

díxitos

NOVAS DO CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA

ABRIL 2007



ANUARIO
CESGA 2006



XUNTA DE GALICIA
CONSELLERÍA DE INNOVACIÓN
E INDUSTRIA

**CONSEJO SUPERIOR DE
INVESTIGACIONES
CIENTÍFICAS**



**MINISTERIO
DE EDUCACIÓN
Y CIENCIA**

**CENTRO COFINANCIADO
A TRAVÉS DO FONDO EUROPEO DE
DESENVOLVEMENTO REXIONAL**



DIRECCIÓN Javier García Tobío
COORDINACIÓN Fernando Bouzas Sierra
REDACCIÓN Ignacio López Cabido
Andrés Gómez Tato
Carlos Fernández Sánchez
Juan Villasuso Barreiro
M^º José Rodríguez Malmierca
Francisco Landeira Vega
Ramón Basanta Cheda
Jesús Arribi Vilela

**PORTADA E
MAQUETACIÓN** Adrián Arcay Fernández

**FOTOMECÁNICA E
IMPRESIÓN** Grafisant, sl.

Depósito legal: C-1604-1998
ISSN: 1139-563X

EDITA

FUNDACIÓN CESGA

Avenida de Vigo, s/n (Campus Sur)
15705 SANTIAGO DE COMPOSTELA
Teléfono 981 569810 Fax 981 594616

Correo electrónico: dixitos@cesga.es
Enderezo web: www.cesga.es/dixitos

CONTIDOS

- ÁREAS FUNCIONAIS CESGA [04]
- CALIDADE, MAPA DE PROCESOS [05]
- ÓRGANOS DE GOBERNO [06]
- ORGANIGRAMAS [07]
- USUARIOS COMPUTACIÓN [08-10]
- COMPUTACIÓN [11-15]
- ALMACENAMIENTO DE DATOS [16-17]
- APLICACIÓNS CIENTÍFICAS [18-21]
- RECETGA - COMUNICACIÓNS [22-27]
- ÁREA DE SOCIEDADE DA INFORMACIÓN [28-31]
- ACCIÓNS DE FORMACIÓN [32-33]
- DIFUSIÓN [34-35]
- PROXECTOS [36-39]
- PRODUCCIÓN CESGA [40]
- PRODUCCIÓN CIENTÍFICA DOS USUARIOS [41-51]

TEMAS SALIENTABLES



Javier García Tobío

Director Xerente

As accións e eventos máis significativos que tiveron lugar no CESGA durante o ano 2006 pódense resumir nos seguintes:

FUNDACIÓN CESGA

Fundación Centro Tecnolóxico de Supercomputación de Galicia.

-A Fundación proseguiu levando a cabo accións orientadas á mellora continua da actividade e servizos, revalidando a certificación ISO 9001:2000. Esta actividade pon de manifesto o compromiso do CESGA na mellora continua dos servizos cara aos seus usuarios e órganos de xestión.

-A capacidade de cálculo viuse duplicada rebasando os 4 TFLOPS, tras as ampliacións realizadas no mes de decembro nos clusters de memoria distribuída.

-O número de horas de cálculo consumidas reducíronse respecto o ano 2005, debido fundamentalmente a maiores necesidades de memoria dos traballos executados, o que fixo que circunstancialmente algunhas CPUs deberan esperar a dispoñibilidade de memoria.

-A Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia mantivo o nivel de dispoñibilidade nun 99,55%.

-Xunto con HP e Intel, leváronse a cabo múltiples sesións de traballo nas áreas de investigación e tecnoloxía cara a planificación e posta en marcha do proxecto Finis Terrae.

-A Fundación participou en 16 proxectos de investigación, desenvolvemento e innovación. Destes proxectos, 3 foron financiados pola Comisión Europea, 5 polo Ministerio de Educación e Ciencia e 8 pola Xunta de Galicia.

-A institución foi proposta polo MEC e a Xunta de Galicia como Instalación Científico-Tecnolóxica Singular e Centro de Excelencia.

S.A.X. CESGA

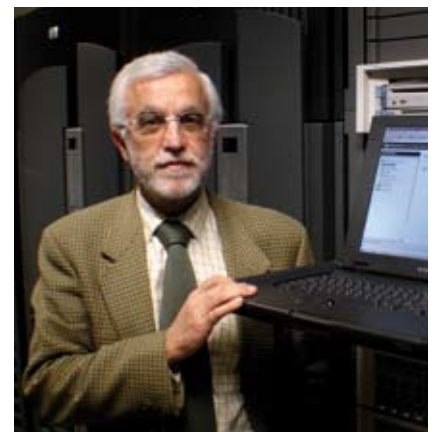
Sociedade Anónima de Xestión Centro de Supercomputación de Galicia.

-A Sociedade revalidou a certificación ISO 9001:2000 patentizando deste xeito o compromiso da institución coa mellora continua na xestión propia e na prestación de servizos.

-Dende a Iniciativa polo Software Libre de Galicia "mancomun.org" o CESGA desenvolveu unha importante actividade cara a difusión e implantación do software de código aberto.

-A Sociedade participou activamente no Proxecto Finis Terrae para a adaptación do edificio e infraestruturas aos requirimentos e necesidades do novo supercomputador.

-A Sociedade participou en 28 proxectos, sendo 8 deles financiados pola Comisión Europea, 3 por empresas e 17 pola Xunta de Galicia.



MENSAXE DO PRESIDENTE



Salustiano Mato de la Iglesia Director Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación - Xunta de Galicia.

O 2006 foi un ano de moi intensa actividade organizativa e de planificación para constituir o CESGA como centro de excelencia de investigación e servizos a nivel internacional. Para elo, asinou un importante acordo de colaboración entre a Xunta de Galicia, o Consello Superior de Investigacións Científicas e o Centro de Supercomputación de Galicia para o financiamento do proxecto Finis Terrae. Este proxecto conta coa participación das empresas HP e Intel que xunto co CESGA levarán a cabo actividades de investigación, formación e difusión do HPC, ademais do deseño, fabricación e instalación dun gran supercomputador con nodos de memoria compartida.

Como consecuencia e a solicitude da Xunta de Galicia, o CESGA foi recoñecido polo Ministerio de Educación e Ciencia como

Instalación Científico-Tecnolóxica Singular así como Centro de Excelencia de Investigación Aplicada en Tecnoloxía Computacional e Modelización Matemática.

Tamén cabe salientar a experiencia acadada polo CESGA na tecnoloxía "grid" foi recoñecida a nivel internacional, sendo incorporados no "middleware" do do Proxecto EGEE módulos de monitorización e contabilidade desenvolvidos no CESGA.

Outra actividade de especial relevancia que se levou a cabo durante o pasado ano, foi a correspondente á iniciativa polo software libre en Galicia, liderada pola Dirección Xeral de Promoción Industrial e Sociedade da Información. Ao amparo desta iniciativa o CESGA fixo un importante esforzo na contribución a implantación do software de fonte aberta na nosa Autonomía, cumprindo deste modo un dos obxectivos da institución, consistente en participar na difusión e implantación das TIC na nosa sociedade.



XUNTA DE GALICIA
CONSELLERÍA DE INNOVACIÓN
E INDUSTRIA

MENSAXE DO VICEPRESIDENTE



José Manuel Fernández de Labastida y del Olmo Vicepresidente de Investigación Científica y Técnica -CSIC.

El proyecto Finis Terrae, mediante el cual se implantará una gran infraestructura de Supercomputación en el CESGA, fue la actividad que polarizó gran parte de los esfuerzos científicos, técnicos y de gestión a lo largo del año 2006. Este proyecto refrenda el decidido apoyo de la Xunta de Galicia y el CSIC al cálculo intensivo como herramienta fundamental para el desarrollo de la Ciencia.

Durante el pasado año el CESGA, junto con investigadores de la comunidad gallega y del CSIC, prosiguió desarrollando una importante actividad en proyectos de I+D+i, participando en 44 proyectos, siendo 11 de éstos financiados por la Comisión Europea.

La experiencia en "grid" acumulada en el CESGA, favoreció la concesión de nuevos

proyectos de ámbito internacional como EGEE-II, Int.eu.grid, RETELAB, entre otros.

Merece especial consideración la participación del CESGA en la iniciativa Luso - Española IBERGRID, mediante la cual se implantará un "grid" a nivel de la Península Ibérica. Las estrechas relaciones de la Comunidad investigadora gallega con la portuguesa hicieron que se le encomendase al CESGA participar en tres iniciativas de implantación del "grid":

-Interconexión de las redes de comunicaciones de I+D de ambos países a través de la Red de Ciencia y Tecnología de Galicia .

-Diseño e implantación de la infraestructura grid.

-Organización del "I Congreso IBERGRID" en el mes de Mayo de 2007 en Santiago de Compostela.



**CONSEJO SUPERIOR
DE INVESTIGACIONES
CIENTÍFICAS**

MISIÓN

Fomentar, difundir, prestar servizos de cálculo intensivo e comunicacións ás comunidades investigadoras galegas e do CSIC, así como a aquelas empresas ou institucións que o soliciten e, deste xeito, contribuír, mediante o perfeccionamento tecnolóxico e a innovación, á mellora da competitividade das empresas.

FUNCIÓNS MÁIS SIGNIFICATIVAS

- Proporcionar servizos de cálculo intensivo e comunicacións avanzadas á comunidade de usuarios.
- Xestionar a "Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia".
- Fomentar e promocionar a cooperación entre empresas e institucións de índole pública e privada.

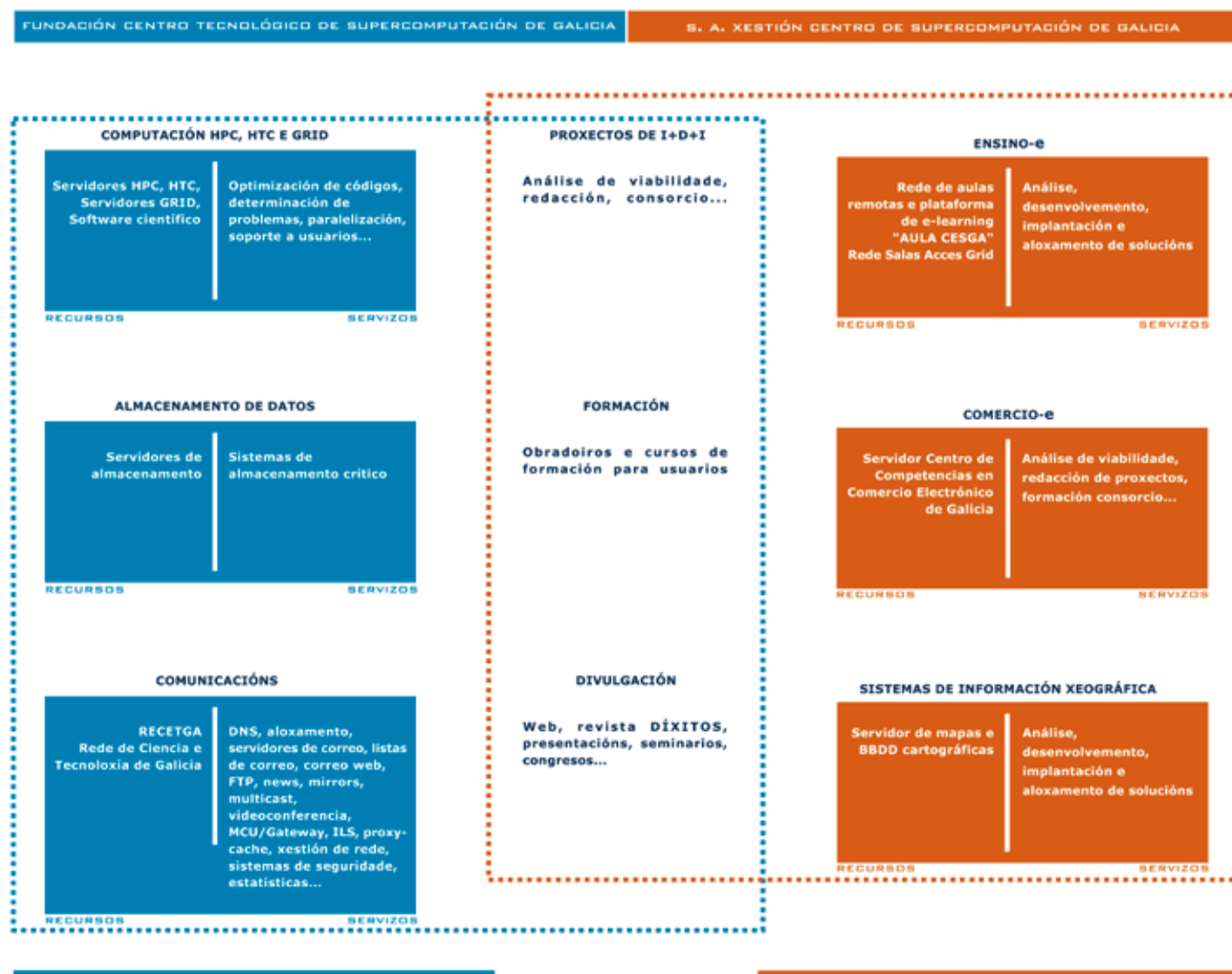
MISIÓN

Promover servizos comúns de apoio á investigación, desenvolvemento e innovación no ámbito das tecnoloxías da información e das comunicacións, en Galicia e na comunidade investigadora do CSIC. Para isto, a S.A.X. CESGA promoverá accións tendentes á innovación e mellora na prestación de servizos de cálculo intensivo e comunicacións avanzadas, así como actividades encamiñadas a favorecer solucións no campo da sociedade do coñecemento.

FUNCIÓNS MÁIS SIGNIFICATIVAS

- Promover e difundir o uso de tecnoloxías de cálculo intensivo e comunicacións avanzadas.
- Promover e difundir o uso de tecnoloxías relacionadas coa sociedade do coñecemento incluíndo: comercio electrónico, ensino electrónico e sistemas de información xeográfica.

ESQUEMA DE ÁREAS FUNCIONAIS, RECURSOS E SERVIZOS DAS DÚAS ENTIDADES



CALIDADE DOS SERVIZOS



Durante o ano 2006 tanto a Fundación como a Sociedade CESGA renovaron o certificado de calidade ISO 9001:2000 que obtido en decembro de 2005. Coa consecución do mesmo, o CESGA se converteu no primeiro centro de supercomputación de España en obter este certificado, agora renovado.

A renovación do certificado, foi a culminación dun traballo intenso de aplicación da norma, así como a mellora continua dos procesos e procedementos internos do CESGA co fin de incrementar a calidade dos servizos prestados aos usuarios.

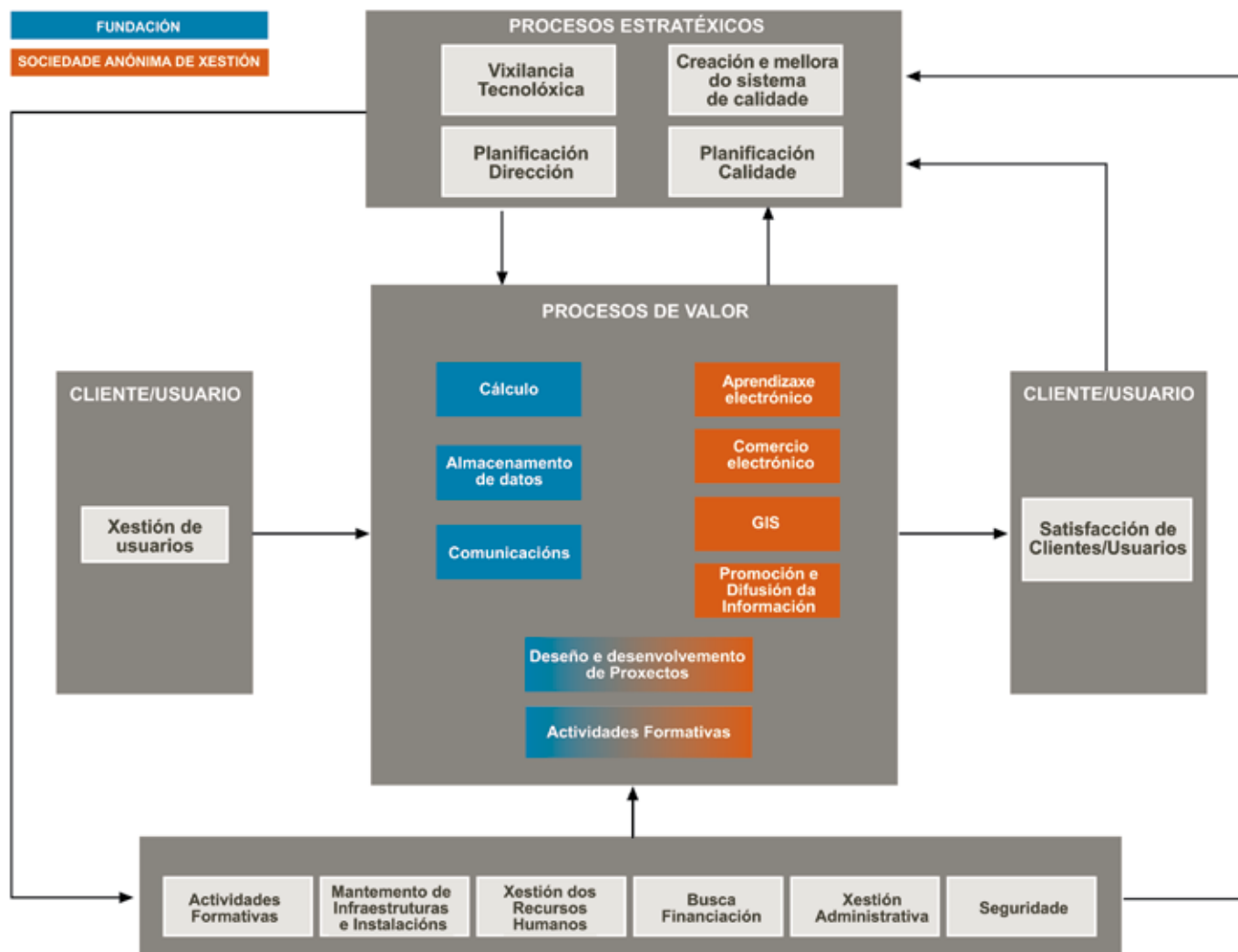
Só durante o primeiro ano de vixencia do certificado se melloraron 14 procesos, 8 procedementos e 7 instrucións. En total pasáronse con éxito tres auditorías (dous internas, pero realizadas por auditores externos, e unha externa para a renovación do certificado).

Adicionalmente, en 2006, se avanzou na informatización de todos os procesos asociados ao control da calidade, con melloras nos sistemas de monitorización do centro (usuarios, sistemas, aplicacións, etc) e se desenvolveu unha nova aplicación de control da calidade segundo a norma ISO

9001:2000 que se implantará no centro durante o ano 2007. Finalmente, como medida adicional, se realizou un Manual de Benvida do Empregado para favorecer a inclusión no Centro dos novos traballadores.



MAPA DE PROCESOS CESGA



ÓRGANOS DE GOBERNO DAS PERSOAS XURÍDICAS QUE CONFORMAN O CESGA



COMPOSICIÓN DO CONSELLO DE ADMINISTRACIÓN S.A.X. CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA

XUNTA DE GALICIA	PRESIDENTE	Salustiano Mato de la Iglesia	Director Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación Consellería de Innovación e Industria.
	SECRETARIO	José Carlos López Corral	Asesoría Xurídica Consellería de Innovación e Industria.
	VOCAL	Gonzalo Gómez Montaña	Director Xeral do Centro de Informática para a Xestión Tributaria, Económico-Financeira e Contable Consellería de Economía e Facenda
	VOCAL	Rogelio Conde Pumpido	Director Xeral de Promoción Científica e Tecnolóxica do Sistema Universitario de Galicia Consellería de Educación e Ordenación Universitaria.
	VOCAL	Manuel José Fernández Iglesias	Director Xeral de Comunicación Audiovisual Secretaría Xeral de Comunicación.
	VOCAL	Emilio Nogueira Moure	Secretario Xeral Consellería de Innovación e Industria
	VOCAL	Juan José Gómez Romero	Director Xeral de Calidade e Avaliación das Políticas Públicas Consellería de Presidencia Administracións Públicas e Xustiza
	VOCAL	Mª Elena Veiguela Martínez	Directora Xeral de Promoción Industrial e da Sociedade da Información Consellería de Innovación e Industria
C.S.I.C	VICEPRESIDENTE	José Manuel Fernández de Labastida y del Olmo	Vicepresidente de Investigación Científica y Técnica Consejo Superior de Investigaciones Científicas
	VOCAL	Mª del Mar García Ferrer	Subdirectora General de Actuación Económica Consejo Superior de Investigaciones Científicas
	VOCAL	Uxío Labarta Fernández	Coordinador Institucional Delegación del CSIC en Galicia
	VOCAL	Antonio Alvarez Alonso	Investigador Instituto de Investigaciones Marinas
UNIVERSIDADE DA CORUÑA	VOCAL	María Concepción Herrero López	Vicerreitora de Investigación.
UNIVERSIDADE DE SANTIAGO	VOCAL	Mª José Alonso Fernández	Vicerreitora de Investigación e Innovación.
UNIVERSIDADE DE VIGO	VOCAL	Manuel Joaquin Reigosa Roger	Vicerreitor de Investigación.

Datos a 31/12/2006

MEMBROS DO PADROADO DA FUNDACIÓN CENTRO TECNOLÓXICO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA

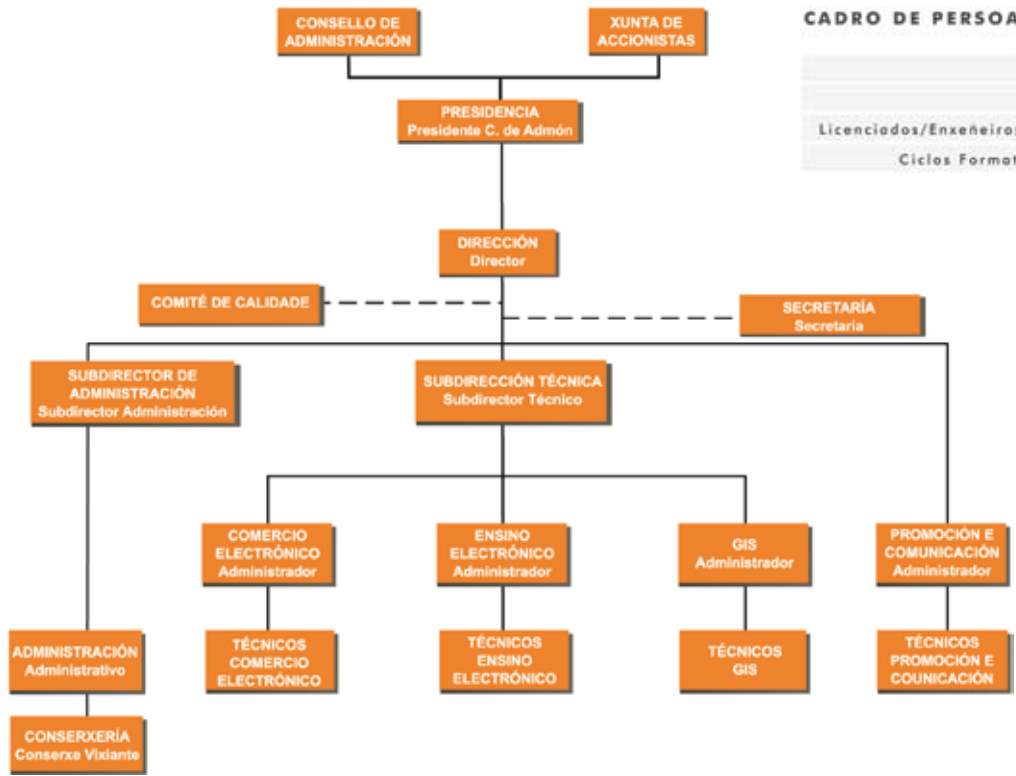
XUNTA DE GALICIA	PRESIDENTE	Salustiano Mato de la Iglesia	Director Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación Consellería de Innovación e Industria.
	SECRETARIO	José Carlos López Corral	Asesoría Xurídica Consellería de Innovación e Industria.
	VOCAL	Gonzalo Gómez Montaña	Director Xeral do Centro de Informática para a Xestión Tributaria, Económico-Financeira e Contable Consellería de Economía e Facenda
	VOCAL	Mª Elena Veiguela Martínez	Directora Xeral de Promoción Industrial e da Sociedade da Información Consellería de Innovación e Industria.
	VOCAL	Rogelio Conde Pumpido	Director Xeral de Promoción Científica e Tecnolóxica do Sistema Universitario de Galicia Consellería de Educación e Ordenación Universitaria
C.S.I.C	VICEPRESIDENTE	José Manuel Fernández de Labastida y del Olmo	Vicepresidente de Investigación Científica y Técnica Consejo Superior de Investigaciones Científicas
	VOCAL	Uxío Labarta Fernández	Coordinador Institucional Delegación del CSIC en Galicia

Datos a 31/12/2006

ORGANIGRAMAS E PERSOAL S.A.X./FUNDACIÓN



ORGANIGRAMA S.A.X. CESGA

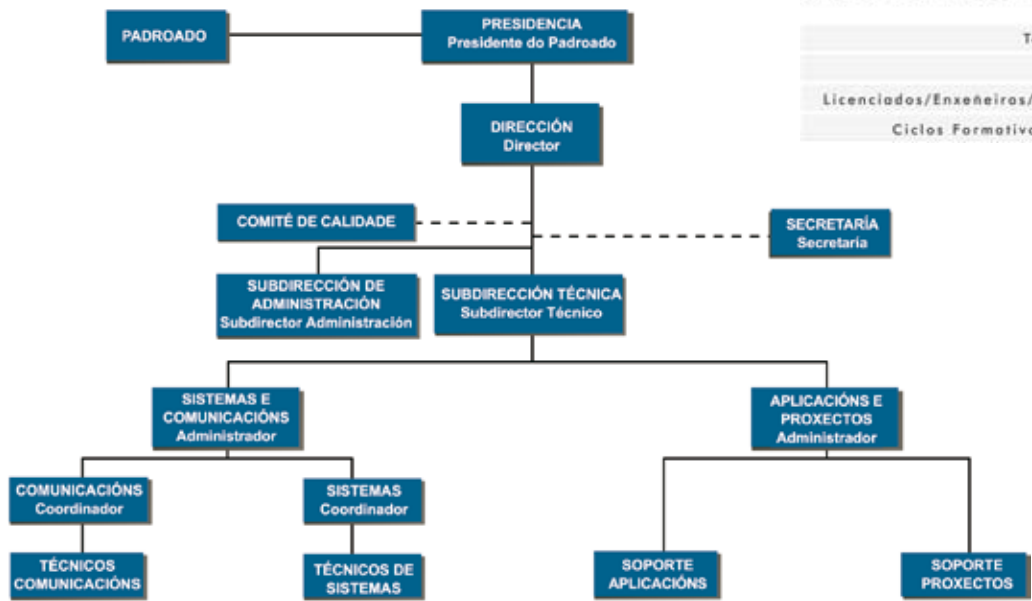


CADRO DE PERSOAL S.A.X. CESGA

Total persoal	25
Doutores	2
Licenciados/Enxeñeiros /Diplomados	17
Ciclos Formativos/Bachiller	6

Datos a 31/12/2006

ORGANIGRAMA FUNDACIÓN CESGA



CADRO DE PERSOAL FUNDACIÓN CESGA

Total persoal	29
Doutores	6
Licenciados/Enxeñeiros/Diplomados	11
Ciclos Formativos /Bachiller	12

Datos a 31/12/2006



Número de Contas Activas por Sistema e Ano

O sistema con maior número de contas activas (usuarios cun consumo significativo de horas de cálculo ao longo do ano) é o HP Superdome, con 256 usuarios con consumo (34 máis que no ano anterior). O HPC320 ocupa a segunda posición con 189 contas activas e por último 127 do cluster SVG. En total, o número de contas activas medrou desde as 564 do ano 2005 a 572 este ano, o que supón un crecemento só do 2% (no ano 2005 o incremento no número de contas activas foi do 10%), fundamentalmente motivado pola saturación dos sistemas actuais.

Distribución por Institucións das horas de CPU consumidas en todos os Sistemas

Por institucións, o maior consumo de horas de computación rexistraron no ano 2006 a USC con 45.3% das horas, seguida da Universidade da Coruña con 26.4% do consumo total. No seu conxunto, as tres universidades galegas representan o 81.7% do consumo, o CSIC o 13.7% das horas consumidas e un 4.5% das horas destináronse a proxectos participados polo CESGA. Respecto ao ano 2005, no 2006 todas as institucións a excepción das Universidades de Santiago e de Vigo incrementaron o seu consumo.

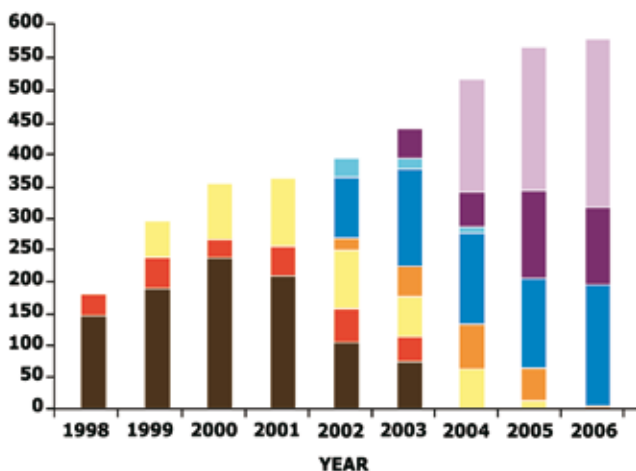
Distribución CPU por Área de Traballo

Por áreas de traballo, os cálculos relacionados coa modelación bioquímica consumiron no ano 2006 o 46.6% das horas de cálculo, mentres que o 30.7% se dedicaron ao estudo da física, representando estas dúas áreas o 77.3% do consumo de horas. A modelación bioquímica volve a ser, xa que logo, a área de maior demanda computacional, como sucedeu no ano 2005. A modelación bioquímica pasou do 50.4% de utilización ao 46.6%, mostrando unha lixeira diminución como xa sucedeu o ano anterior, fronte ás outras áreas que aumentaron respecto ao ano 2005. Así, por exemplo, se duplicou a porcentaxe de utilización na área de métodos numéricos.

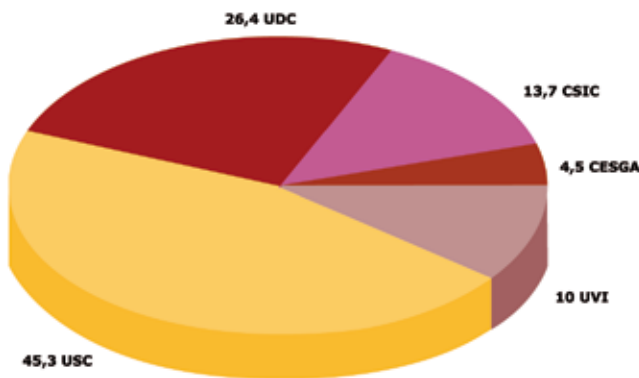
Porcentaxe de CPU por máquina e institución

Na gráfica correspondente pódense ver cales son os sistemas máis demandados por cada unha das institucións que utilizan os servizos de cálculo do CESGA. Como se pode apreciar, os investigadores do CSIC utilizan principalmente o servidor HPC320, con máis dun terzo da utilización do sistema, mentres que o Superdome se reparte principalmente entre os investigadores das universidades de Santiago e de Coruña e o SVG é utilizado maioritariamente polos investigadores da Universidade de Santiago.

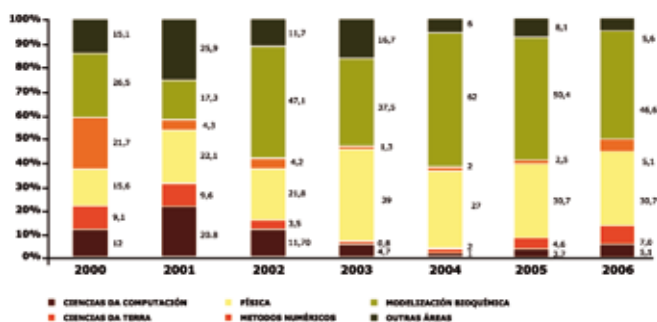
EVOLUCIÓN CONTAS ACTIVAS DE USUARIO POR SISTEMA E ANO



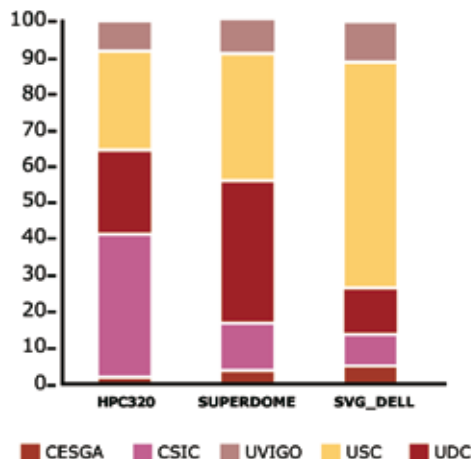
DISTRIBUCIÓN POR INSTITUCIÓN DAS HORAS DE CPU CONSUMIDAS EN TODOS OS SISTEMAS NO ANO 2006



DISTRIBUCIÓN CPU POR ÁREA DE TRABALLO



PERCENTAXE DE CPU POR MÁQUINA E INSTITUCIÓN NO ANO 2006



USUARIOS MÁIS ACTIVOS EN 2006 POR INSTITUCIÓNS



USUARIO	DEPARTAMENTO/CENTRO	HORAS CONSUMO
UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA		
David Serantes Abalo	Física de Partículas	111.710,9
Bernardo Adeva	Física de Partículas	87.349,1
Manuel Pereiro López	Física Aplicada	54.928,1
Jesus Angel Varela Carrete	Química Organica	51.689,2
Manuel María González Alemany	Física de la Materia Condensada	50.065,9
Daniel Baldomir Fernández	Física aplicada	38.732,9
UNIVERSIDADE DA CORUÑA		
Luis Fermín Rodríguez Vázquez	Química Física e Ingeniería Química I	112.369,2
Daniel Rivero Cebrián	Tecnoloxías da Información e as Comunicacións	48.223,1
Rosa Caamaño Vázquez	Química Física e Enxeñaría Química I	23.051,5
María Ruiz Pita-Romero	Química Fundamental	21.833,8
Vicente Ojea Cao	Química Fundamental	20.664,3
María Fernández González	Química Fundamental	19.060,3
UNIVERSIDADE DE VIGO		
Ángel Rodríguez de Lera	Química Órganica	21.233,3
Rosana Álvarez Rodríguez	Química Órganica	20.969,2
Carlos Silva López	Química Orgánica	19.339,7
Manuel Martínez Piñeiro	Física Aplicada	12.664,4
Fátima Rodríguez Barrios	Química Órganica	10.578,4
Keimars Eskandari	Química Física y Química Orgánica	8.329,3
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS		
Noemi Hernández Haro	Estación Experimental del Zaidín (EEZ-Granada)	17.306,5
Joaquín Ortega Castro	Estación Experimental del Zaidín (EEZ-Granada)	15.970,9
Ana María Mancho Sánchez	Instituto de Matemáticas y Física Fundamental (IMAFF-Madrid)	15.454,9
Alejandro Valbuena Jiménez	Instituto Ramón y Cajal: Centro de Investigaciones Neurobiológicas (Madrid)	13.325,6
Jorge Íñiguez González	Institut de Ciencia de Materials de Barcelona	12.801,7
Bernardo Herradón García	Centro de Química Orgánica Lora Tamayo (Madrid)	12.350,8

RECURSOS SOLICITADOS POLOS USUARIOS NOS SERVIDORES DE CÁLCULO NO ANO 2006



Co obxectivo de determinar as necesidades dos investigadores en canto aos recursos computacionais que precisan para realizar as súas investigacións, almacenamos todos os traballos enviados polos usuarios e para cada traballo extraemos os requirimentos que solicitaron dos catro recursos computacionais principais: Tempo de execución máximo estimado, memoria máxima, almacenaxe do traballo en disco e número de procesadores, no caso de traballos paralelos. Estas métricas son estimacións levadas a cabo polos usuarios e por conseguinte non reflicten os recursos consumidos senón aqueles que non poderán superarse na execución do traballo. En calquera

caso debemos ter en conta que son os recursos reservados nos sistemas de cálculo para asegurar a correcta execución do traballo e que xa que logo, son reservados e é necesario que estean dispoñibles no sistema durante o tempo que duran os traballos.

Tempo de execución solicitado

O tempo de execución reflicte o tempo máximo de execución que os usuarios estiman para os seus traballos. Como en moitas ocasións se trata de procesos iterativos, resulta moi complexo determinar

o tempo de execución total da simulación, aínda que por diversos motivos, que inclúen o propio mantemento dos servidores e a distribución equitativa dos recursos entre os usuarios, establécese un tempo máximo de execución para todos os servidores, e que dependendo de cada un deles varía entre as 200 e as 300 horas de execución, e para traballos especiais poden chegar a 700 horas. En moitas ocasións, para resolver un único problema son necesarias varias execucións consecutivas co tempo de execución máximo dispoñible para poder finalizar o cálculo correctamente.

Globalmente, o 50.5% dos traballos solicitaron menos de 24 horas de execución, e o 49.5% requiriron máis de 24 horas. A distribución das porcentaxes de usuarios entre as escalas de tempo que utilizamos na gráfica é moi homoxénea. Por servidores destaca a alta porcentaxe de usuarios que utilizan traballos curtos de ata 1 hora no cluster beowulf (o 88.9% dos usuarios). Isto é debido a que este sistema se utiliza maioritariamente para o estudo e optimización de algoritmos de cálculo paralelo.

Número de procesadores solicitados

O 57.9% dos usuarios enviou traballos secuenciais (1 só procesador), e o 42.1% enviou traballos paralelos, deles os máis utilizados son os de 2 procesadores, diminuíndo a porcentaxe co número de

procesadores. No Superdome o número de usuarios con traballos paralelos é lixeiramente inferior ao de secuenciais (47.3% fronte a 52.7%), mentres que nos sistemas de Throughput (Cluster SVG e GRID) predominan os traballos secuenciais.

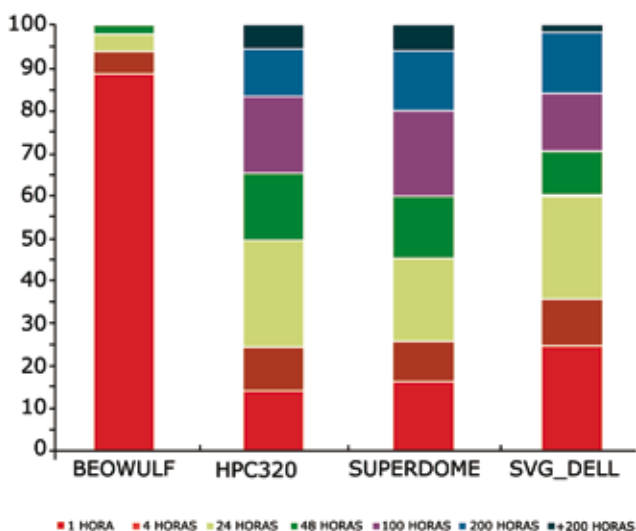
Memoria solicitada

O 37.3% dos usuarios utilizan ata 1GB de memoria fronte ao 62.7% que empregan máis de 1GB. Por sistemas este valor está limitado polo tamaño de memoria dispoñible en cada un deles lóxicamente. No Superdome, sendo o sistema con maior memoria dispoñible, o 28.7% dos usuarios precisan máis de 4GB de memoria para realizar os seus cálculos.

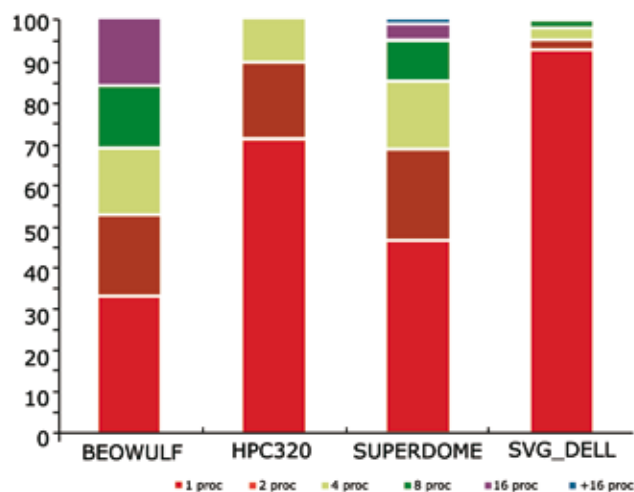
Almacenamento solicitado

O 58.7% dos usuarios soluciona os seus problemas con menos de 10GB de almacenamento temporal en disco, mentres que o 42.3% restante necesita máis de 10GB. Resulta curioso comprobar como no HPC320 existe unha porcentaxe maior de usuarios que solicitan máis de 20GB de disco que no Superdome (30% fronte ao 22.4% do Superdome), se ben neste último existen usuarios que solicitan máis de 100GB.

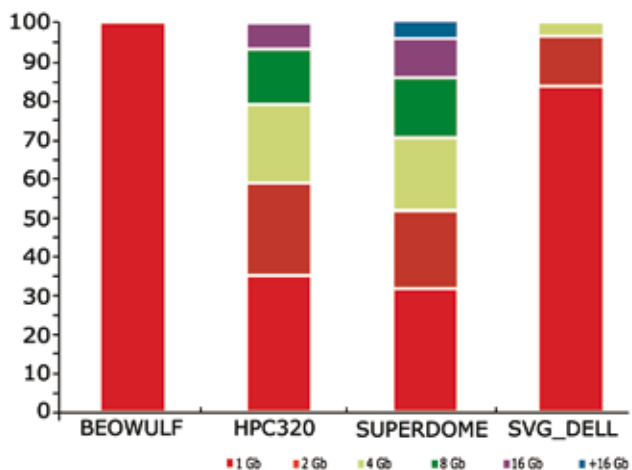
PORCENTAXE DE USUARIOS POR TEMPO RESERVADO HORAS



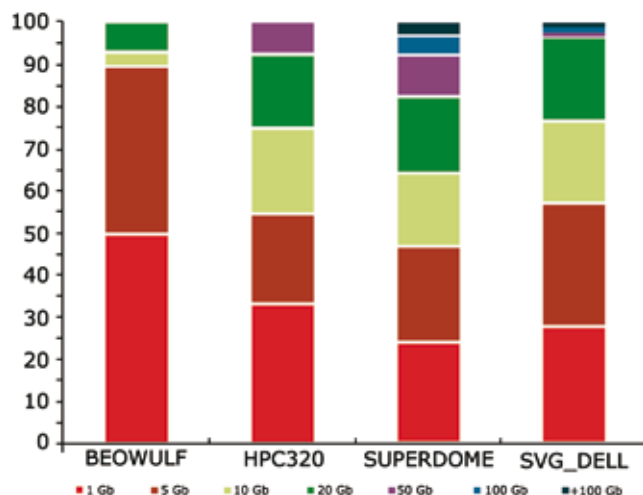
PORCENTAXE DE USUARIOS POR NÚMERO DE PROCESADORES SOLICITADOS POR MÁQUINA



PORCENTAXE DE USUARIOS POR MEMORIA RESERVADA EN GB POR MÁQUINA



PORCENTAXE DE USUARIOS POR DISCO RESERVADO EN GB POR MÁQUINA





A Fundación CESGA conta con diferentes arquitecturas de sistemas de cálculo de altas prestacións dispoñibles para a comunidade de usuarios. Dependendo dos algoritmos de cálculo, o usuario opta pola arquitectura de computación máis adecuada.

Os feitos máis relevantes do ano 2006 en canto a servidores de cálculo, foron:

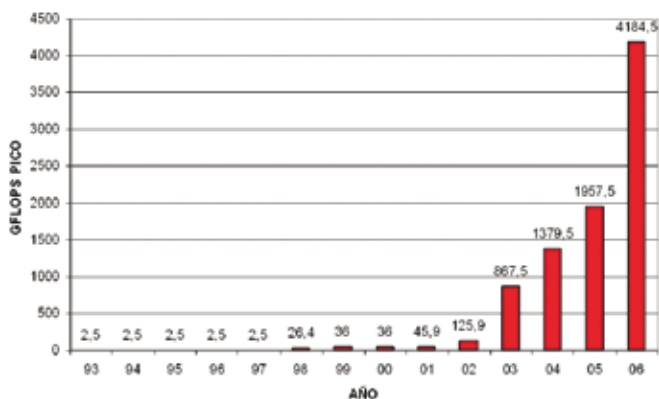
- Instalación en decembro do 2006 dunha ampliación do SVG para dar resposta aos requirimentos dos GRID's nos que participa o CESGA. Esta ampliación duplica a capacidade de cálculo do CESGA.

- A crecente demanda de memoria nos traballos dos investigadores e o incremento da paralelización, ocasionaron que parte dos procesadores quedasen cun baixo nivel de uso, diminuindo con iso as horas de cálculo durante o ano. A arquitectura como a do Finis Terrae, vén a resolver esta carencia de memoria.

- Firma do Convenio Finis Terrae.

No ano 2006 o CESGA non levou a cabo novas adquisicións de equipamento de cálculo ata finais de Decembro en que se recepciónó un novo cluster de computación grid formado por 36 servidores DELL Poweredge 1955 e 1 servidor DELL Poweredge 2950 cun total de 1843 GFLOPS. Este sistema non entrou en produción ata o mes de Xaneiro do 2007.

EVOLUCIÓN DA CAPACIDADE DE CÁLCULO INSTALADA NO CESGA



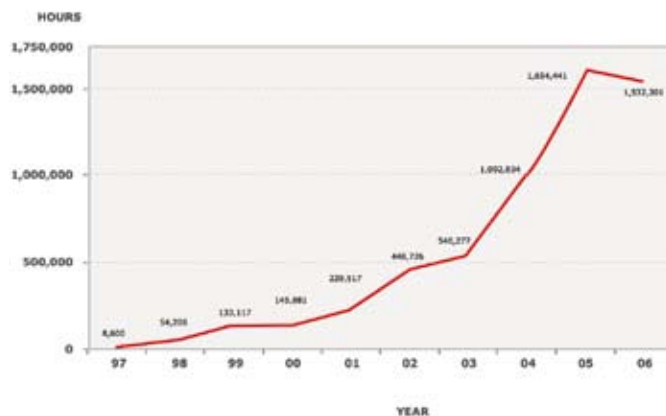
1 GFLOPS = 1.073.741.824 OPERACIONES DE PUNTO FLOTANTE POR SEGUNDO

Evolución consumo de CPU por Sistema

Durante o ano 2006 os servidores máis utilizados foron o cluster SVG e o servidor HP Integrity Superdome. Durante este ano non se realizou ningunha adquisición adicional (exceptuando a ampliación do cluster SVG con nodos grid pero que non se puxo en produción neste ano) mostrando todos os servidores uns niveis de ocupación próximos ao 100%. Diversas incidencias no servidor de cálculo Superdome, a priorización de traballos paralelos (cuxa eficiencia é inferior á dos secuenciais) e os requirimentos de maior cantidade de memoria, provocaron unha diminución no número de horas con-

sumidas polos investigadores, desde 1,654,411 horas no ano 2005 ata 1,532,301, o que representa unha diminución do 7.4%. Durante todo o ano o servidor HPC320, instalado no ano 2002, tamén continuou cun nivel alto de utilización (contorno ao 75%).

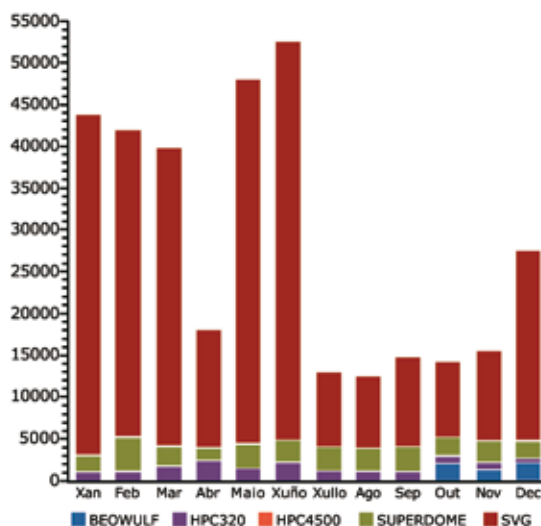
EVOLUCIÓN DAS HORAS DE CÁLCULO CONSUMIDAS NO CESGA



Número de traballos executados por sistema

O número de traballos executados por sistema representa a cantidade de simulacións que os usuarios realizaron en cada un dos servidores de cálculo. Este valor depende non só da capacidade de cálculo dispoñible senón tamén dos recursos necesarios para a execución das simulacións. Os sistemas con maior número de traballos foron o SVG e o Superdome. Especialmente o primeiro, debido a que é un servidor orientado a produtividade, é dicir, á realización dun gran número de traballos independentes con necesidades de cálculo relativamente baixas.

TRABALLOS EXECUTADOS POR SISTEMA EN 2006



Tempo medio de espera en cola por sistemas

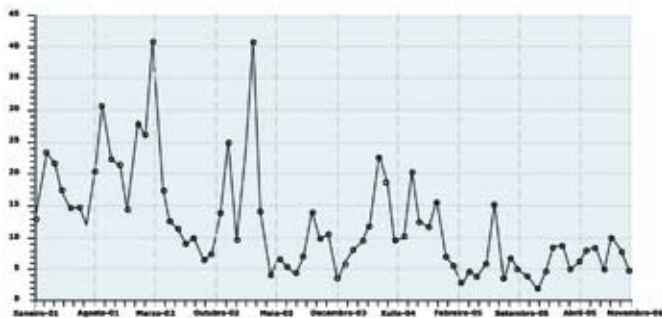
Os tempos medios de espera en cola representan o tempo que por termo medio deben esperar as simulacións dos usuarios desde que solicitan os recursos do CESGA ata que as súas simulacións comezan a utilizalos. Estes tempos varían en función da cantidade de simulacións que se están a realizar e idealmente debería ser o máis próximo a cero para evitar as esperas ata obter os resultados das simulacións. Porén, canto máis alto é o nivel de ocupación dos sistemas de cálculo, é necesario esperar máis cantidade de tempo ata que estean dispoñibles os recursos suficientes. Xa que logo, esta medida tamén é un bo indicativo de cal é o nivel de saturación existente nos recursos de computación.

Normalmente os tempos de espera diminúen nos períodos estivais e navideños e aumentan significativamente a medida que se van incorporando novos usuarios. Na gráfica apréciase que os sistemas con maiores tempos de espera son o Superdome (por encima das 20 horas) e o HPC320, con menores tempos de espera durante os meses de Xullo e Agosto. Mentres que o tempo medio de espera baixou no Superdome de 25 a 19 horas, no HPC320 subiu de 9 a 19 horas e no SVG non variou.

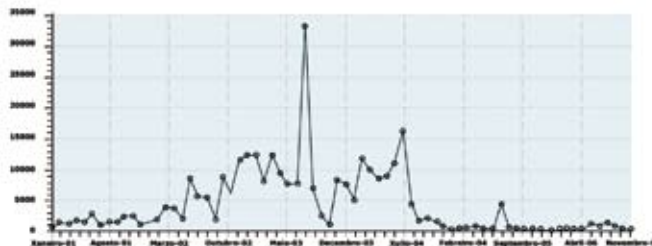
TEMPO MEDIO DE ESPERA PARA PROCESO POR SERVIDORES EN 2006



TEMPO MEDIO DE ESPERA PARA PROCESO EN TODOS OS SISTEMAS ENTRE XANEIRO DE 2001 E DECEMBRO DE 2006, EXPRESADO EN HORAS



TEMPO PROCESO/TEMPO ESPERA EN COLA PARA TODOS OS SISTEMAS ENTRE XANEIRO 2001 E DECEMBRO 2006





Os usuarios do CESGA teñen ao seu dispor diferentes arquitecturas de servidores para Computación de Altas Prestacións. Trátanse de máquinas deseñadas para solucionar un reducido número de problemas, pero de grandes dimensións, nun tempo limitado. Estas arquitecturas incorporan procesadores escalares de alto rendemento con acceso a grandes cantidades de memoria, utilizando para isto redes de interconexión interna cun baixo tempo de latencia e alta capacidade de transferencia.

Ao longo do ano 2006, os usuarios tiveron acceso a dous sistemas de altas prestacións diferentes:

- HP Integrity Superdome:

Cluster Numa formado por dous nodos cun total de 128 procesadores Intel Itanium2, 1500 MHz, 6 Mbytes cache e 384 GB de memoria e 4,6 Terabytes para almacenamento temporal en disco. Dispón dunha rede Infiniband de interconexión entre os dous nodos. Para os datos permanentes do usuario conta cunha cabina de almacenamento masivo EVA-3000 con tecnoloxía FiberChannel. Esta é a máquina na que os usuarios realizan os traballos con maior demanda computacional, e como opción preferente para a execución de traballos paralelos.

- COMPAQ HPC 320:

Cluster conformado por oito máquinas SMP con catro procesadores Alpha EV68 a 1GHz e 80 GB de memoria. Os nodos deste cluster están interconectados mediante unha rede Memory Channel Dual Rail.



SUPERORDENADOR HP INTEGRITY SUPERDOME

FINISTERRAE

A Xunta de Galicia, o Consejo Superior de Investigaciones Científicas e o CESGA asinaron un acordo de colaboración para o financiamento do proxecto FINIS TERRAE. O CESGA, HP e Intel levarán a cabo actividades de investigación, formación e difusión en HPC, ademais do deseño, fabricación e instalación no Centro dun gran supercomputador con nodos de memoria compartida, o FINIS TERRAE.



PLATAFORMAS ABERTAS PARA HPC

No ano 2006, o CESGA foi convidado a integrarse en Gelato. A Federación Gelato (www.gelato.org) é un foro de traballo da comunidade técnica global dedicada ao avance de Linux sobre plataformas baseadas en Intel Itanium. O CESGA contribuirá ao desenvolvemento e mellora de ferramentas de xestión de clusters e grids, xestión de memoria, ferramentas de medida de rendemento e contabilidade do uso de recursos, adaptación e sintonización de aplicacións e librerías a contornos Linux Itanium, entre outros.



EQUIPO	ANO INSTALACIÓN	ARQUITECTURA	PROCESADORES, MEMORIA, REND. MÁX.
SERVIDORES HPC			
Compaq HPC320	2002	Cluster	32 CPU's, 80 GB memoria, 64 GFLOPS
HP Superdome	2003	Cluster Numa	128 CPU's, 384 GB Memoria, 768 GFLOPS

SERVIDORES GRID E HTC (HIGH THROUGHPUT COMPUTING)

O CESGA conta con arquitecturas de servidores deseñadas para solucionar un elevado número de problemas de escasa complexidade computacional nun tempo reducido. Os servidores HTC, ou de Computación de Alta Produtividade, incorporan unha gran cantidade de procesadores escalares con acceso rápido á memoria local de tamaño limitado. Estes servidores dispoñen dunha rede interna de interconexión cunha latencia media-alta.

Este tipo de arquitecturas é idóneo para procesos repetitivos con baixa dependencia entre eles, por exemplo: algoritmia xenética, procesado masivo de datos experimentais, renderización de imaxe, cálculos paramétricos, etc.

No ano 2006, o CESGA adquiriu á casa DELL un Cluster de Blades con 292 núcleos de procesador, 148 GB de memoria e una

capacidade de cálculo de 2.227 GFLOPS. Este cluster integrouse no Superordenador Virtual Galego (SVG).

O SVG reflicte a aposta que, xa no ano 1999, fixo o Centro polos sistemas cluster de baixo custo como solución axeitada para elevar o throughput de traballos de usuario.

Os sistemas HTC, e incluso algúns clusters, son cada vez máis abundantes nos laboratorios e departamentos dos grupos de investigación. Estes grupos empregan os servizos do CESGA como complemento dos seus, sen necesidade de portar as súas aplicacións nin de aprender novos sistemas operativos.

Polas súas características, os servidores HTC instalados no CESGA empréganse en experiencias e proxectos GRID.



NODOS DE CLUSTER DELL DE PCS INTEGRADOS NO SVG

PROXECTOS GRID SIGNIFICATIVOS NOS QUE PARTICIPA O CESGA

EQUIPOS INTEGRADOS NO SUPERORDENADOR VIRTUAL GALEGO (SVG)

EQUIPO	ANO INSTALACIÓN	ARQUITECTURA	PROCESADORES, MEMORIA, REND. MÁX.
SVG	2001	Cluster distribuído de PC's	50 CPU's 0,5-1 GB memoria CPU, 9,9 GFLOPS (último trimestre 2004: 110 CPU's, 300 GFLOPS)
Compaq Beowulf	2002	Cluster Beowulf	16 CPU's, 8 GB memoria, 16 GFLOPS
SVG Dell	2004	Cluster de PC's	80 CPU's, 80 GB memoria, 512 GFLOPS
SVG Blades	2006	Cluster de Blades	292 núcleos de procesador, 148 GB memoria 2.227 GFLOPS

HOUSING DE EQUIPOS DE COMPUTACIÓN



EQUIPO	AÑO INSTALACIÓN	ARQUITECTURA	PROCESADORES, MEMORIA, REND. MÁX.
--------	-----------------	--------------	-----------------------------------

OUTROS SERVIDORES

Meteogalicia	2004	2 nodos SUN	20 CPU's, 40 GB memoria, 48 GFLOPS
LHCb - USC	2002	Cluster de PCs	139 cores, 112 GB memoria, 894 GFLOPS

Meteogalicia

No CPD do CESGA atópase instalado un servidor para cálculo da casa SUN Microsystems composto por dous nodos SMP cun total de 20 CPUs, 40 GB de memoria e 48 GFLOPS de capacidade de cálculo, que foi adquirido por Meteogalicia no ano 2004. Dende esa data, o Centro ocúpase do housing e a administración do equipo, que se emprega no desenvolvemento de proxectos de investigación metereolóxica.

Meteogalicia ven utilizando os servidores do CESGA dende a súa creación para producir decotío a predición meteorolóxica. Ademais desta máquina de SUN empregan habitualmente os servidores: HP Integrity Superdome, HPC 320 e o Superordenador Virtual Galego (SVG).

LHCb - USC

Dende o ano 2002, o grupo de investigación xxxxx da Facultade de Física da Universidade de Santiago de Compostela ten aloxado no CPD do CESGA un cluster de PCs que participa como Tier-2 no experimento LHCb coordinado polo CERN. Os técnicos de sistemas do CESGA veñen dando resposta ás necesidades de administración do equipo, que ponse ao dispor de todosos usuarios cando non é empregado polo proxecto. No ano 2006 este cluster ampliouse con 32 cores e 32 GB de memoria.



Worldwide LHC Computing Grid

Distributed Production Environment for Physics data Processing



NODOS SUN DE METEOGALICIA



DETALLE CONEXIÓNS CLUSTER DE PCS DO PROXECTO LHCb NO QUE PARTICIPA O DPTO. DE FÍSICA DE PARTÍCULAS DA UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

ALMACENAMIENTO DE DATOS

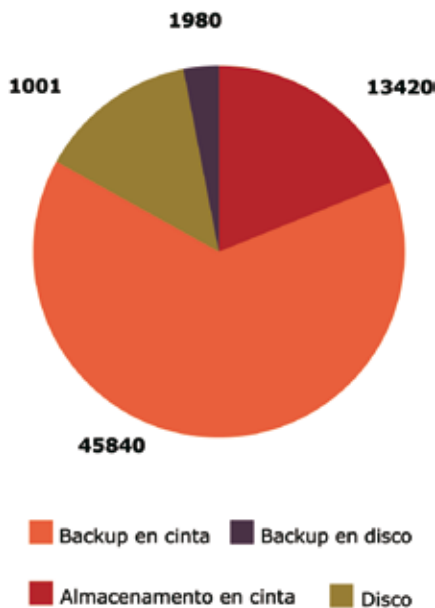


A capacidade total de almacenaxe dispoñible para os usuarios do CESGA no ano 2006 supera os 140 TB e non variou significativamente respecto ao ano anterior (as variacións corresponden á adquisición dun cluster grid que non entrou en produción ata Xaneiro do 2007 e á ampliación do espazo no SVG ata 1TB). Esta capacidade encóntrase distribuída en distintos tipos de almacenaxe da seguinte forma:

TIPO DE ALMACENAMIENTO	CAPACIDADE (Gigabytes)
Temporal ou Scratch	9.092
Temporal Paralelo	12.800
Permanente en disco	25.538
Cinta	95.000
Total	142.430

Destes 142 TB dispoñibles para os investigadores, a finais do ano 2006 estaban ocupados 71 TB, dos cales 13.4 TB corresponderon a almacenaxe en liña en cinta, 45.8 TB se dedicaron a backups en cinta dos servidores de cálculo, 10 TB en disco de alto rendemento e 1.9 TB dedicados a réplicas de información en disco de baixo custo para dar servizo ás copias de seguridade dos investigadores. Respecto ao ano 2005 a cantidade total de almacenaxe utilizada non variou de forma significativa. Así mesmo, o servizo de almacenaxe de datos conta agora cunha xerarquización do tipo de datos que se almacenan para asegurar a mellor calidade en función da información (criticidade dos datos e velocidade de acceso). O número de usuarios do servizo de almacenaxe foi de 45, dos cales 26 contan cun aumento da súa cota de usuario, 20 con almacenaxe masiva de datos e 11 con copias de seguridade a disco (algúns usuarios están subscritos a máis dun servizo).

OCUPACIÓN DO SISTEMA DE ALMACENAMIENTO EN (GB)



Servizo de almacenamento

Criterios para a clasificación da información

No ano 2006 mantivéronse os criterios, introducidos xa no ano 2004, para a clasificación dos tipos de datos no servizo de almacenamento.

Esta sistematización permitiu axeitar os distintos servizos de almacenamento ás necesidades específicas de cada grupo de información, respondendo deste xeito á crecente demanda en cantidade e calidade do servizo, así como á optimización das diferentes opcións de almacenamento dispoñibles no centro. A continuación preséntanse os 5 tipos de información dispoñibles nos servidores, de acordo coa clasificación definida anteriormente:

SCRATCH: de moi baixa latencia e máximo ancho de banda. Afecta ao rendemento dos sistemas de cálculo do centro. Capacidade media (os datos almacénanse unicamente mentres dura a execución dos cálculos). A súa dispoñibilidade pode ser baixa (son datos temporais), e non é necesario realizar backups.

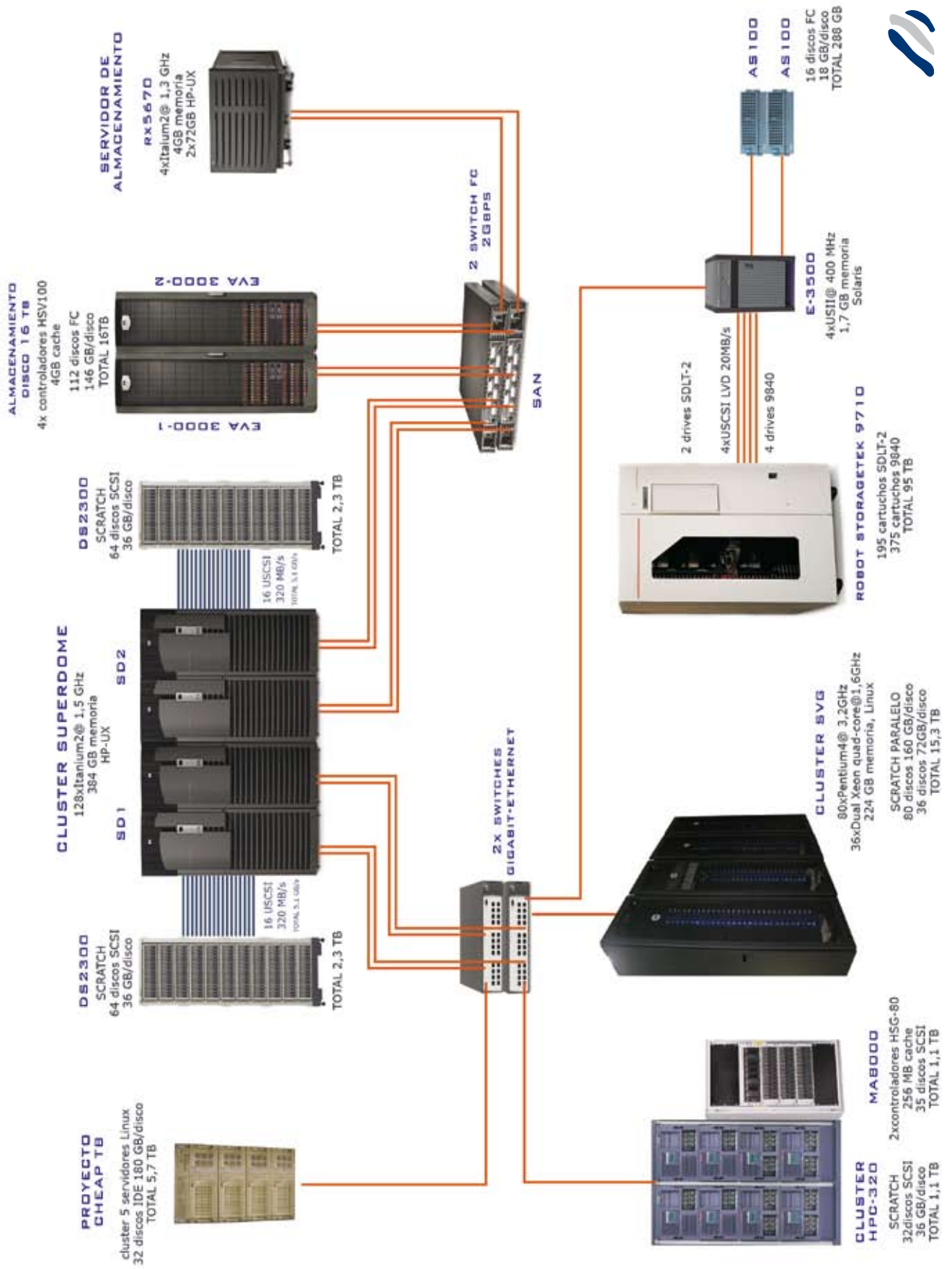
Directorios home: conteñen datos críticos susceptibles de ser analizados e modificados en calquera momento. Da súa dispoñibilidade depende o funcionamento dos servizos de cálculo do centro. Por tanto, deben ter como prioridade a dispoñibilidade (máxima) e un axeitado balance entre capacidade (media, en función do número de usuarios), e rendemento (medio), do cal se realizan backups de forma diaria.

Almacenamento masivo de datos (MSS): utilizados para almacenar bases de datos e resultados de experimentos; normalmente non varían o seu contido (adoitan ser do tipo WORM) e a súa velocidade de acceso non adoita ser crítica, aínda que si requiren dun elevado ancho de banda de acceso aos servidores. A realización dos backups pódese levar a cabo baixo demanda.

Backups a disco: Copias de datos que os usuarios realizan dos seus propios servidores ou dos seus PCs nos sistemas de almacenamento do CESGA para dispoñer dunha copia de seguridade dos seus datos. A dispoñibilidade do servizo pode ser baixa. O servizo é ofrecido a través da rede polo que o tipo de conexión non require dun alto rendemento.

SCRATCH PARALELO: De moi alto rendemento (moi baixa latencia e máximo ancho de banda), similar ao primeiro tipo, co engadido de que neste caso, os datos scratch compártense entre todos os nodos do cluster e están repartidos entre eles. Isto permite aumentar o ancho de banda de acceso aos ficheiros e a capacidade total do scratch por riba da capacidade do disco local. A súa dispoñibilidade pode ser moi baixa, debido a que depende de moitos compoñentes que non están redundados e non se realizan backups destes datos.

RECURSOS DE ALMACENAMIENTO DE DATOS NO CESGA



APLICACIONES DE CÁLCULO CIENTÍFICO

A actividade da área de aplicacións estivo marcada este ano polos seguintes feitos:

- O elevado número de accións de soporte realizadas durante o ano (91).
- A adaptación do contorno do SVG á inclusión de equipos con capacidade de 64bits e o desenvolvemento conseguinte dun método de instalación de aplicacións que teña en conta a arquitectura de execución de forma transparente ao usuario.
- O elevado número de peticións de novas instalacións ou actualizacións (20) ou de soporte á compilación de aplicacións de usuario ou con licenza de usuario (6).

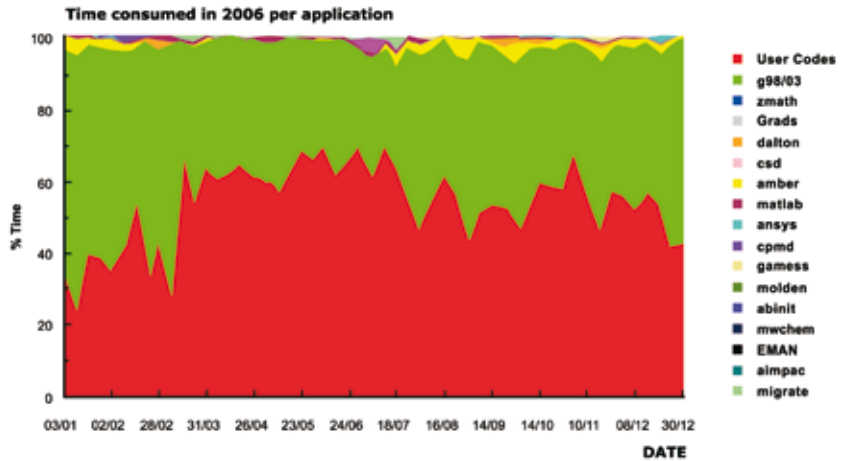
• A mellora da aplicación de xestión de aplicacións para seguir os procedementos da ISO 9001:2000 así como a consulta directamente desde a páxina WEB das aplicacións instaladas.

• A proba do sistema de xestión de software Subversión para prover dun novo servizo aos usuarios durante 2007.

Esta actividade resúmese nas seguintes cifras:

- 51 aplicacións ou librarías de cálculo científico en produción.
- 20 aplicacións novas instaladas ou actualizadas.
- 2 aplicacións desenvolvidas.
- 2 desenvolvementos de usuario optimizados.
- 91 solicitudes de axuda atendidas.
- Dúas aplicacións de xestión actualizadas (a de xestión de aplicacións e de xestión da calidade).

DISTRIBUCIÓN DE TEMPO DE CPU CONSUMIDO POR APLICACIÓN



As estatísticas presentadas nesta gráfica extráense dos ficheiros de contabilidade. Debido a que a información recollida sobre o nome dos executables en case todos os sistemas está truncada a 8 caracteres, é posible que exista un pequeno erro na asignación do mesmo a unha aplicación (moi improbable). Só se recollen entradas cun tempo de execución superior a 30 segundos (suma de tempo de sistema máis de usuario), para evitar saturar o sistema, excepto no CSD, para o que o punto de corte é inferior, xa que o consumo de tempo deste tipo de aplicacións é moi baixo.

DESENVOLVEMENTO DE APLICACIONES PARA USUARIOS

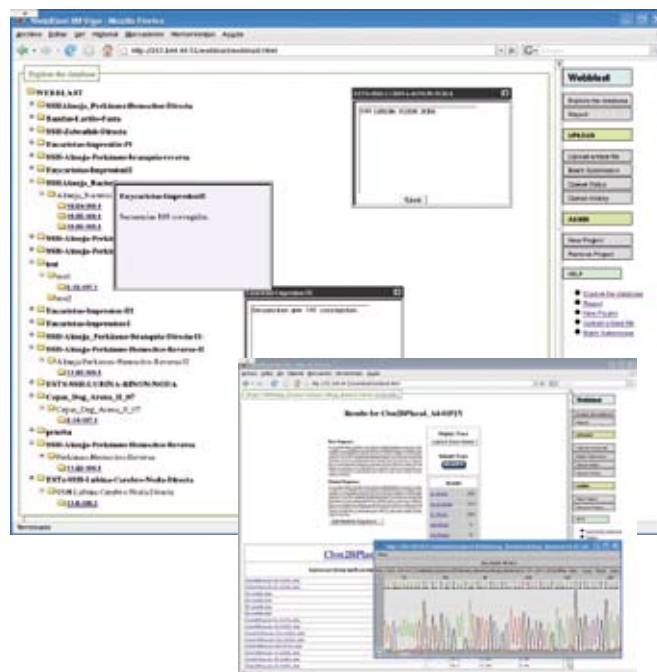
Mellora no soporte de aplicacións: Gaussian 03 e g03mem. Enviar traballos de Gaussian03 á cola de execución nos servidores de cálculo dá CESGA supón realizar por parte do usuario unha estimación máis ou menos precisa dos recursos que ese traballo vai consumir. Con esta fin o script g03mem desenvolvido enteiraamente no CESGA permite o cálculo do número de bases do traballo a executar e dá unha estimación de CPU/memoria/disco requiridos para a súa execución. Nos exemplos aparece a execución de g03mem con 2 tests estándar de Gaussian 03.

SERVIZO DE ADAPTACIÓN DE SOFTWARE PARA USUARIOS

Entre outras adaptacións de software científico para usuarios, no ano 2006 creouse un portal web de xestión de secuencias de nucleótidos para a Intranet do Grupo de Patoloxía de Organismos Marinos do Instituto de Investigacións Marinas do CSIC en Vigo (<http://pathology.iim.csic.es/>). Isto supuxo a adaptación dos seguintes paquetes de software especializados:

- Webblast: NHGRI WebBLAST é un conxunto de ferramentas útiles na organización de datos de secuencias xenéticas.
- Staden: Paquete de análise de xenos e proteínas.
- Netblast: Cliente de rede para a consulta de aliñamentos de secuencias xenéticas fronte ás bases de datos mantidas polo NCBI (National Center for Biotechnology Information).

Grazas ao desenvolvemento deste portal o tempo de organización e análise de aliñamentos de grupos de varios centenaes de secuencias xenéticas reducirase drasticamente.



CONSEJO SUPERIOR
DE INVESTIGACIONES
CIENTÍFICAS

CATÁLOGO DE APLICACIÓN E BIBLIOTECAS DE UTILIDADES INSTALADAS NOS SERVIDORES CESGA A 31 DE DECEMBRO DE 2006

ÁREA	APLICACIÓN	SERVIDORES				
		HPC 320	HP SUPERDOME	SVGD	OUTROS	
Análise Científica	ROOT	X				
Bases de Datos Científicas	CSD				csd.cesga.es	
	ZENTRALBLATT				zmath.cesga.es	
Bioinformática	BEAMnrc			X		
	Blast	X	X			
	GlimmerM			X		
	IM		X			
	Migrate	X	X			
	MrBayes		X	X		
	MSVAR		X			
	Phylip			X		
	r8s		X	X		
Cálculo Estructural, Fluidos e Magnetismo	Ansys	X				
Cálculo Molecular	Abinit			X		
	Aimpac	X				
	Amber	X	X	X		
	CPMD	X	X	X		
	Dalton	X	X	X		
	Games	X	X	X		
	Gaussian 03	X	X	X		
	Gaussian 98	X	X	X		
	Gromacs	X	X	X		
	LAMMPS		X			
	Molden	X	X			
	NAMD	X				
	NWChem	X	X			
	XPLOR-NIH				X	
Librerías Matemáticas	ACML				X	
	ATLAS				X	
	BLAS	X	X			
	cernlib				X	
	CLHEP				X	
	FFTW	X	X	X		
	GMP		X			
	LAPACK	X	X			
	ScaLAPACK		X			
	SUPERLU		X			
	Simulación	Bsoft	X		X	
		EMAN				X
		Geant				X
		Matlab	X	X		
SPIDER		X	X			
Visualización Científica e Animación	Ferret	X	X			
	Grace				X	
	Grads	X	X	X		
	Ncarg	X	X	X		
	ncBrowse	X				
	ncl	X				
	Ncview	X				
	NetCDF	X	X	X		
	udunits	X				
	CVS	X	X			
Xestión de Software	CVS	X	X			

APLICACIONES DE CÁLCULO CIENTÍFICO



As novas aplicacións ou bibliotecas de utilidades incorporadas durante o ano 2006 a petición dos usuarios ou por incorporación de novas versións son:

APLICACIÓN	TAREFA
Acml (nova instalación no SVG)	Implementación BLAS/LAPACK e outras librarías matemáticas optimizadas especificamente para procesadores AMD.
ARB (nova instalación no SVG)	ARB é un paquete gráfico que comprende varias ferramentas para o manexo de bases de datos de secuencias e análise de datos. En concreto, crea a árbore filoxenética dunha base de datos de secuencias procesadas (aliñadas) e calquera tipo de dato adicional relacionado coas mesmas.
Atlas (nova instalación no SVG)	O proxecto ATLAS é un esforzo investigador centrado en aplicar técnicas empíricas co obxectivo de obter alto rendemento portable. Actualmente dispón de interfaces en C e Fortran77 dunha eficiente implementación de BLAS así como dunhas poucas rutinas LAPACK.
Bsoft (nova instalación no SVG e no hpc320)	Bsoft é unha colección de programas e unha plataforma de desenvolvemento de software para o procesado de imaxes en bioloxía estrutural. Problemas en bioloxía estrutural son tratados mediante un deseño altamente modular, permitindo un desenvolvemento rápido de novos algoritmos eliminando as limitacións derivadas de problemas tales como o I/O de ficheiros. Proporciona unha interface de doado accesibilidade que pode e foi utilizada noutros paquetes de software.
CSD (Instalada nova versión)	Cambridge Structural Database é unha base de datos que recolle información bibliográfica, química e cristalográfica de compostos orgánicos e organometálicos obtida mediante difracción de raios X e difracción de neutróns.
Dalton (nova versión no SVG e no Superdome)	Programa de cálculo de funcións de onda, propiedades moleculares e superficies de enerxía potenciais que implementa os algoritmos de cómputo SCF, MCSCF, MP2 e Coupled Cluster.
EGSnrc (nova instalación no SVG)	Este programa é un Monte Carlo para a simulación do transporte de electróns e fotóns. A utilidade do mesmo é variada aínda que se utiliza para o cálculo de dosimetrías en tratamentos médicos.
F2PY (nova instalación no SVG e no Superdome)	F2PY proporciona unha conexión entre as linguaxes Python e Fortran. F2PY é unha extensión de Python que posibilita a creación de módulos C/API de Python C/API desde códigos Fortran.
Gromacs (nova versión no SVG e no hpc320)	GROMACS é un software versátil para cálculos de dinámica molecular, é dicir, simular as ecuacións de Newton do movemento para sistemas de centos a millóns de partículas. Está principalmente deseñada para o estudo de moléculas bioquímicas como proteínas e lípidos con un gran número de complexas interaccións de enlace.
IM (nova versión no Superdome)	Implementación do método MCMC (Markov Chain Monte Carlo) para a análise de datos xenéticos mediante o modelo de diverxencia de poboación 'Isolation with Migration'.

APLICACIÓN	TAREFA
Migrate (nova versión no SVG e no hpc320, nova instalación no Superdome)	Migrate estima tamaños de poboación efectiva e índices de migración pasados entre n poboacións asumindo un modelo de matriz de migración con índices de migración asimétricos e diferentes tamaños de sobpoboación. Migrate utiliza máxima similitude ou inferencia Bayesiana para estimar conxuntamente todos os parámetros.
MrBayes (nova versión no SVG e no Superdome)	Mrbay é un programa para a estimación Bayesiana de filoxénese baseada nunha técnica de simulación Markov Chain Monte Carlo (ou MCMC).
NAMD (nova instalación no Superdome e no hpc320)	NAMD é un código de dinámica molecular paralelo deseñado para conseguir un alto rendemento na simulación de grandes sistemas biomoleculares. A súa programación está baseada en obxectos paralelos Charm++ (http://charm.cs.uiuc.edu) e escala ata centos de procesadores en plataformas paralelas de alto rendemento e ata decenas de procesadores en clusters comúns con gigabit ethernet.
NumPy (nova instalación no SVG e no Superdome)	Numeric Python (NumPy) é un conxunto de extensións á linguaxe Python que permite aos programadores nesta linguaxe manipular eficientemente grandes conxuntos de obxectos organizados en forma de malla (arrays).
PHYML (nova instalación no SVG)	Un algoritmo simple, rápido e preciso para a estimación de grandes filoxenias mediante probabilidade máxima.
pyMPI (nova instalación no SVG e no Superdome)	A extensión pyMPI foi deseñada para proporcionar operacións paralelas para Python sobre plataformas paralelas distribuídas usando MPI.
Spider (nova instalación no Superdome e no hpc320)	System for Processing Image Data from Electron microscopy and Related fields é un sistema de procesamento de imaxes procedentes de técnicas de microscopía electrónica.
SuperLU (nova instalación no Superdome)	Librarías secuenciais e paralelas para a resolución de sistemas lineais, sparse e asimétricos utilizando factorización LU.
WRF (nova instalación no SVG)	O modelo Weather Research and Forecasting (WRF) é un sistema de última xeración para a predición numérica mesoescala do tempo atmosférico deseñado tanto para predición operativa como para investigación sobre a atmósfera.
XPLOR-NIH (nova instalación no SVG)	PLOR-NIH é un programa de determinación de estrutura molecular construído sobre o programa XPLOR, que inclúe ferramentas adicionais.



REDE DE CIENCIA E TECNOLOXÍA DE GALICIA



As accións máis relevantes correspondentes a RECETGA, durante o ano 2006, resúmense nas seguintes:

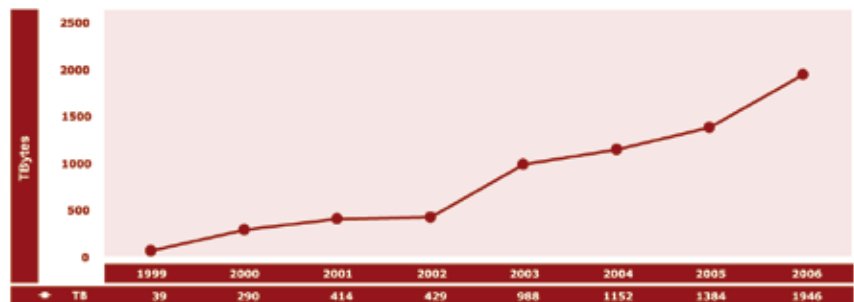
Monitorización e xestión de rede:

A Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia prestou o seu servizo cun nivel de dispoñibilidade do 99,55 %.

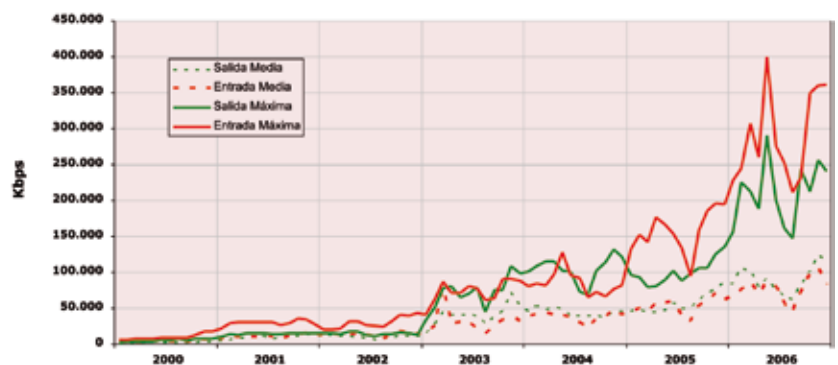
Novas conexións a Centros:

- Conexión a RedIRIS mediante 5 liñas de 2,5 Gbps cada liña.
- Conectouse á rede o Centro Oncolóxico de Galicia, situado na cidade da Coruña.
- Mellorouse a conexión da Universidade da Coruña mediante a inclusión dun Giga-router.
- Conectouse ao hospital Juan Canalejo mediante fibra óptica, proporcionando redundancia ao radioenlace.
- Continuouse co despregamento de Eduroam.

TRÁFICO INTERCAMBIADO EN RECETGA 1999 - 2006



INTERCAMBIO DE TRÁFICO RECETGA REDIRIS 2000 - 2006



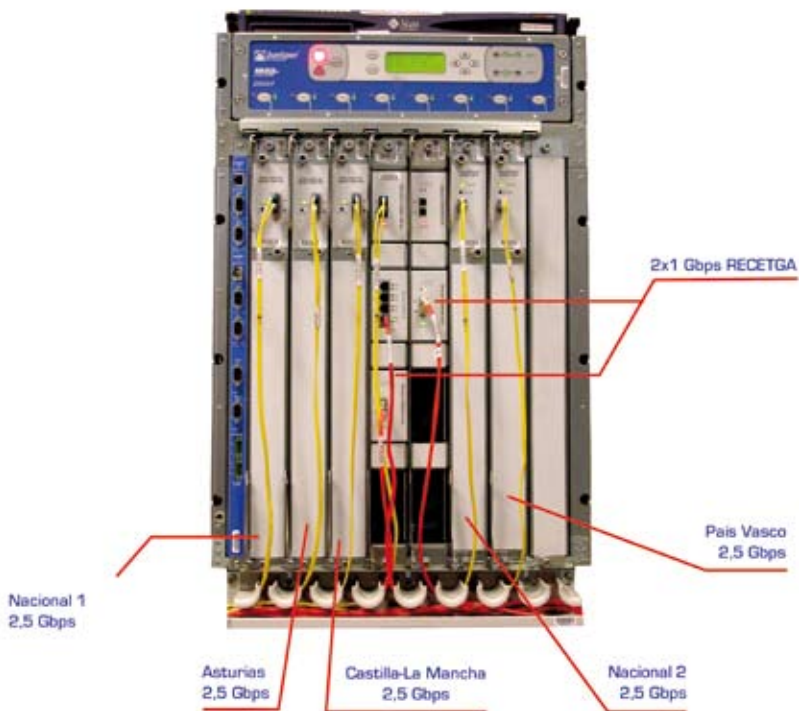
ESPECIFICACIÓNS TÉCNICAS RECETGA

Rede Troncal	<ul style="list-style-type: none"> ■ Baseada Fibra Óptica Oscura e Radio Enlaces SDH ■ Enlaces Gigabit e ATM ■ Gigarouters JUNIPER M20, M10 e M10I ■ Conmutadores ATM de FORE
Rede de Acceso	<ul style="list-style-type: none"> ■ Baseada en Fibra Óptica, Radio enlaces SDH e outras tecnoloxías como WIFI, RDSI, etc ■ Capacidades ata múltiples Gigabits Ethernet segundo as necesidades do centro ■ Gigarouters JUNIPER, conmutadores FORE, CISCO e ENTERASYS
Xestión da Rede	<ul style="list-style-type: none"> ■ Baseada en ferramentas de software libre e desenvolvementos propios
Conexión a RedIRIS	<ul style="list-style-type: none"> ■ Cinco liñas de 2,5 Gbps
Rede Interna CESGA	<ul style="list-style-type: none"> ■ Gigabit Ethernet-Fast Ethernet-Rede ATM ■ Conmutadores ATM de FORE ASX 200, ASX 1000 ■ Conmutadores Gigabit FORE ESX-4800 e 3COM ■ Gigabit ata o posto nos servizos que o requiren

SERVIZOS A DISPOSICIÓN DOS CENTROS CONECTADOS

- DNS
- ALOXAMENTO DE WEBS
- CORREO ELECTRÓNICO (con antivirus)
- LISTAS DE CORREO
- WEBMAIL
- ESTADÍSTICAS DE USO
- FTP
- NEWS
- MIRRORS (contidos de interese)
- SERVIZOS DE ACCESO REMOTO
- MULTICAST
- VIDEOCONFERENCIA
- MCU/GATEWAY
- ILS
- EDUROAM
- FERRAMENTA DE XESTIÓN DE REDE
- SERVIZOS DE SEGURIDADE (auditoría, xestión de incidentes)

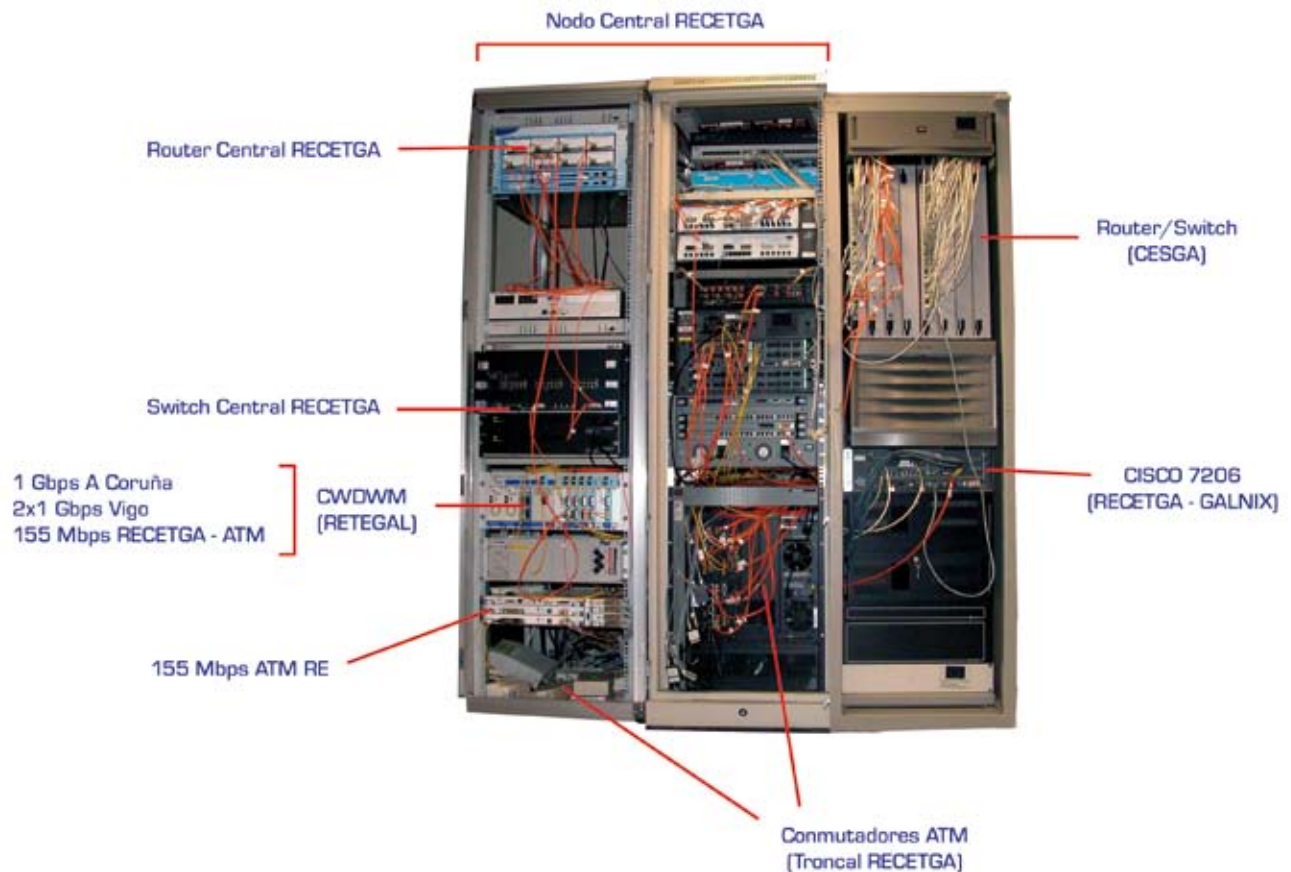
PdP REDIRIS EN GALICIA (JUNIPER M40e)



CONEXIONES EXTERIORES A TRAVÉS DE



NODO CENTRAL DE RECETGA INSTALADO NO CESGA



CENTROS CONECTADOS Á RECETGA



	CONEXIÓN	DISPONIBILIDADE ANO 2006
Universidade da Coruña		
Campus da Coruña	Fibra Óptica (1Gbps) + Radio enlace ATM a 155Mbps	99,687%
Campus de Ferrol	Fibra Óptica (1Gbps) + Radio enlace ATM a 155Mbps	99,752%
Universidade de Santiago de Compostela		
Campus de Santiago	2 Fibra Óptica (1Gbps)	99,997%
Campus de Lugo	Fibra Óptica (155 Mbps)	99,797%
Universidade de Vigo		
Campus de Vigo	2 Fibra Óptica (1Gbps)	99,941%
Campus de Pontevedra	Fibra Óptica (1Gbps)	99,569%
Campus de Ourense	Fibra Óptica (1Gbps)	98,894%
Universidade do Minho		
	Fibra Óptica (155Mbps)	99,940%
BUGALICIA		
Consortio de Bibliotecas Universitarias de Galicia	Fibra Óptica (155Mbps)	99,895%
Centros Tecnolóxicos e de Investigación		
ANFACO - CECOPECA (Vigo)	FastEthernet (100Mbps)	99,893%
Aula de produtos lácteos (USC - Lugo)	Radio enlace 4x2 Mbps	99,916%
Centro de Investigacións Forestais (Lourizán)	Radio enlace ATM a 155 Mbps	99,997%
Centro Superior Bibliográfico de Galicia	Fibra Óptica (155 Mbps)	96,623%
Centro de Investigacións Lingüísticas "Ramón Piñeiro"	Radio enlace ATM a 155 Mbps	99,997%
Centro Tecnolóxico Armando Priegue AIMEN	Radio enlace 4x2 Mbps	99,988%
Estación de Viticultura e Enoloxía (Leiro)	RDSI (64 Kbps)	NA
Centro de Cultivos Mariños (Ribadeo)	RDSI (64 Kbps)	100,00%
Centro de Investigacións Agrarias de Mabegondo	Radio enlace 4x2 Mbps	99,809%
Centro de Control de Calidade do Medio Mariño (Vilaxoán)	Radio enlace ATM a 155 Mbps	99,735%
Centro de Investigacións Mariñas (Corón)	Radio enlace 4x2 Mbps	99,882%
Centro de Supercomputación de Galicia	2 Fibra Óptica (1Gbps)	100%
Centro Tecnolóxico del Mar (CETMAR)	Wireless (11/22 Mbps)	99,312%
Centro de Innovacións e Servizos (Ferrol)	Radio Enlace ATM a 155 Mbps + Wireless (11/22 Mbps)	99,190%
Fundación Empresa - Universidade de Galicia (Vigo)	FastEthernet (100 Mbps)	99,851%
Fundación Empresa - Universidade de Galicia (Santiago)	Fibra Óptica (155 Mbps)	99,851%
CEIDA (Santa Cruz)	Wireless (11/22 Mbps)	99,122%
Dirección Xeral de I+D+i	FastEthernet (100Mbps)	99,705%
Centro Tecnolóxico del Automóvil (CTAG)	Radio enlace 4x2 Mbps	99,593%
Complexos Hospitalarios		
Hospital Clínico Universitario de Santiago de Compostela	Fibra Óptica (155 Mbps)	99,981%
Complexo Hospitalario "Xeral- Cies"	Radio enlace ATM a 155 Mbps	99,350%
Complexo Hospitalario Universitario "Juan Canalejo"	Radio enlace ATM a 155 Mbps	99,997%
Unidade de investigación do Hospital do Meixoeiro	Radio enlace ATM a 155 Mbps	94,605%
Centro Oncolóxico de Galicia	Wireless (11/22 Mbps)	NA
IEO		
Instituto Español de Oceanografía - A Coruña	Wireless (11/22 Mbps)	99,425%
Instituto Español de Oceanografía - Vigo	Radio enlace ATM a 155 Mbps	99,546%
CSIC		
Misión Biológica de Galicia	Radio enlace 4x2 Mbps	99,799%
Instituto de Investigacións Agrobiolóxicas de Galicia	Fibra Óptica (1Gbps)	98,508%
Instituto de Investigacións Marinas	Fibra Óptica (155 Mbps)	99,372%
Instituto de Estudios Galegos "Padre Sarmiento"	Radio enlace 4x2 Mbps	99,657%
Delegación Institucional del CSIC en Galicia	FastEthernet (100 Mbps)	NA
Outros Centros		
Palacio de Exposicións e Congresos de Galicia	Fibra Óptica (155 Mbps)	*
Parque Tecnolóxico de Galicia	Fibra Óptica (155 Mbps)	99,993%
Autopista Galega de Información	Fibra Óptica (155 Mbps)	99,508%
Meteogalicia	Fibra Óptica (155 Mbps)	
Intercambio con outras Redes		
GALNIX	2x100 Mbps	99,905%
JAZZTEL	2 Mbps	99,672%
RedIRIS	5x2.5 Gbps	99,994%
RETEGAL	155 Mbps	99,917%
SERGAS	155 Mbps	99,902%

* Conexión só dispoñible durante Congresos Científicos

PUNTO NEUTRO DE INTERCAMBIO DE TRÁFICO DE INTERNET EN GALICIA [GALNIX]



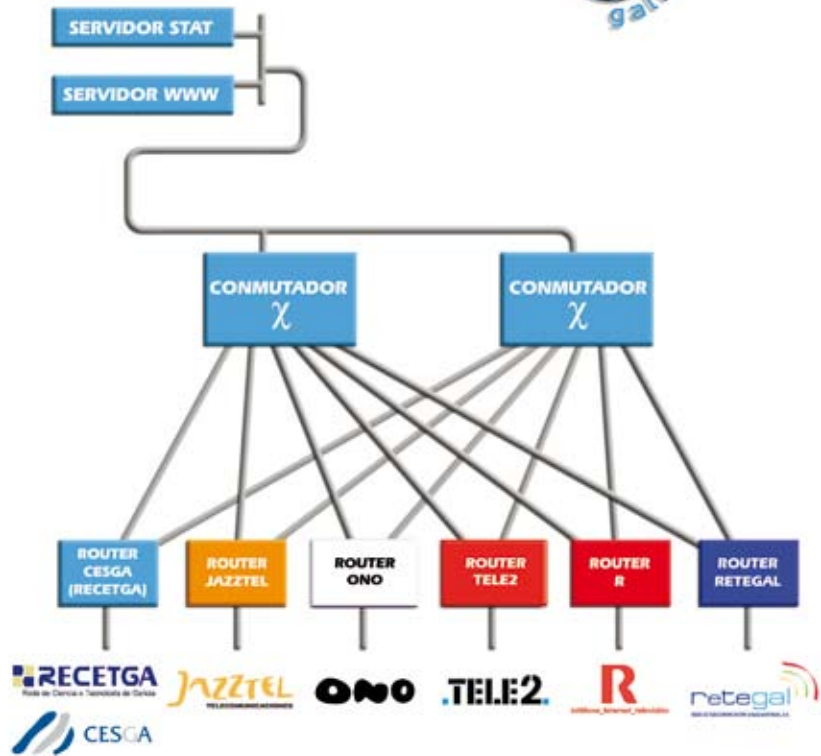
Dende que foi creado en maio de 2003, o Punto Neutro de Intercambio de Tráfico de Internet en Galicia (galNIX), albergado e xestionado polo CESGA, leva encamiñando localmente o tráfico que circula pola Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia (RECETGA) e polas cinco operadoras conectadas a el (Jazztel, ONO, R, RETEGAL, TELE2). Con esta labor, RECETGA facilita o tránsito da información con orixe e destino dentro da comunidade galega.

Ao longo do ano 2006, galNIX fixo posible a transmisión de 218,922 Terabytes de datos.

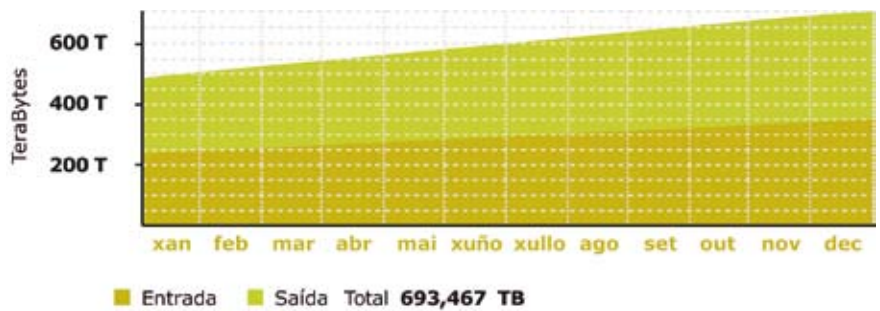
O mes do ano no que galNIX rexistrou o maior índice de transmisións foi o mes de marzo, con 11,8 Terabytes intercambiados, seguidos polos meses de febreiro e xaneiro, con 11,1 e 11 Terabytes, respectivamente. Non obstante, apréciase un comportamento moi similar no intercambio de datos, con índices moi próximos á media mensual (9,10 Terabytes), soamente afastada no mes de agosto con 5,9 Terabytes intercambiados.

Con estas cifras, o punto neutro galego acumula xa dende a súa creación un total de 693,467 TB transmitidos.

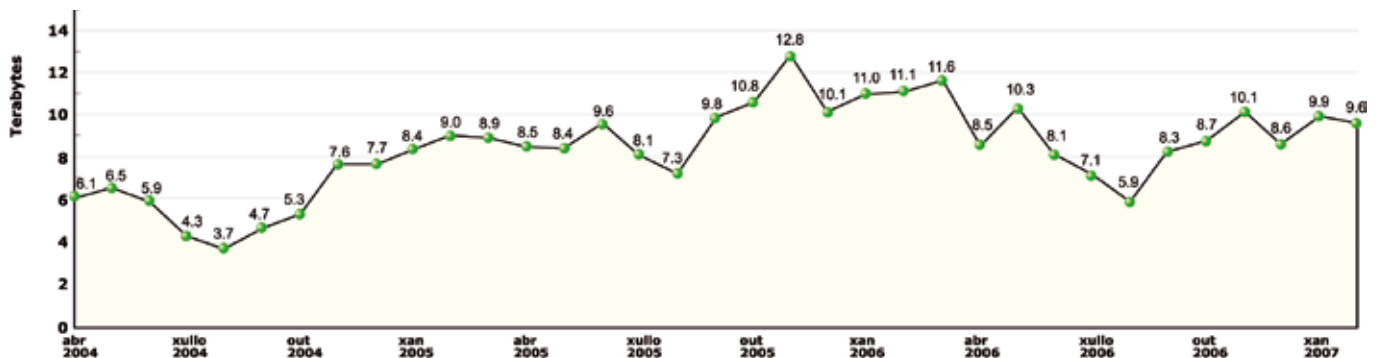
PUNTO NEUTRO DE INTERCAMBIO DE TRÁFICO DE INTERNET EN GALICIA



TRÁFICO ACUMULADO INTERCAMBIADO EN GALNIX



TRÁFICO MENSUAL INTERCAMBIADO NO GALNIX EN 2006





Obxectivos:

- Investigación na área de e-learning en distintos contornos.
- Promoción e difusión das Tecnoloxías da Información e as Comunicacións aplicadas á formación e ensino.
- Promover a integración das institucións educativas na Sociedade da Información.

Recursos tecnolóxicos do CESGA en e-learning:

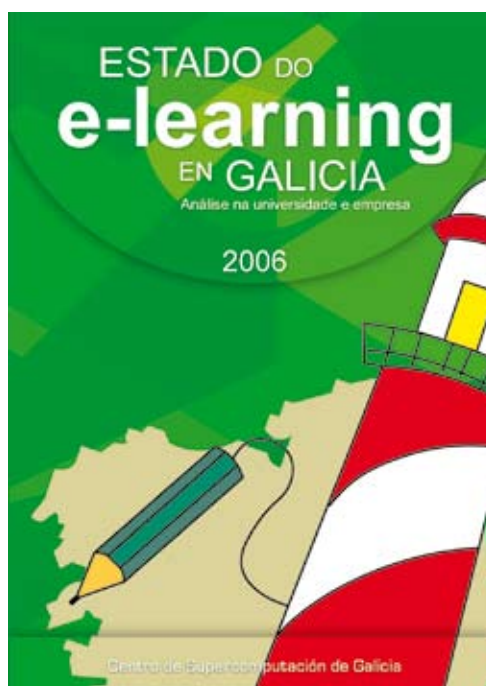
- LMS Aula Cesga
- Vídeo Streaming para sesións formativas
- Xestor de foros de debate
- Xestor de Bitácoras online
- Equipamento para videoconferencia
- Listas de distribución
- Webminar
- Aula teleensino

Actividades da área máis destacadas no exercicio 2006:

- Realización de tres proxectos cofinanciados pola Dirección Xeral de I+D+i: Ensigna (análise dunha metodoloxía de ensino innovadora para a aprendizaxe de Lingua de Signos Española mediante Tecnoloxías da Información e da Comunicación); DiscognitioS (Teleestimulación cognitiva para persoas maiores); e-Intervención (Estudio e análise do impacto das TIC na atención das persoas con discapacidade e as súas familias).
- Realización de tres proxectos europeos, dous dentro do programa Socrates Grundtvig: E-hospital (e-learning aplicado a pacientes adultos hospitalizados), e IEPTL (Integrating European Projects in Teaching and Learning); e un Socrates Comenius 2.1: Efelcren (Contornos formativos flexibles e creativos).
- Coordinación do proxecto Aula Molina, financiado pola Dirección Xeral de Cooperación Exterior, para a análise e implantación dun campus virtual na Universidade Nacional Agraria La Molina, de Lima (Perú), e participación como socio tecnolóxico no proxecto Arte Perú 2005, orientado á formación de produtores artesáns da área andina.
- Colaboración coa Consellería de Educación (Dirección Xeral de Formación Profesional e Ensinanzas Especiais) en actividades formativas para o profesorado: realización dun curso de e-learning sobre

a base de datos de didáctica matemática MathDi, e colaboración nun curso de e-learning sobre o XIS en ensino secundario, así como actividades de asesoramento no eido das plataformas de teleformación.

- Colaboración na planificación, desenvolvemento e avaliación das actividades de formación de usuarios e formación para o personal CESGA.
- Colaboración coas actividades formativas da Rede de Centros Tecnolóxicos de Galicia -Retgalia-.
- Participación como socio colaborador do "III Congreso online do Observatorio para la Cibersociedade", e como coordinadores do grupo de traballo sobre "e-learning: Tecnoloxías, exclusión e tendencias nun entorno integral de formación".
- Participación no grupo de traballo de e-learning da plataforma INES (Plataforma Tecnológica Española de Software y Servicios).
- Participación na "Red Temática sobre diseño de actividades y objetos de aprendizaje" (REDOAPA), xunto con outras 18 institucións e universidades de toda España.
- Publicación de 1 libro, 3 artigos e 6 comunicacións en revistas científicas e congresos do sector da educación e as tecnoloxías.
- Análise e implantación como servizo para os investigadores do Webminar CESGA, unha ferramenta de Seminarios Web, froito da adaptación do paquete de software libre Webhuddle.
- Mantemento e actualización dos contidos da sección e-learning na Web do CESGA.



CURSOS E ESPAZOS COLABORATIVOS ACTIVOS EN AULA CESGA			
	2004	2005	2006
ENTORNO ACADÉMICO UNIVERSITARIO	50	84	111
ENTORNO DE FORMACIÓN NON REGRADA	9	10	14
ENTORNO SECUNDARIA E OUTROS	49	68	110
TOTAL	108	162	235
NÚMERO DE USUARIOS AULA CESGA	1583	2533	4378

SISTEMAS DE INFORMACIÓN XEOGRÁFICA (GIS)



Obxectivos:

- Realización de proxectos de análise e cálculo no ámbito dos sistemas de Información Xeográfica (GIS), para iso trátase e procesa a información xeoreferenciada, tanto raster como vectorial así como as bases de datos alfanuméricas, realizando diferentes estudos sobre o territorio, incluíndo tarefas de análise, programación, visualización e saídas diversas (impresa, aplicacións, intranet, internet).
- Promoción e apoio ao uso da tecnoloxía GIS na comunidade investigadora.

Recursos do CESGA en GIS:

- 1 servidor de mapas servidor web con SQL server e ArcSDE
- 4 pc, 1 pc portátil
- 1 impresora láser cor
- 1 plóter A2 inxección cor
- Software GIS ESRI ArcGIS 9 ArcSDE, ArcIMS, ARC/INFO, ArcView, ArcPad
- Software raster ER Mapper

Actividade máis destacada no exercicio 2006:

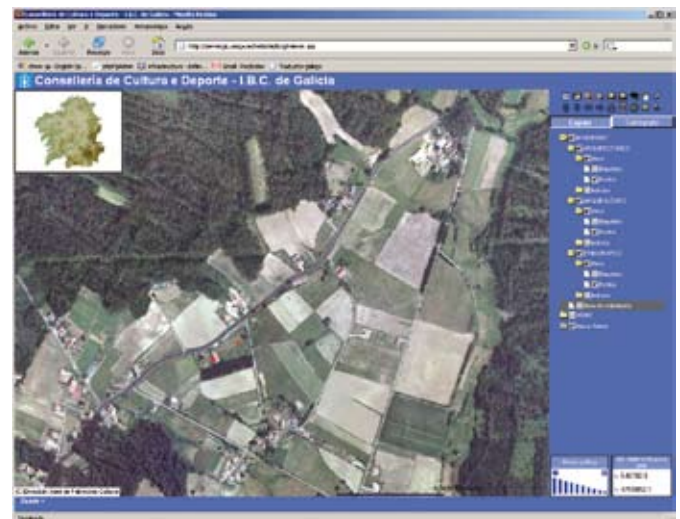
- MovilidadNav.- Finalizouse este proxecto de I+D conxunto coa Universidade de Vigo e o Centro Tecnolóxico do Automóvil. O CESGA realizou as actividades correspondentes ao cálculo de rutas con navegación abordo e información en servidor remoto
- Riscos Medioambientais Industriais.- Desenvolvéronse as tarefas previstas para este ano de localización de cartografía e desenvolvemento da aplicación para este proxecto de riscos medioambientais realizado coa Universidade de Santiago e Centro de Innovación e Servizos de Galicia.
- Arqueoloxía-GIS-CSIC.- Realizouse a actividade correspondente

ao estudo de implantación dun sistema de información cartográfica centralizado para o Instituto Padre Sarmiento finalizando este proxecto.

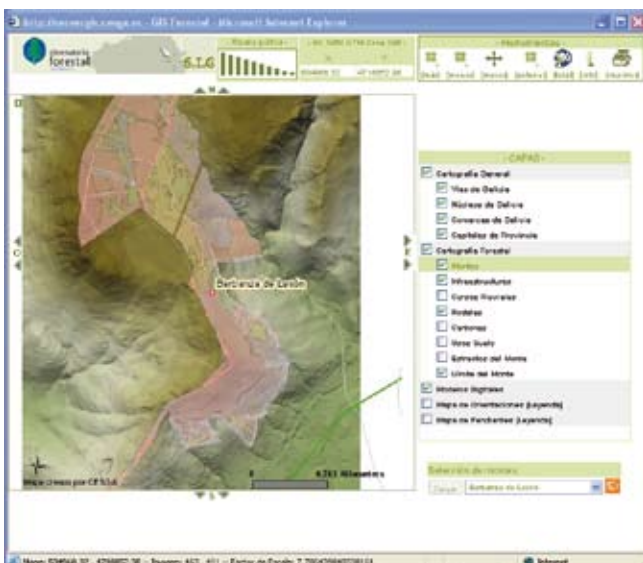
• Risco de Inundacións.- Este proxecto, que finalizou en decembro de 2005, precisou un desenvolvemento complementario en xaneiro de 2006 para o cumprimento total das especificacións da Dirección Xeral de Protección Civil da Xunta de Galicia.

• Patrimonio Arqueolóxico.- Realizáronse as actividades deste proxecto correspondentes ao contrato de 2006, que comprenderon o desenvolvemento de modelos de análise espacial, deseño dunha plataforma web piloto de inventario de bens culturais e asistencia e formación en materia de Sistemas de Información Xeográfica.

• GIS Forestal 3D.- Realizouse este proxecto para unha asociación forestal analizando, xerando e servindo información cartográfica de diversas explotacións silvícolas en 2D e 3D, con xeración de vídeos de voos sobre o modelo dixital do terreo.



APLICACIÓN WEB PARA INVESTIGACIÓN E XESTIÓN DE PATRIMONIO CULTURAL



APLICACIÓN GIS FORESTAL



SIMULACIÓN DE RISCO QUÍMICO DENTRO DO PROXECTO FARIA.



Obxectivos:

- Promoción do uso das tecnoloxías da información e das comunicacións nas empresas galegas.
- Sensibilización e difusión das TIC e a innovación.
- Deseño e realización de proxectos de innovación no ámbito das TIC e da empresa.
- Identificación e desenvolvemento de liñas de traballo e investigación en materia de Tecnoloxías da Información e das Comunicacións e de empresa. Observación e realización de estudos.
- Cooperación con outras organizacións para realizar actividades e proxectos que promovan o desenvolvemento da Autonomía mediante o uso das TIC na empresa.

Actividade máis destacada no exercicio 2006

Durante o ano 2006 a área de e-Business continuou desenvolvendo proxectos de innovación e tecnoloxía centrados no eido empresarial e seguiu co seu labor de apoio a proxectos de empresas.

Entre os primeiros, destaca polo seu alcance o proxecto ICHNOS, no que se desenvolveu un estudo en profundidade, con numerosas entrevistas a expertos, sobre as tecnoloxías da información como axudas á tramitación empresarial e ós puntos de contacto únicos para empresas.

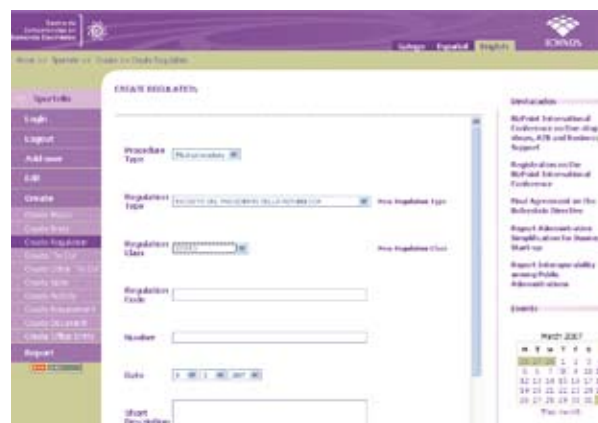
Dentro do proxecto preparáronse varios informes e publicacións que resumen a situación en Galicia, España e Europa sobre xanelas únicas para empresas, simplificación administrativa, interoperabilidade e estándares abertos, apoio a empresas e A2B.

Ademais da web adicada ó proxecto de tramitación empresarial, desenvolveuse a aplicación Sportello. Trátase dunha aplicación para a xestión e soporte de puntos de contacto únicos para empresas que está a ser utilizada polos socios italianos e checos do proxecto.

A ferramenta actúa como un repositorio e sistema de información sobre tramitación para empresas destinada a xestores e usuarios finais. Os primeiros poden crear ou editar os contidos do repositorio e xerar novas cadeas procedimentais. No que respecta ós usuarios finais, que serían empresas que desexan consultar os procedementos e requisitos para determinada actividade, a aplicación Sportello permite a consulta dos procedementos, requerimentos e normativa relacionada coa actividade empresarial e a xeración dun único informe que conteña toda a información necesaria.

No marco do proxecto CIC-Commerce, se deseñou e realizou unha investigación para determinar o impacto económico das tecnoloxías da información na actividade das empresas, desenvolvendo un método para identificar posibles indicadores a utilizar na avaliación dese impacto.

O departamento participou tamén en diversos paneis técnicos, seminarios e xornadas nacionais e internacionais, realizando numerosos encontros cos axentes implicados no sector TIC empresarial en Galicia e Europa. Por medio desta participación, a área de e-Business do CESGA puido contribuir á xeración de coñecemento nos seus ámbitos de traballo, dando difusión ós resultados dos seus proxectos e promovendo a innovación en TIC nas empresas galegas.



Aplicación/Sportello/ para xestión e consulta de procedementos

INICIATIVA GALEGA POLO SOFTWARE LIBRE



O pasado mes de xullo de 2005 o goberno galego apostou por impulsar o Software Libre en Galicia. Esta decisión materializouse no proxecto "mancomun.org, Iniciativa galega polo Software Libre", unha importante acción, participada polo CESGA e integrada no Plan Estratégico Galego para a Sociedade da Información.

Esta iniciativa tenta dinamizar o uso do Software Libre para:

- Facilitar o desenvolvemento de factorías de software en Galicia.
- Potenciar o uso de formatos abertos e a independencia tecnolóxica.
- Achegar a Sociedade da Información e do Coñecemento á sociedade galega.
- Potenciar o uso de aplicacións informáticas en galego.

A dinámica de traballo está baseada nun modelo en colaboración, tal e como o demostran os convenios asinados con diferentes axentes (universidades, grupos de usuarios de Linux, asociacións empresariais, etc.). Entre os principais servizos que se atopan dispoñibles están os seguintes:

1.- Observatorio de Software Libre de Galicia: Este servizo proporciona información relevante para coñecer a evolución do Software Libre, a nivel técnico-económico e no ámbito das diferentes políticas e iniciativas estatais e internacionais. Baixo Creative Commons, publicouse un estudo de mercado sobre o Software Libre en Galicia e trimestralmente difúndense informes con información relevante. Este estudo repetirase a finais de 2007 para comprobar a evolución dos principais indicadores.

2.- Sensibilización e difusión do Software Libre: A iniciativa mancomun.org conta cunha axenda de eventos. O ano 2006 foi o máis frutífero en canto a actividades relacionadas co Software Libre en Galicia, superando as 50, polo que practicamente se dobrou o número de eventos dos dous anos anteriores. O sector empre-

sarial mostrou un gran interese con diversas actividades orientadas á PEME. Estanse documentando casos de éxito de provedores que desenvolven a súa actividade con este modelo de negocio.

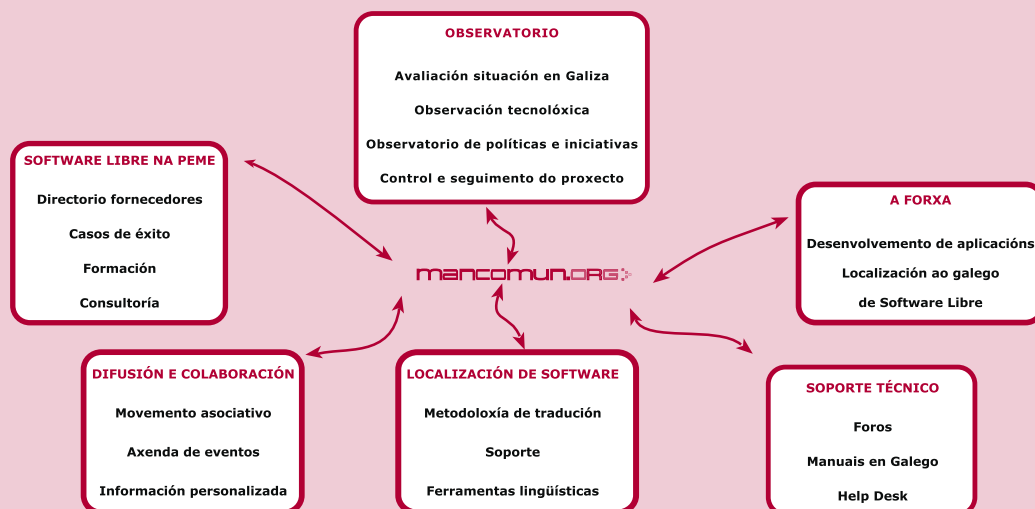
3.- Repositorio de Software Libre, "A Forxa": Espazo colaborativo pensado para facilitar a creación, o mantemento e a distribución de proxectos, tanto de creación de software como de documentación. Tanto empresas como particulares teñen, a través deste espazo, un foro común de discusión e colaboración desde onde acceder a un repositorio global para conseguir as ferramentas que precisen.

4.- Asesoramento en Software Libre para a PEME: Decidiuse elaborar un directorio de empresas galegas de Software Libre que conta actualmente con preto de 40 empresas dadas de alta. Galicia atópase neste momento en cuarto lugar entre as comunidades Españolas por número de empresas rexistradas. Púxose a disposición das empresas un espazo de intercambio de ofertas e demandas que facilita a contratación de solucións libres, así como a procura de profesionais capacitados neste ámbito para incorporar ás empresas do sector TIC.

5.- Tradución de Software Libre: Estase realizando un gran esforzo para dispor de software en galego. Actualmente xa se pode utilizar o OpenOffice.org co seu corrector, do cal se baixaron máis de 20.000 copias durante o ano 2006. Para facilitar os traballos de tradución da comunidade de voluntarios, púxose en marcha un servizo de tradución on-line, así como unha ferramenta wiki e listas de distribución. Actualmente estase traballando no Firefox, o Thunderbird, o Gaim e no contorno de escritorio Gnome.

6.- Software Libre para o ensino secundario: Enviáronse a todos os centros educativos de secundaria de Galicia un CD-ROM co OpenOffice.org en galego. A iniciativa é a primeira dunha serie de accións que abarcan, entre outras, a formación para o profesorado no paquete ofimático e o soporte técnico.

mancomun.org



ACCIÓNS DE FORMACIÓN



Ao longo do ano 2006 o Centro participou de modo directo na organización dun total de 32 accións de formación, distribuídas do xeito exposto na táboa. Esta cifra supuxo un incremento con respecto ao ano anterior, ao aumentárense o número de cursos, reforzando así a formación das persoas vinculadas ao contorno do CESGA.

Concretamente beneficiáronse destas accións os usuarios do Centro, persoal de I+D+i de empresas e administración pública, persoal docente, de investigación e alumnos de institucións de educación superior e secundaria. Así como o propio persoal técnico do CESGA, segundo o Plan de Formación Anual.

A meirande parte destas accións estiveron relacionadas co uso, implantación ou aproveitamento das tecnoloxías avanzadas. Os cursos tiveron unha duración aproximada de 11.35 horas como media e abordaron aspectos como compilación, linguaxes de programación ou xestión de contidos informáticos.

SUMARIO ACCIÓNS DE FORMACIÓN	2004	2005	2006
CURSOS	16	21	22
XORNADAS E SEMINARIOS	8	7	8
CONFERENCIAS	1	3	2
TOTAL ACCIÓNS DE FORMACIÓN	25	31	32

DETALLE DE ACCIÓNS DE FORMACIÓN PARA USUARIOS E PERSOAL DO CENTRO REALIZADAS NO ANO 2006

Data	Duración	Tipo	Título	Entidades Participantes
13/12/2006 a 14/12/2006	20 horas	Curso	Programación paralela do Superdome mediante directivas OpenMP	CESGA, UDC e HP Invent
06/10/2006	5 horas	Curso	Curso FPGAS	CESGA
10/10/2006	3 horas	Curso	Curso Fountain Codes	CESGA
17/10/2006	8 horas	Curso	Curso de Xestión de Proxectos Europeos I+D+i(II)	CESGA, RETGALIA, Fundación para el Conocimiento MadrI + D, Oficina I+D da UVIGO e CITT
06/09/2006 a 07/09/2006	5 horas	Curso	Introdución QIP	CESGA
22/09/2006	4 horas e 30 minutos	Xornada	Presentación en Galicia do VII Programa Marco	CESGA, RETGALIA, DXI+D+I, Rede Galega para a Transferencia de Coñecemento
13/07/2006	3 horas	Xornada	Xornada sobre software libre coma modelo de éxito empresarial	CESGA e INEO
19/07/2006	1 hora	Conferencia	Ciclo de conferencias 2006 de ISOC-ES	CESGA, Internet Society, UIMP e CICA
06/06/2006	3 horas, 45'	Seminario	Plataformas Tecnolóxicas, novas oportunidades para a I+D+I en Europa	CESGA, RETGALIA, OTRI, CDTI, Manufature, PTEC
13/06/2006	4 horas	Xornada	Xornadas GIS: Servizos GIS en Internet	ESRI, CESGA

14/06/2006 a 15/06/2006	14 horas	Curso	Compilación e execución de códigos no supercomputador HP Superdome	CESGA, UDC, HP Invent
15/06/2006 a 20/06/2006	18 horas	Curso	Modelos de optimización-Teoría, formulación e solución	CESGA
27/06/2006 a 28/06/2006	10 horas	Curso	Curso de Fortran 90/95	CESGA, UDC
29/06/2006	5 horas	Curso	Curso de Fortran 2003	CESGA, UDC
03/05/2006 a 05/05/2006	5 horas	Curso	MIOi	CESGA, Telindus
03/05/2006 a 05/05/2006	15 horas	Curso	Matrix N3	CESGA, Telindus
11/05/2006	4 horas	Xornada	Solucións para a produción de cartografía e a xestión integral.	CESGA, ESRI
15/05/2006 a 19/05/2006	20 horas	Curso	Computación en clusters: instalación, administración e programación.	CESGA
23/05/2006	4 horas	Curso	Seminario servidores virtuais	CESGA, UDC
27/04/2006	4 horas	Xornada	Solucións para o desenvolvemento de aplicacións con funcionalidade xeográfica	CESGA,ESRI
08/03/2006	2 horas	Xornada	Wikipedia: a colaboración, unha nova dimensión para os sitios web	Internet Society, CESCA, CESGA
14/03/2006	3 horas, 45'	Xornada	Xornadas GIS: Producción cartográfica con ferramentas GIS	CESGA, ESRI
17/03/2006 a 23/03/2006	10 horas	Curso	Tratamento de sinais. Procesado de audio.	CESGA, UVIGO
27/03/2006	2 horas	Conferencia	Large scale computations and computer requeriments	CESGA, USC
08/03/2006	2 horas	Xornada	Wikipedia: a colaboración, unha nova dimensión para os sitios web	Internet Society, CESCA, CESGA, I2BASK, CICA e Instituto Cervantes
15/02/2006 a 17/02/2006	8 horas	Curso	Curso de Xestión de Proxectos Europeos de I+D+i (I)	CESGA, IPR Helpdesk, ATOS Origin, EOSA, RETGALIA
20/02/2006 a 21/02/2006	10 horas	Curso	Acústica de salas	CESGA, UVIGO
27/02/2006 a 03/03/2006	30 horas	Curso	Streaming de vídeo: Técnicas de Codificación e Transporte	CESGA, LAMBDASTREAM
13/01/2006	10 horas	Curso	Presentación do Convenio que dá acceso á base de datos MATHDI	CESGA
18/01/2006	2 horas	Curso	Presentación de GRID Superescalar	CESGA,REDE GRID
23/01/2006 a 27/01/2006	25 horas	Curso	Programación PHP	CESGA
02/01/2006 a 29/12/2006	2 horas/ semana	Curso	Curso Inglés(Intermedio)	CESGA
02/01/2006 a 31/13/2006	2 horas/ semana	Curso	Curso Inglés(Avanzado)	CESGA

CARTACES DE PROXECTOS



SITIOS WEB DE PROXECTOS E EVENTOS



PUBLICACIÓN PERIÓDICAS



PUBLICACIÓN ESTUDIOS E PROXECTOS



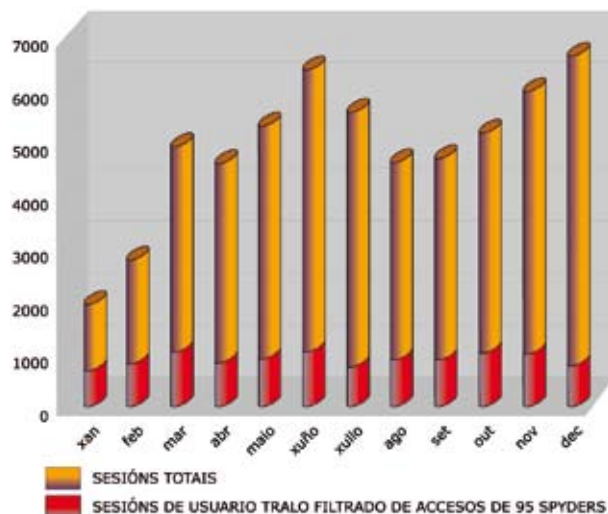
ORGANIZACIÓN E PARTICIPACIÓN EN EVENTOS



Obxectivos

- Planificación, coordinación e execución da actividade de difusión da Sociedade e Fundación co fin de dar a coñecer aos usuarios e aos diferentes axentes sociais os recursos e servizos para investigadores dispoñibles a través do Centro. Mellorar as relacións cos usuarios e cos medios de comunicación técnicos e xeralistas.
- Desenvolvemento e mantemento das ferramentas de difusión (webs, revista "díxitos" workshop anual, etc).
- Apoio a elaboración das publicacións do CESGA, incluíndo estudos realizados como froito dos proxectos desenvolvidos no centro, comunicacións (pósters) realizados para a súa presentación en congresos e conferencias científicas, sitios web de proxectos, etc.
- Organización e loxística do Proxecto de Formación Anual dos usuarios e do persoal do CESGA.

PROMEDIO DIARIO DE SESIÓNS DE USUARIO EN www.cesga.es EN 2006



PARA A REALIZACIÓN DA ESTADÍSTICA FÍLTRANSE OS ACCESOS DESDE IPs CORRESPONDENTES AO PERSOAL DO CESGA

PRINCIPAL ACTIVO CESGA: PERSOAL DA FUNDACIÓN CESGA E DA S.A.X. CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA





No pasado ano, desde a Fundación CESGA fixo ou participou en 15 solicitudes de proxectos: 9 de proxectos estatais e 6 rexionais. Destas, concedéronse 3 estatais (dous do proxecto nacional, un con IP do CESGA e outro en participación coa USC, ademais da participación nun proxecto Consolidar: Enxeño MATHEMATICA) e un rexional. Están pendentes de resolución 4 proxectos e o resto foron denegados. Consegúronse menos proxectos rexionais dos previs-

tos (a pesar de ter moi boas valoracións nalgún deles -95 sobre 100 puntos-), pero por contra, conseguiuuse o primeiro proxecto nacional con IP do CESGA, así como o recoñecemento como institución de I+D. É importante destacar que a fundación está a participar en dous proxectos europeos (EGEE e Int.eu.Grid) e forma parte de dúas plataformas tecnolóxicas españolas (INES e eMOV) e da europea NESSI.

COMPUTACIÓN

METEOGALICIA: MODELO DE PREDICIÓN METEOROLÓXICA: Provisión de cálculo numérico para o desenvolvemento de simuladores da prevención metereolóxica en Galicia. Financia: Dirección Xeral do Centro de Información e Tecnoloxía Ambiental, Consellería de Medio Ambiente. IP: Duración: Ignacio López Cabido. Duración: 2003-2006.

RETELAB: LABORATORIO VIRTUAL PARA LA RED NACIONAL DE TELEDETECCIÓN OCEANOGRÁFICA: Desenvolvemento dun contorno de traballo colaborativo e distribuído que constituía un laboratorio virtual para o desenvolvemento de proxectos de investigación interdisciplinares relacionados coa teledetección oceanográfica. Financia: Ministerio de Educación e Ciencia. IP: Ignacio López Cabido. Duración: 2006-2009

MATHEMATICA CONSOLIDER: Proxecto INGENIO CONSOLIDER para incrementar, tanto cualitativa como cuantitativamente, a presenza das matemáticas na ciencia, tecnoloxía e innovación. Financia: Ministerio de Educación e Ciencia. IP: Enrique Zuazua. CESGA: Andrés Gómez Tato. Duración: 2006-2011.

PLATAFORMA TECNOLÓXICA GALEGA DAS TIC: Constitución da Plataforma Tecnolóxica Galega das Tecnoloxías da Información e as Comunicacions. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación. IP: Javier García Tobío. Duración: 2006

IRIS-GRID. Iniciativa Estatal de Grid: A iniciativa IRISGrid aparece co obxectivo de coordinar a nivel académico e científico os grupos de investigación interesados nas tecnoloxías GRID no Estado. Financia: Ministerio de Industria, Innovación e Comercio. IP: Ignacio Martín Llorente. Duración: 2004-2006.

Evoproc, arquitectura de axentes intelixentes para a xestión de centros de supercomputación: Desenvolvemento dun sistema de decisión adaptativo para seleccionar o seguinte traballo a executar dos existentes na cola, tendo en conta as preferencias marcadas polo centro e as necesidades e preferencias dos usuarios. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación. Colabora: Universidade de A Coruña. IP: Ignacio López Cabido. Duración: 2003-2006

EGEE: Enabling Grids for ESciencE: implantación dunha infraestrutura de computación mundial baseada en tecnoloxías GRID, dispoñible para investigadores e empresas as 24 horas do día. Colaboran máis de 100 institucións de Europa, Asia e América. Financia: Unión Europea

e a Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación da Xunta de Galicia. IP: Fabricio Gagliardi. IP CESGA: Ignacio López Cabido. Duración: 2004-2006.

EGGE II: Enabling Grids for ESciencE II: Segunda fase da implantación dunha infraestrutura GRID a nivel mundial. Financia: Unión Europea e a Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación. IP: Bob Jones. IP CESGA: Ignacio López Cabido. Duración: 2006-2008

Int.eu.grid: Interactive European Grid: Despregue e operación dunha e-infraestructura para aplicacións que demandan interactividade para o uso dos investigadores. Financia: Unión Europea. IP: Jesús Marco de Lucas. IP CESGA: Ignacio López Cabido. Duración: 2006-2008

Study the phase separation in magnetic oxides combining theory and experiment: Estudo dos fenómenos de coexistencia de fases magnéticas nalgúns óxidos de cobalto a través de medidas experimentais, modelos analíticos e técnicas ab initio. Financia: Ministerio de Educación e Ciencia. IP: Daniel Baldomir. Duración: 2006-2009.

e-IMRT: Sistemas Avanzados de Planificación para Radioterapia mediante Contornos de Computación. Desenvolvemento dunha plataforma de computación distribuída e acceso a través de servizos web para o cálculo optimizado de tratamentos en radioterapia con aceleradores e a súa verificación a través de simulación. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación, Xunta de Galicia. Colaboran: Universidade de A Coruña, Universidade de Vigo, Universidade de Wisconsin. IP: Andrés Gómez Tato. Duración: 2005-2008.

FOLSTEIN: Desenvolvemento dunha plataforma para a atención xerontolóxica a domicilio. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación, Xunta de Galicia. Colaboran: Universidade de A Coruña, Universidade de Vigo e Televés. IP: Andrés Gómez Tato. Duración: 2005-2008.

PARTÍCULAS III: Despregamento dunha infraestrutura GRID para o experimento LHCb do CERN. Financia: Ministerio de Educación e Ciencia. Colabora: Universidad de Santiago de Compostela. IP: Juan José Saborido Silva. IP CESGA: Carlos Fernández Sánchez. Duración: 2005-2007

COMUNICACIÓNS - REDE

Ópera Oberta: Este proxecto consiste na retransmisión en directo de Ópera dende o Liceo de Barcelona ás universidades para a docencia. Participan: Universidade de Santiago de Compostela, Universidade de Vigo, Universidade de A Coruña e Universidade do Minho. IP CESGA: Ignacio López Cabido. Duración: indefinida.

GALNIX: Galician Neutral Internet Exchange. Mantemento do Punto Neutro de Intercambio de Tráfico de Internet en Galicia. Financian: Xunta de Galicia, Tele2-Comunitel, Jazztel, R (agora Axunta), Retevisión e Retegal. Colabora: Autoestrada Galega da Información (AGI). IP: Javier García Tobío. Duración: Indefinida.

TORGA.net: TransPortugal-Galicia Network. Enmarcado no contexto dos proxectos Interreg III España-Portugal, o seu obxectivo consiste

no establecemento dunha rede de comunicacións de banda ancha para interconectar os compus da Univerddade de Vigo e Univerddade do Minho o Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) e o Centro de Computación Gráfica. Utilizando esta infraestrutura instaláronse salas Access Grid para o traballo colaborativo en cada unha das instalacións. Os obxectivos desta rede son; a) prover os servizos de comunicacións a comunidade académica e de investigación en Galicia e Portugal, b) prover dun contorno tecnolóxico que posibilite a I+D+I no campo das comunicacións en ambas as dúas comunidades, c) Favorecer o desenvolvemento da Sociedade da Información e Coñecemento en Galicia e Portugal. Financian: Unión Europea, Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación, Xunta de Galicia. Colaboran: Universidade de Vigo, Universidade de Minho e o Centro de Computación Gráfica. IP: Ignacio López Cabido. Duración: 2003-2006.

PROXECTOS 2006 DA SAX CESGA

A actividade da sociedade na área de proxectos foi considerable en 2006. Ademais da execución dos xa activos, se presentaron 13 propostas. Destas, conseguíronse 9 e denegáronse 3. Unha está aínda esperando a resolución. A porcentaxe de éxito é moi alta e diversificáronse os programas nos que se participa. Así, hai 8 proxectos rexionais (varios de colaboración con empresas) e dous

europes. Non foi fructífera a participación a nivel nacional, onde non se conseguiu o proxecto presentado ao Plan Nacional. É importante destacar que actualmente a Sociedade ten 4 proxectos europeos en execución e que mantén activa unha boa colaboración con Latinoamérica.

SOCIEDADE DO COÑECEMENTO

RIGA: Rexistro de Investigadores de Galicia. Mantemento da Base de Datos para a xestión de Rexistro de Investigadores de Galicia. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación, Xunta de Galicia. IP: Javier García Tobío. Duración: 2006

VIDEMANIUM, Vídeo Baixo Demanda para o Patrimonio Galego. É unha iniciativa innovadora para a posta de valor dos recursos patrimoniais galegos, mediante a mellora da dispoñibilidade e accesibilidade a contidos audiovisuais sobre ditos recursos e a súa posterior explotación en vídeo baixo demanda (VoD) sobre redes da banda ancha e Internet. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación, Xunta de Galicia. IP: Ramón Basanta Cheda. Duración: 2004-2007.

ICHNOS: Innovation and Change. Network of One-Stop-Shops: O proxecto está baseado na premisa de que a implementación de Ventanillas Únicas ou Puntos de Acceso Único empresariais representa en moitas rexións un instrumento clave para promocionar o desenvolvemento local. Financia: Interreg. IP: Duración:

CIC-Commerce: Articular accións dirixidas á sensibilización das MICRO-PEMES máis tradicionais de Galicia e Norte de Portugal para os procesos de innovación, de modo que poidan comprobar que a incorporación das novas tecnoloxías supoñen un importante avance e optimización dos propios procesos de xestión. Financia: Interreg. IP: Jonathan Deckmyn. Duración: 2004-2007

RETGALIA-PEuropaA: Fomento da Participación de Entidades Galegas de I+D en Proxectos Financiados pola Unión Europea. Programación de dúas actividades formativas e tres divulgativas sobre o programa

de proxectos europeos de I+D+i. Creación dunha sección na web RETGALIA adicada a proxectos europeos. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación, Xunta de Galicia. Colaboran: Os 10 centros tecnolóxicos galegos. IP: Javier García Tobío. Duración: 2005-2006.

RETGALIA-comun: Proxecto de Comunicación da Rede de Centros Tecnolóxicos de Galicia. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación, Xunta de Galicia. IP: Javier García Tobío. Duración: 2005-2006.

RETGALIA-Observ: Desenvolvemento dun observatorio tecnolóxico de RETGALIA. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación. Colaboran: Os 10 centros tecnolóxicos galegos. IP: Duración: 2005-2006. IP: Javier García Tobío. Duración: 2005-2006.

RETGALIA-Movil: Promoción da mobilidade nos centros tecnolóxicos. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación, Xunta de Galicia. Colaboran: Os 10 centros tecnolóxicos galegos. IP: Duración: 2005-2006. IP: Javier García Tobío. Duración: 2005-2006.

RETGALIA-Formación: Formación de técnicos en xestión do I+D+i de RETGALIA. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación, Xunta de Galicia. Colaboran: os 10 centros tecnolóxicos galegos. IP: Duración: 2005-2006

RETAGLIA-Proxecto: Definición de proxectos estratéxicos de RETGALIA. Financia: Dirección Xeral de I+D+I, Xunta de Galicia. Colaboran: os 10 centros tecnolóxicos galegos. IP: Duración: 2005-2006.

APRENDIZAXE ELECTRÓNICA (e-LEARNING)

DiscognitioS: Desenvolvemento dunha ferramenta de Teleestimulación Cognitiva que permita aos profesionais da xerontoloxía realizar o tratamento terapéutico das persoas maiores con estrago intelectual dende os seus fogares. Para iso analízanse e desenvólense actividades acordadas ao grao e tipo de estrago do usuario. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación, Xunta de Galicia. Colaboran: Universidade da Coruña. IP: María José Rodríguez Malmierca Duración: 2004-2007.

Arte Perú 2005: Formación de produtores artesáns de produtos lácteos mediante aprendizaxe mixta (blended learning) con ferramentas como simuladores, videoconferencia, formación presencial e online. Financia: Dirección Xeral de Cooperación Exterior. Colaboran: Universidade de Santiago de Compostela e a Universidad de La Molina (Perú). IP: Javier García Tobío. Duración: 2005-2006.

e-Hospital: e-Learning Opportunities for Adult Patients During Hospitalisation in Health Care Institutions. Análise da aplicabilidade de e-learning ao contorno das persoas adultas hospitalizadas de longa duración, e produción de guías e ferramentas para os educadores neste ámbito. Financia: Comisión Europea-Sócrates-Grundtvig. Colaboran: Die Berater (Austria), Danube University Krems (DUK-Austria), ORT (Francia), Training Centre of the Saxonian Economy (BSW-Alemaña), Academy of Humanities and Economics (WSHE-Polonia), Universidade de Santiago de Compostela e Centro de Supercomputación de Galicia. Co apoio en Galicia do Complexo Hospitalario Juan Canalejo. IP: Holger Bienzle. IP CESGA: María José Rodríguez Malmierca Duración: 2005-2008.

ENSIGNA: Desenvolvemento e validación dunha metodoloxía de ensino innovadora para a aprendizaxe de Lingua de Signos Española utilizando Tecnoloxías da Información e da Comunicación de última xeración. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación, Xunta de Galicia. Colaboran: Universidade de Santiago de Compostela, Federación Galega de Persoas Xordas, Grupo Femxa. IP: María José Rodríguez Malmierca Duración: 2005-2006.

EFELCREN: Educational Flexible and Creative Environments. Análise e desenvolvemento de propostas de formación para contornos educativos flexibles e creativos en educación primaria e secundaria

mediante o uso das Novas Tecnoloxías mediante a identificación das estratexias de ensino, e a creación e avaliación de materias e-learning. Financia: Dirección Xeral de I+D. Colaboran: Universidade de Santiago de Compostela, Trinity College(TCD-Irlanda), Centre of Information Technology of Education (ITC-Lituania), Ca' Foscari University of Venice (UNIVE-Italia), Haslev Seminarium (Dinamarca), Euneos Corporation (Finlandia). IP: Beatriz Cebreiro López IP CESGA: María José Rodríguez Malmierca Duración: 2005-2008.

Alua Molina: Conseguir que a Universidade Nacional Agraria da Molina de Perú sexa un referente para outras universidades e institucións latinoamericanas no campo do coñecemento e-learning mediante o uso de ferramentas de código aberto, así como posibilitar o acceso á formación de colectivos con posibilidades limitadas para participar na formación presencial, son os principais obxectivos do proxecto Aula Virtual A Molina. Financia: Secretaría Xeral de Cooperación. Colaboran: Universidade de Santiago de Compostela, Universidade Agraria A Molina (Perú). IP: Javier García Tobío. Duración: 2006-2007.

e-Intervención: Ten como obxectivo estudar e analizar o impacto da utilización das Novas Tecnoloxías na atención ás persoas con discapacidade e ás súas familias. Esta metodoloxía de comunicación permitirá aos profesionais responder ás necesidades das familias en tempo real (a través da utilización de comunicación sincrónicas) ou en diferido (ferramentas de comunicación asincrónicas), así como determinar en que medida as Novas Tecnoloxías poden contribuír á mellora da calidade da vida das familias das persoas con discapacidade. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación, Xunta de Galicia. Colabora: Universidade de A Coruña. IP: María José Rodríguez Malmierca Duración: 2006-2009.

Integrating European Projects into Teaching and Learning: Ten como principal obxectivo identificar exemplos de boas prácticas e demostrar o impacto dos programas Sócrates na educación. Financia: Comisión Europea. Programa Sócrates-Comenius. Participa: Universidade de Santiago de Compostela. IP: Beatriz Cebreiro López/Carmen Fernández Morante. IP CESGA: María José Rodríguez Malmierca Duración: 2006-2007

SISTEMAS DE INFORMACIÓN XEOGRÁFICA [GIS]

GIS aplicado á xestión do patrimonio arqueolóxico V: Desenvolvemento e actualización dunha aplicación dos Sistemas de Información Xeográfica vinculada ao patrimonio arqueolóxico de Galicia. Financia: Dirección Xeral de Patrimonio Cultural, Consellería de Cultura e Deporte. IP: Francisco Landeira Vega Duración: 2006

GIS – Polígonos: Servidor de mapas en Internet de Polígonos Industriais de Galicia e norte de Portugal. Financia: EDISA (Elementos de Informática, S.A.). IP: Francisco Landeira Vega. Duración: 2005-2006.

Arqueoloxía IEGPS: Desenvolvemento do Sistema Informático de Información Arqueolóxica do IEGPS (Instituto de Estudos Galegos de Padre Sarmiento). Financian: Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) e Xunta de Galicia. IP: Francisco Landeira Vega. Duración: 2004-2006.

FUNCMOV: Navegación Off-Board para o Automóbil. Cálculo de rutas para servizos de mobilidade avanzada en vehículos. Financia: Dirección Xeral de I+D. Colaboran: Universidade de Vigo e Centro Tecnolóxico de Automoción de Galicia (CTAG). IP: Francisco Landeira Vega. Duración: 2005-2006.

GIS-RISCOS MEDIOAMBIENTAIS: Desenvolvemento GIS para o estudo de posibles áreas de impacto en riscos medioambientais. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación, Xunta de Galicia. IP: Francisco Landeira Vega. Duración: 2005-2007

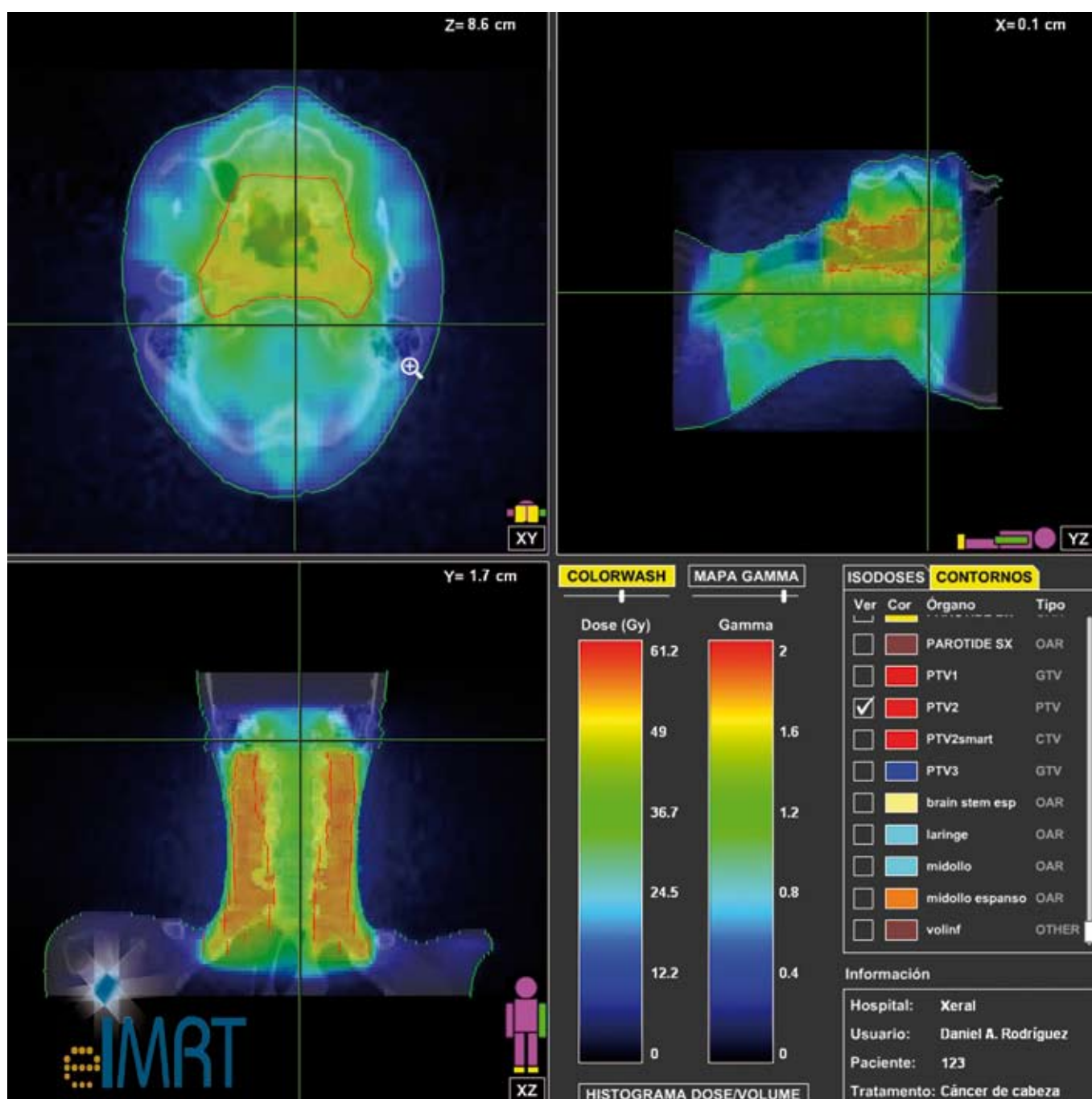
GIS-SIFI: Mapa do sector forestal industrial de Galicia. Financia: Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación, Xunta de Galicia. IP: Francisco Landeira Vega. Duración: 2005-2009

GIS-Forestal 3D: Mapas 3D de explotacións de silvicultura. Financia: Estrategia y Organización, S.A. (EOSA) IP: Francisco Landeira Vega. Duración: 2006

GIS-Apelidos: Mapa de Apellidos de Galicia. Financia: Instituto de Lingua Galega, Universidade de Santiago de Compostela. IP: Francisco Landeira Vega. Duración: 2006

FREE/LIBRE SOFTWARE

MANCOMUN.org: Iniciativa Galega polo Software Libre. Promoción do software libre en Galicia. Financia: Dirección Xeral de Promoción Industrial e da Sociedade da Información. Colaboran: Universidade de Santiago de Compostela, Universidade de A Coruña, Universidade de Vigo, Empresas Galegas Adicadas a Internet (EGANET), IGALIA, ALFA21 e dez institucións máis. IP: Javier García Tobío. Duración: 2005-2007.





Publicacións

J. Carlos Mouriño, María J. Martín, Patricia González, and Ramón Doallo. Dynamic Load-Balancing for the STEM-II Air Quality Model. Lecture Notes in Computer Science vol. 3980 M. Gavrilova, O. Gervasi, V. Kumar, C.J.K. Tan, D. Taniar, A. Lagana, Y. Mun, H. Choo (Eds.), Springer-Verlag, ISSN 0302-9743, ISBN 3-540-26918-5, pp.701-710, 2006. (Proceedings 2006 International Conference on Computational and its Applications, ICCSA 2006, Glasgow, UK, May 2006).

J. Carlos Mouriño, María J. Martín, Patricia González and Ramón Doallo. High Performance Air Quality Simulation in the European CrossGrid Project. Computing and Informatics, Vol. 25, 2006, pp. 253-271.

Andrés Gómez, Carlos Fernández Sánchez, José Carlos Mouriño Gallego, Francisco J. González Castaño, Daniel Rodríguez-Silva, Javier Pena García, Faustino Gómez Rodríguez, Diego González Castaño, Miguel Pombar Cameán. Remote Radiotherapy Planning: The eIMRT Project. Challenges and Opportunities of HealthGrids, V. Hernández and others, eds., IOS Press, 2006.

Natalia Costas Lago. Informe técnico CESGA 2006-002. AccessGrid: Nuevos entornos de colaboración. Informe técnico CESGA 2006-002.

María José Rodríguez Malmierca (coord), Manuel Gromaz Campos, Javier García Tobío, et al. El estado del e-learning en Galicia. Análisis en la universidad y empresa. CESGA, Santiago de Compostela 2006. Libro. ISBN: 84-689-9968-7.

Manuel Gromaz Campos, María José Rodríguez Malmierca, Javier García Tobío, et al. "La Red Gallega de e-learning: Una iniciativa del Observatorio gallego de e-learning". Quaderns Digitals nº 42. [En línea] (2006). ISSN 1575-9393.
http://www.quadernsdigitals.net/index.php?accionMenu=hemeroteca.DescargaArticuloIU.descarga&tipo=PDF&articulo_id=8998

María José Rodríguez Malmierca, Manuel Gromaz Campos. "Formación continua en el período de convalecencia. El proyecto e-hospital". Revista Linha Virtual. Nº7, segundo Semestre. 2006.
<http://www.nead.uncnet.br/2004/revistas/ead/7/71.pdf>

Manuel Gromaz Campos; José Carlos Millán Calenti; María José Rodríguez Malmierca; Javier García Tobío; Isabel González-Abraldes Iglesias; Ana López Fraga; Aránzazu Balo García. Actividades informáticas para la Telerehabilitación cognitiva: Proyecto Discognitios.
http://www.quadernsdigitals.net/index.php?accionMenu=hemeroteca.VisualizaArticuloIU.visualiza&articulo_id=9451

Congresos

Javier García Tobío. Comunicación al servicio de la Comunidad Académica y del desarrollo. Ponencia, I Congreso Internacional de Educación a Distancia. Universidad Católica de Lima (Perú). Octubre 2006.

Javier García Tobío. Actividad GRID en España y CESGA. Ponencia, IN-GRID'06. Braga (Portugal). Noviembre 2006.

F. J. González Castaño, P.S. Rodríguez Hernández, R.P. Martínez Álvarez, A. Gómez, I. López Cabido, J. Villasuso Barreiro. Support Vector Machine Detection of Peer-to-Peer Traffic. Presentación, CIMSIA 2006 - IEEE International Conference on Computational Intelligence for Measurement Systems and Applications. A Coruña, España. 12-14 Julio 2006.

J. Pena, F. Gómez, D. González-Castaño, A. Gómez, C. Fernández, J. Mouriño, F. González-Castaño, D. Rodríguez-Silva, M. Pombar. The eIMRT project: a web-based tool for Monte Carlo verification of treatment plans. Oral, ESTRO 25 congress. Leipzig (Alemania). 8-12 octubre 2006.

Ignacio López Cabido. Status and experiences with Itanium at CESGA. Presentación, International Supercomputing Conference ISC 2006. Dresden (Alemania). 28.06.06.

Manuel Gromaz Campos. "Proyectos de e-learning en los que participa el Centro de Supercomputación de Galicia". Ponencia, Aulas con Software - Doctenia. IFEVI - Vigo. 31 marzo 2006.

Manuel Gromaz Campos. "Plataformas de e-formación". Ponencia, Primeras Jornadas de Aplicaciones Web de Software Libre para PYMES. USC Santiago de Compostela. 30 junio 2006.

Manuel Gromaz Campos. "Proyectos de e-learning en los que participa el Centro de Supercomputación de Galicia". Ponencia, Aulas con Software - Doctenia. IFEVI - Vigo. 31 marzo 2006.

María José Rodríguez Malmierca, Manuel Gromaz Campos. Formación continua en el período de convalecencia. Proyecto eHospital. Comunicación, 4º Congreso de Tecnología Educativa y Atención a la Diversidad (Tecnoneet) Lugar celebración. Murcia. Septiembre 2006.

María José Rodríguez Malmierca. Production of flexible environments and quality contents. Comenius ES-2007-129-2 "IPM Tools: Finding innovative pedagogical methods to integrate web based tools into teaching and learning", USC Santiago de Compostela. Septiembre 2006.

Manuel Gromaz Campos, Jesús Arribi Vilela, María José Rodríguez Malmierca, Miguel Bermejo Paradelá. E-learning y Software Libre, Coordinadores del grupo de trabajo, Miembros del Comité de Apoyo III. Congreso Online del Observatorio para la Cibersociedad Online. Noviembre 2006

P. Félix, D. Nieto, A. Illobre, J. Presedo, C. Zamarrón, S. Barro. MORFEO: Un sistema para el estudio de pacientes con alteraciones cardiopulmonares del sueño. Ponencia, CASEIB 2006 XXIV: Congreso anual de la sociedad Española de Ingeniería Biomédica. Pamplona. Noviembre 6-8 de 2006.

Congresos. Posters

Andrés Gómez, Javier López Cacheiro, Carlos Fernández Sánchez, Ignacio López Cabido, José Carlos Mouriño Gallego, Javier Pena García, Faustino Gómez Rodríguez, Diego González Castaño, Francisco J. González Castaño, Daniel Rodríguez Silva. IMRT Planning and Verification on EGEE. Poster, EGEE'06. Ginebra (Suiza). 25-29 de Septiembre de 2006.

Ignacio López Cabido, Juan Villasuso Barreiro. Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia. Poster, Jornadas Técnicas de Rediris. Granada Spain. 13.11.06

Ignacio López Cabido, Carlos Fernández Sánchez. FINIS TERRAE. Poster, Jornadas Técnicas de Rediris, Granada, 13.11.06.

Teses

José Carlos Mouriño Gallego, "Aplicación de la Computación de Altas Prestaciones al Modelado de la Calidad del Aire", Universidade da Coruña.

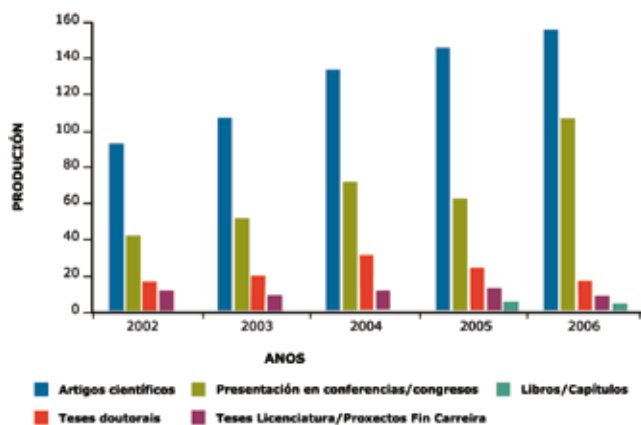
Proxectos DEA

María José Rodríguez Malmierca. "Análisis de la utilización didáctica del Sistema de Gestión de Cursos 'Aula Cesga'." Programa de doutorado: "Didáctica e organización educativa, investigación e innovación". Universidade de Santiago de Compostela.

PRODUCCIÓN CIENTÍFICA DOS USUARIOS



O CESGA continuou no ano 2006 contribuíndo, á produción científica das diferentes institucións que conforman a súa comunidade de usuarios . Segundo a produción científica declarada polos mesmos, esta incrementouse con respecto ao ano 2005 do xeito detallado nas seguintes táboas.



PRODUTO	2002	2003	2004	2005	2006
Artigos Científicos	93	107	134*	147	154
Aceptados	4	8	20	16	26
Enviados	16	29	26	27	23
Publicados	73	70	91	104	105
Presentacións en Conferencias	42	52	72*	65	105
Presentacións	33	40	53	37	53
Posters	9	12	35	28	52
Teses Doutorais	17	21	32	24	18
En proceso	8	17	27	15	5
Defendidas	9	4	5	9	10
Presentadas	0	0	0	0	3
Teses Licenciatura/Proxectos	12	9	12	14	5
En proceso	6	5	7	1	2
Defendidas	6	4	5	13	3
Libros/Capítulos	ND	ND	ND	5	ND
Aceptados/In press	ND	ND	ND	4	1
Enviados	ND	ND	ND	1	0
Publicados	ND	ND	ND	0	3
Outros	5	5	6	5	15
TOTAL	169	194	256	260	301

* 8 PUBLICACIÓN E 16 CONGRESOS ASINADOS POR MÁIS DUNHA INSTITUCIÓN

	2004	2005	2006
PORCENTAXE DE USUARIOS QUE DECLARAN PRODUCCIÓN	78,57%	87,40%	74,43%
PORCENTAXE DE HORAS CONSUMIDAS POR ESTES	90,01%	98,32%	94,65%

DESGLOSE DA PRODUCCIÓN CIENTÍFICA DECLARADA NO ANO 2006 POR INSTITUCIÓN

PRODUTO	CSIC	UDC	USC	UVIGO	TOTAL
Artigos Científicos	42	19	60	33	154
Aceptados	7	2	9	8	26
Enviados	9	1	12	1	23
Publicados	26	16	39	24	105
Presentacións en Conferencias/Congresos	41	3	40	21	105
Presentacións	19	3	22	9	53
Posters	22	0	18	12	52
Teses Doutorais	2	6	7	3	18
En proceso	1	3	1	0	5
Defendidas	1	2	4	3	10
Presentadas	0	1	2	0	3
Teses Licenciatura/Proxectos Fin Carreira	0	1	3	1	5
En proceso	0	0	2	0	2
Defendidas	0	1	1	1	3
Libros/Capítulos	3	0	0	1	4
Aceptados	1	0	0	0	1
Publicados	2	0	0	1	3
Outros	0	0	13	2	15
TOTAL POR INSTITUCIÓN	88	29	123	61	301



CSIC
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS



CONSEJO SUPERIOR
DE INVESTIGACIONES
CIENTÍFICAS

Artigos científicos publicados

Inmaculada Peral and Jorge Íñiguez. "Amorphization induced by pressure: results for zeolites and general implications". **Physical Review Letters** 97, 225502/1-4 (2006).

Jesús H. Busto, Gonzalo Jiménez-Osés, Juan L. Asensio, Jesús Jiménez-Barbero, Jesús M. Peregrina, and Alberto Avenoza. "New Insights into -GalNAc-Ser Motif: Influence of Hydrogen Bonding versus Solvent Interactions on the Preferred Conformation Francisco Corzana". **Journal of The American Chemical Society**; 2006; 128(45) pp 14640 - 14648.

Corzana F, Busto J.H., Jimenez-Oses G, Asensio J.L., Jimenez-Barbero J, Peregrina J.M., Avenoza A. "New insights into alpha-GalNAc-Ser motif: Influence of hydrogen bonding versus solvent interactions on the preferred conformation". **Journal of The American Chemical Society** 128 (45): 14640-14648 NOV 15 2006

Corzana F, Busto JH, Engelsen SB, Jimenez-Barbero J, Asensio JL, Peregrina JM, Avenoza A. "Effect of beta-O-glucosylation on L-Ser and L-Thr diamides: A bias toward alpha-helical conformations". **Chemistry-European Journal** 12 (30): 7864-7871 OCT 16 2006

Freire F, Cuesta I., Corzana F., Revuelta J., Gonzalez C., Hricovini, M., Bastida A., Jimenez-Barbero J., Asensio J.L. "A simple NMR analysis of the protonation equilibrium that accompanies aminoglycoside recognition: Dramatic alterations in the neomycin-B protonation state upon binding to a 23-mer RNA aptamer". **Chemical Communications** (2): 174-176 2007

Jimenez-Oses G, Corzana F, Busto JH, Perez-Fernandez M, Peregrina JM, Avenoza A. "Conformational analysis of 2-substituted cyclobutane-alpha-amino acid derivatives. A synergistic experimental and computational study". **Journal of Organic Chemistry** 71 (5): 1869-1878 MAR 3 2006

A. Valdés, R. Prosmi, P. Villarreal and G. Delgado-Barrio. "A theoretical study of He₂ICI van der Waals cluster", **Journal of Chemical Physics.**, 014301-1-10 (2006)

A. García-Vela y K.C. Janda "Quantum Dynamics of Ne- Br₂ Vibrational. Predissociation: The Role of Continuum Resonances as Doorway States". **Journal of Chemical Physics.**, 034305 (2006)

M. P. De Lara-Castells, R. Prosmi, G. Delgado-Barrio, D. López-Durán, P. Villarreal, F.A. Gianturco, and J. JELLINEK. "Polar di-halogen molecules solvated in bosonic helium clusters: The paradigm of ICl(X)". **Physical Review A**, 053201 (2006).

M. P. de Lara-Castells, et.al. "Polar di-halogen molecules solvated in bosonic helium clusters: The paradigm of ICl(X)" **Physical Review A** 74, 053201 (2006).

I. Alkorta, J. Elguero. "Chiral Recognition in Self-complexes of Tetrahydroimidazo[4,5-d]imidazole Derivatives: From Dimers to Heptamers" **The Journal of Physical Chemistry A** 110, 2259-2268 (2006).

K. Zborowski, I. Alkorta, J. Elguero. "Effect of Dimerization and

Racemization Processes on the Electron Density and the Optical Rotatory Power of Hydrogen Peroxide Derivatives" **The Journal of Physical Chemistry A**, 110, 7247-7252 (2006).

I. Alkorta, K. Zborowski, J. Elguero, M. Solimannejad. "Theoretical Study of Dihydrogen Bonds between (XH)₂, X = Li, Na, BeH, and MgH, and Weak Hydrogen Bond Donors (HCN, HNC, and HCCH)", **The Journal of Physical Chemistry A**; 110, 10279-10286 (2006).

A. García-Vela. "Intramolecular Vibrational Redistribution in the Vibrational Predissociation Dynamics of He-I₂". **The Journal of Physical Chemistry A**, 8023 (2006)

I. Alkorta, J. Elguero. "Theoretical models of directional proton molecular transport". **Organic and Biomolecular Chemistry**. 4, 3096-3101 (2006).

I. Alkorta, J. Elguero. "An Atoms in Molecules analysis of the differences between meso and chiral forms of oxirane and cyclobutene derivatives", **Chemical Physics Letters**. 417, 367-370 (2006).

I. Alkorta, K. Zborowski, J. Elguero. "Self-aggregation as a source of chiral discrimination". **Chemical Physics Letters**. 427, 289-294 (2006).

Casado S, Alonso M, Herradon B, et al. "Activation of the aryl hydrocarbon receptor by carbaryl: Computational evidence of the ability of carbaryl to assume a planar conformation". **Environmental Toxicology and Chemistry** 25 (12): 3141-3147 DEC 2006

O. Picazo, I. Alkorta, J. Elguero, M. R. Sundberg. "Chiral discrimination in binuclear square planar metal complexes of group 10. **Inorganic Chemistry Communications**. 9, 712-715 (2006).

A. Hernández-Laguna, E. Escamilla-Roa, V. Timón, M. T. Dove, and C. I. Sainz-Díaz, "DFT study of the cation arrangements in the octahedral and tetrahedral sheets of dioctahedral 2:1 phyllosilicates". **Physical Chemistry of Minerals** 33 (2006) 655 - 666.

I. Alkorta, J. Elguero, J.F. Liebman. "The annular tautomerism of imidazoles and pyrazoles: the possible existence of non-aromatic forms", **Struc. Chem**. 17, 439-444 (2006).

R. Prosmi, S. López-López and A. García-Vela. "Theoretical simulation of the sequential photodissociation dynamics of the HI dimer". **Lecture Series on Computer and Computational Sciences: recent Progress in Computational Sciences**, Brill Acad. Publ., (Leiden, The Netherlands), 1433-1436 ISBN:90-04-15542-2 (2006).

Valiron, P.; Wernli, M.; Wiesenfeld, L.; Rist, C.; Noga, J.; Tennyson, J., Dubernet, M.-L.; Daniel, F.; Grosjean, A.; Faure, A.; "Influence of a new potential energy surface on the rotational (de) excitation of H₂O by H₂ at low temperature". 2006, A&A, 460, 323

Daniel, F.; Dubernet, M.-L.; Meuwly, M.; Cernicharo, J. "Collisional excitation rate coefficients of N₂H⁺ by He for T = 50-300 K". **Astronomy & Astrophysics**.

Artigos científicos in-press

Corzana, F, Cuesta, I., Freire, F., Revuelta, J., Torrado, M., Bastida, A., Jimenez-Barbero, J., Asensio, J.L. "Pattern of distribution of amino groups modulates the structure and dynamics of natural aminoglycosides: implications for RNA recognition". **Journal of The American Chemical Society** 2007

Carlos Aydillo, Gonzalo Jiménez-Osés, Jesús H. Busto, Jesús M. Peregrina, Marimar Zurbano, and Alberto Avenzo. "Theoretical Evidences of Pyramidalized Bicyclic Serine Enolates in Highly Diastereoselective Alkylations". **Chemistry- A European Journal**.

A. García-Vela. "Intramolecular Vibrational Redistribution in Ne-Br₂: The Signature of Intermediate Resonances in the Excitation Spectra". **Journal of Chemical Physics**.

Estela Carmona-Novillo, Massimiliano Bartolomei, Marta I. Hernandez, and Jose Campos-Martinez, "Quasiclassical trajectory study of reactive and dissociative processes in H₂ + H₂: Comparison with quantum-mechanical calculations". **Journal of Chemical Physics**.

M.Villa, M.L.Senent y R.Dominguez-Gómez. "ZPVE correction to the FIR Spectrum to the propanal isotopomers". **Chemical Physics Letters**.

H. Manzano, A. Ayuela, J.S. Dolado; "On the formation of cementitious C-S-H nanoparticles". **Journal of Computer-Aided Design Materials**.

M. Alonso, B. Herradón. "Neural Networks as a Tool to Classify Compounds According to Aromaticity Criteria". **Chemistry- A European Journal**.

Libros/Capítulos

N.Feautrier, J.Cernicharo, F.Daniel, M.L.Dubernet, F.Lique, M.L.Senent and A.Spielfiedel. "Molecules as a diagnostic tool in astrophysics". Hunt for Molecules (in honor of Pierre Encrenaz), F.Combes, F.Casoli, L.Falgarone and L.Pagani, Eds.

A. VALDÉS, R. PROSMITI, P. VILLARREAL and G. DELGADO-BARRIO. "Progress in Theoretical Chemistry and Physics". Springer (The Netherlands), 347-369 ISBN: 1-4020-4527-1 (2006)

Fabrice Dayou, Marta I. Hernández, José Campos-Martínez, Ramón Hernández-Lamonedá, "Electronic energy transfer in O₂(v)+O₂ collisions". Libro: Beyond standard quantum chemistry: Applications from gas to condensed phase. Ed.: Transworld Research Network.

Comunicacións/Presentacións en Congresos/Conferencias

R. PROSMITI, "Theoretical simulation of the sequential photodissociation dynamics of the HI dimer". Conferencia Invitada, **ICCMSE-2006: Computational Spectroscopy**, Chania-Grecia.

R. PROSMITI. "Structure, Energetics and Vibrational Dynamics of He₂-dihalogen van der Waals Complexes". Conferencia Invitada, **MOLEC XVI**, Trento(Italy).

"Ab initio simulations of materials for hydrogen storage". Charla invitada no **Spring 2006 Joint Workshop of the International Energy Agency—Hydrogen Implementation Agreement (IEA-HIA) and the International Partnership for the Hydrogen Economy (IPHE)**, Windermere, Reino Unido, Maio de 2006

Inmaculada Peral e Jorge Íñiguez. "First-principles investigation of pressure-induced amorphization in zeolites". **2006 March Meeting of the American Physical Society**. Baltimore, Maryland, EE.UU., Marzo de 2006

S. López-López, R. Prosmi y A. García-Vela. "Intracluster superelastic scattering of hydrogen upon photodissociation of I*—HI". **IBER 2006**, Aranjuez (España), Septiembre, 2006.

F. Corzana, J. H. Busto, A. Fernández-Tejada, J. M. Peregrina, A. Avenzo, J. L. Asensio, J. Jiménez-Barbero. "Are the Hydrogen Bonds Truly Responsible for the Defined Conformation of the alfa-GalNAc-Ser/

Thr Linkages?". **XXIIIrd International Carbohydrate Symposium**. Whistler (Canadá) do 23 ao 28 de xullo de 2006.

F. Corzana, J. H. Busto, G. Jiménez-Osés, M. L. García de Luis, J. L. Asensio, J. Jiménez-Barbero, J. M. Peregrina, A. Avenzo. "Are the Hydrogen Bonds Truly Responsible for the Defined Conformation of the alfa-GalNAc-Ser/Thr Linkages?". **III Simposium de Investigadores Jovenes**. Tarragona (España). 16 ao 17 de novembro de 2006

N. Hernández-Haro, M. Pruneda, A. Hernández-Laguna y C.I. Sainz-Díaz. "Influencia de la sustitución catiónica octaédrica sobre los espectros de los grupo hidroxilo en los filosilicatos 2:1 dioctaédricos por métodos computacionales." **XXVI Reunión (SEM) / XX Reunión de la Sociedad Española de Arcillas**. Publicación: Macla, 6 (2006) 265

J. Ortega Castro, M. T. Dove, A. Hernández-Laguna y C.I. Sainz-Díaz. "Distribuciones catiónicas binarias en la capa octaédrica de los filosilicatos 2:1 dioctaédricos por métodos mecano-cuánticos". **XXVI Reunión (SEM) / XX Reunión de la Sociedad Española de Arcillas**. Publicación: Macla, 6 (2006) 337 - 339

M. E. Molina-Montes, D. Donadio, A. Hernández-Laguna y C.I. Sainz-Díaz. "Mecanismos y dinámica molecular ab initio de la reacción de deshidroxilación a través del hueco dioctaédrico de la pirofilita". **XXVI Reunión (SEM) / XX Reunión de la Sociedad Española de Arcillas**. Publicación: Macla, 6 (2006) 317 - 318

V. Timón, N. Hernández-Haro, C.I. Sainz-Díaz y A. Hernández-Laguna. "Formación de estructuras tipo hielo en filosilicatos laminares 2:1 dioctaédricos". **XXVI Reunión (SEM) / XX Reunión de la Sociedad Española de Arcillas**. Publicación: Macla, 6 (2006) 483 - 484

M. E. Molina Montes, D. Donadio, C.I. Sainz Díaz, A. Hernández Laguna. "Investigación teórica de los mecanismos y dinámica molecular ab initio de la reacción de deshidroxilación a través del hueco dioctaédrico de la pirofilita". **IV Encuentro Franco-Español de Física y Química del Estado Sólido**.

V Timon, N. Hernandez-Haro, A Hernandez-Laguna, C.I. Sainz-Diaz. "Estudio teórico de la influencia del catión interlaminar en la formación de láminas de hielo en filosilicatos 2:1 dioctaédricos." **IV Encuentro Franco-Español de Física y Química del Estado Sólido**.

N. Hernández-Haro, M. Pruneda, A. Hernández-Laguna, C. I. Sainz-Díaz. "Cálculo Teórico de Espectros Infrarrojos en Filosilicatos 2:1 Dioctaédricos." **IV Encuentro Franco-Español de Física y Química del Estado Sólido**.

J. Ortega-Castro, C.I.Sainz-Díaz, M. T. Dove and A. Hernández-Laguna. "Estudio teórico de la distribución catiónica Al/Mg y Al/Fe en la capa octaédrica de filosilicatos 2:1 dioctaédricos." **IV Encuentro Franco-Español de Física y Química del Estado Sólido**.

H. Massó and M.L.Senent. " Ab initio theoretical study of carbon chains". **Molecular Spectroscopy Conference** (Ohio State University, 2006).

M. Villa, M.L.Senent y R.Hidalgo. "Ethane asymmetric C-H stretching vibrational spectra". **Molecular Spectroscopy Conference** (Ohio State University, 2006).

M. Alonso, C. Miranda, A. Montero, B. Herradón. "Experimental and Computational Studies on Aromatic Compounds: Synthesis, Structure and Properties". **4th Spanish~Portuguese~Japanes Organic Chemistry Symposium (4SPJ-OCS)**. Santiago de Compostela (Spain), September 8-11, 2006.

B. Herradón, M. Alonso, R. Chicharro, M. T. Mazo, C. Miranda, A. Montero, V. J. Arán. "Híbridos péptido-molde: Síntesis, estructura y propiedades". **X Encuentro Peptídico Ibérico (EPI)**. Zaragoza, 1-4 Febreiro 2006, Comunicación oral.

H. Manzano, A. Ayuela, J. S. Dolado. "On the formation of cementitious C-S-H nanoparticles". **Synergy between Experiment and Computation in Nanoscale Science**, Harvard Univ. Cambridge, MA, USA (31 Maio-3 Xuño).

H. Manzano, J. S. Dolado, A. Guerrero, A. Ayuela. "Mechanical properties of cementitious crystalline calcium-silicate-hydrates: comparison with C-S-H gels". **Trends in Nanotechnology TNT 2006**, Grenoble (Francia), Septiembre.

J. S. Dolado, H. Manzano, A. Ayuela. "On the formation of cementitious C-S-H nanoparticles". **NANO 2006 Workshop: "Perspectives in Nanoscience and Nanotechnology"**, Setembro, San Sebastián.

A. Valdés, R. Prosmiiti, P. Villarreal, G. Delgado-Barrio. "Ab initio Potential Surface and Vibrational Predissociation Dynamics of HeI₂(B) Cluster". Comunicacion y Poster, **MOLEC XVI**, Trento (Italy).

S. López-López, R. Prosmiiti, A. A. García-Vela. "Intracluster superelastic scattering of hydrogen upon photodissociation of I*HI". Comunicacion e Poster, **MOLEC XVI**, Trento (Italy).

A. Valdés, R. Prosmiiti, P. Villarreal, G. Delgado-Barrio, J.-H. Werner. "Vibrational Predissociation Dynamics of HeI₂(B) Cluster". Comunicacion e Poster, **QSCP-XI**, St Petersburg, (Russia)

A. Valdés, R. Prosmiiti, P. Villarreal, G. Delgado-Barrio, J.-H. Werner. "Vibrational predissociation dynamics of HeI₂(B) cluster using { ψ ab initio} surfaces". Comunicacion e Poster, **IBER-2006**, Aranjuez (Spain).

Jose I. Garcia, G. Jimenez-Oses, J. A. Mayoral, E. Pires, I, Villalba. "QM/MM modeling of enantioselective pybox-ruthenium and BOX-copper-catalyzed cyclopropanation reactions". **Experiment & Theory in Transition Metal Chemistry: a meeting point**. Bellaterra (Spain). September 2006

Carlos Aydillo, María M. Zurbano, Gonzalo Jiménez-Osés, Jesús H. Busto, Jesús M. Peregrina, Alberto Avenzoa. "Highly Diastereoselective Alkylation of Bicyclic N,O-Acetals: A Memory of Chirality Protocol". **4th Transmediterranean Colloquium on Heterocyclic Chemistry**, Aveiro-Portugal; 23-27 June, 2006

G. Jiménez-Oses, J.I. García, J.A. Mayoral, V. Martínez-Merino. "QM/MM Modeling of Enantioselective Pyboxruthenium and Box-Copper-Catalyzed Cyclopropanation Reactions". **XXII International Conference on Organometallic Chemistry**. Zaragoza (Spain). July 2006.

A. García-Vela. "A full-dimensional quantum dynamical approach to the vibrational predissociation of Cl₂-He". **IBER 2006**, Aranjuez (España), Setembro, 2006. Comunicación publicada en Libro de Resúmenes.

A. García-Vela y K.C. Janda. "Quantum Dynamics of Ne-Br₂ Vibrational Predissociation: The Role of Continuum Resonances as Doorway States". **MOLEC XVI**, Trento (Italia), Septiembre, 2006. Comunicación publicada en Libro de Resúmenes.

S. López-López, R. Prosmiiti y A. García-Vela. "Intracluster superelastic scattering of hydrogen upon photodissociation of I*HI". **MOLEC XVI**, Trento (Italia), Setembro, 2006. Comunicación publicada en Libro de Resúmenes.

Ana María Mancho, Instituto de Matemáticas y Física Fundamental del CSIC (joint work with D.Córdoba, M.A.Fontelos, J.L.Rodrigo). "Evidence of singularities for a family of contour dynamics equations". **International Congress of Mathematicians**. Madrid, Agosto 2006. Poster ganador del 1er premio de la seccion de Ecuaciones en Derivadas Parciales.

Ana M. Mancho joint work with D. Córdoba (CSIC), M.A. Fontelos (CSIC), J.L. Rodríguez (Yale), CSIC. "Recent advances in nonlinear partial differential equations and applications". **A workshop in honor of Peter D. Lax and Louis Nirenberg**, June, Wednesday 7-Saturday

10, 2006 Toledo, Spain: Singularities in a family of contour dynamics equations.

J. Ortega-Castro, N. Hernández-Haro, C.I. Sainz-Díaz, M.T.Dove, A. Hernández-Laguna. "Estudio teórico de la distribución catiónica Al/Mg y Al/Fe en la capa octaédrica de Filosilicatos 2:1 dioctaédricos". **4º Encuentro Franco-Español de Química y Física del Estado Sólido**. Bilbao. (2006).

J. Ortega-Castro¹, M. T. Dove², A. Hernández-Laguna¹, C.I.Sainz-Díaz³. "Distribuciones catiónicas binarias en la capa octaédrica de filosilicatos 2:1 dioctaédricos por métodos mecano-cuánticos". **XX Sociedad Española de Arcillas**. Oviedo, Setembro 2006.

A. Fernández-Tejada, F. Corzana, J. H. Busto, J. M. Peregrina, A. Avenzoa. "Synthesis and Conformational Analysis of Model beta-O-Glucopeptides Derived from Non-natural alfa-MeSer and c4Ser diamides". **VIII Jornadas de Carbohidratos (RSEQ)**. Alcalá de Henares (España). 13 al 15 de septiembre de 2006

H. Massó, M.L.Senent, J.Goicoechea, J.Cernicharo, M.Hochlaf y P.Rosmus. "Ab initio characterization of the c4 radical". **The 19th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy**, Prague, Czech Republic, August 29 - September 2, 2006

R. Domínguez-Gómez, R.Ruiz, M.L.Senent y M.Villa. "Ab initio study of the far-infrared spectrum of ethyl methyl ether". **The 19th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy**, Prague, Czech Republic, August 29 - September 2, 2006,

R. Domínguez-Gómez, M. L. Senent, M. Villa and F. J. Meléndez. "Ab initio ro-vibrational study of acetic acid isomers". **Principles and Applications - ESPA2006**, Santiago, Xullo 2006.

H. Massó, M.L.Senent, J.Goicoechea, J.Cernicharo. "Ab initio study of carbon chains". **Principles and Applications - ESPA2006**, Santiago, Xullo 2006

Teses de doutoramento defendidas

Alvaro Valdes De Luxan. "Superficies de Energia Potencial y Dinámica de Agregados de van der Waalstri atómicos y tertatómicos formados por gases noble y moléculas dihalógenas". **Universidad Complutense de Madrid**. Facultad de Ciencias Físicas. 2006.



Artigos científicos publicados

Leonardo Castellanos, Carmenza Duque, Sven Zea, Alfonso Espada, Jaime Rodríguez and Carlos Jiménez. "Isolation and Synthesis of (-)-(5S)-2-Imino-1-methylpyrrolidine-5- carboxylic Acid from *Cliona tenuis*: Structure Revision of Pyrostatins". **Organic Letters**, 2006, Vol. 8, No. 21, 4967-4970.

David Esteban-Gómez, Carlos Platas-Iglesias, Teresa Enríquez-Pérez, Fernando Avecilla, Andrés de Blas and Teresa Rodríguez-Blas. "Lone Pair Activity in Lead (II) Complexes with Unsymmetrical Lariat Ethers". **Inorganic Chemistry**, 45, 5407-5416 (2006).

M^a del Carmen Fernández-Fernández, Rufina Bastida, Alejandro Macías, Paulo Pérez-Lourido, Carlos Platas-Iglesias, Laura Valencia. "Lanthanide (III) Complexes with a Tetrapyrroline Pendant-armed Macrocyclic Ligand: 1H NMR Structural Determination in Solution, X-Ray Diffraction and DFT Calculations". **Inorganic Chemistry**, 45, 4484-4496 (2006).

Fernandez, MC; Diaz, A; Guillin, JJ; Blanco, O; Ruiz, M; Ojea, V. "Diastereoselective synthesis of 2-amino-4-phosphonobutanoic acids by electrophilic substitution and tin-Peterson olefination of bis-lactim ethers derived from cyclo-[L-AP4-D-Val]". 2006 **Journal Of Organic Chemistry** 71 (18): 6958-6974. Publisher: AMER CHEMICAL SOC, 1155 16TH ST, NW, WASHINGTON, DC 20036 USA. Subject Category: CHEMISTRY, ORGANIC. IDS Number: 077HO. ISSN: 0022-3263

Marta Mato-Iglesias, Edina Balog, Carlos Platas-Iglesias, Éva Tóth, Andrés de Blas and Teresa Rodríguez-Blas. "Pyridine and Phosphonate Containing Ligands for Stable Lanthanide Complexation. An Experimental and Theoretical Study to Assess the Solution Structure". **Journal of the Chemical Society Dalton Transactions** 5404-5415, 2006.

M. Isabel Nieto, Noemí González, Jaime Rodríguez, Russell G. Kerr and Carlos Jiménez. "New cytotoxic cembranolides: isolation, biogenetic studies, and synthesis of analogues". **Tetrahedron Letters** 2006, 62, 11747-11754.

Polychlorinated leucine derivatives: synthesis of (2S,4R)-5,5-dichloroleucine and J-based analysis. **European Journal of Organic Chemistry**, Volume 2006, Issue 16, Pages 3645 - 3651

Marcos Chas, Carlos Platas-Iglesias, Carlos Peinador, José M^a Quintela. "New self-assembled dinuclear Pd (II) and Pt(II) metallomacrocycles of a 4,4'-bipyridin-1-ium ligand with an inner cavity". **Tetrahedron Letters**, 47, 3119-3122 (2006).

M. Canle L., D. Rodríguez Ramos, J.A. Santaballa. "A DFT study on the microscopic ionization of cysteine in water". Ref. 1 revista 0 Libro: Clave: A, Volumen: 417, Páginas, 28-33 .**Chemical Physics Letters**, 2006.

M.I. Fernández Pérez, J.M. Oliva, X.L. Armesto, M. Canle L., J.A. Santaballa. "Extended planarity and π -delocalization in triazine-based derivatives". **Chemical Physics Letters**, Ref. X revista Clave: A. Volumen: 426. Páginas: 290-295, 2006 .

D. Rodríguez Ramos, R. Castillo, M. V. García, M. Canle L., J. Andrés, J.A. Santaballa. "Density Functional Study of the Hoffmann Elimination of (N-Cl),N-methylethanolamine in Gas Phase and in Aqueous Solution". X revista, Clave: A, Volumen: 429, Páginas: 426-429 **Chemical Physics Letters**, 2006.

D. Andrade, B.B. Fraguera, R. Doallo. "Cache Behavior Modelling for Codes Involving Banded Matrices". Proceedings of The 19th International Workshop on Languages and Compilers for Parallel Computing (LCPC'06). New Orleans, November 2006. Se publicará próximamente adicionalmente como volumen de **Lecture Notes in Computer Science**.

B.B. Fraguera, M.G. Carmueja, D. Andrade. "Optimal Tile Size Selection Guided by Analytical Models". Proc. Parallel Computing 2005 (ParCo 2005). pp. 565-572. Publicado en el volumen 33 de la **Publication Series of the John von Neumann Institute for Computing (NIC)**, ISBN 3-00-017352-8.

Daniel Rivero, Julián Dorado, Juan R. Rabuñal, Alejandro Pazos, Javier Pereira, "Artificial Neural Network Development by means of Genetic Programming with Graph Codification" **Enformatika. Transactions on Engineering, Computing and Technology**. págs 209-214

Daniel Rivero, Julian Dorado, Juan Rabuñal, Alejandro Pazos, "Building and Simplifying Artificial Neural Networks with Genetic Programming". **WSEAS Transactions on Information Science and Applications**. Volumen: 4, Issue 3, Pages 500-507, ISSN 1790-0832, WSEAS Press

Artigos científicos in-press

D. Andrade, M. Arenaz, B.B. Fraguera, J. Touriño, R. Doallo. "Automated and accurate cache behavior analysis for codes with irregular access patterns". **Concurrency and Computation: Practice and Experience**. (ISSN: 1532-0626).

A. Alonso-Betanzos, N. Sánchez-Marroño, F.M. Carballal-Fortes, J.Suárez-Romero and B. Pérez-Sánchez. "Classification of computer intrusions using functional networks. A comparative study". proc. **15th European Symp. on Artificial Neural Networks, ESANN-07**. Abril, 2007

Comunicacións/Presentacións en Congresos/Conferencias

M.I. Fernández Pérez, J. Oliva, M. Canle-López, A. Santaballa. "How do Biocides Derived from Sym-Triazines Start Their Fate?". **18 IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry**. Varsovia (Polonia), 20- 25/08/2006

Pósters en Congresos/Conferencias

D. Rodríguez Ramos, M.V. García Dopico, M. Canle-López, A. Santaballa. "Quantum Chemical Study of the Hydrolysis of Imines: Structure and Reactivity". **18 IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry**. Varsovia Polonia, 20 - 25/08/2006.

M. I. Fernández Pérez, J. Oliva, M. Canle-López, M.V. García Dopico, J.A. Santaballa. "Why do amino groups become planar?". **1st European Chemistry Congress**. Budapest (Hungría), 27- 31/ 08/2006.

Teses de doutoramento presentadas

Manuel A. Peiteado Peiteado. "Estudios fotofísicos y fotoquímicos sobre el aminoácido aromático N-fenilglicina", **Universidade da Coruña**.

D. César Rodríguez López. "Complejos de Ru(II) con Ligandos Derivados de 2,2'-Bipiridilo: Diseño, Síntesis y Caracterización". Facultade de Ciencias da **Universidade da Coruña** en Xullo de 2006.

Ana Arda Freire. "Aplicación de las constantes de acoplamiento heteronucleares para la determinación de la estereoquímica relativa de sistemas acíclicos, 1,3 nitrogenados quirales. Estructura y síntesis de Disitiazolamida". **Universidade da Coruña**. Facultade de Ciencias. 31 de Marzo 2006

Marta Mato Iglesias (Directores: Carlos Platas Iglesias, Andrés de Blas Varela, Teresa Rodríguez Blas). "Quelatos de Lantánidos Conteniendo Unidades Piridina con Potencial Aplicación como Agentes de Contraste para Resonancia Magnética de Imagen". **Universidade da Coruña**, Facultade de Ciencias, Marzo 2006.

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA



Artigos científicos publicados

V. Pardo, P. Blaha, K. Schwarz, D. Baldomir. "Possible non-collinear magnetic configurations in BaCoO₃". **Phys. B** 378-380 (2006) 556.

Harmata, M.; Zheng, P.; Schreiner, P. R.; Navarro-Vázquez, A. W. "Deantiaromatization as a driving force in an Electrocyclic reaction". **Angewandte Chemie International Edition** 2006, 25, 1966-1971

David G. Míguez, Milos Dolnik, Alberto P. Muñuzuri, and Lorenz Kramer. "Effect of Axial Growth on Turing Pattern Formation". **Physical Review Letters** 96, 048304 (2006)

David G. Míguez, Sergio Alonso, Alberto P. Muñuzuri, and Francesc Sagués. "Experimental Evidence of Localized Oscillations in the Photosensitive Chlorine Dioxide-Iodine-Malonic Acid Reaction". **Physical Review Letters** 97, 178301 (2006)

Jesús A. Varela, Silvia G. Rubín, Carlos González-Rodríguez, Luis Castedo, and Carlos Saá. "A New Ru-Catalyzed Cascade Reaction Forming Polycyclic Cyclohexadienes from 1,6-Diynes and Alkenes". **Journal of the American Chemical Society**, 2006, 128, 9262-9263

Jorge Caeiro, Diego Peña, Agustín Cobas, Dolores Pérez, Enrique Guitián. "Asymmetric Catalysis in the [2+2+2] Cycloaddition of Arynes and Alkynes: Enantioselective Synthesis of a Pentahelicene". **Advanced Synthesis & Catalysis**. Volume 348, Issue 16-17, Date: November 2006, Pages: 2466-2474

Iria Louzao, J.M. Seco, Emilio Quiñoá and Ricardo Riguera. "The assignment of absolute configuration of cyanohydrins by 1H-NMR". **Chemical Communications**. 1422-4, 2006.

Enrique Lallana, Félix Freire, José Manuel Seco, Emilio Quiñoá and Ricardo Riguera. "The 1H NMR Way to the Determination of the Absolute Configuration of 1,2,3-Prim,Sec,Sec-Triols". **Organic Letters**, 4449-4452, 2006

Dominguez E, Loza MI, Padin F, Gesteira A, Paz E, Paramo M, Brenlla J, Pumar. E, Iglesias F, Cibeira A, Castro M, Caruncho H, Carracedo A, Costas J. "Extensive linkage disequilibrium mapping at HTR2A and DRD3 for schizophrenia susceptibility genes in the Galician population". **Schizophr Res**. 2007 Feb;90(1-3):123-9. Epub 2006 Nov 27. PMID: 17125970

V. Pardo, D. Baldomir. "First principles study of the spin-state transitions in GdBaCo₂O_{5.5}". **Physical Review B** 73, 165117 (2006).

P. M. Botta, V.Pardo, D.Baldomir, C.de la Calle, J.Alonso, J.Rivas; "Dynamic magnetic behavior of BaCoO₃ quasi-one dimensional perovskite". **Physical Review B** 74, 214415 (2006).

Koji S. Nakayama, M. M. G. Alemany, Tomoko Sugano, Kenji Ohmori, H. Kwak, James R. Chelikowsky, and J. H. Weaver. "Electronic structure of S(001)-c(4x2) analyzed by scanning tunneling spectroscopy and ab initio simulations". **Physical Review B**, vol. 73, pg. 035330 (2006).

M. M. G. Alemany and James R. Chelikowsky. "Ab initio calculations for the interconversion of optically active defects in amorphous silica". **Physical Review B**, vol.73, pg. 235211 (2006).

Shen Li, M. M. G. Alemany, and James R. Chelikowsky. "Real-space ab initio pseudopotential calculations for anion clusters: Fen-(n=3-6)". **Physical Review B**, vol. 73, pg. 233404 (2006).

Shen Li, M. M. G. Alemany, James R. Chelikowsky. "Real space pseudopotential calculations for copper clusters". **Journal of Chemical Physics**, vol. 125, pg. 034311 (2006).

Fajin JLC, Fernandez B, Felker PM. "The p-difluorobenzene-argon S-1 excited state intermolecular potential energy surface". **Journal of Physical Chemistry A** 110 (49): 13259-13263 DEC 14 2006 .

Emilio Martínez-Núñez, Saulo A. Vázquez, F. Javier Aoz and Jesús F. Castillo. "Quasiclassical Trajectory Study of the Collision-Induced Dissociation Dynamics of Ar + CH₃SH+ Using an Ab Initio Interpolated Potential Energy Surface". **Journal of Physical Chemistry A** 2006, 110, 1225-1231

S. Hosein Mousavipour, Antonio Fernández-Ramos, Rubén Meana-Pañeda, Emilio Martínez-Núñez, Saulo A. Vázquez, and Miguel A. Ríos. "Direct-Dynamics VTST Study of the [1,7] Hydrogen Shift in 7-Methylocta-1,3(Z), 5(Z)-triene. A Model System for the Hydrogen Transfer Reaction in Previtamin D₃". **Journal of Physical Chemistry A** 2007, 111 (4), 719 -725.

Pena J, Sánchez-Doblado F, Capote R, Terrón J A e Gómez F "2006 Monte Carlo correction factors for a Farmer 0.6 cm³ ion chamber dose measurement in the build-up region of the 6 MV clinical beam". **Physics in Medicine and Biology**. 51 1523-1532

Fajin JLC, Fernandez B. "Accurate intermolecular ground state potential of the He-HCl van der Waals complex". **Chemical Physics Letters** 419 (1-3): 55-58 FEB 15 2006

Emilio Martínez-Núñez, Saulo Vázquez. "Rotational distributions of HBr in the photodissociation of vinyl bromide at 193 nm: An investigation by direct quasiclassical trajectory calculations". **Chemical Physics Letters** 2006, 425, 22-27

Vicente Pérez-Villar, Jose L. F. Porteiro, and Alberto P. Muñuzuri. "Active media under rotational forcing". **Physical Review E** 74, 046203 2006

David G. Míguez, Razvan A. Satnoianu, and Alberto P. Muñuzuri. "Experimental steady pattern formation in reaction-diffusion-advection systems". **Physical Review E** 73, 025201(R) 2006.

David G. Míguez, Gonzalo G. Izús, and Alberto P. Muñuzuri. "Robustness and stability of flow-and-diffusion structures". **Physical Review E** 73, 016207 (2006).

Igal Berenstein and Alberto P. Muñuzuri. "Waving patterns: A general transition from stationary to moving forced Turing structures". **Physical Review E** 74, 036202 2006).

Vicente Pérez-Muñuzuri. "Resonant pattern formation in active media driven by time-dependent flows". **Physical Review E** 73, 066213 (2006).

Fajin JLC, Fernandez B, Mikoszz A, et al. "Accurate computations of the rovibrational spectrum of the He-HF van der Waals complex". **Molecular Physics** 104 (9): 1413-1420 MAY 10 2006

C. Adam, J. Sanchez-Guillen, R.A. Vazquez and A. Wereszczynski. "Investigation of the Nicole model", **Journal of Mathematical Physics** 47, 052302 (2006)

V. Pardo, D. Baldomir, J. Rivas, J. Castro, J.E. Arias. "Orbital and magnetic structure of quasi-1D cobaltites: ab initio calculations and experiment". **J. Magn Mater.** 300 (2006) 48.

Gamallo P., (2006) "Using Natural Alignment to Extract Translation Equivalents", **Lecture Notes in Computer Science**, vol. 3848, Springer-Verlag, (41-49) ISSN: 0302-9743.

N. Seoane and A.J.García Loureiro. "Study of parallel numerical methods for semiconductor device simulation". **International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields**. Vol. 19, Issue 1, pp. 15-32 (2006)

K. Warda, L.Wojtczak, D.Baldomir, M.Pereiro and J.E.Arias, "The influence of effective mass on magnetoresistance in ultrathin Fe/Cr/Fe films" **Materials Science-Poland**, 24, 3, (2006).

N. Seoane, A.J.García Loureiro, K.Kalna and A.Asenov. "Current Variations in pHEMTs introduced by channel composition fluctuations". **Journal of Physics: Conference Series**. Vol. 38, pp. 212-215 (2006)

N. Seoane, A.J.García Loureiro, K.Kalna and A.Asenov. "Atomistic effect of delta doping layer in a 50 nm InP HEMT". **Journal of Computational Electronics**. Vol. 5, pp. 131-135 (2006)

Emilio Martínez-Núñez, Dmitrii V. Shalashilin. "Acceleration of Classical Mechanics by Phase Space Constraints". **Journal of Chemical Theory and Computation** 2006, 2, 912-919

P. Carracedo García, C. F. Balseiro, E. Penabad, B. Gómez, V. Pérez-Muñuzuri. "One year validation of wave forecasting at Galician coast", **Journal of Atmospheric and Ocean Science**, Vol. 10, No. 4, 2006

Rosa García, José M. Seco, Saulo Vázquez, Emilio Quiñoá and Ricardo Riguera. "The Role of Barium (II) in the Determination of the Absolute Configuration of Chiral Amines by ¹H-NMR" **Journal of Organic Chemistry** 71, 1119-1130, 2006

J. Alvarez-Muniz, E. Marques, R.A. Vazquez, and E. Zas, Coherent radio pulses from showers in different media: An unified parameterization; **Physical Review D** 74 (2006) 023007

Artigos científicos in-press

Sánchez-Doblado F., Hartmann G. H., Pena J., Capote R., Piusco M., Rhein B., Leal A. e Lagares J. I. "Uncertainty estimation in IMRT absolute dosimetry verification", **International Journal of Radiation Oncology, Biology, Physics**. 2007

Mouriño Mosquera A. "Synthesis and conformational analysis of new 17a,21-cyclo-22-unsaturated analogues of calcitriol". **Journal of Organic Chemistry**, 2007, 72

Pena J, González-Castaño D M, Gómez F, Sánchez-Doblado F e Hartmann G H. "Automatic determination of primary electron beam parameters in Monte Carlo simulation". **Medical Physics**, 2007

M.Pereiro, D.Baldomir; "Structure and static response of small silver clusters to an external electric field". **Physical Review A**

J.Botana, M.Pereiro, D.Baldomir, J.E.Arias, K.Warda, L.Wojtczak; "Electronic configuration of nFe/3Cr/nFe (1-6) trilayers in FM state". **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**.

V. Pardo, D. Baldomir, J. Castro, M. Iglesias, J.E. Arias. "Ising-type anisotropy and spin state in GdBaCo₂O_{5.5}". **Journal of Magnetism**

and Magnetic Materials. (2007).

V.Pardo, D.Baldomir, J.Castro, M.Iglesias, J.E.Arias; "Ising-type anisotropy and spin state in GdBaCo₂O_{5.5}". **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**.

M. Aldegunde, A.J. García Loureiro, K. Kalna and A. Asenov, "Study of Fluctuations in Advanced MOSFETs Using a 3D Finite Element Parallel Simulator". **Journal of Computational Electronics**.

Gonzalo G. Izus, Roberto R. Deza, Luis Bernal, and Vicente Perez-Villar. "Complete synchronization of convective patterns between Gray-Scott systems". **European Physics Journal** 2006

B. Adeva, A.Romero Vidal, O.Vazquez Doce. "Measurement of Pionium Lifetime with the DIRAC spectrometer"

Comunicacións/Presentacións en Congresos/Conferencias

A.J.García Loureiro, N.Seoane y M.Aldegunde. "Estudio de técnicas de particionamiento aplicadas a la simulación paralela de transistores". **XVII Jornadas de Paralelismo**. Albacete (2006)

N. Calvo, J. Durany, R. Toja, C. Vázquez. "Numerical methods for shallow ice models". **Earth Sciences and Mathematics**. Libro de abstracts. Madrid, Septiembre de 2006.

N.Seoane, A.J.García Loureiro. "Simulación tridimensional paralela de dispositivos HEMT usando el modelo de arrastre difusión". **XVII Jornadas de Paralelismo**. Albacete (2006)

N.Seoane, A.J.García Loureiro, K.Kalna and A.Asenov. "A 3D parallel simulation of the effect of interface charge fluctuations in HEMTs". **11th International Workshop on Computational Electronics**. pp. 81-82. Viena (2006)

Gamallo P., Lopes G.P., Agustini A. (2006) "Extraction of Lexico-Semantic Classes from Text", **International Workshop on Ontologies in Text Technology (OTT'06)**, Osnabrück, Germany (39-44).

M.Pereiro, D.Baldomir, J.Botana, J.E.Arias, K.Warda, G.Wiatrowski, L.Wojtczak, "Biomedical applications of small silver clusters", Oral contribution **JEMS'06**.

Ricardo Riguera Vega. **Congreso Hispano-Luso-Japones (4SPJ-OCS)**, Santiago de Compostela, Septiembre 2006

Fredy Sussman, José Clemente, Paula Graña, M. Rita Paleo, Juan F. Correa, M. Carmen Villaverde, F. Javier Sardina, Lakshmanan Govindasamy, Mavis Agbandje-McKenna, Robert McKenna and Benn M. Dunn. "Induced fit of ligands by the HIV-1 Protease.". **BIFI 2006-II International Conference**. Libro de Resúmenes. Zaragoza. Febrero 2006

Lucía González-Louro, Fredy S. Sussman, M. Carmen Villaverde, Juan Carlos Estévez y Ramón J. Estévez. "Monohydroxylated isosteres vs dihydroxylated isosteres: computer aided design of potential beta-secretase inhibitors.". **Medicinal Chemistry in the 21st Century**. Libro de Resúmenes. Lisboa, octubre 2006

Howard Maskill, Juan Crujeiras, Ana Rios, William McFarlane, Miguel A. Rios. "New Chemistry of N-Nitroso- N,O-dialkylhydroxylamines and Related Compounds" Book of Abstracts: **18th Conference on Physical Organic Chemistry**, ISBN 83-89585-11-1 Poland, 2006

S. Saavedra, J. A. Souto, A.I. Quintana, J.L. Bermúdez. "La simulación meteorológica en el estudio del origen aloctono del ozono troposférico en zonas rurales del norte de Galicia", **Congreso de la Asociación Meteorológica Española**, Pamplona, Abril 2006

J. Pena, D. González-Castaño, F. Gómez, G. Hartmann, F. Sánchez-Doblado. "Characterization of Siemens PRIMUS linacs in Monte Carlo

simulations for advanced dosimetric studies”, **World Congress on Medical Physics and Biomedical Engineering**. Do 27-agosto-2006 ao 01-Setembro-2006. Seoul (Korea do Sur)

J. Pena, F. Gómez, D. González-Castaño, A. Gómez, C. Fernández, J. Mouríño, F. González-Castaño, D. Rodríguez-Silva, M. Pombar “The eIMRT project: a web-based tool for monte carlo verification of treatment plans” **ESTRO 25**. Do 08-Outubro-2006 ao 12-Outubro-2006. Leipzig (Alemaña)

J. Pena, D. González-Castaño, F. Sánchez-Doblado, G. H. Hartmann, F. Gómez. “Calculation of very small fields output factors in megavoltage beams using Monte Carlo”, **First European Workshop on Monte Carlo Treatment Planning of the European Workgroup on MCTP**. 22-Outubro-2006 - 25-Outubro-2006. Ghent (Bélxica)

F. Sánchez-Doblado, J. Pena, G. Hartmann, A. Leal, F. Gómez. “Ionization Chamber miss-responding in IMRT reference dosimetry verification”, **World Congress on Medical Physics and Biomedical Engineering**. 27-agosto-2006 - 01-Setembro-2006. Seoul (Korea do Sur)

A. Bermúdez, R. Rodríguez, P. Salgado. “Numerical solution of 3D magnetostatic problems in terms of scalar potentials”, **14th European Conference on mathematics for Industry (ECMI 2006)**, July 10-14, Leganés, Madrid

B. Adeva on behalf of DIRAC collaboration. “ $|a_0-a_2|$ measurement from Pionium Lifetime by DIRAC”. **IVth International Conference on Quarks and Nuclear Physics**, 5 - 10 June 2006, Madrid, Spain

B. Adeva on behalf of DIRAC collaboration. “ $|a_0-a_2|$ Measurement from Pionium Lifetime by DIRAC”. **9th International Workshop on Meson Production, Properties and Interaction**, KRAKÓW, POLAND, 9 - 13 June 2006 .

E. Penabad, C. F. Balseiro , M. Poncela , A. Hermida , A. Dorado.. “Empleo de modelos deterministas y estadísticos para la predicción de energía eólica”. **Jornadas Científicas AME** (Abril 2006, Navarra)

Balseiro C.F., Barreiro, M., Torres López S., Carracedo P., Montero. “Influence of different wind forcing on an ocean circulation model”. **X International Symposium on Oceanography of the Bay of Biscay**.

Pósters en Congresos/Conferencias

M. Aldegunde, A.J. García Loureiro, K. Kalna and A. Asenov, “A 3D parallel finite element simulator for studying fluctuations in advanced MOSFETS”, **11th International Workshop on Computational Electronics**, 2006

V. Pardo, D. Baldomir, J. Castro, M. Iglesias, J.E. Arias. “Ising-type anisotropy and spin state transitions in GdBaCo2O5.5 from first-principles calculations” **JEMS '06 (Joint European Magnetic Symposia)**, San Sebastián del 26 al 30 de junio de 2006.

D. Baldomir, V. Pardo, J. Castro, M. Iglesias, J.E. Arias and J.Rivas. “First principles calculations of charge ordering in manganites”. **JEMS '06 (Joint European Magnetic Symposia)**, San Sebastián del 26 al 30 de junio de 2006.

García-Fandino, Rebeca; Castedo, L.; Granja, J. R. “Enyne metathesis catalyzed by Grubbs Ruthenium carbene catalyst. A mechanistic study”. Book of Abstracts ESPA Julio 2006 **Electronic Structure: Principles and Applications**. Pág. 115

Jesús A. Varela*, Silvia G. Rubín, Carlos González-Rodríguez, Luis Castedo and Carlos Saá. “Theoretical Study of the Ru-Catalyzed Reactions of 1,6-Diynes and Alkenes”. **1st European Chemistry Congress**. 27-31 Agosto 2006, Budapest, Hungría.

Berta Fernández, José L. Cagide Fajín, Cristian R. Munteanu and Javier López Cacheiro. “Accurate van der Waals complex rovibrational spectra”, **XIIth International Congress of Quantum Chemistry**, Kyoto Terrsa (Japan), 21-26 May 2006.”

José L. Cagide Fajín, Berta Fernández, Aleksandra Mikosz and David Farrelly. “Accurate Intermolecular Ground State Potentials and Rovibrational Spectra of He-HX (X=F, Cl, Br) Accurate Intermolecular Ground State Potentials and Rovibrational Spectra of He-HX (X=F, Cl, Br) van der Waals Complexes” **ESPA 2006; Electronic Structure: Principles and Applications**, Santiago de Compostela (Spain) 18-21 July 2006.

A. Peña-Gallego, M.M. Montero Campillo, E.M. Cabaleiro-Lago, J. Rodríguez-Otero. “Effects of BF3 on the aromaticity and the pericyclic-pseudopericyclic character.” **XIIth International Congress of Quantum Chemistry**. Kyoto (Japón/Xapón). Do 21/05/2006 ó 26/05/2006.

J. Rodríguez-Otero, E.M. Cabaleiro-Lago, M.M. Montero Campillo, A. Peña-Gallego. “Aromaticity of electrocyclic reaction transition structures, assessed by anisotropy of the current induced density.” **XIIth International Congress of Quantum Chemistry**. Kyoto (Japón/Xapón). Do 21/05/2006 ó 26/05/2006.

M.M. Montero Campillo, J. Rodríguez-Otero, E.M. Cabaleiro-Lago, A. Peña-Gallego. “From Diademane to Triquinacene: a theoretical study of a pericyclic rearrangement catalyzed by Lithium”. **XIIth International Congress of Quantum Chemistry**. Kyoto (Japón/Xapón). Do 21/05/2006 ó 26/05/2006.

Á. Peña-Gallego, E. M. Cabaleiro-Lago, M. M. Montero-Campillo, J. Rodríguez-Otero. “The study of the effects of BF3 on the [4+2] cycloaddition of vinylketene with formalimine”. **Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2006**. Santiago de Compostela (España). Do 18/07/2006 ó 21/07/2006.

E. M. Cabaleiro-Lago, J. Rodríguez-Otero, M. M. Montero-Campillo, Á. Peña-Gallego. “DFT study of the pseudopericyclic character of electrocyclization in 1,2,4,6-heptatetraene sulfur derivatives”. **Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2006**. Santiago de Compostela (España).Do 18/07/2006 ó 21/07/2006.

J. M. Hermida-Ramón, J. Rodríguez-Otero, E. M. Cabaleiro-Lago, M. M. Montero-Campillo, Á. Peña-Gallego. “Analysis of the nucleophilic addition of water to ketenes. A DFT study”. **Electronic Structure: Principles And Applications. ESPA 2006**. Santiago de Compostela (España). Do 18/07/2006 ó 21/07/2006.

M. M. Montero-Campillo, J. Rodríguez-Otero, E. M. Cabaleiro-Lago, Á. Peña-Gallego. “Transition metal-catalyzed hetero-[5+2] cycloadditions of cyclopropilimines and alkynes: A DFT study.” **Electronic Structure: Principles And Applications. ESPA 2006**. Santiago de Compostela (España). Do 18/07/2006 ó 21/07/2006.

Fredy Sussman, José C. Clemente, Paula Graña, M. Rita Paleo, Juan F. Correa, M. Carmen Villaverde, F. Javier Sardina, Lakshmanan Govindasamy, Mavis Agbandje-McKenna, Robert McKenna and Benn M. Dunn. “Induced fit of ligands by the HIV-1 protease”. Libro de Resúmenes. Lisboa, octubre 2006.

S. Saavedra, J.A. Souto, J. Vilà-Guerau de Arellano. “Impact of Meteorological Factors on Turbulent Dispersion over Complex Terrain”. **28th NATO/SPS International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and its Application**, Leipzig 2006

J. Pena, D. González-Castaño, F. Gómez, F. Sánchez-Doblado “Commissioning of photon beams in Monte Carlo simulations ensuring full machine reproducibility”, **First European Workshop on Monte Carlo Treatment Planning of the European Workgroup on MCTP**, 22-Outubro-2006 ao 25-Outubro-2006. Ghent (Bélxica)

Julio A. Seijas,* M. Pilar Vázquez-Tato,* M. Raquel Carballido-Reboredo. “Prediction of Flavone UV-Vis spectrum: semiempirical versus ab-initio methods”. **10th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry**. Hall G. Computational Chemistry: g012.

V.Pardo, D.Baldomir, J.Castro, M.Iglesias, J.E.Arias; "Ising-type anisotropy and spin state transitions in GdBaCo₂O_{5.5}". **JEMS '06 (Joint European Magnetic Symposia)**, 2006.

Teses de doutoramento defendidas

Victor Pardo Castro. "First principles studies of the electronic structure and magnetism of cobalt oxides", presentada el 24 de marzo de 2006. **Universidade de Santiago de Compostela**.

Rebeca Garcia Fandiño. "Reacciones de Formación de Sistemas Policíclicos:I. Síntesis de taxoesteroides mediante metátesis de dieninos.II. Estudios teóricos de reacciones de ciclación de metátesis y reacciones de cicloadición [3+2] catalizadas por Pd". Director/es: Luís Castedo Expósito e Juan R. Granja Guillén. **Universidade de Santiago de Compostela**.

Víctor Pardo Castro. "First principles studies of electronic structure and magnetism of cobalt oxide". 24 de Marzo del 2006. Director: Daniel Baldomir Fernández. **Universidade de Santiago de Compostela**.

José Luis Cagide Fajín. "Estudio Coupled Cluster de Potenciales de Interacción en Complejos de van der Waals" CD06/065, ISBN:84-9750-729-0 Novembro (2006). **Universidade de Santiago de Compostela**.

Teses de doutoramento presentadas

Javier Pena García. "Application of Monte Carlo simulation to the study of clinical beams and dosimetry in radiotherapy". **Universidade de Santiago de Compostela**.

Oton Vazquez Doce. "Study of Pionium Lifetime in pNi collisions at $p=24$ GeV/c". **Universidade de Santiago de Compostela**.

A. Romero. "Determination of pi-pi s-wave amplitude difference $|a_0-a_2|$ with the DIRAC spectrometer at CERN." **Universidade de Santiago de Compostela**.

Teses de licenciatura/Proxectos Fin Carreira

Cristina Romero Caamaño. "Transferencia Protónica en Sistemas con Enlace de Hidrógeno Intramolecuular. Influencia del Disolvente" Septiembre de 2006. **Universidade de Santiago de Compostela**.

Outros

Conferencia: Ricardo Riguera Vega. Universidad de Zaragoza, Dpto. de Q. Orgánica, Noviembre 2006

B. Adeva, A. Romero, O. Vazquez Doce. INTERNAL NOTE 05-11: Study of SFD efficiency using MSGC detector for 2001 data, [Santiago]

B. Adeva, A. Romero, O. Vazquez Doce. INTERNAL NOTE 05-15 : Full-tracking resolution in DIRAC with 2001 data, [Santiago]

B. Adeva, A. Romero, O. Vazquez Doce. INTERNAL NOTE 05-16 : Study of multiple scattering in upstream detectors in DIRAC, [Santiago]

B. Adeva, A. Romero, O. Vazquez Doce. INTERNAL NOTE 05-19: Addendum to full-tracking resolution in DIRAC with 2001 data, [Santiago]

B. Adeva, A. Romero, O. Vazquez Doce. INTERNAL NOTE 06-03: Measurement of pionium lifetime, [Santiago]

B. Adeva, A. Romero, O. Vazquez Doce. INTERNAL NOTE 06-05: Experimental measurement of a K+K- signal at $p=2.90$ GeV/c in Ni 2001 data, [Santiago]

A.Romero. Presentacion en meeting de colaboracion: Measurement of K+K- at 2.9 GeV/c.

A. Romero. Presentacion en meeting de colaboracion. Measurements of K+K-, K+-pi+ and K-p and comparison with UrQMD.

B. Adeva. Presentacion en meeting de colaboracion: Measurement of pionium lifetime with Ni 2001 data.

B. Adeva. Presentacion en meeting de colaboracion: Final corrections for pionium lifetime with Ni 2001 data.

UNIVERSIDADE DE VIGO



Artigos científicos publicados

Olalla Nieto Faza, Carlos Silva López, Rosana Álvarez and Angel R. de Lera. "The mechanism of the gold(I) catalyzed Rautenstrauch rearrangement: A center-to helix-to center chirality transfer". **J. Am. Chem Soc** 2006 128(7), 2434-2437

Rosana Álvarez, Olalla Nieto Faza, Carlos Silva López, and Ángel R. de Lera. "Computational Characterization of a Complete Palladium-Catalyzed Cross-Coupling Process: The Associative Transmetalation in the Stille Reaction". **Organic Letters**. 2006; 8(1) pp 35 - 38.

Carlos Silva López, Olalla Nieto Faza, and Ángel R. de Lera. "Computational Study and Analysis of the Kinetic Isotope Effects of the Rearrangement of cis-Bicyclo[4.2.0]oct-7-ene to cis,cis-Cycloocta-1,3-diene." **Organic Letters.**; 2006; 8(10) pp 2055 - 2058

Marta Domínguez, Rosana Álvarez, Martín Pérez, K. Palczewski, Angel R. De Lera. "The Role of the 11-cis-Retinal Ring Methyl Substituents on Visual Pigment Formation." **ChemBioChem**. 2006, 7, 1815

Jose M. Hermida-Ramón N, Ana M. Graña A. "Blue-Shifting Hydrogen Bond in the Benzene-Benzene and Benzene-Naphthalene Complexes". **J. Comput. Chem.** 28, 540 (2007)

Carlos Silva López, Olalla Nieto Faza, Rosana Álvarez, and Ángel R. de Lera. "Cycloisomerization of Activated (2E,4Z)-Heptatrienoate and Its Relevance to Crispatene (Bio)synthesis. A Case of Concerted and Stepwise Uncertainty". **Journal of Organic Chemistry**; 2006; 71(12) pp 4497 - 4501

Jelius Jellinek, Paulo H. Acioli, Juan Garcia Rodeja, Weijun Zheng, Owen C. Thomas and Kit H. Bowen. "Mn-n clusters: Size include transition on half metallicity". **Physical Review B.**, 74, 153401 (2006)

J. R. Flores, R. Slupski, K. Jankowski. "Towards benchmark second-order correlation energies for large atoms II. Angular Extrapolation Problems." **Journal of Chemical Physics** 124(10) (2006) 104107/1-104107/17. Clave A.

J. R. Flores. "Quasiclassical trajectories on a finite element density functional potential energy surface: The C++H₂O reaction revisited". **Journal of Chemical Physics** 125(16) (2006) 164309/1-164309/10. Clave: A.

M. J. González Moa, R. A. Mosquera, "On the Electron Donor and the Electrophilic Substitution Activating Abilities of Substituents in Uracil". **J. Phys. Chem. A**, 110, 5934-5941 (2006)

A. Vila, R. A. Mosquera, "On the Electronic Origin of Strain Energy: QTAIM Study of Perfluorocycloalkanes". **J. Phys. Chem. A**, 110, 11752-11759 (2006)

M. Mandado, R. A. Mosquera, C. Van Alsenoy. "A scheme estimating the energy of intramolecular hydrogen bonds in diols". **Tetrahedron**, 62, 4243-4252 (2006)

M. Mandado, N. Otero, R. A. Mosquera. "Local aromaticity study of heterocycles using n-center delocalization indices: the role of aromaticity". **Tetrahedron**, 62, 12204-12210 (2006)

J. L. López, M. Mandado, M. J. González Moa, R. A. Mosquera. "A charge density analysis on the proximity effect in dicyanoalkanes". **Chem. Phys. Lett.**, 422, 558-564 (2006)

M. J. González Moa, M. Mandado, R. A. Mosquera. "QTAIM charge density study of natural cinnamic acids". **Chem. Phys. Lett.** 424, 17-22 (2006).

N. Otero, M. J. González Moa, M. Mandado, R. A. Mosquera. "QTAIM study of the protonation of indole". **Chem. Phys. Lett.**, 428, 249-254 (2006)

M. J. González Moa, M. Mandado, R. A. Mosquera. "Explaining the sequence of protonation affinities of cytosine with QTAIM". **Chem. Phys. Lett.**, 428, 255-261 (2006)

J. M. Hermida-Ramón, R. A. Mosquera. "Do small carboxylic acids present intramolecular hydrogen bond?". **Chem. Phys.** 323, 211-217 (2006)

A. Vila, E. Vila, R. A. Mosquera. "Topological characterisation of intermolecular lithium bonding". **Chem. Phys.** 326, 401-408 (2006). *Chemical Physics* 232, (2006), 211-217

J. Jiménez-Barbero, J. L. Asensio, G. Cuevas, A. Canales, M. C. Fernández-Alonso, F. J. Cañada. "Conformational Insights on the Molecular Recognition Processes of Carbohydrate Molecules by Proteins and Enzymes. A 3D View by Using NMR". **Biocatalysis and Biotransformation**, Publisher: Taylor & Francis, Volume 24, Number 1-2 2006 pp. 13-22.

K. Jankowski, R. Slupski, J.R. Flores. "Ab initio asymptotic-expansion coefficients for pair energies in MP2 perturbation theory for atoms". **Molecular Physics** 104(13-14) (2006) 2213-2223. Clave A.

A. Vila, R. A. Mosquera. "Are the Hydrogen Bonds Involving Sulfur Bases Inverse or Anomalous?". **Int. J. Quantum Chem.** 106, 928-934 (2006).

Daniel Cernadas et al, "Non-destructive testing of plates based on the visualisation of Lamb waves by double-pulsed TV holography", **Mechanical Systems and Signal Processing**, 20, pp. 1338-1349

L. J. Alvarez Vazquez, A. Martinez, M. E. Vazquez Mendez, M. A. Vilar. "Optimal location of sampling points for river pollution control." **Math. Comput. Simul.**, 71, pp. 149 - 160, 2006.

Artigos científicos in-press

Jose M. Hermida-Ramón and Carlos M. Estévez. "Towards the Design of Neutral Molecular Tweezers for Anion Recognition". **Chemistry: a European Journal**, 2007

Rosana Álvarez, Olalla Nieto Faza, Angel R. de Lera, Diego J. Cárdenas. "A Density Functional Theory Study of the Stille Cross-Coupling via Associative Transmetalation. The Role of Ligands and Coordinating Solvents". **Advanced Synthesis and Catalysis**

Alvarez, S.; Germain, Pierre.; Alvarez, R.; Rodríguez-Barrios, F.; Gronemeyer, H.; R. de Lera, A.. "Structure, Function and Modulation of RARbeta, a tumour suppressor". **International Journal of Biochemistry and Cell Biology**

José M. Hermida-Ramón, Ana M. Graña. "Blue-Shifting Hydrogen Bond in the Benzene-Benzene and Benzene-Naphthalene Complexes". **Journal Computational Chemistry** 28, (2007), 540-546

Carlos Silva López. "Pseudopericyclic design drives [1a,5a] methylene sigmatropic shifts from a stepwise to a concerted mechanism". **J. Comput. Chem.**

Olalla Nieto Faza. "Sulfoxide-induced stereoselection in [1,5]-sigmatropic hydrogen shifts of vinylallenes. A computational study". **J. Org. Chem.**

Rosana Álvarez and Angel R. de Lera, José M. Aurrecochea and Ariz Durana. "Bimetallic Intermediates in the Formation of Nucleophilic Allenylzinc Intermediates from Allenylpalladiums: A DFT Study". **Organometallics**.

Raquel Pereira Cameselle. Natural and synthetic retinoids: structural bases and biological effects of potential clinical relevance for the prevention and treatment of infection-driven tumors.

Comunicacións/Presentacións en Congresos/Conferencias

L. J. Alvarez Vazquez, A. Martinez, M. E. Vazquez Mendez, M. A. Vilar. "Vertical slot fishways: Modeling and optimal management". **XII ICCAM**, Leuven (Belgica), 2006.

L. J. Alvarez Vazquez, A. Martinez, M. E. Vazquez Mendez, M. A. Vilar. "Mathematical models in river fishways". **Marrakesh World Congress in Differential Equations and Applications**, Marrakesh (Marruecos), 2006.

L. J. Alvarez Vazquez, A. Martinez, M. E. Vazquez Mendez, M. A. Vilar. "Numerical resolution of a shape optimization problem in hydraulic engineering". **ECCOMAS CFD 2006**, Egmond aan Zee (Holanda), 2006.

José M. Hermida-Ramón and Carlos M. Estévez. Comunicación oral en el congreso. "Molecular Tweezers for Anion Recognition". **ESPA (Electronic Structure Principles and Applications)**, Santiago de Compostela, 18-21 Xullo 2006

R. A. Mosquera, "Analysing basic chemical concepts in the light of the quantum theory of atoms in molecules". Conferencia plenaria en congreso **ESPA (Electronic Structure Principles and Applications)**, Santiago de Compostela, 19 julio 2006

Manuel M. Piñeiro, Claudio A. Cerdeiriña, Milton Medeiros. "Evaluation of the competence between energetic and volumetric fluctuations on second order derived properties of a Lennard Jones fluid using NPT Monte Carlo". **VII Iberoamerican conference on Phase Equilibria and Fluid Properties for Process Design**. Morelia, México, October 21-25, 2006

A. Bermúdez, J.L. Fernández, C. López, P. Salgado. "Analysis of probe response in nondestructive testing of tubes using a volumen integral formulation based on the current density", **COMPUMAG 2007**

Pósters en Congresos/Conferencias

Carlos M. Estévez and José M. Hermida-Ramón. "Novel Molecular Tweezers for Anion Recognition". Congreso **ESPA Electronic Structure: Principles and Applications**, Santiago de Compostela 18-21 Xullo 2006.

A. Vila, M. J. González Moa, A. M. Graña, R. A. Mosquera, "On the electronic origin of strain energy: QTAIM study of perfluorocycloalkanes", **ESPA (Electronic Structure Principles and Applications)**, Santiago de Compostela, julio-2006

D.A. Rincón Daza, R. A. Mosquera, M. N. D. S. Cordeiro. "A First Theoretical Approach to Understand the Importance Between Drug's Interactions", **ESPA (Electronic Structure Principles and Applications)**, Santiago de Compostela, julio-2006

M. Mandado, M. J. González Moa, N. Otero, A. Vila. "Chemical Graph Theory and N-Center Electron Delocalization Indices: A Study on Polybenzenoid Hydrocarbons". **ESPA (Electronic Structure Principles and Applications)**, Santiago de Compostela, julio-2006

A. S. S. Pinto M. N. D. S. Cordeiro R. A. Mosquera, J. R. B. Gomes. "A Periodic DFT Study on the Methanol Decomposition at RU(0001) Surfaces": **ESPA (Electronic Structure Principles and Applications)**, Santiago de Compostela, julio-2006.

A. M. Graña, M. Mandado, K. Tersago, F. Blockhuys, C. Van Alsenoy. "Insight Into the Conformational Stability of Z-Configurations in Sulphur Diimides and Thionylidimides: Topological and Multicenter Electron Delocalization Analysis". **ESPA (Electronic Structure Principles and Applications)**, Santiago de Compostela, julio-2006

R. Nieto, L. Gimeno, R. Trigo, J.A. Añel, L. de la Torre & M.N. Lorenzo. "Predictability of cut-off low systems occurrence using reforecasts" . **COST 723 Final Workshop**. Libro de abstracts. Sofia, Bulgaria AÑO: 2006

Manuel M. Piñeiro, Amparo Galindo and Andrew O. Parry. "Surface ordering and capillary phenomena of confined hard cut-sphere particles". **Sixteenth Symposium on Thermophysical Properties**. Boulder, CO, USA. July 30 - August 4, 2006

Olalla Nieto Faza, Adán Borja González Pérez. "Theoretical Study of bis(pseudo)pericyclic reaction in symmetric azines". **ESPA (Electronic Structure Principles and Applications)**, Santiago de Compostela, July 18-21 2006. <http://www.usc.es/gdrq/ESPA2006/index.htm>

Rodríguez-Barrios, F.; Santín, E. P.; Germain, P.; Gronemeyer, H.; de Lera, A. R. "Structural and Functional Modulation of RXR by a Series of 3-(2'-Alkoxy)-Tetrahydronaphthyl-Cinnamic". **Acids Chemistry in Cancer Research: A Vital Partnership**. San Diego (EEUU)

D. González-Salgadoa and I. Nezbedab. "VLE simulations of 1-methylnaphthalene with explicit interface". **Seventh Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids** Lednice, June 11-16, 2006

M.N. Lorenzo and JJ. Taboada. "Collapse of the North Atlantic thermohaline circulation versus of the synoptic variability". **EGU 2006**. Libro de abstracts. Viena, Austria, 2006

M.N. Lorenzo and JJ. Taboada. "Influence of high-frequency variability on a shutdown of the Atlantic Thermohaline Circulation". **The Challenger Conference for Marine Science**. Libro de abstracts. Oban, Escocia 2006

Teses de doutoramento defendidas

María del Carmen Fernández Alonso. "Interacciones Proteína-Carbohidrato: Estudio Teórico De Los Requisitos Energéticos Para La Distorsión de Anillos de Piranosa y Origen de las Interacciones Carbohidrato-Anillo Aromático". Defendida o 17 de Xaneiro de 2006 na **Universidade de Vigo**.

Olalla Nieto Faza. "Estudio computacional de reacciones pericíclicas en sistemas cargados: Estereoselectividad y Mecanismo". Defendida en Febreiro de 2006 na **Universidade de Vigo**.

Susana Álvarez Rodríguez. "Moduladores de Receptores de Retinoides: Diseño, Síntesis y Caracterización", Defendida en 2006 na **Universidade de Vigo**.

Teses de licenciatura/Proxectos Fin Carreira

Adán Borja González Pérez. "Estudio teórico de reacciones bis(pseudo)pericíclicas en azinas simétricas"

Libros/Capítulos publicados

Jesús Jiménez-Barbero, Javier Cañada, Juan Luis Asensio, Gabriel Cuevas, María del Carmen Fernández-Alonso, Nuria Aboitiz, Ángeles Canales, Silvia Mari, Isabel Chávez, Paloma Vidal. "Protein-Carbohydrate interactions: A combined theoretical and experimental approach on carbohydrate-aromatic interactions and on pyranose ring distortion". CS Symp. Ser. 930. NMR Spectroscopy and Computer Modeling of Carbohydrates. Recent Advances. Edited by Johannes F. G. Vligenthart and Robert Woods. Published by Am. Chem. Soc., Washington DC. (2006)

Outros

DEA, Laura Estévez Guiance, Programa de Doctorado Interuniversitario: Química Teórica y Computacional, Septiembre-2006

J.C. López, "Resolución numérica de las ecuaciones de Maxwell en régimen armónico cuasiestacionario en base a una formulación integro-diferencial en la densidad de corriente", Trabajo de investigación tutelado en el programa de doctorado "Métodos matemáticos y simulación numérica en ingeniería y ciencias aplicadas".



TURGALICIA
DIRECCIÓN XERAL DE TURISMO

www.turgalicia.es

TODOS OS RECURSOS E ALOXAMENTOS TURÍSTICOS DE GALICIA



XUNTA DE GALICIA
CONSELLERÍA DE INNOVACIÓN
E INDUSTRIA

AHORA
LA VIRTUALIZACIÓN
ES UNA REALIDAD.
Con los servidores HP Integrity
con procesadores Intel® Itanium® 2

LLAME AL **902 10 14 14**
VISITE www.hp.es/integrity-virtualizacion

© 2000 Hewlett-Packard Development Company, L.P. Todos los derechos reservados. IBM, IBM logo, IBM Inside logo, IBM eServer, IBM eServer logo, eServer, IBM Xeon, IBM SpeedStep, Bankrupt, Pentium y Pentium II Xeon son marcas registradas de IBM Corporation o sus subsidiarias en los Estados Unidos y otros países. Microsoft y Windows son marcas registradas de Microsoft Corporation. Linux es una marca registrada de Linus Torvalds.

DELL™

**¿Conoce lo que
Dell puede ofrecerle
en Super-computación?**

Conozca los mejores casos
y lo que Dell puede hacer
por usted en HPCC.



PowerEdge™ SC1425

Una máquina pensada y diseñada para
las soluciones de Super-computación

www.dell.es/hpcc

902 119066