artificial intelligence in hybrid functionals for excitonic properties of low-dimensional systems	2.077,60		8.000	8.000	BSC/MN5-GPP
Edgardo Saucedo	Massive screening of ionic diffusion in solid-state electrolytes: from first-principles simulations to machine learning models	4.000		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
Elisa Jimenez-Izal	Size-selected Pt clusters deposited on Au(111)	2.150,40		1.000	12.000	BSC/MN5-GPP
Eliseo Ruiz	Thermal Ellipsoids from DFT calculations and Graph Neural Networks	1.150		120	10	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Ernane de Freitas Martins	Enhancing the longevity and durability of steel structures with recycled Al alloy coatings	1.300		3.000	3.000	BSC/MN5-GPP
Federico Calle-Vallejo	Designing oxyhydroxide/cation interfaces to boost oxygen evolution electrocatalysis	518,40		900	1.500	BSC/MN5-GPP
Federico Calle-Vallejo	Urea production from the co-electrolysis of nitrogen and carbon oxides	462,27		900	1.500	BSC/MN5-GPP
Felipe J. Blas	Hydrate-water interfacial free energies and nucleation rates of hydrates from computer simulation	9.800		6.000	6.000	BSC/MN5-GPP
Fernando Martin	Attosecond pump-probe spectroscopy of charge dynamics in molecules	9.722		1.000	160.000	BSC/MN5-GPP
Fernando Martín Garcia	Optoelectronic Modulations and Doping Mechanisms in Gr/SiC(0001)	3.686		3.000	8.000	BSC/MN5-GPP
Francesc Coll I Cerezo	Large-scale genomic analyses applied to study the genetic mechanisms of antibiotic resistance in enterococci	581		6.144	6.144	UMA
Francesc Illas	Beyond the thermodynamic picture: exploring the selectivity of electrocatalytic NO hydrogenation by means of the Grand-Canonical Density Functional Theory approach.	1.840		900	1.500	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Francesc Viñes Solana	Structural and electronic study of M2C MXene flakes for photocatalytic purposes	2.903		600	1.000	BSC/MN5-GPP
Francesc Viñes Solana	Functionalized MXenes for Advanced Perovskite Solar Cells	983		1.000	1.200	BSC/MN5-GPP
Francesc Viñes Solana	Thermodynamic Stability of Supported Cu(n) Metal Islands	753		400	700	BSC/MN5-GPP
Francesc Xavier Trias Miquel	Energy-consistent Large-Eddy Simulations of buoyancy-driven flows	9.125		256	51.200	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		38.000	40.000	BSC/MN5-GPP
Gabriel Chiodo	The role of stratospheric composition under present-day and future climate projections in CMIP6	604,80		15.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Gaëtan Fichet de Clairfontaine	The complex dance between relativistic outflows and their host galaxies	6.100		28.000	12.200	BSC/MN5-GPP
Gara Villalba	Modelling the impacts of green infrastructure on future heat wave episodes and greenhouse gas fluxes	750		15.000	15.000	UMA
Giuliano Iorio	Exploring the binary formation channels of metal-rich RR Lyrae stars	405		3.000	1.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Giuseppe Battaglia	LRP1's extended glycosylation may affect the protein's quaternary structure formation and stability	600		3.000	3.000	UAM
Giuseppe Battaglia	Extending small fragments' MD evolution to a protein complex via torchmd-net	600		2.000	2.000	BSC/MN5-GPP
Horacio Andres Vargas Guzman	Small RNAs Colocalized onto Functionalized Surfaces of Manifold Polarities for High-Resolution 3D Structural Ensembles Imaging	76,80		4.000	4.000	CESGA/FT3
		252		14.000	12.000	CESGA/FT3-GPU
Humberto Bustince Sola	Optimization of a Large-Scale Transformer for Protein Design from a Natural Language Processing Approach	2.304		6.000	6.000	BSC/MN5-GPP
ICREA Prof. Victor Guallar	Computational Estimation of Maximum Recommended Therapeutic Dose with PELE	4.000		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
Ignasi Vallès Casanova	Evaluating Upper-Ocean Stratification: Implications for Climate Dynamics and Ocean-Atmosphere Interaction in Tropical Basins	584,68		5.000	1.000	UC
Iñaki Tuñón	Mechanisms of HRas deactivation. GTP Hydrolysis and Conformational Changes	300		16.000	16.000	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Iñaki Tuñón	Mechanisms of HRas deactivation. GTP Hydrolysis and Conformational Changes	4.100		16.000	16.000	BSC/MN5-GPP
Inés Corral Pérez	Is isocytosine a photostable nucleobase? insights from time resolved studies.	364		900	1.500	BSC/MN5-GPP
Ivette Rodríguez	Deep reinforcement learning - based strategy for active flow control of separated flows	1.705		2.048	20.000	BSC/MN5-ACC
Ivette Rodríguez	Deep reinforcement learning - based strategy for active flow control of separated flows	13,44		2.048	20.000	BSC/MN5-GPP
Javier Carrasco	Advancing Atomistic Design for Optimal Li-Metal/Solid Electrolyte Interfaces in All-Solid-State Lithium-Ion Batteries	653		950	750	CIEMAT/TURGALIUM
Javier García Marín	Computational insights into the scaffolding activation of a pseudokinase by a small molecule	500		750	500	BSC/MN5-GPP
Jeremias Likerman	Estimation of geothermal potential of volcanic zones using thermomechanical numerical models	1.781		2.400	4.800	BSC/MN5-GPP
Jesús González Vázquez	Time resolved overview of the photophysics of alkaloid derivates as models for UV filters.	47,60		500	2.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Joan Torras Costa	Computational study of the aggregation propensity of the peptides/peptidomimetics scaffolds for regenerative medicine	333		10.240	2.040	BSC/MN5-ACC
		6.666		10.240	2.048	BSC/MN5-GPP
Johannes Feist	Harnessing Extreme Light-Matter Interactions		272	4.000	4.000	BSC/MN5-ACC
		2.000		10.000	6.000	BSC/MN5-GPP
Jordi Juárez-Jiménez	Multiple-copy association studies (MAS) as a tool for Computer-Aided Drug Design.	70		5.000	5.000	BSC/MN5-ACC
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	324		400	200	CESGA/FT3-GPU
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	Precise characterization of the low temperature structures of vanadium oxides	7.000		1.000	20.000	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	20.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
José Antonio Moríñigo	Optimization and Scalability of a Randomized SVD for EoCoE3	210		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	650		6.000	12.000	UMA
José Ignacio ROJAS GREGORIO	WOW-CONTROL – WP1 expanded: 2D-CFD baseline simulations RANS + LES; DTU 10MW and MuWind turbines	2.413,44		1.024	1.024	BSC/MN5-GPP
Jose Javier Plata Ramos	Computational modelling of the thermoelectric performance of transverse thermoelectric materials: the case of Re4Si7	950		2.000	2.000	CENITS
Jose Javier Ruiz Pernía	Understanding of the Enzymatic Properties of the Computationally Redesigned gpASNase1 and de novo Design of Asparaginases for Leukemia Treatment. Multiscale Simulations To Elucidate the Properties of de novo Designs.	510		16.000	18.000	BSC/MN5-ACC
Jose Javier Ruiz Pernía	Understanding of the Enzymatic Properties of the Computationally Redesigned gpASNase1 and de novo Design of Asparaginases for Leukemia Treatment. Multiscale Simulations To Elucidate the Properties of de novo Designs.	3.200		16.000	18.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
jose luis sanchez gomez	Weather forecast for scheduling operations in sectors heavily impacted by adverse conditions. (F-Scheduler)	1.800		20		BSC/MN5-GPP
Jose Maria del Peso Malagon	ATLAS (LHC) simulation of detector response to proton-proton collisions (UAM_m11y2024)	2.000		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)	4.000		10.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Josep Flix Molina	MC Simulation for the CMS Experiment at the CERN LHC	10.300		2.000.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Josep M Bergadà	Optimum Active Flow Control implementation in a large scale wind turbine to maximize the power generated at small (5m/s) and medium (10m/s) wind speeds.	5.741,50		4.096	2.048	BSC/MN5-GPP
Juan José Palacios Burgos	A novel approach to compute excitons and optical responses in solids from first-principles	1.800		20	3.000	UMA
Kirill Zinovjev	Accelerating convergence of multiscale molecular simulations with "mean MM force" approach	150		10.000	10.000	BSC/MN5-ACC
		500		10.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Lorena Ruiz Pérez	On the Amyloid Beta 40 aggregation and secondary nucleation	1.500		1.500	1.500	UAM

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Lucia Romero Perez	Electromechanical simulations of electrical and pharmacological therapies	6.000		35.000	15.000	BSC/MN5-GPP
Lucía Sanchis Sánchez	Modelling of fast-ion transport in fusion plasmas with symmetry-breaking fields	3.500		2.000	5.000	BSC/MN5-GPP
M. Verónica Ganduglia Pirovano	Innovative Approaches to Catalysis and Nanozymology Using Metal Oxides	9.979,20		10.000	100.000	BSC/MN5-GPP
Manuel Alcamí	Prediction of degradation products of pesticides	1.200		8.192	2.048	BSC/MN5-ACC
Marc Garcia-Borràs	Unravelling unnatural oxidation pathways in P450s by dynamic control of reactive intermediates	215		5.000	5.000	CESGA/FT3-GPU
Marcos Carreres Talens	Curvature-based approach to post-process droplet data from primary breakup VOF-LES simulations of pressure-swirl aero engine atomizers	1.022		8.000	16.000	BSC/MN5-GPP
María Gema Llorens	Unraveling rock deformation history in mantle subduction zones	900		2.400	4.800	BSC/MN5-GPP
María Gonçalves Ageitos	Assessment of mineral dust radiative forcing from observationally-constrained dust emissions since the pre-industrial era.	3.682,56		61.440	204.800	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Marina Corbella Morató	Deciphering the specificities for enzymatic production of universal type O blood	60		6.000	6.000	BSC/MN5-ACC
Marina Corbella Morató	Deciphering the specificities for enzymatic production of universal type O blood	1.881,60		6.000	6.000	BSC/MN5-GPP
Marta Villegas	Ibero-LLM: Optimal Data Distribution, Training and Instruction	3.329		10.000	10.000	BSC/MN5-ACC
Martin Crocche	Preparing the cosmological analysis of Euclid Data Release 1	2.500		1.000	1.000	BSC/MN5-GPP
MERCEDES BORONAT	Understanding the catalytic behaviour of Ru-based materials in the low temperature CO2 methanation	998		96	250	UMA
Michael Gabler	Long-time simulations of magneto-rotational Supernovae	2.700		2.000	60.000	BSC/MN5-GPP
Miguel Alonso Pruneda	Magnetic exchange interactions in High Entropy Alloys	1.492		500	500	BSC/MN5-GPP
Miguel Angel Armengol de la Hoz	MediCorderDX - Empowering Diagnostics and Optimize treatment with Autoencoder-Enhanced Free Text to CIE10 Conversion.	500		1.024	500	BSC/MN5-GPP
Miguel Ángel Armengol de la Hoz	Análisis de los factores determinantes del ingreso en UCI de pacientes con infección por SARS-CoV2 en Andalucía (RASCAL-CRX)	112		1.000	1.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Milton Ruiz	Studies In Theoretical Astrophysics and General Relativity	9.120		120.000	150.000	BSC/MN5-GPP
Miquel Solà Puig	Nanographenes for Li-S battery applications	1.236		900	1.000	BSC/MN5-GPP
Modesto Orozco	The way membrane cholesterol interacts with L-type amino acid transporter: an allosteric mechanism	934,50		10.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Modesto Orozco López	Towards the Rational Optimization of Xenonucleotide-Based Enzymes	9.072		3.072	5.120	BSC/MN5-GPP
Modesto Orozco López	MoDEL_CNS: a new dataset of atomistic Molecular Dynamics simulations for relevant signal transduction proteins	7.200		30.000	120.000	BSC/MN5-ACC
Mohit Kumar	Observing the self-assembly of a new phospholipid molecule	1.200		3.000	2.000	UAM
Nestor Balcazar-Arciniega, and Joaquim Rigola	DNS of drag force and mass transfer in gravity-driven bubble swarms on inclined channels	3.100		3.072	3.072	BSC/MN5-GPP
Nicolas Moreno	Mesoscale Modelling of Passive Transport of Viruses and Viral Spikes	2.200		200	2.000	BSC/MN5-GPP
Nicolas Moreno	Lagrangian Heterogeneous Multiscale Modelling for adhesive polymeric materials	1.500		200	2.000	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Nuria Lopez	Computational Advances for efficient Hydrogen production via halide perovskite technology	460,80		1.024	1.024	BSC/MN5-ACC
		4.838,40		6.144	6.144	BSC/MN5-GPP
Nuria Lopez	Advanced Simulations to Close the Carbon Cycle via Catalysis: from Nanoparticles to Interfaces	9.042,43		6.144	6.144	BSC/MN5-GPP
Oier Lopez de Lacalle	Visual Language Models for Basque	480		25.000	100.000	BSC/MN5-ACC
Oriol Jorba Casellas	Quantifying the air pollution climate penalty in Spain compared to other European regions	4.838,02		60.000	200.000	BSC/MN5-GPP
Oriol Lapiedra González	Podarcis pityusensis genomics	240		15.000	50.000	BSC/MN5-GPP
Oriol Lehmkuhl	Towards high-fidelity simulations of full-scale urban flows	1.198		2.048	40.000	BSC/MN5-ACC
		191		2.048	40.000	BSC/MN5-GPP
SEDIA	ALIA	29.491		1.000	1.000	BSC/MN5-ACC
P.h. D Claudio Torres	Roberta Language Model Training on a original and a debias dataset on behalve of the gender social bias reduction on word and contextual embedding	30		750	750	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Pablo Gamallo Belmonte	DFT and kinetic study of methane dissociation over carbon catalysts for hydrogen production and carbon production	242		900	1.500	BSC/MN5-GPP
Pablo Gamallo Belmonte	DFT screening of metallic clusters encapsulated in ZSM-5 zeolite (X _n Y _m @ZSM-5, with X,Y= Ru, Co, Ni) and their performance in CO ₂ activation.	2.157		900	1.500	BSC/MN5-GPP
Pablo Gamallo Belmonte	Study of direct dehydrogenation of methane on NiCu clusters supported on γ -Al ₂ O ₃ (0001)	940		900	1.500	BSC/MN5-GPP
Pablo Germán Lustemberg	Enhanced CO ₂ Valorization through Reversed Water-Gas Shift Reaction using Machine Learning Accelerated Methods	1.481,47		5.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Pablo M. Piaggi	Large-scale machine-learning-augmented molecular dynamics simulations for understanding crystallization	298		5.000	5.000	BSC/MN5-ACC
Pablo Ordejon	The kinetics and voltage effects on the interactions of corrosion inhibitors at the metal-water interface	4.200		2.000	3.500	BSC/MN5-GPP
Paula Petrone	Deep Learning to understand the cellular fundamentals of aging using stem cell microscopy	140		200	50	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Prof. Luis Miguel Pinho	Evaluation of OpenMP task to thread mapping approaches on HPC platform	1,60		30		BSC/MN5-GPP
Raimin Luna i Perelló	Exotic Compact Objects in Einstein-Proca-Scalar Theories	3.000		4.096	512	BSC/MN5-GPP
Ramón Cuadrado del Burgo	Exploring magnetic phenomena in 2D Mn ₂ Ru _x Ga/MgO(001) heterojunctions	134		150	10	BSC/MN5-GPP
Reisel Millan Cabrera	Machine learning based multiscale simulation of zeolites nucleation under hydrothermal conditions	270		200	800	CESGA/FT3-GPU
Riccardo Rurali	Dynamical tuning on the thermal conductivity of an antiferroelectric	3.072		1.000	4.000	CESGA/FT3
		2.304		1.000	4.000	BSC/MN5-ACC
		2.304		1.000	4.000	BSC/MN5-GPP
Robert Castilla López	Numerical simulation of two-phase flow in a water-steam ejector	250		2.000	10.000	UC
Roberta Farris	Thermal Properties of all-inorganic 2D perovskites	200		400	200	BSC/MN5-GPP
Roberto D'Agosta	Optical spectra of metallic nanoclusters beyond Density Functional Theory	1.650		4.000	4.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Rodrigo Tenorio	Searching for continuous gravitational-wave signals from unknown sources in Advanced LIGO O4 data	650		500	12.000	BSC/MN5-ACC
Ruben Perez	The Role of Mutations and Glycans in Modulating Viral Protein and Manifold Polarizable-Surface Interactions	345,60		14.000	14.000	BSC/MN5-ACC
		24		7.000	7.000	BSC/MN5-GPP
Rubén Pérez Pérez	High Resolution Atomic Force Microscopy for studying two relevant catalytic systems: CeO2 and CoPc derivatives	1.000,22		6.000	6.000	BSC/MN5-GPP
Santi Roca-Fabrega	HARKONENS: The Arrakihs simulations to unveil the nature of Dark Matter	8.000		40.000	150.000	BSC/MN5-GPP
Santiago Avila	What can Euclid or DESI tell us about inflation? The response of low-redshift tracers to Primordial Non-Gaussianities.	1.180		20.000	40.000	BSC/MN5-GPP
Santiago González de la Hoz	ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities (IFIC Phase XII)	4.500		4.000	4.000	BSC/MN5-GPP
Sara Rastello	Galactic Black-Hole-star binaries in the Gaia Era with N-body simulations	2.000		3.000	3.000	UZ
Sascha Husa	Exploring the phenomenology of eccentric coalescences of black hole binaries	40		2.000	3.000	BSC/MN5-ACC
		7.200		12.000	35.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Sascha Husa	Preparations for the Spanish Contribution to the LISA Distributed Data Processing Centre	100		3.000	5.000	BSC/MN5-ACC
		1.000		3.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Sergio Chiva Vicent	APPWIND: ENVIRONMENTAL MANAGEMENT PLATFORM APPLIED TO THE CONTROL OF ATMOSPHERIC POLLUTION BASED ON AI AND COMPUTATIONAL FLUID SIMULATION	1.228		1.024	2.048	BSC/MN5-GPP
Sergio Mendoza Farina	KOIOS - Frugal Learning approaches	250		10.000	10.000	BSC/MN5-ACC
		53,76		1.500	1.500	BSC/MN5-GPP
Sergio Posada Pérez	ABIOTIC HYDROCARBON PRODUCTION IN METAMORPHIC ROCKS	538		900	1.000	BSC/MN5-GPP
Sergio Posada Pérez	Single and Dual Atom Catalysts on Carbon Nitride Supports	864		900	900	UZ
Sonia Raquel Gámiz Fortis	Modelling of the soil-atmosphere interactions for regionalized decadal climate predictions in the Iberian Peninsula	2.300		5.120	20.480	IAC
Stefan Bromley	Factors affecting performance of electrocatalysts based on tethered redox active molecules	1.306		500	1.000	CESGA/FT3

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Susana Pilar García Abellán	Compiling a database of nonlinear optical properties using high-level computational chemistry methods	115,20		2.000	5.000	UZ
Tomas Andrade	Numerical relativity simulations for eccentric binary black holes with high mass ratios	5.645		200	7.000	BSC/MN5-GPP
Violeta González Pérez	The initial conditions of the Universe studied with multi-tracers	196,61		50.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Weiguang Cui	The300 galaxy clusters -- A complete mass volume limited sample of simulated galaxy clusters up to z=1.	9.000		250.000	250.000	BSC/MN5-GPP
Xavier Luri Carrascoso	Gaia: Last daily operational activities and trial runs for the final data reduction cycle	2.000		750.000	1.000.000	BSC/MN5-GPP
Xavier Vilasis-Cardona	LHCb-Dirac at the BSC-HPC	1.000		2.000	2.000	BSC/MN5-GPP

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

Líder	Título	Recursos pre-reservados
-------	--------	-------------------------

6. Siguietes pasos

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

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

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

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

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