

Centro de Supercomputación de Galicia - CESGA.

Acceso a Infraestructuras Científicas y Tecnológicas Singulares.

Resolución del Comité Externo de Acceso

Año 2014

Santiago de Compostela, 20 de marzo de 2014.

1. INTRODUCCIÓN.

En la convocatoria de acceso al ICTS-CESGA, para el año 2014, se han valorado 17 solicitudes de acceso. El Comité Externo de Acceso en a la vista de los informes y puntuaciones recibidas por los evaluadores, ha seleccionado las 17 propuestas para otorgarles acceso en el marco de esta convocatoria. Para realizar esta selección se han tenido en cuenta el número total de horas de cálculo disponibles, el número de accesos disponibles según la modalidad y la procedencia del solicitante (acceso presencial), con motivo de cumplir con la oferta indicada en las bases de la convocatoria (http://icts.cesga.es/docs/DO_ICTS_BasesConvocatoriaAcceso_2014.pdf y http://icts.cesga.es/docs/DO_ICTS_OfertaAcceso_2014.pdf).

2. EVALUACIÓN Y SELECCIÓN DE PROPUESTAS.

El trabajo de los evaluadores científicos, de los evaluadores técnicos y de los miembros del Comité Externo de Acceso se ha centrado en la valoración de las propuestas según los criterios, en la que cada evaluador ha emitido un informe y puntuado, de 1 a 5, cada uno de los criterios de valoración correspondientes, según se trate de una evaluación científica o técnica. Como resultado de las evaluaciones, teniendo en cuenta la puntuación de cada criterio y sus pesos específicos, se ha realizado una lista ordenada con la puntuación global obtenida por cada propuesta. Finalmente, tomando como base esta lista ordenada, el Comité Externo de Acceso ha seleccionado las propuestas que, por su calidad y adecuación, podrán contar con acceso en el marco de esta convocatoria.

Para el año 2014 se ha realizado una asignación total de 5.566.800 horas.

Las **horas garantizadas** son horas de tipo priorizado que se mantendrán a disposición del beneficiario hasta el **de 1 de septiembre de 2014**. A partir de esta fecha, las horas garantizadas no consumidas se convertirán en horas no garantizadas y estarán a disposición de todas las solicitudes.

Las **horas no garantizadas** son horas de tipo priorizado que podrán ser utilizadas por el solicitante, una vez haya consumido las horas garantizadas que se le han asignado y además existan horas disponibles que no fuesen utilizadas hasta el momento por el resto de solicitantes. Por tanto la disponibilidad de este tipo de horas no esta garantizada y se irán adjudicando a los solicitantes a medida que las vayan consumiendo hasta el límite asignado.

Aquellos beneficiarios que durante el período necesiten de más tiempo de cálculo, para poder finalizar su actividad, podrán **solicitar horas adicionales de cálculo**. Dicha solicitud podrá ser realizada, por los beneficiarios de proyectos en curso, **hasta 1 mes antes de la finalización del período**. La concesión de tiempo de cálculo adicional estará condicionada por la disponibilidad de los recursos y se realizará por orden de puntuación de los proyectos que lo soliciten. En este periodo no se establece inicialmente un límite máximo de horas adicionales a solicitar, aunque dicho límite podrá ser aplicado en función de la disponibilidad y del número de solicitudes recibidas.

El periodo de acceso finalizará el **31 de Diciembre de 2014**. Las horas no consumidas durante el período para el que han sido otorgadas no se podrán acumular para próximas convocatorias. El consumo se medirá según "elapsed time", considerando la utilización por el número de procesadores asignados.

3. PROPUESTAS CON ACCESO OTORGADO.

A continuación se incluyen los listados de las propuestas, de tipo telemático y de tipo presencial, que disponen de acceso al ICTS-CESGA en 2014. En la tabla correspondiente a los accesos telemáticos se incluye la asignación del número de horas priorizadas asignadas a cada propuesta y el supercomputador.

3.1.- ACCESO TELEMÁTICO.

Listado ordenado según identificador de actividad.

ID	TITULO	SOLICITANTE	ENTIDAD	HORAS G*	HORAS NG**	EQUIPO***
256	Sulfur Dioxide Capture by Ionic Liquids from a molecular point of view: A Density Functional Theory Study	Santiago Aparicio Martínez	Universidad de Burgos	520.000	0	SVG
257	Reacciones divergentes catalizadas por paladio	Rosana Álvarez Rodríguez	Universidade de Vigo	120.000	80.000	SVG
258	Chemistry of Na insertion/deinsertion in FePO ₄ -NaFePO ₄ for cathode material in Na-ion batteries: a density functional theory study	Javier Carrasco Rodriguez	CIC Energigune	770.000	0	SVG
259	Estudio del transporte iónico a través de nanotubos peptídicos insertados en membranas lipídicas, mediante Dinámica Molecular.	Rebeca García Fandiño	Universidad de Santiago de Compostela	400.000	0	SVG
260	Procesos reactivos de interes astrofisico y sobre nanoobjetos	Octavio Roncero Villa	Instituto de Física Fundamental, CSIC	400.000	0	SVG
261	Polidispersidad en sistemas de nanopartículas magnéticas para tratamiento del cáncer: posibles efectos de sobre/infra-calentamiento a nivel local	Cristina Muñoz Menéndez	Instituto de Investigacions Tecnolóxicas	50.000	25.000	FT
262	Modelización de procesos catalizados por complejos de Fe y otros elementos de transición	Juan Cámpora Pérez	CSIC	120.000	80.000	SVG
263	Computational design of bioactive organometallic complexes for catalytic processes involving nucleotides. Medical applications	Manuel Melle Franco	Universidade do Minho	600.000	0	FT
264	De novo assembly of Trovaconus RNA-seq data	Ramon Fallon Esparza	Universidad de Vigo	136.000	0	SVG
265	Desarrollo de métodos de optimización global paralelos basados en búsqueda dispersa	David Rodríguez Penas	IIM-CSIC	30.000	0	SVG
266	Gravitational Wave Astronomy and High-Energy Physics through Black Hole simulations	Carlos Fernández Sopena	CSIC-IEEC	300.000	0	FT
267	Diseño de nuevos catalizadores para procesos de transferencia de oxígeno, basados en molibdeno.	Olalla Nieto Faza	Universidade de Vigo	125.000	125.000	SVG
268	Diseño de farmacos multi-diana para la enfermedad de alzheimer	Fredy Sussman	Universidad de Santiago de Compostela	150.000	600.000	FT
270	Test de escalabilidad de la nueva versión MPI del modelo hidrodinámico MOHID	Breogán Gómez	MeteoGalicia	5.000	0	SVG
271	Estudio de la tasa de reciclaje de lluvia en la Península Ibérica	Breogán Gómez	Universidade de Santiago de Compostela	100.000	20.000	SVG
272	Simulación mediante dinámica molecular con métodos semiclásicos (método SHARC) en combinación con cálculos ab initio de la fotodisociación de yoduros de alquilo	Ignacio Solá Reija	Universidad Complutense de Madrid	800.000	0	SVG

* Horas G: horas garantizadas.

** Horas NG: horas no garantizadas.

*** Equipo: Indica el superordenador asignado. Puede ser FT (Finis Terrae) o SVG (Superordenador Virtual Gallego)

3.2.- ACCESO PRESENCIAL.

ID	TITULO	SOLICITANTE	ENTIDAD	MODALIDAD	SEMANAS
273	Caracterización teórica de la adsorción de CO ₂ , CH ₄ y SF ₆ en imidazoles zeolíticos de zinc.	Vicente Timón Salinero	CSIC	2	2

4. INSTRUCCIONES DE ACCESO

Tras la publicación de esta resolución de acceso, el personal del CESGA se pondrá en contacto con los beneficiarios para proporcionarles la información necesaria para puedan iniciar su actividad (alta de usuarios, instrucciones de acceso, etc.) lo antes posible.