

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 2025

Barcelona, Noviembre 2025

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 816,9 millones de horas de CPU (140M de horas de nodo, 4.25M exaflop), que se obtienen sumando el acceso concedido en las diferentes arquitecturas, incluyendo con prioridad y sin prioridad. Esto incluye los sistemas instalados 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). Algunos de los nodos en este periodo no han recibido ningún proyecto, al estar en fase de instalación de nuevas infraestructuras.

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 6 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 acceso a los equipos de la RES con utilización preferente. El resto de actividades que han obtenido recursos, es con utilización no preferente (es decir, utilizando el equipo cuando este no sea usado por las actividades preferentes, con lo que no se puede garantizar que puedan usar todo el acceso asignado). Las actividades no concedidas recibirán un e-mail indicando que no ha sido posible concederles acceso a las máquinas en esta convocatoria. Se anima a todos los solicitantes a presentar solicitud de acceso para la siguiente convocatoria, que iniciará la evaluación el próximo mes de Marzo de 2026.

Por primera vez, se ha distribuido también acceso a las tecnologías cuánticas de la RES en BSC-CNS, CESGA y SCAYLE, financiadas por el proyecto QuantumSpain.

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
Adam Ranson	Decoding high dimensional neural representations during sleep	1.000		200	200	BSC/MN5-ACC
Adeline de Villardi de Montlaur	Investigation on wall-modeled large-eddy simulations of sheared daytime atmospheric boundary layers over rough surfaces for wind-energy applications	5.490,24		1.500	4.500	BSC/MN5-GPP
Adrián Gutiérrez Adame	New tools for the generation of the state-of-the-art PNG simulations for DESI final analysis	250		10.000	30.000	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Adrián Gutiérrez Adame	New tools for the generation of the state-of-the-art PNG simulations for DESI final analysis	220		20.000	60.000	BSC/MN5-GPP
Albert Bruix	Predicting stable states of Ag nanoparticles under reaction conditions with machine learning potentials and Replica-Exchange Grand Canonical Monte Carlo simulations	1.680		2.000	4.000	BSC/MN5-GPP
Albert Civit Bertran	3D Non-linear non-adiabatic MHD simulations of 3D stellarators and tokamaks	1.317		2.000	2.000	BSC/MN5-GPP
Albert Poater	The role of entropy towards latent olefin metathesis catalysts	1.700	235	600	600	CSUC/PIR3
Albert Poater	Predictive Molecular Modelling of Salt–Solvent Reduction Pathways for SEI Formation in Alkali Batteries	1.000		500	500	CSUC/PIR3
Albert Poater	Surface termination effects on 2D carbides for electrochemical conversion	0,56		900	1.000	BSC/MN-ONA
Albert Solé-Daura	Computational determination of acidity constants of polyoxometalates	2.600		256	256	BSC/MN5-GPP
Alberto Zingaro	Simulation of ATTR Cardiac Amyloidosis via Electromechanical Models	6.400		20.000	2.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Alejandra Renee Pillado Gonzalez	Calibration and validation of state-of-the-art neutron star black hole gravitational waveform models	1.800		300	50.000	BSC/MN5-GPP
Alejandro Bermúdez	Quantum characterisation for Error Correction and Mitigation	0,04		256	256	BSC/MN-ONA
Alexandra Gómez Villa	Large-Scale Systematic Assessment of Color Controllability in State-of-the-Art Text-to-Image Models	5		10.000	20.000	BSC/MN5-ACC
Alfonso Valencia	Integrating AI and Synthetic Biology for Sustainable Industrial Production of Plant Metabolites	400		15.000	15.000	BSC/MN5-ACC
Alicia Lozano Diez	Evaluating Large Audio Language Models for Speaker Characterization Tasks	12		10.000	5.000	BSC/MN5-ACC
Alicia Palacios	Attosecond metrology exploiting new waveforms in intense HHG pulses and Free Electron Lasers	750		300	6.000	BSC/MN5-GPP
		0,01		200	500	BSC/MN-ONA
Allan Mackie	Coarse-grained simulations of membraneless organelles	48		4.000	2.000	BSC/MN5-ACC
		500		4.000	2.000	BSC/MN5-GPP
Ana María Mancho	High-Resolution Ocean Modelling at Coastal Scales for Sustainable Aquaculture (BlueHiRes)	60		2.000	2.000	CESGA/FT3

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Andres Pacheco Pages	Monte Carlo Simulation for the ATLAS Experiment at the CERN LHC at the MareNostrum by IFAE/PIC Tier-1	5.362		9.000	9.000	BSC/MN5-GPP
Ángel Morales Garcia	Conversion of Methane on V2Ox clusters supported on Ti3C2 MXenes	1.038		500	500	NASERTIC
Anna Guseva	3D numerical simulations of thin-shell convection in intermediate-mass stars	3.960		10.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Anna Heffernan	High Mass Ratio Compact Binaries	1.500		14.000	45.000	BSC/MN5-GPP
Anthoni Alcaraz Torres	Pressure induced- SERS enhancement of Pyridine on mono and bimetallic Au and Ag Clusters.	1.000		1.000	2.000	BSC/MN5-GPP
Anthoni Alcaraz Torres	Atomistic Insights into quasi-solid-state Li-O ₂ Batteries with MoS ₂ @CNT Cathodes using Large-Scale DFT Simulations	1.000		1.000	2.000	BSC/MN5-GPP
Antoni Ramos Buades	Assessing gravitational-wave modeling approximations with binary black-hole numerical relativity simulations	6.000		19.200	19.200	UMA
Antonio José Álvarez Naveira	CFD simulations of a twin-box bridge under Small Scale Rod Induced Turbulence (SSRIT)	240		10.000	600	CESGA/FT3
Arghya Bhowmik	Exploring the Cathode Space for Sodium-Ion Batteries Using Generative Models and GNNs	4.000		3.000	3.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Arnau Riera	Classical Simulation of Quantum Analog Computation	600		5.000	5.000	BSC/MN5-ACC
		2.000		5.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Arnau Rios Huguet	Quantum computing for nuclear physics & convolutional machine learning applications	0,22		256	256	CESGA/FT-QMIO-QPU
		0,50		256	256	BSC/MN-ONA
Aurelio Gallardo	Computational characterization of the absorption of molecular gases on low-coordinated Co and Au metallic ions captured on the inner cycle of mono- and di-carbahemiporphyrines.	288		500	300	BSC/MN5-GPP
Aurelio Juste	Identification of the charge of the jets in the ATLAS experiment	40,32		2.000	200	BSC/MN5-ACC
Beatriz Gonzalez del Rio	Computational Atomistic Study of Oxidation in Liquid Alloys	1.042,27		250	3.000	BSC/MN5-GPP
Beñat Gurrutxaga-Lerma	Machine Learning Interatomic Potentials for High Entropy Alloys	1.600		10.000	15.000	BSC/MN5-ACC
Beñat Gurrutxaga-Lerma	Machine Learning Interatomic Potentials for High Entropy Alloys	8.288		10.000	15.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Blanca Biel Ruiz	Development of Machine-Learning trained potentials for the study of irradiation-induced defects in alpha-Fe/cementite interfaces for nuclear fusion	3.732		4.000	4.000	BSC/MN5-GPP
		411		4.000	4.000	BSC/MN5-ACC
Borja Aizpurua	Quantum nanoLLM	30		1.000	2.000	BSC/MN5-ACC
Borja Aizpurua	ARES: Advanced Reduction and Efficiency for Sovereign AI	8.000		10.000	100.000	BSC/MN5-ACC
Brendon Bradley	Physics-based simulation of earthquake-induced ground motions for seismic hazard analysis	7.000		1.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Bruno Di Geronimo	Genetic Code Expansion for Biocatalysis: Mechanistic Insights on alkane monooxygenase MapADO via in QM/MM Simulations	800		2.000	2.000	CIEMAT/XULA
Carlos Palenzuela	Properties of the ejecta in binary neutron star mergers with realistic initial magnetic fields and neutrino radiation transport	600		100.000	100.000	BSC/MN5-ACC
		4.000		160.000	120.000	BSC/MN5-GPP
Carme Rovira	Modelling protein glycosylation mechanisms	960		160.000	160.000	BSC/MN5-ACC
		12.164		160.000	160.000	BSC/MN5-GPP
Carme Rovira	Mechanistic directionality of GDP-mannose epimerases explored by multiscale simulations	1.120		160.000	160.000	BSC/MN5-ACC
		13.541		160.000	160.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Carmen Gil	Discovery and Optimization of Novel Inhibitors for Cyclin G-associated Kinase (GAK) Using High-Performance Computational Approaches	78		5.000	5.000	BSC/MN5-ACC
		1.751,68		5.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Carmen Sousa	Ground and Excited state Reactivity for the Water Splitting Reaction in Surface Terminated MXenes	1.344		1.000	1.200	BSC/MN5-GPP
Celia Pérez Souto	High-res UTLS simulations to disentangle role and feedbacks on atmospheric structure and composition	2.000		90.000	90.000	CESGA/FT3
César González Pascual	First-Principles Investigation of Gas Adsorption on defective Fe ₂ O ₃ Surfaces	300		1.000	1.000	UC
Cesare Cugnasco, PhD.	Scaling Internet-Wide Vector Indexing for Advanced Machine Learning Applications	2.300		500.000	500.000	BSC/MN5-ACC
		1.500		500.000	500.000	BSC/MN5-GPP
Chervin Laporte	Models of the MW-LMC-like interactions in a cosmological context	520		5.760	5.760	BSC/MN5-GPP
Cibrán López Álvarez	From First-Principles to Machine Learning: Large-Scale Screening of Ionic Diffusion in Solid-State Electrolytes	4.000		300	700	BSC/MN5-GPP
Claudio Cazorla	Giant Photocaloric Effects in Low-Dimensional Materials for Solid-State Cooling	1.500		300	1.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Cristina Díaz Blanco	Charge Transport in Molecular Junctions with Bi-Material Electrodes	4.382		4.000	4.000	BSC/MN5-GPP
Daniel García Figueroa	Understanding particle and gravitational wave emission from cosmic strings	4.436		30.000	30.000	BSC/MN5-GPP
Daniel Gosálbez Martínez	Search of the ground states of ReAg_2Cl_6 , a new 2D magnetic material	1.493,50		5.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Daniel Hernangómez Pérez	Many-body perturbation theory for electronic and optical properties of graphene-TMD van der Waals heterobilayers	1.935,40		40.000	40.000	BSC/MN5-ACC
Daniel Hernangómez Pérez	Many-body perturbation theory for electronic and optical properties of graphene-TMD van der Waals heterobilayers	3.584		40.000	40.000	BSC/MN5-GPP
Daniel Muñoz-Santiburcio	Understanding the phase behavior of nanoconfined water with an ab initio hydrostatic pressurizer	2.763		10.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Daniel Muñoz-Santiburcio	Computing the IR spectra of water and the solvated proton and hydroxide from ab initio simulations	1.422		10.000	10.000	UMA
David Keitel	Gravitational-wave lensing studies in open data of unprecedented sensitivity	820		2.000	5.000	UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
David Pérez García	Tensor-Network Based Monte Carlo sampling of 2D and 3D lattice systems with disorder	570,24		100	4	BSC/MN5-GPP
Dominique M.-A. Meyer	Composite supernova remnants	5.000		30.000	30.000	BSC/MN5-GPP
Dr. Eduardo Mendive Tapia	Multicaloric refrigeration near room temperature in van der Waals ferromagnets	4.500		5.000	1.000	BSC/MN5-GPP
Dr. Gibu George	Electron transfer at fullerene–perovskite interfaces	1.373,20		900	1.000	BSC/MN5-GPP
Dr. Matthew Orkney	Genetically modified cosmological hydrodynamical simulations of Milky Way-like galaxies	350		14.000	5.000	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	Global turbulence simulations for present and future stellarators	8.064		30.000	50.000	BSC/MN5-GPP
Eleanor Hamilton	Evaluating the potential of high precision precessing gravitational wave models	710		2.000	5.000	UMA
Elena Bascones	Heavy Fermions in Twisted Bilayer Graphene	5.998		50	50	BSC/MN5-GPP
Elena Lloret Pastor	Quantum Mechanics for Natural Language Processing	0,02		500	500	BSC/MN-ONA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Elisa Jimenez Izal	Small Pt units diffusion on epitaxial graphene grown on Ir(111)	4.830		750	1.500	BSC/MN5-GPP
Eliseo Ruiz	Spin Crossover Systems with Single-Molecule Hysteresis Behavior	820		120	4	BSC/MN5-GPP
Emilio Artacho	Penetration and stopping of electron and positron projectiles in condensed matter from first principles	4.000		5.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Enrique Marcos Benteo	Computational redesign of quorum-quenching enzyme specificity for targeted antivirulence-therapies	1.215		2.000	4.000	BSC/MN5-ACC
Esteban Ferrer	TurbNoise: Simulation of offshore wind turbines and prediction of the aeroacoustic impact underwater	9.600		5.000	1.000	BSC/MN5-GPP
Estefanía Fernández Villanueva	CO2 hydrogenation to methanol over (MgO) _n /Cu(111) (n=3, 12) inverse catalysts	2.034,73		500	1.000	BSC/MN5-GPP
Fátima Lucio Martínez	Cyclometallation leading to tetranuclear architectures. Mechanism and reactivity elucidation (CyTAME)	13		300	250	CESGA/FT3
Federico Calle-Vallejo	Comprehensive assessment of Ir and Ru oxides as OER electrocatalysts: from extended surfaces to nanoparticles.	508,03		900	1.500	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Federico Schianchi	Effects of magnetic fields and neutrino transport in simulations of binary neutron star mergers with short lived remnant: magnetic field amplification and secular ejecta mechanisms.	1.800		40.000	40.000	BSC/MN5-GPP
Felipe J. Blas	Molecular Insights into Hydrate Nucleation and Phase Equilibria: Toward Sustainable Energy and Climate Solutions	9.797		6.000	6.000	BSC/MN5-GPP
Fernando Fernández Rebollo	Data Quality Metrics for Efficient Offline Reinforcement Learning	36		2.000	100	BSC/MN5-ACC
Fernando Iglesias-Suarez	Development and Implementation of Climate Emulator for Destination Earth (DestinE)	2.240		128.000	128.000	BSC/MN5-ACC
		216		128.000	128.000	BSC/MN5-GPP
Fernando Martín	Attosecond electron dynamics in molecules induced by broadband light pulses	9.910		1.000	220.000	BSC/MN5-GPP
Fernando Martín García	Optoelectronics of organic donor-acceptor molecules on NaCl Substrate II	4.932		5.000	9.000	BSC/MN5-GPP
Ferran Feixas	Electrostatic preorganization in allosterically-regulated enzymes	345,60		1.000	1.000	BSC/MN5-GPP
		300		5.000	5.000	BSC/MN5-ACC
Ferran Feixas	Time-resolved mechanism of the photopharmacological allosteric regulation of metabotropic glutamate receptor 5	300		5.000	5.000	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Francesc Viñes Solana	CO2RR on Copper Nanoislands: Stability and Reactivity of Cun Clusters	2.022		800	900	BSC/MN5-GPP
Francesc Viñes Solana	C2H4 Hydrogenation on Molybdenum Carbides Nanoparticles Supported on the Au (111) Surface	3.104		1.000	1.200	BSC/MN5-GPP
Francesc Xavier Trias Miquel	A rational length scale for Large-Eddy Simulation of turbulent flows	7.675		250	65.536	BSC/MN5-GPP
Francisco Javier Salvador Rubio	Using an Adaptive Mesh Refinement code for the DNS study of the atomization process in a pressure-swirl atomizer	4.000		38.000	40.000	BSC/MN5-GPP
Gaëtan Fichet de Clairfontaine	Probing Relativistic Jets: Dynamics and Multimessenger Emissions Across Scales	4.000		10.000	3.000	BSC/MN5-GPP
Gara Villalba	Inverse modelling of biogenic and anthropogenic greenhouse gas emissions as a tool to support urban climate change mitigation strategies	403		15.000	15.000	UMA
Germán RODRIGO	Quantum algorithms for collider physics	0,02		16	16	CESGA/FT-QMIO-QPU
Germán RODRIGO	Quantum algorithms for collider physics	0,04		16	16	BSC/MN5-GPP
Germán RODRIGO	Quantum algorithms for collider physics	0,02		16	16	BSC/MN-ONA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Giancarlo Castellano	Multilayer Pediatric Patient Similarity Network modeling: biomolecular profiles for clinical and phenotype prediction?	50		7.000	7.000	BSC/MN5-GPP
Giancarlo Castellano	Multiomics and high-throughput drug screening approaches for targeted treatment of drug-resistant Neuroblastoma	50		7.000	7.000	BSC/MN5-GPP
		50		7.000	7.000	CSUC/PIR3
Giancarlo Castellano	Orphan vascular anomalies: harnessing computational multilayer networks to identify therapeutic opportunities	50		7.000	7.000	BSC/MN5-GPP
		50		5.000	7.000	CSUC/PIR3
Giuliano Iorio	Shedding light on a Galactic mystery: state-of-the-art stellar evolution simulations to investigate the formation of metal-rich RR Lyrae stars.	525		4.000	2.000	CSUC/PIR3
Giuseppe Battaglia	A computational study on the binding free-energy and interaction between MRC1-mUNO	1.200		1.500	1.500	UAM
Gonzalo Rubio	High-Fidelity GPU-Accelerated Simulations for Turbulence Modeling and AI-Enhanced Aerodynamic Design	4.147,20		80.000	60.000	BSC/MN5-ACC
		560		80.000	60.000	BSC/MN5-GPP
Horacio Andres Vargas Guzman	Positioning small RNAs onto Functionalized Surfaces of Manifold Polarities for High-Resolution 3D Structural Ensembles Imaging	75		5.000	5.000	BSC/MN5-GPP
		240		15.000	15.000	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Horacio Pérez-Sánchez	From Billions to Leads: Consensus-Based Ultra-Large Virtual Screening for Novel Drug Discovery	506		2.000	2.000	BSC/MN5-ACC
Horacio Pérez-Sánchez	From Billions to Leads: Consensus-Based Ultra-Large Virtual Screening for Novel Drug Discovery	5.056		5.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Hsiu-Chuan Lin	Decoding Gene Regulatory Networks in Cell Fate Decisions	1.600		12.280	6.144	BSC/MN5-GPP
Hugo Cristian Ojeda	Quantum Simulation of Piezoelectric AlN Alloys for Sustainable Energy Harvesting	2		200	200	CESGA/FT3
		2		200	200	CESGA/FT3-GPU
		20		200	200	CESGA/FT-QMIO-cpu
		0,02		200	200	CESGA/FT-QMIO-QPU
Ignacio Ingerto Ingerto	Digital Twin for Reliable Aerial Means Planning in Firefighting (RAMP_FFDT)	1.103,76		900	3.000	BSC/MN5-GPP
Ignacio Pagonabarraga Mora	Coupling activity, hydrodynamics, and responsiveness in complex soft matter	300		10.000	10.000	BSC/MN5-ACC
		16.000		200.000	200.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Ignacio Soto Molina	Nationwide High-Resolution Environmental Noise Modeling in Spain	7.169		100.000	600.000	BSC/MN5-GPP
IGNACIO SOTO MOLINA	Dynamic Spatio-Temporal Noise Assessment from Aircraft in Spain and France	7.440		100.000	600.000	BSC/MN5-GPP
Iñaki Tuñón	Simulating ATP Hydrolysis with Machine Learning Potentials	260		16.000	16.000	BSC/MN5-ACC
Iñaki Tuñón	Simulating ATP Hydrolysis with Machine Learning Potentials	4.200		16.000	16.000	BSC/MN5-GPP
Inés Corral Pérez	Gaining insights into the deactivation dynamics in artificially expanded AEGIS alphabet: photophysics of K.	705,60		900	1.500	BSC/MN5-GPP
Ines Corral Perez	Theoretical Study of Color-Tunable Emission in Aza-Nanographenes: Bridging intrinsic electronic structure and aggregation effects	2.049,60		5.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Isaac Alcón	Steric hindrance engineering of electron pairing in 2D conjugated polymers	339,60		400	1.000	UV
Ismael Arán Tapia	Digital twin of the vestibular system for personalized treatment of patients with Refractory Positional Vertigo	80,64		100	10	CESGA/FT3
Itxaso Odériz	TRANSCLIMA advances in risk assessments for unprecedented storms	500		3.000	3.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Iván Santos Tejido	Atomistic modeling of defect and dopant diffusion and interaction in diamond using ab initio simulations	1.260		2.000	2.000	BSC/MN5-GPP
Ivano Eligio Castelli	A High-Fidelity Computational Framework of Correlated Jahn-Teller and Polaron Dynamics in Battery Materials	4.000		3.000	3.000	BSC/MN5-GPP
Ivette Rodríguez	High-Fidelity Simulations of Atmospheric Boundary Layer Stability Effects on Urban Flow Dynamics: A Case Study in Barcelona	1.751		4.080	80.000	BSC/MN5-ACC
Ivette Rodríguez	High-Fidelity Simulations of Atmospheric Boundary Layer Stability Effects on Urban Flow Dynamics: A Case Study in Barcelona	120		4.048	80.000	BSC/MN5-GPP
Ivette Rodriguez	Accelerating deep reinforcement learning strategies for flow control of turbulent flows: transfer learning and resolvent analysis.	1.443		2.048	40.000	BSC/MN5-ACC
		60		2.048	40.000	BSC/MN5-GPP
Jan Phillips Staller	Ab initio description of π -electron quantum magnetism of nanographenes	350		100	100	BSC/MN5-GPP
Jana Selent	Large-Scale Simulation of Variant Impact on the β 2-Adrenergic Receptor via Systematic Amino Acid Scanning	8.540		3	10	BSC/MN5-ACC
Javier Calderón Sánchez	Numerical Simulations for Floating Offshore Wind Turbines	5.100		30.000	18.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Javier Calderón Sánchez	Numerical Simulations for Floating Offshore Wind Turbines	80		1.000	1.000	BSC/MN5-ACC
Javier Carrasco	Computational screening of sustainable and efficient chemical pre-lithiation and pre-sodiation candidates for energy storage devices	1.000		1.000	900	BSC/MN5-GPP
Javier Carrasco	Molecular insights into the dispersion and aggregation of polymers in ionic liquids for plastic to H ₂ catalytic conversion	540		900	800	BSC/MN5-GPP
Javier García Marín	In silico approaches to target HIF multimerization with small molecules	900		750	1.000	BSC/MN5-GPP
Javier Gonzalez-Martin	MEGAFIELD: Non-linear hybrid simulations of MHD-induced fast-ion transport in 3D tokamaks	7.925		20.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Javier Gonzalez-Martin	MEGAMHD: Non-linear hybrid simulations of Alfvén Eigenmodes and Edge Localized Modes in 3D tokamaks	11.088		20.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Javier Guerra	Automatismos Predictivos con IA y HPC (Predictive Automation with AI & HPC)	10		6	12	BSC/MN5-GPP
Javier Principe	Simulation and design of magnetohydrodynamics flow devices	360		48	128	BSC/MN5-GPP
Javier Vazquez Corral	Image Relighting Leveraging Foundational Models	60		10.000	20.000	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jeremias Likerman	Assessment of geothermal potential in volcanic regions through thermomechanical numerical modeling	1.000		2.400	4.800	BSC/MN5-GPP
JESUS FERNANDEZ FERNANDEZ	1st CORDEX-CORE simulations with WRF	5.222,40		60.000	30.000	CESGA/FT3
Jhonathan Rosa de Souza	Electronic Structure Studies on Small Molecules	0,18		200		CESGA/FT-QMIO-QPU
Joan Torras Costa	EU Computational study of the aggregation propensity of the peptides/peptidomimetics scaffolds for regenerative medicine	333		1.000	1.000	BSC/MN5-ACC
		6.666		1.000	1.000	BSC/MN5-GPP
Joan-René Mérou	All-sky search for continuous gravitational-wave signals from unknown isolated sources in the fourth LIGO-Virgo-KAGRA observing run	5.000		500	12.000	BSC/MN5-ACC
Jordi Martí	Structural investigation of MYC-MAX oncogenes: locating drugging pockets towards in silico drug design	4.500		1.500	500	BSC/MN5-ACC
Jordi Martí Rabassa	Simulation and modelling of biosystems with applications to medicine: the effect of guanosine pentaphosphate/tetraphosphate on the metabolism of Helicobacter pylori and in silico drug design for blocking its antibiotic resistance	3.000		200	100	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jordi Ventosa Molina	Unsteady dynamics of tip leakage flow and corner separation at off design conditions in compressor cascades	1.853,44		1.024	30.000	BSC/MN5-ACC
		58,24		1.024	45.000	BSC/MN5-GPP
Jorge Alberto Alcusón Belloso	Characterization of Turbulent transport at SMART tokamak with positive and negative triangularity	7.713,60		30.000	4.000	BSC/MN5-GPP
Jorge R. Espinosa	Multiscale Coarse-Grained Modeling of RNA Multimerization and Gelation in RNA-Protein Condensates	3.902		2.100	1.800	BSC/MN5-GPP
Jose Angel Silva Guillén	Transition metal chalcogenides: A DFT study of their different polytypes and charge density waves.	9.500		2.000	20.000	BSC/MN5-GPP
Jose Angel Silva Guillén	Correlated and superconducting phases in rhombohedral graphene with different number of layers	9.945		2.000	30.000	BSC/MN5-GPP
Jose Angel Silva Guillén	Electronic properties of Twisted Transition Metal Dichalcogenides Multilayers	8.000		2.000	20.000	BSC/MN5-GPP
José Antonio García Orza	WRF-Chem high-res simulations for dust storms formation over large areas in North Africa	3.500		25.000	15.000	BSC/MN5-GPP
Jose Guilherme Vilhena Albuquerque D'Orey	Breakdown of Ballistic Heat Transport Single-Molecule Junctions	300		6.000	6.000	CESGA/FT3-GPU
		1.520		6.000	6.000	UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jose Hugo Garcia	High-throughput database of 2D magnetic heterostructures for emerging spintronics applications	9.000		100.000	100.000	BSC/MN5-GPP
José Ignacio Martín Subero	Multi-scale high-dimensional non-negative matrix factorization to dissect epigenetic heterogeneity in chronic lymphocytic leukemia at single-cell resolution.	140		500	100	BSC/MN5-GPP
José Ignacio ROJAS GREGORIO	WOW-CONTROL – WP6: CFD and BEM analysis of passive flow control with Gurney flap (GF) vs slat vs slat + GF, and effect of Reynolds, for thick airfoils	4.296,30		2.048	4.096	BSC/MN5-GPP
Jose J. Plata	Predicting the lattice synthesizability of high-entropy stabilized chalcogenides	1.267,20		2.000	2.000	CENITS
José Javier Honrubia Checa	Proton generation and transport for fast ignition of inertial fusion targets	1.700		10.000	100.000	BSC/MN5-GPP
Jose Javier Ruiz Pernia	Biological Motors: from the Chemical to the Motion Side. Application for Dengue NS3 Helicase.	780		16.000	16.000	BSC/MN5-ACC
		3.970		16.000	18.000	BSC/MN5-GPP
Jose Manuel Ruiz Franco	Understanding Soft Matter Mechanics: From Polymer Networks to Granular Systems	270		10.000	2.000	CESGA/FT3
		270		10.000	2.500	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Jose María del Peso	ATLAS (LHC) simulation of detector response to proton-proton collisions (UAM_m12y2025)	4.000		1.500	4.000	BSC/MN5-GPP
José María García Oliver	Analysis of pressurized hydrogen flames by means of Partially-Stirred Reactor Large Eddy Simulations	8.000		80.000	80.000	BSC/MN5-GPP
Josep Flix Molina	MC Simulation for the CMS Experiment at the CERN LHC	6.200		2.000.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Juan Aragó	Understanding and engineering enzymes for plastic degradation from multiscale simulations	30		16.000	16.000	BSC/MN5-ACC
Juan Aragó	Understanding and engineering enzymes for plastic degradation from multiscale simulations	4.100		16.000	16.000	BSC/MN5-GPP
Juan José Palacios Burgos	Excitons in two-dimensional magnetic materials	1.500		20	500	UMA
Juan Manuel Andrés Bort	Enhancing the sensing performance of inorganic semiconductor by formation of nanoheterojunctions and femtosecond laser irradiation: a combined experimental and theoretical investigation	2.340		4.000	8.000	UMA
Kai Keller	Towards an efficient spin-up protocol for very high resolution coupled climate simulations	9.500		9.000	100.000	BSC/MN5-GPP
Karen Strehlow	Hazard Modelling for Geophysical Risks	5.500		20.000	20.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Kirill Zinovjev	Accelerating simulations of enzymatic reactivity with multiscale ML potentials	900		5.000	5.000	BSC/MN5-ACC
		1.200		5.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Laura Sáez-Ortuño	Pilot test of quantum algorithms for market segmentation and consumer behavior prediction	0,25		256	256	BSC/MN-ONA
Leonardo Pachano Prieto	Soot Formation in Turbulent Spray Combustion for Gas Turbine Applications	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	2.520		40.000	10.000	BSC/MN5-ACC
Lilian Garcia-Oliva	Benefits of Aerosol-Radiation Interactions (ARIs) and Aerosol-Cloud Interactions (ACIs) in seasonal-to-decadal climate prediction	4.670		61.440	204.800	BSC/MN5-GPP
Lorena Ruiz Pérez	Comparative Computational Study of Inhibitors Targeting Toxic A β Oligomers	1.200		2.000	2.000	UAM
Lucia Romero Perez	Optimization of Purkinje system for electromechanical simulations	3.000		35.000	15.000	BSC/MN5-GPP
Lucía Sanchis Sánchez	Modelling of fast-ion transport in fusion plasmas with symmetry-breaking fields	14.515		5.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Luis Artiles	Quantum Machine Learning for cybersecurity and healthcare	0,10		1	1	BSC/MN-ONA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
M. Verónica Ganduglia Pirovano	DFT and ML-Driven Exploration of DRM over Sm-Doped Ni/CeZrO ₄ Catalysts	12.000		10.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Maite Alducin	First-Principles-Driven 2TM Workflow for Plasmonic Catalysis	1.533		10.000	2.000	BSC/MN5-GPP
Maite Alducin	Role of Hot Electrons in the Photoinduced Chemistry of O and CO on Ru(0001) Surface	2.403		10.000	2.000	SCAYLE
Manel Esteller Badosa	High-Resolution Spatial Multi-Omics for Understanding Tumor Organization and Therapy Response	300		150.000	10.000	BSC/MN5-GPP
Manuel Alcamí	Ab Initio Molecular Dynamics Simulations to Explore the Complete Degradation Routes of Pesticides.	2.500		10.240	2.048	BSC/MN5-ACC
Manuel Alcamí Pertejo	Towards a complete database of theoretical calculations of pesticides.	2.950		12.000	3.000	BSC/MN5-GPP
Marc Delgado Aguilar	Topology of cationic polyelectrolytes of common use in the paper industry	38		10	20	NASERTIC
Marc Garcia Borràs	Unraveling electrostatic contributions on the catalytic efficiency of laboratory evolved retroaldolases	570		1.000	1.000	CSUC/PIR3

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Marc Garcia Borràs	Unraveling electrostatic contributions on the catalytic efficiency of laboratory evolved retroaldolases	288		5.000	5.000	CSUC/PIR3-GPU
Marc Güell Cargol	LINE-1 ORF2p Optimization using protein Large Language Models for efficient gene writing	200		2.000	3.000	BSC/MN5-ACC
Marc Torrent Burgas	Generating Novel Antimicrobial Peptides with Electron Density Diffusion	200		4.000	12.000	BSC/MN5-ACC
		3.920		4.000	16.000	BSC/MN5-GPP
Marcos Carreres Talens	Application of a specific injection model for LES simulations of kerosene and FT-SPK Sustainable Aviation Fuel in a Lean Direct Injection burner from VOF-LES simulations of a simplex pressure-swirl atomizer	1.500		8.000	16.000	BSC/MN5-GPP
María Camarasa Gómez	Surface excitons within many-body perturbation theory and time-dependent density functional theory with hybrid functional and AI frameworks	5.080		8.000	8.000	BSC/MN5-GPP
Maria Francisca Cardell Martínez	High-Resolution Regional Climate Simulations for the Balearic Islands under SSP-AR6 Scenarios	20.300		150.000	100.000	BSC/MN5-GPP
Maria Veronica Ganduglia-Pirovano	Fine-tuning of the water/Fe ₃ O ₄ (001) neural network potential to address H ₂ O ₂ decomposition at the solid-liquid interface	2.459,66		10.000	10.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Marina Corbella Morató	Deciphering and inhibiting the mechanisms of bacterial efflux pump transcription activation	345,60		6.000	6.000	BSC/MN5-ACC
Marina Corbella Morató	Engineering substrate specificities towards the enzymatic production of universal type O blood	210,60		6.000	6.000	BSC/MN5-ACC
Marina Corbella Morató	Engineering substrate specificities towards the enzymatic production of universal type O blood	860,16		6.000	6.000	BSC/MN5-GPP
Marta Colleoni	Testing state-of-the-art gravitational waveform models for current and future detectors	2.900		6.500	12.000	UMA
Marta Reynal Querol	Predicting Conflicts and other Disruptive Events	20		4.000	1.000	BSC/MN5-ACC
		280		1.000	1.000	BSC/MN5-GPP
Martin Croce (co-ordinator of CLOE team and EC DR1 JC1)	Euclid: Preparing the cosmological inference for Data Release 1	3.000		1.000	1.000	BSC/MN5-GPP
Martin Obergaulinger	3D progenitors and nuclear physics in magneto-rotational stellar core collapse	9.000		4.000	200.000	BSC/MN5-GPP
Mercedes Boronat Zaragoza	Optimizing the CeO ₂ support in Pt/CeO ₂ catalysts to overcome the inverse activity/stability correlation in the CO oxidation reaction	2.300		150	1.500	UMA

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Michael Gabler	Morphology of core collapse remnants: the influence of progenitor dimensionality 1D vs 3D	3.900		2.000	60.000	BSC/MN5-GPP
Miguel Alcalde Galeote	An integrated framework for enzyme directed evolution: application to cutinases, laccases and peroxygenases for green biotechnology.	844,80		1.000	3.000	BSC/MN5-ACC
		537,60		1.000	3.000	BSC/MN5-GPP
Miguel Molinos Pérez	Atomistic study of long-term hydrogen diffusion at magnesium-based nano-materials	1.500		1.000	100	BSC/MN5-GPP
Miguel Muñoz Rojo	Atomic Detailed Understanding of Heat Transport Mechanisms in Two-Dimensional MXenes	600		1.000	1.500	UMA
Milton Ruiz	The role of magnetic fields in r-process nucleosynthesis from neutron star binary mergers	9.999		200.000	200.000	BSC/MN5-GPP
Milton Ruiz	Evolution of a Cluster of Spinning Black Holes in Full General Relativity	6.000		150.000	250.000	BSC/MN5-GPP
Miquel Solà Puig	Computational design of defect-containing nanographenes for optoelectronic applications	2.160		900	1.000	CSUC/PIR3
Miquel Solà Puig	Functional carbon materials for sulfur cathode stabilization in Li-S batteries	1.317		900	1.000	BSC/MN5-GPP
Mònica Aragüés Peñalba	Quantum and hybrid quantum-classical algorithms for power system applications	80		1	1	CESGA/FT-QMIO-QULACS

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Mònica Aragüés Peñalba	Quantum and hybrid quantum-classical algorithms for power system applications	0,08		1	1	BSC/MN-ONA
Morteza Khalifehei Shahsavari	Non-dilute Aerothermochemical Models for Combustion Sprays	900		1.000		BSC/MN5-ACC
Néstor Balcázar- Arciniega, and Joaquim Rigola	DNS of Hydrodynamics and Mass Transfer in Gravity-Driven Bubbly Flows in Inclined Pipes: Effect of Confinement Ratio	4.500		3.072	3.072	BSC/MN5-GPP
Nicolás Guil Mata	Foundational Models for Biomedical Signal Analysis	5.069		2.000	1.000	BSC/MN5-ACC
Nicolas Moreno	Mesoscale Modelling of Passive Transport of Viruses and Viral Spikes	1.500		200	2.000	BSC/MN5-GPP
Nicolas Moreno	LHMM-Based and Data-Driven Multiscale Simulations of Complex Adhesive Polymeric Materials	3.400		200	2.000	BSC/MN5-ACC
Nuria E. Campillo	De novo design using Artificial Intelligence and synthesis of modulators of protein-protein interaction targeting NCS-1	22		150	40	BSC/MN5-ACC
		500		100	30	BSC/MN5-GPP
Nuria Lopez	Dynamic Structural Evolution of Metal and Alloy Catalysts using ML-based Grand Canonical Simulations	598,40		6.144	6.144	BSC/MN5-ACC
		8.064		6.144	6.144	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Núria López	Modeling activity, stability, and degradation of Ir/RuO ₂ electrocatalysts combining DFT and Machine Learning	576		6.144	6.144	BSC/MN5-ACC
Núria López	Modeling activity, stability, and degradation of Ir/RuO ₂ electrocatalysts combining DFT and Machine Learning	7.661,57		6.144	6.144	BSC/MN5-GPP
Oier Lakuntza	Influence of having a Fe/Li defect with an Mn atom in a previous Fe place.	425		500	400	BSC/MN5-GPP
Pablo Cerdá-Durán	The role of dense matter properties and magnetic fields in Neutron Star Mergers	5.600		100.000	100.000	BSC/MN5-GPP
Pablo del Mazo Sevillano	Advanced Membrane Synthesis and AI-Driven Optimization for Green Hydrogen Production	1.000		40	10	CESGA/FT3
Pablo Fosalba (coordinator of the Euclid Consortium Cosmological Simulations Science WG)	Euclid: Developing cosmological simulations for Data Release 1	6.720		500.000	500.000	BSC/MN5-GPP
Pablo G. Lustemberg	Unveiling MgO(001) Surface Defects via CO Vibrational Signatures: A DFT Study	2.388,06		1.000	5.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Pablo G. Lustemberg	Interfacial Activation of H ₂ , H ₂ O and CO/CO ₂ on NiO _x -CeO ₂ : Mechanisms, Descriptors and Oxidation-State Control	3.236,36		2.000	2.000	BSC/MN5-GPP
Pablo Gamallo Belmonte	DFT and kinetic study of methane dissociation over carbon catalysts for hydrogen production and carbon production	241		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 Gamallo Belmonte	The Role of Oxygen Vacancies in CO ₂ Hydrogenation on Ni/CeO ₂ Catalysts	2.096,64		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.	2.156		900	1.500	BSC/MN5-GPP
Pablo Llombart Gonzalez	Electrostatic-driven Complex Coacervates in the Cell Nucleus: Multiscale Computational Modelling of Prothymosin- γ Condensates	1.244		2.024	2.024	BSC/MN5-GPP
Pablo M. Piaggi	Understanding crystallization with atomistic machine learning	800		15.000	6.000	BSC/MN5-ACC
Pablo Ordejón	Engineering Anti-Corrosion Coatings via Sequential Inhibitor Layering SIL-Coat	8.200		3.000	6.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Pablo Ortega	Understanding North Atlantic winter predictability with a high resolution atmospheric model	9.579,90		1.000	100.000	BSC/MN5-GPP
Pär Strand	GK Fusion	1.500		10.240	2.048	BSC/MN5-ACC
Pär Strand	GK Fusion	6.144		10.240	2.048	BSC/MN5-GPP
Perla Piña-Varas	MAGCAN: MAGnetotolúrica en CANarias para la vigilancia volcánica y caracterización del sistema magmático regional del oeste del archipiélago	800		50	50	BSC/MN5-GPP
Petia Radeva	Multimodal benchmarking for Food Volume Estimation using Neural 3D Reconstruction	2.760		10.000	10.000	BSC/MN5-ACC
Petia Radeva	Scaling Data-centric Deep Learning Towards Comprehensive Food-Centric Multimodal Understanding	879,36		16.384	16.384	BSC/MN5-ACC
Prof. Ian Henderson	Evolution of the eukaryotic pancentromere	483,84		1.000	1.000	CESGA/FT3
Prof. Maciej Lewenstein	Investigation of localization and optical properties of quantum many-body systems	2.500		4.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Prof. Max García-Melchor	High-Throughput Screening of Bimetallic Alloys for C–N Coupling	1.458,60		1.000	6.000	BSC/MN5-GPP
Prof. Max García-Melchor	Computational Screening of Liquid Organic Hydrogen Carriers for Sustainable Hydrogen Storage	1.248,44		2.000	6.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
prof. Miroslav Grajcar	Design and numerical simulation of Josephson traveling-wave parametric amplifiers	150		50	100	BSC/MN5-GPP
Prof. Ronen Zangi	Understanding the Behavior of Thermoresponsive Draw Solutes in Desalination Processes	2.500		10.000	2.000	BSC/MN5-ACC
R. Gonzalo Parra	Biophysical characterisation of native and artificial protein families	220		2.500	2.500	BSC/MN5-ACC
		125		5.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Rafael Franco Fernández	Molecular dynamics of five odorants and 3 microbiota metabolites on two olfactory receptors detected in microglia (II)	225		2.000	2.000	BSC/MN5-ACC
Rafael Sanjuán Verdeguer	Uncovering viral receptors using deep learning.	600		20.000	2.000	BSC/MN5-ACC
Ramón Beivide Palacio	Evaluation of topologies, routing algorithms and allocation technics for interconnection networks for HPC and Data Centers.	232		40		BSC/MN5-GPP
Ricardo Ortiz Cano	Computation of the Magnetic Ground State of a Frustrated Quasi-One-Dimensional Truxene Ribbon	30		20	10	UMA
Riccardo Rurali	AI-Guided Fast Screening of Negative Thermal Expansion Materials for Emergent Applications	16.632		2.000	4.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Riccardo Rurali	Intercalation strategy for boosting TMDs thermoelectric performances	1.728		2.000	4.000	CESGA/FT3
Roberto D'Agosta	Exciton real time dynamics in 2D materials	1.882		16.000	16.000	BSC/MN5-ACC
Roberto Lázaro Gastón	Variational Quantum Regression for Wind Energy Forecasting	0,10		512	512	BSC/MN-ONA
Roberto San Jose	Urban Air-Quality Micro-Simulation for the Madrid Intercomparison Exercise Using Nested WRF/Chem and PALM-4U Simulations, Supporting the FAIRMODE Initiative.	4.140		20.000	30.000	BSC/MN5-GPP
Rocco Ballester	Harnessing Quantum Computing for Advancements in Federated Learning and Optimization	0,15		1	1	BSC/MN-ONA
Rodrigo García-Muelas	Mechanism of nitrate reduction to ammonia on oxide-derived copper surfaces	1.814,40		500	8.000	BSC/MN5-GPP
Rosana Collepardo-Guevara	Large-Scale Molecular Simulations to Predict Sequence-Encoded Condensate Stability and Viscoelasticity in Cancer	2.350		20	20	BSC/MN5-GPP
Ruben Perez	Conformational Transitions of the Spike originated by the Interaction with Manifold Polarizable-Surface Interactions	36,86		8.000	8.000	BSC/MN5-ACC
		460,80		16.000	16.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Sandra Rodriguez Gonzalez	Oxide-based air electrodes for green hydrogen production	3.484		1.200	1.800	BSC/MN5-GPP
Santi Roca-Fabrega	HARKONENS, the Arrakis simulations III: unveiling the nature of DM and constraining the baryonic physics parameters	20.000		500	100.000	BSC/MN5-GPP
Santiago Gonzalez de la Hoz	ATLAS production and simulation jobs running on HPC facilities (IFIC Phase XIII)	7.500		4.000	4.000	BSC/MN5-GPP
SARA RASTELLO	Stellar Evolution Matters: Simulating Black Hole Multiples with PeTar and SEVN	1.816		5.000	5.000	UZ/AG
Sascha Husa	Analysis of the Mojito test data set for the LISA Space Mission	100		3.000	5.000	BSC/MN5-ACC
		3.500		3.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Sergio Chiva Vicent	CFD simulations and ML models convergence for creating digital twins of complex physical systems.	268		1.024	2.048	BSC/MN5-ACC
		1.400		1.024	2.048	BSC/MN5-GPP
Sergio Iserte	Enabling MPI Malleability in Hydrodynamic Environmental Simulations: Integration of DMR with the SERGHEI Framework	1.000		200	200	BSC/MN5-ACC
Sergio Iserte	Jacobi Malleable with DMRv2	100		100	100	BSC/MN5-GPP
Sergio Mendoza Fariña	KOIOS: Frugal Learning and Human-AI Workflows	863,84		15.000	15.000	BSC/MN5-ACC

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Sergio Mendoza Fariña	KOIOS: Frugal Learning and Human-AI Workflows	100		2.500	2.500	BSC/MN5-GPP
Sergio Moles Quintero	Single-Metal Atom Coordination and Transport Properties in N-Doped Graphene	720		900	1.000	CSUC/PIR3
Sergio Posada Pérez	Adsorption and Selectivity at MN? Graphitic Sites: From Proton Binding to CO?RR/NRR	730		1.000	1.000	CSUC/PIR3
Sergio Posada Pérez	Electrolyte and Proton-Coupled Effects on 2D Carbon Nitride Catalysts for Electrochemical Reactions	1.586		1.000	1.000	BSC/MN5-GPP
Silvia Massaro	Volcanic dispersion modeling: Application to Nyiragongo and Nyamuragira volcanoes in the East African Rift	224		5.000	5.000	BSC/MN5-ACC
Sonia Bruña Fernández	Computational insights into structure-activity relationships for porous organic materials with photo-and/or electro-catalytic activity	2.016		500	2.000	BSC/MN5-GPP
Stefano Michele Cavaletto	Probing nonadiabatic dynamics following excitation by ultrashort intense x-ray pulses	160		250	5.000	BSC/MN5-GPP
Stephan Roche	Dynamical control of topological properties in 2D materials	430		800	300	BSC/MN5-ACC
Susana Pilar García Abellán	Cheminformatics-Driven Catalyst Discovery for Challenging C–H Activation	1.536,38		1.000	3.000	CESGA/FT3

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Toni Gabaldón	Metagenomic profiling from fecal immunochemical test tubes to identify early players and diagnostic markers in colorectal cancer.	2.600		10.000	200.000	BSC/MN5-GPP
Toni Gabaldon	Phylogenetic analysis of the Last eukaryotic common ancestor	6.000		10.000	200.000	BSC/MN5-GPP
Uciel Chorostecki	GINFINITY: an alignment-free RNA structure comparison tool designed for lncRNAs.	20,40		5.000	10.000	BSC/MN5-GPP
		52		5.000	10.000	BSC/MN5-ACC
Vicent Ribas Ripoll	Lung CT synthesis with Diffusion Models	168,28		4.096	4.096	CESGA/FT3-GPU
Victor Guallar Tasies	NextAI: Next Frontier Generative AI in Drug Discovery	2.112		3.000	5.000	BSC/MN5-ACC
Victor Guallar Tasies	Learning Biomolecular Representations with Topological Neural Networks	500		20.000	5.000	BSC/MN5-ACC
		500		20.000	5.000	BSC/MN5-GPP
Victor Guallar Tasies	Quantum Applications in Drug Discovery: From Quantum Chemistry to Quantum Machine Learning	0,45		512	512	BSC/MN-ONA
Xavi Borrat Frigola	Introduction of translation models for improvement of LLM performance	500		3.000	2.000	BSC/MN5-ACC
		100		2.000	2.000	BSC/MN5-GPP

Líder	Título	Con prioridad	Sin prioridad	Projects	Scratch	Site/Máquina
Xavier Luri Carrascoso	Gaia: Completion of the first iteration and preparation of the next one within the final data reduction cycle	2.000		750.000	1.000.000	BSC/MN5-GPP
Xavier Serra	Joint-embedding text and audio models for Sound and Music Understanding	457		200.000	200.000	BSC/MN5-ACC
Xavier Sevillano	AI-Driven 3D Brain Mapping for Early Detection and Stratification of Alzheimer's Disease in Down Syndrome	12		750	1.500	BSC/MN5-ACC
Xavier Vilasís-Cardona	LHCb Dirac at the BSC-HPC	1.000		4.000	4.000	BSC/MN5-GPP
Yumeng Xu	Enhanced Sensitivity to Eccentric BBHs Using Memory-Optimized pycWB on LIGO O4 Datasets	2.000		1.000	16.000	UMA

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

Líder	Título	Recursos pre-reservados
Ignacio Ingerto Ingerto	Digital Twin for Reliable Aerial Means Planning in Firefighting (RAMP_FFDT)	1.103

6. Siguientes 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.