

díxitos

NOVAS DO CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA - NOVEMBRO 2003



CESGA O CENTRO DE CÁLCULO CIENTÍFICO DE MAIOR CAPACIDADE DO ESTADO



CONSEJO SUPERIOR DE
INVESTIGACIONES
CIENTÍFICAS



XUNTA DE GALICIA
CONSELLERÍA DE INNOVACIÓN,
INDUSTRIA E COMERCIO

MINISTERIO
DE CIENCIA
Y TECNOLOGÍA



CENTRO COFINANCIADO
A TRAVÉS DO FONDO EUROPEO DE
DESENVOLVEMENTO REXIONAL



S.A. Xestión Centro de Supercomputación de Galicia
Sociedade participada pola Xunta de Galicia e o Consejo Superior de Investigaciones Científicas.

DIRECCIÓN Javier García Tobío
COORDINACIÓN Fernando Bouzas Sierra
REDACCIÓN Dr. Ignacio López Cabido
Dr. Carlos Fernández Sánchez
Cristina González Domínguez
COLABORACIÓN Luís F. Rodríguez
Patricia Somorrostro
ILUSTRACIONES E PORTADA Germán Blanco
DESEÑO E MAQUETACIÓN Germán Blanco
FOTOMECÁNICA Macrom

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

EDITA
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

CESGA INFORMA

Actos da Semana da Ciencia - 02
CESGA: centro de cálculo científico de maior capacidade - 03
Os centros tecnolóxicos impulsan a innovación en Galicia - 04

TECNOLOXÍA

CESGA e CESCA crean un Grid de computación - 05

USUARIOS

Simulación para o estudo das reaccións químicas - 06 - 07

INNOVACIÓN

Proxecto MRI - 08

COMUNICACIÓNS

Proxecto Torga.NET - 09

e-COMERCIO

O Centro de Competencias premiado en Cerdeña - 10

TECNOLOXÍA

I+D apoia o deseño dun sistema de almacenamento - 11

ACTIVIDADES DO CESGA NA SEMANA DA CIENCIA 2003

Aproveitando a coxuntura da Semana da Ciencia en Galicia, o CESGA vai celebrar numerosos actos vinculados á súa labor como Centro Tecnolóxico ó longo destes dez anos de existencia.

Durante a mañá do 11 de novembro o centro será sede do High Performance Computing Workshop 2003. Despois da apertura da xornada a cargo de Pedro Merino, Presidente do CESGA, e Amando Ordás, Coordinador do CSIC en Galicia; Javier García Tobío, Director do centro, fará balance dos 10 anos do CESGA. J.C.Aerts, Coordinador Xeral de Arcade-Europa analizará o estado da Computación Científica en Europa. Seguidamente, o Catedrático Ángel Carracedo, exporá un relatorio sobre a Rede Galega de Bioinformática e as necesidades de Bioinformática na Xenómica en Galicia. Cerrará o Workshop o profesor Ramón Doallo presentando casos prácticos de aplicación e uso da computación distribuída e das tecnoloxías GRID.

O mesmo día a partir das 19 horas terá lugar no CESGA a Mesa Redonda: "Internet na sociedade: presente e futuro" na que participarán representantes da Socioloxía, Administración, Dereito, Tecnoloxía, Medios de Comunicación e a Educación. A mesa

redonda está orientada a un público obxectivo pertencente a empresas, asociacións empresariais, universidades, administración, centros tecnolóxicos, medios e cidadáns en xeral.

O 13 de novembro vai celebrarse o 10º Aniversario de creación do CESGA, no que se darán cita importantes persoeros vinculados ó centro, entre os que destacan o Presidente da Xunta, Manuel Fraga, Emilio Lora-Tamayo, Presidente do CSIC e o Dr. Javier Echeverría do Instituto de Filosofía do CSIC. Tralo relatorio do Dr. Echeverría, terá lugar a entrega de placas conmemorativas a anteriores responsables do CESGA.

Entre o 17 e 21 de novembro, o CESGA abrirá as súas portas para ser visitado por grupos de escolas, facultades e colexios, ademais de público en xeral interesado no campo da supercomputación e as redes de comunicacións.

Por último, organizado polo Centro de Competencias de Comercio Electrónico de Galicia, realizarase a presentación ós medios dos resultados do proxecto europeo e-Minder de comercio electrónico en Galicia, o próximo día 19 de novembro no Clube Internacional de Prensa de Galicia.

SEMANA DA CIENCIA NO CESGA

Data	Hora	Lugar	Título
11/9	10:00	CESGA	High Performance Computing Workshop 2003
11/9	19:00	CESGA	Mesa Redonda: "Internet na Sociedade: presente e futuro".
13/9	19:00	CESGA	Actos de Celebración do 10º Aniversario
17/9 ó 21/9		CESGA	Xornadas de Portas Abertas
19/9	12:00	Clube I. de Prensa	Presentación: "Resultados do proxecto e-Minder"



CESGA: O CENTRO DE CÁLCULO CIENTÍFICO DE MAIOR CAPACIDADE DO ESTADO

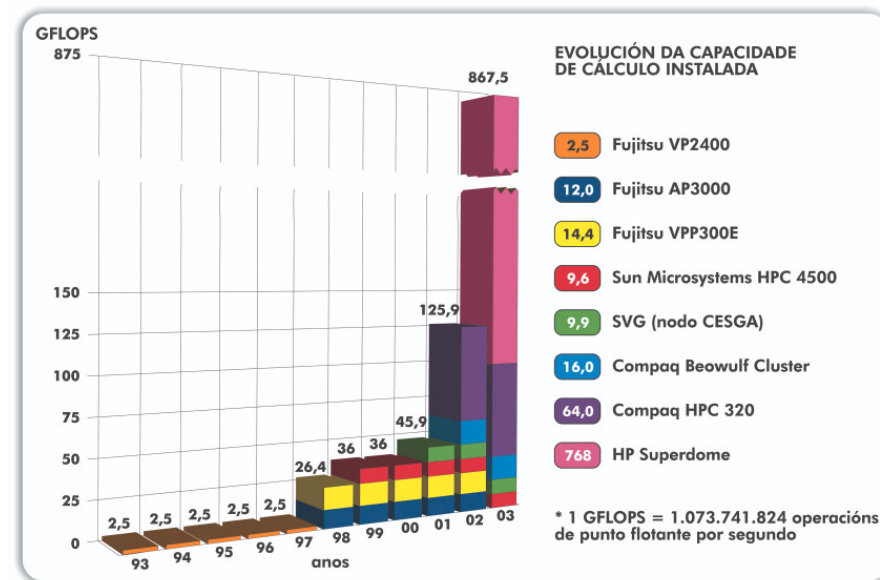
No mes de marzo deste ano, o CESGA convocou un concurso aberto para adquirir un "superordenador" aplicado á resolución de grandes problemas. Ademais dunha grande capacidade de cálculo, o ordenador elixido debía proporcionar unha capacidade de memoria elevada, unha rápida velocidade de acceso á memoria e un subsistema de almacenamento tamén de grande capacidade.

Ó concurso concorreron numerosos provedores como Catón, Fujitsu, IBM, SGI, HP e Sun. Tras un riguroso proceso de avaliación, o CESGA determinou adjudicar o proxecto a HP e ó seu modelo Superdome. "Trala avaliación dun conxunto de parámetros como test Benchmark, deseño de arquitectura, costes operativos e de adquisición, soporte técnico, experiencia previa e evolución tecnolóxica futura, HP Integrity Superdome foi o equipo que aportou a solución máis completa", sinala Javier García Tobío, director do CESGA.

Baseados nos novos microprocesadores Intel Itanium 2, os dous servidores de alta computación de HP Superdome que entrarán en funcionamento en novembro do 2003 incrementarán sustancialmente a capacidade de cálculo ofrecida polo CESGA ós seus usuarios, que pasa de 125,9 a 893,9 GFLOPS (esta cifra será de 867,5 GFLOPS despois da desconexión dos servidores de Fujitsu VPP300E e AP3000).

Con esta nova incorporación, que contou co apoio financeiro de FEDER, o CESGA pasa a ser o centro de cálculo científico de maior capacidade do estado español o que vai repercutir moi positivamente no labor que desenvolve a comunidade científica en Galicia.

Hai que recordar que os principais usuarios do CESGA son investigadores das universidades galegas, centros tecnolóxicos e de investigación dependentes da Xunta de Galicia, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Instituto Español de Oceanografía, Laboratorios de Investigación de Complexos Hospitalarios e Institucións e Empresas que traballan en I+D+I.



Ó longo dos últimos anos as contas de usuario de cálculo de altas prestacións tiveron un ascenso continuado, así como as horas de cálculo empregadas por estes usuarios que pasaron das 8.600 horas empregadas en 1997 ata as 448.726 horas en 2002. As áreas de traballo máis comúns son Modelización Bioquímica, Física, Ciencias da Computación, Métodos Numéricos e Ciencias da Terra.

A chegada do novo equipamento ó CESGA vai permitir que estes usuarios poidan abordar problemas de maior envergadura e complexidade, desenvolvendo os seus proxectos con maior axilidade e eficacia e potenciando o vínculo con investigadores doutros centros españois, europeos e estadounidenses.

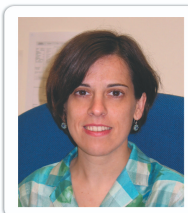
Os servidores Superdome de HP tamén van incidir directamente noutros proxectos que o CESGA está a desenvolver, fundamentalmente aqueles relacionados con tecnoloxías Grid. Actualmente o centro participa en proxectos como Crossgrid, Irisgrid, Galigrid e ProducciónGrid para establecer redes de colaboración entre institucións de diferentes países e/ou comunidades e desenvolver investigacións complexas que absorben maiores recursos de cálculo computacional.



ESPECIFICACIÓNS TÉCNICAS DO NOVO EQUIPO SUPERDOME

Nome do Equipo: HP Cluster Superdome
Arquitectura: Cluster de 2 nodos SMP
Número de Procesadores: 128
Tipo de procesador: Intel Itanium2, 1500 MHz, 6 Mbytes cache
Memoria: 384 GBytes
Potencia Pico: 768 GFlops
Rede de Interconexión: Infiniband
Sistema Operativo: HP-UX
Disco: 7 Terabytes

OS CENTROS TECNOLÓXICOS IMPULSAN A INNOVACIÓN EN GALICIA



Patricia Somorostro López
Xefa do Servizo de Apoio á Innovación. Dirección Xeral de Innovación e Desenvolvemento. Consellería de Innovación, Industria e Comercio. Xunta de Galicia

Os Centros Tecnolóxicos de Galicia e a Dirección Xeral de Investigación e Desenvolvemento da Xunta de Galicia están traballando para crear unha rede na que se fomenten as iniciativas e proxectos comúns que favorezan e potencien o seu labor de apoio á innovación nas empresas da nosa comunidade.

Esta rede participa do obxectivo principal do Plan Galego de I+D+I, isto é, impulsa-lo despegue económico e social de Galicia mediante o incremento da capacidade científico-tecnolóxica, a participación das empresas no proceso de innovación e a extensión da investigación ó conxunto da sociedade galega. Para todo este proceso os centros tecnolóxicos son institucións claves, xa que cumpren unha misión de achegamento da ciencia e a tecnoloxía ós demais axentes do sistema, e contan cun importante potencial tamén para prestar servizos tecnolóxicos que contribúen a incrementar a capacidade innovadora e competitiva das empresas.

O establecemento dunha colaboración entre os diferentes Centros Tecnolóxicos de Galicia é fundamental para o fomento dunha cultura de innovación na nosa comunidade xa que vai posibilitar, de facto, un impulso ó traballo de investigación que están elaborando a cotío, unha integración e coordinación das

súas tarefas grupais e a constitución dunha rede de traballo permanente que vai favorecer á sociedade galega en xeral e as empresas en particular.

As actividades da rede consisten fundamentalmente en mellora-la capacitación dos técnicos que traballan nestes centros, así como optimiza-lo uso dos recursos dispoñibles neles. Como consecuencia destas actividades, a rede mellorará a prestación de servizos de apoio ó conxunto do tecido empresarial galego, pero tamén dará unha maior visibilidade ós centros tecnolóxicos, de xeito que sexan máis coñecidos pola sociedade e que poidan ter presenza en convocatorias e proxectos de ámbito nacional e europeo.

CENTROS TECNOLÓXICOS DE GALICIA

- Centro de Innovación e Servizos (CIS Tecnoloxía e Deseño)
- Centro de Innovación e Servizos Tecnolóxicos da Madeira (CIS-Madeira)
- Instituto de Electrónica Aplicada Pedro Barrié de la Maza (IEA)
- Instituto de Cerámica
- Centro Tecnolóxico Armando Priegue (AIMEN)
- Centro Tecnolóxico Nacional de Conservación de Productos de Pesca (ANFACO-CECOPECA)
- Centro Tecnolóxico do Mar (CETMAR)
- Centro Tecnolóxico da Automoción de Galicia (CTAG)
- Centro Tecnolóxico Galego de Acuicultura (CETGA)
- Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA)

Accións previstas para a Rede Galega de Centros Tecnolóxicos

- Aula de Innovación: programa formativo no ámbito da xestión da I+D+I dirixido a técnicos dos centros tecnolóxicos.
- Ciclo de Conferencias Aula de Innovación: abertas ás empresas, directivos e técnicos para dar a coñecer temas de interese relacionadas coas áreas de actividade dos centros.
- IDIPYME: mecanismo de apoio a empresas galegas para iniciarse ou mellora-la súa xestión en innovación.
- Publicación dun Catálogo de servizos tecnolóxicos prestados polos dez centros tecnolóxicos.
- Elaboración dun Catálogo de Sevicios Comúns (bibliotecas, subscricións a revistas, software e equipamentos) para uso interno.
- Posta en marcha dunha acción de Vixilancia Tecnolóxica.
- Experiencia piloto dun centro como intermediario e comercial de oferta científica e tecnolóxica existente en Galicia nese campo nos distintos axentes do sistema
- Realización de encontros con técnicos da Comisión Europea para coñece-los programas de investigación de relevancia para os centros tecnolóxicos.
- Foro de Centros Tecnolóxicos.

Como unha das primeiras accións que se veñen desenvolvendo nos últimos meses, durante os días 23 e 24 de xullo tivo lugar no CESGA un curso de Vixilancia Tecnolóxica. O programa formativo desenvolveu, de xeito teórico e práctico, elementos para identificar, coñecer, deseñar e xestionar estratexias do proceso innovador, útiles para empresas e centros tecnolóxicos.

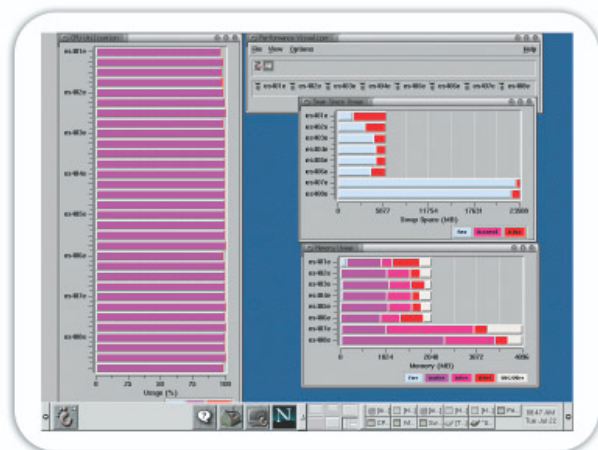


Representantes dos Centros Tecnolóxicos Galegos que participaron no curso de Vixilancia Tecnolóxica

CESGA E CESCA CREAN XUNTOS UN GRID DE SUPERCOMPUTACIÓN

Os Centros de Supercomputación de Galicia (CESGA) e de Catalunya (CESCA) veñen de crear un Grid de computación para a resolución de problemas con grande demanda de recursos de cálculo. Este superordenador virtual, plenamente operativo desde xullo deste ano, xunta a capacidade de 64 procesadores, obtendo unha potencia punta de ata 117,31 Gigaflops por segundo (Gflop/s).

O CESGA en Santiago de Compostela e o CESCA en Barcelona conseguiron xuntar con éxito a potencia dos superordenadores de maior capacidade de cálculo que xestionan para dar solución a grupos de investigación que requiren acceso a inxentes volumes de datos e moi altas necesidades de computación. Este sistema de interconexión de máquinas vai permitir ós usuarios de ámbolos dous centros abordar problemas de grande envergadura.



A imaxe mostra o uso de CPU e de memoria nun momento de traballo da aplicación.



Carlos Fernández, técnico do CESGA, e José Antonio Becerra, investigador da UDC, seguen a evolución do traballo de simulación

moito máis amigable e facilitará ós nosos científicos avanzar nas súas investigacións, independentemente de onde estean ubicados os recursos que necesitan".

Ámbolos dous superordenadores, un situado en Santiago de Compostela e outro en Barcelona, traballaron conxuntamente e a pleno rendemento durante 9 horas en tarefas relacionadas co "Deseño Automático de Controladores para Robots Autónomos". Este problema, de gran custo computacional, está sendo abordado polo Grupo de Sistemas Autónomos (GSA) da Universidade da Coruña, dirixido por Richard Duro Fernández, para o que se desenvolveu a aplicación SEVEN, utilizada nesta experiencia.

Un GRID que se realiza gracias ás redes de banda ancha para científicos que conectan ós dous centros

A operatividade deste Grid é posible, en boa medida, gracias ás redes de banda ancha que interconectan ós dous centros, a Anella Científica de Catalunya, a Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia e a rede estatal RedIRIS. Contar con estas redes permitiu conecta-las dúas máquinas a través de liñas con anchos de banda de 2,5 gigabits por segundo (Gbps).

Na realización do Grid de cómputo CESCA-CESGA, os centros de supercomputación contaron tamén co apoio de RedIRIS e HP Europa.

Outros proxectos GRID nos que participa o CESGA

- **IRISGRID:** Proxecto no que numerosas institucións científicas española se unen para o desenvolvemento dunha infraestrutura GRID en España.
- **CROSSGRID:** Desenvolvemento dun contorno GRID para aplicacións interactivas en diversos países de Europa.
- **GALIGRID:** Estudio e implementación dunha plataforma de computación baseada en tecnoloxías GRID.
- **ProducciónGRID:** Xestión da produción e uso de recursos nun contorno GRID aplicable ó audiovisual galego.

Tralas probas realizadas ó longo de varias semanas, o pasado 22 de xullo levouse a cabo a primeira experiencia de interconexión das máquinas para a resolución dun problema de cálculo real. Para a realización desta experiencia de produción uníronse as capacidades dos servidores de altas prestacións Alpha Server HPC320 da casa Hewlet Packard. Cada un destes servidores conta con 32 procesadores. A potencia punta combinada obtida coa creación deste Grid é de 117,31 Gflop/s, ou o que é o mesmo, a capacidade de executar ata un máximo de 117.310 millóns de operacións de coma flotante por segundo. A potencia de cálculo de ámbolos dous sistemas permitiu terminar en 9 horas unha simulación que, utilizando un servidor departamental, tardaría tódalas horas de 1 mes, traballando ininterrompidamente. Para completa-lo cálculo empregáronse máis de 64 gigabytes (GB) de memoria e foron intercambiados 8 GB de datos entre os dous centros, a través da nova rede de investigación estatal RedIRIS (o equivalente a 2 DVDs completos).

"A colaboración entre ámbolos dous Centros estreitouse nos últimos anos", explica o director do CESCA, Miquel Huguet, "xa no 2000 firmamos un acordo para facilita-lo acceso dos nosos respectivos investigadores ós recursos de ámbolos dous Centros." O director do CESGA, Javier García Tobío, engade que "mediante a tecnoloxía Grid, o uso compartido de recursos é

A SIMULACIÓN, ÚTIL FERRAMENTA PARA O ESTUDIO DAS REACCIÓNS QUÍMICAS

Explicar e Comprender Teóricamente a Reactividade Química. Síntese Abiótica de alfa-hidroxiácidos

Luis F. Rodríguez Vázquez- luisfrv@mail2.udc.es, fclslqfrv@mundo-r.com
Rede Galega de Bioinformática.

A modelización teórica das reaccións químicas, gracias ás ferramentas informáticas actualmente dispoñibles, constitúe unha importante aproximación cara á explicación e comprensión dos mecanismos de reacción, que usualmente se elaboran a partir dos datos obtidos a través dos estudos experimentais da cinética de reacción. Ás veces, os resultados experimentais resultan ser compatibles con diferentes mecanismos de reacción e, nestes casos, a modelización teórica permite a elección do mecanismo que mellor xustifica o observado na experimentación.

Un modelo teórico dunha reacción química consiste, basicamente, no estudio topolóxico da función matemática que expresa a enerxía baseada nas coordenadas internas (lonxitudes de enlace, ángulos de enlace, ángulos diedros) que definen a posición relativa dos núcleos dos átomos que constitúen o sistema molecular obxecto de estudio. Esta función recibe o nome de Superficie de Enerxía Potencial (SEP). En xeral, para moléculas poliatómicas non liñais, é unha función definida nun espazo (3N-6)-dimensional (sendo N o número de átomos do sistema molecular).

Nunha SEP atopamos dous tipos de puntos estacionarios dos que podemos obter información: os mínimos, que representan configuracións estables de mínima enerxía do sistema molecular,

tales como Complexos de Interacción de Reactivos (CIR), Complexos de Interacción de Produtos (CIP), Especies Intermediarias da Reacción (EIR); e os "puntos de sela" de primeira orde, caracterizados matematicamente por ser mínimos en tódalas direccións do espazo excepto nunha, na que son máximos. Estes puntos representan configuracións do sistema molecular que corresponden ás Estructuras de Transición (ET), que son os menores dos máximos de Enerxía de tódalas liñas posibles (definidas na SEP) que conectan dous puntos mínimos da mesma.

Unha vez caracterizados os puntos estacionarios da SEP, pódense calcular as diferenzas enerxéticas entre eles para obter a enerxía de reacción ($E_R = E[CIP] - E[CIR]$), a partir da cal se pode calcular a constante de equilibrio da reacción, ou a enerxía de activación ($E_a = E[TS] - E[CIR]$), que nos permite o cálculo da constante cinética da reacción. Estas dúas magnitudes, obtidas teóricamente, son as que se comparan coas obtidas experimentalmente para a elección do mecanismo de reacción.

Estudios astroquímicos parecen confirmar que a composición química dos xeos cometarios inclúe especies químicas como H₂O, NH₃, CH₃OH, CO₂, e CO. Asemade, Muñoz Caro, do observatorio de Leiden, comprobou experimentalmente que nunha mostra de xeo amorfo cunha composición química coma a devandita, sometida a irradiación ultravioleta en condicións de baixa temperatura (12 K) e ultravacío (10⁻¹¹ atm) (condicións similares ás da superficie dun cometa na súa aproximación á estrela á que orbita) aparecen mesturas racémicas de aminoácidos e outros ácidos orgánicos como o ácido glicólico.

Ata o momento actual, os modelos teóricos de reaccións químicas de síntese de ácidos carboxílicos elaborados consideran, en conxunto, as reaccións químicas nas que interveñen (coma reactivos) auga, amoníaco e dióxido de carbono nuns casos, e formaldehído e cianuro de hidróxeno noutros.

O modelo que estou a presentar é o primeiro modelo teórico no que se considera o monóxido de carbono como reactivo na síntese abiótica dun alfa-hidroxiácido sen outros reactivos que os atopados nos estudos astroquímicos nos xeos cometarios, tal e como se pode extraer da bibliografía.

No estudo teórico da síntese do ácido glicólico consideráronse tres aspectos:

• A reacción entre unha molécula de auga, unha molécula de monóxido de carbono e unha molécula de formaldehído (sábese que esta substancia se produce pola irradiación ultravioleta do metanol e que, polo tanto, é un constituinte dos xeos cometarios), reacción que chamaremos "sen catálise" (sc).

• A reacción na que participan máis dunha molécula de auga, "reacción con catálise asistida polo disolvente" (cad).

• E a reacción catalizada por fluoruro de hidróxeno, que se elixiu por ser unha molécula representativa dun ácido mineral de estrutura pequena que facilita os cálculos para estudiala "catálise ácida" (ca).

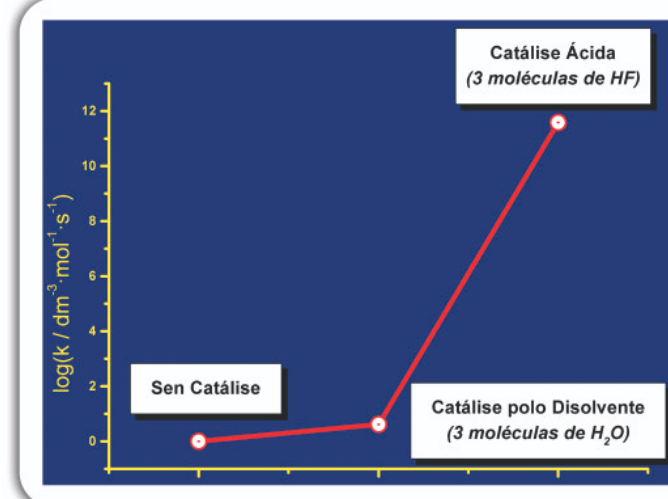


Figura 3. Valores teóricos da constante cinética relativos ós valores obtidos para a reacción sen catálise, para a reacción de síntese do ácido glicólico, obtidos co modelo teórico B3LYP e o conxunto de funcións de base 6-31+G(d,p).

Con estes valores, e facendo uso da ecuación de Eyring

$$k = \left(\frac{k_B T}{h}\right) (C^0)^{\Delta n^\ddagger} \exp\left[\frac{-\Delta G^{\ddagger,0}}{RT}\right]$$

obtéñense os valores das constantes de velocidade teóricas dos que se obtiveron os valores, 2,4·10⁻¹⁴ dm³mol⁻¹s⁻¹, 9,91·10⁻¹⁴ dm³mol⁻¹s⁻¹, e 0,00918 dm³mol⁻¹s⁻¹, para as reaccións sen catálise, con catálise asistida polo disolvente e catálise ácida respectivamente (Figura 3).

Os resultados obtidos aportan conclusións interesantes para o estudo:

- De ter optimizado con éxito as estruturas xeométricas de tódolos puntos estacionarios da SEP, a reacción é posible segundo os mecanismos propostos, o que suporía un posible modelo teórico para as reaccións de síntese de ácidos α-hidroxicarboxílicos en medios cometarios e interestelares.

- A reacción é máis rápida (ten unha máis grande constante de velocidade) cando se considera a participación de moléculas de disolvente, e é unha reacción especialmente rápida cando se atopan presentes moléculas de ácido actuando como catalizador. (Neste último caso a velocidade de reacción incrementase nunha orde de 10¹⁰ con respecto á velocidade da reacción sen catalizar.

A modelización realízase no marco da Teoría dos Funcionais da Densidade Electrónica, nun espazo de Hilbert definido polo conxunto de funcións gaussianas de base 6-31+G(d,p), con algoritmos implementados no programa Gaussian98.

A optimización xeométrica feita co algoritmo de Berny permite caracterizar os puntos estacionarios da SEP correspondentes ós CIR, TS, e CIP, das tres reaccións descritas con anterioridade (Figura 1).

Coas enerxías dos diferentes puntos estacionarios, e tomando como referencia da enerxía a dos reactivos separados, é dicir, os reactivos sen interacción, elabórase a representación gráfica do "perfil da reacción", o que nos permite calculalo camiño de reacción, isto é, a variación de enerxía que se produce ó longo da reacción nos tres casos que estamos a considerar: reacción sen catálise, reacción con catálise asistida polo disolvente e reacción con catálise ácida (Figura 2).

As diferenzas de enerxía libre de Gibbs, obtidas a partir da análise de frecuencias das estruturas optimizadas do sistema molecular, que nos reporta os valores estándar das magnitudes termodinámicas (Enerxía Interna, Entalpía, e Enerxía Libre de Gibbs), entre as estruturas de transición (ET) e os complexos de interacción de reactivos (CIR) permítenos obter os valores da Enerxía Libre Estándar de Activación (ΔG^{0,‡}) para cada unha das reaccións estudadas.

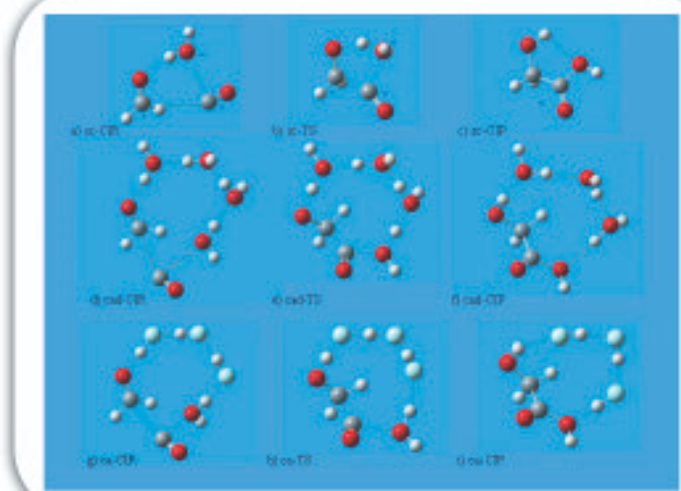


Figura 1. Estructuras xeométricas dos puntos estacionarios da Hipersuperficie de Enerxía Potencial da reacción de síntese do ácido glicólico optimizadas co modelo teórico baseado na Teoría dos Funcionais da Densidade Electrónica (DFT) B3LYP e a base do espazo de Hilbert formada polo conxunto de funcións gaussianas 6-31+G(d,p).

Sc=sen catálise, cad=catálise asistida polo disolvente, ca=catálise ácida, CIR=Complexo de Interacción de Reactivos, TS=Estructura de Transición, CIP=Complexo de Interacción de Produtos.

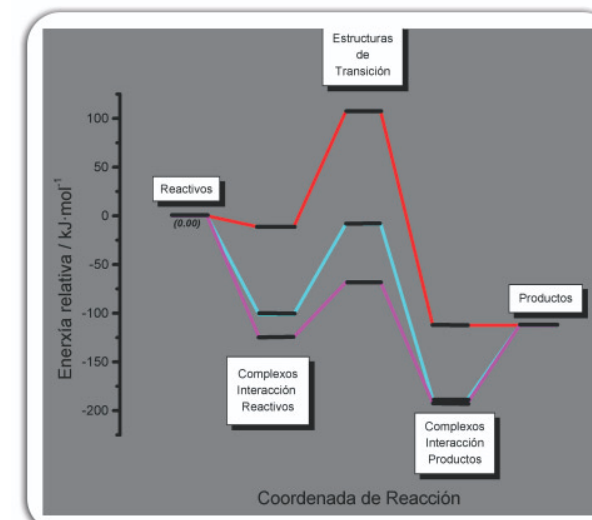


Figura 2. Perfís de Reacción expresados en termos de enerxía relativa ós reactivos, amosando os perfís nos casos de reacción sen catálise (liña vermella), con catálise asistida polo disolvente (liña azul), e con catálise ácida (liña rosa); elaborados con datos obtidos co modelo teórico baseado na Teoría dos Funcionais da Densidade Electrónica, B3LYP, e utilizando como base do espazo de Hilbert o conxunto de funcións gaussianas 6-31+G(d,p).

INNOVACIÓN

A EUROREXIÓN APOSTA POLA COLABORACIÓN EN MATERIA DE I+D+I

A Unión Europea leva varios anos impulsando políticas de integración entre os distintos países que a forman. O Programa INTERREG 2000-2006 trata, neste senso, de reforza-la cohesión económica e social da comunidade europea, fomentando a cooperación transfronteiriza, transnacional e interrexional e o desenvolvemento equilibrado do seu territorio.

Precisamente, enmarcadas dentro deste contexto europeo de integración e colaboración entre territorios, empresas, institucións e universidades de Galicia e o Norte de Portugal

veñen intensificando as súas relacións nos últimos anos. A idea xeral das iniciativas que xorden ó amparo de INTERREG é que as fronteiras nacionais non deben ser un obstáculo para o futuro, senón un lugar de encontro común para rexións ubicadas nunha mesma área xeográfica.

Froito do traballo conxunto son proxectos como os que se describen a continuación: MRI e TORGA.net, propostas que están a crea-las bases da colaboración entrámbalas dúas fronteiras en materia de I+D+i.

PROXECTO MRI

O proxecto MRI xorde da iniciativa dun grupo de Centros e Institucións Tecnolóxicas de Galicia e do norte de Portugal que se uniron para deseñar estratexias de actuación en materia de innovación. O obxectivo xeral desta acción é promover-la innovación e a iniciativa empresarial a través de diferentes estudos e accións divulgativas e formativas, conseguindo con isto unha maior competitividade das empresas e consecuentemente unha maior oferta de emprego.

A franxa sur de Galicia e o Norte de Portugal conforman unha rexión caracterizada, en xeral, por un poboamento disperso, con forza da economía agraria, pero tamén cunha industria cada vez máis destacada, fundamentalmente asentada sobre o eixe estratéxico de Vigo-Porriño-Oporto. O avance destas industrias pasa cada vez máis polo investimento crecente en infraestruturas de investigación, desenvolvemento e innovación.

O proxecto MRI, que comenzo a desenvolverse ó longo deste ano e que durará ata o 2004, vai crear unha rede de vixilancia tecnolóxica e de mercados (REVITEC) que analizará o estado da euro-rexión no que respecta á innovación en produtos e procesos e a adaptación destes á situación do mercado. REVITEC apoiárase nunha plataforma web que xestionará todo o intercambio de información vinculada á innovación.

Paralelamente vanse celebrar distintos seminarios de difusión, formación e promoción da rede, dirixidos a empresarios, xerentes e técnicos, así como accións xerais de sensibilización da sociedade para unha cultura da innovación, que prestarán especial atención á comunidade máis nova.

A proposta MRI quere fomentar-lo investimento das empresas na innovación como valor engadido e punto de apoio para a mellora da competitividade. Para isto vai busca-la cohesión de centros, institucións e laboratorios tecnolóxicos, favorecendo o traballo en solucións conxuntas e deseñando propostas de optimización do uso dos recursos en innovación.

No caso das empresas, ademais da potenciación da rede de vixilancia e da realización de seminarios específicos, tamén está prevista a creación dun espazo web de discusión e intercambio de experiencias ou estratexias de reforzo da innovación e das potencialidades do Deseño Industrial.

O CESGA está presente no proxecto a través do Centro de Competencias en Comercio Electrónico de Galicia.

O proxecto MRI vai desenvolverse ó longo dos próximos anos, tratando de configurar unha eurorrexión en constante evolución, cohesionada tecnolóxicamente e que toma a innovación como motor de avance. A realización das distintas actividades terá consecuencias evidentes para a industria da zona, pero tamén para as persoas, xa que fomentará perfís de especialización en materia tecnolóxica que redundarán nunha maior capacidade de emprego.

PROXECTO TORGA.net

TORGA.net (Trans pORtugal GALicia.network) é un proxecto que pretende conecta-los contornos científico-tecnolóxicos de Galicia e norte de Portugal, solucionando un dos problemas que freaban a colaboración real entre o sector de I+D na eurorrexión: a carencia de infraestruturas de comunicacións avanzadas.

A iniciativa xurde da Universidade de Vigo e da Universidade de Minho á que incorporan dous centros tecnolóxicos: o Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) e o Centro de Computação Gráfica (CCG). Xuntos están a estudia-las necesidades dos colectivos de I+D+I (Universidades, Centros de Investigación,..) da área transfronteiriza, a fin de determina-las especificacións técnicas e a planificación xeográfica que precisa a futura rede de banda ancha que se espera comence a funcionar en probas no terceiro trimestre do 2004.

O mapa xeral das infraestruturas estará conformado como unha estrela, unindo ós campus de Vigo, Pontevedra, Ourense, Braga, Guimarães, e ó CESGA en Santiago de Compostela. Estas conexións permiten, ademais, que a futura rede non só una as comunidades universitarias galegas e portuguesas, senón tamén os investigadores vinculados a Centros de I+D da Xunta de Galicia e do CSIC, Institutos, Hospitais, Centros Tecnolóxicos e Empresas, entre outros. En total, está previsto que esta nova rede conecte, aproximadamente a uns 8000 ordenadores de Galicia e o Norte de Portugal.

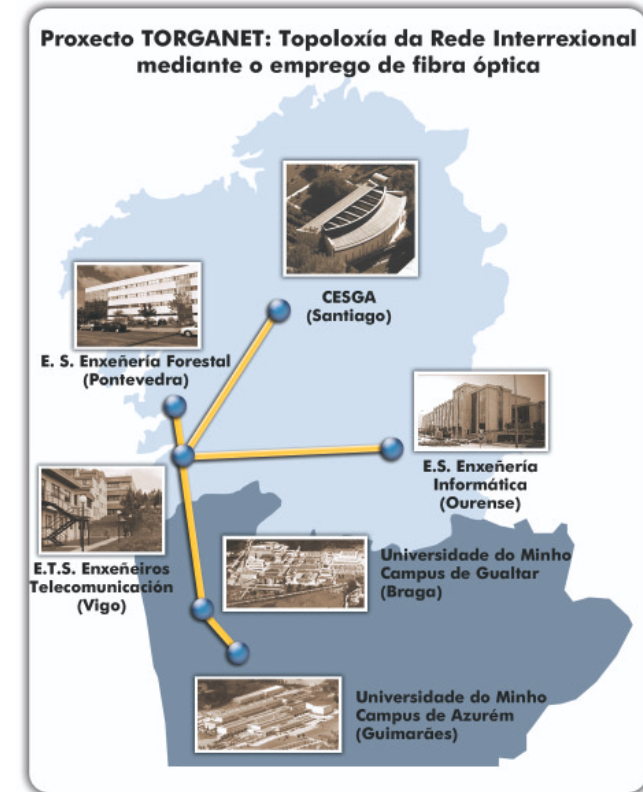
Paralelamente á construción da rede tamén se van a crear 7 salas Acces Grid, que realizarán 300 sesións ó longo do proxecto e que serán o lugar idóneo para a realización de cursos, encontros ou videoconferencias de alta calidade entre os usuarios da propia rede ou de outras redes de investigación.

A rede abre as posibilidades da investigación, do teleensino e dos encontros entre sectores

Unha vez finalizada a fase de implantación física da rede, as institucións participantes no proxecto van desenvolver distintas actividades piloto de e-learning na universidade coma un xeito máis de aproxima-las utilidades das novas infraestruturas ó mundo académico. Desde os distintos puntos de acceso á rede, uns 750 alumnos participarán en cursos de especialización e postgrao vinculados ó proceso de moldes/polímeros, ó ensino de música e ó ensino e prácticas da informática gráfica, entre outros.

A creación da rede de alta capacidade entre Galicia e o Norte de Portugal vai favorecer-lo uso de Internet como un medio útil e eficaz de intercambio de comunicacións entre os distintos sectores vinculados á investigación, que impulsará a colaboración máis estreita entre as dúas rexións, pero tamén vai abrir novas posibilidades de intercambio con outros centros do mundo xa que a nova rede estará conectada, a través do CESGA á rede de ciencia e tecnoloxía de España, RedIRIS, a rede que conecta ós centros de investigación de España e do resto de Europa e América, tendo a parte portuguesa conexión á Rede de Ciencia e Tecnoloxía do seu país.

A nova infraestrutura de comunicación vai beneficiar ó eido académico, xa que permitirá realizar cursos de postgrao e seminarios de xeito simultáneo nas dúas rexións, favorecendo asimesmo ás teses ou proxectos de investigación que poderán



contar con investigadores e titores dos dous países. Tamén vai ser moi útil no seguimento de alumnos desprazados

Os centros, hospitais e empresas da eurorrexión conectados á nova rede tamén se van ver beneficiados. As comunicacións permiten intercambiar eficazmente informacións, promover encontros entre investigadores e empresas, favorece-las colaboracións entre sectores semellantes e impulsa-la mobilidade de traballadores, investigadores e empresarios. Estímase que as actividades de I+D compartidas afectarán a máis de 320 investigadores, e os encontros sectoriais e de investigadores e empresas favorecerán a 150 empresas e a 1000 investigadores da eurorrexión.

PROXECTO TORGA.net

Nome do Proxecto: Trans Portugal-Galicia Network, TORGA.net

Proxecto Tipo: Programa Interreg IIIA.

Contido do Proxecto: Implantación de infraestruturas de comunicacións para I+D+I

Duración: 2003 - 2006

Orzamento Total: 4.128.838,67 Eu

Financiación FEDER: 3.096.629 Eu

Institucións Participantes:

- Universidade de Vigo
- Universidade do Minho
- Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA)
- Centro de Computação Gráfica (CCG)

O CENTRO DE COMPETENCIAS, MODELO DE "BOAS PRÁCTICAS"

O Centro de Competencias en Comercio Electrónico de Galicia obtivo recompensa ó traballo que leva desenvolvendo ó longo dos dous últimos anos ó ser escollido como modelo de "Boas Prácticas" (Best Practices) para o seminario internacional "Accións rexionais de innovación - Diesis", que tivo lugar o pasado setembro en Cerdeña (Italia).

A futura creación dun centro de competencias en comercio electrónico en Cerdeña tomará como exemplo a estrutura organizativa e o traballo realizado polo centro galego desde a súa creación, en marzo de 2002. Con este recoñecemento, o Centro de Competencias en Comercio Electrónico, revélase como referente ineludible para outras rexións de Europa que queren incentivar o uso de Internet como canle de negocio entre as súas PEMEs.

Un centro que naceu dentro do proxecto europeo e-MINDER

O Centro de Competencias en Comercio Electrónico de Galicia naceu como unha aplicación práctica de e-MINDER, un proxecto europeo iniciado no 2001, que tiña como obxectivo crear unha rede de centros de comercio electrónico en Europa. Ademais de Galicia, tamén participaron nesta iniciativa a rexión de Pomerania en Polonia e a illa de Chipre. Meses máis tarde, en marzo do 2002, daba comenzo o Centro de Competencias, xestionado polo CESGA e apoiado pola Dirección Xeral de I+D da Consellería de Innovación, Industria e Comercio.



Tal e como se reflectiu na presentación de resultados celebrada en Bruxelas no mes de xullo, o proxecto e-MINDER elaborou diversos estudos e manuais vinculados ó comercio electrónico, obtidos a través de investigacións de campo e enquisas, entre os que cabe destacar o Informe Rexional sobre TIC e Comercio Electrónico. Numerosas rexións europeas interesadas en promover esta canle de negocio entre as súas pequenas e medianas empresas solicitaron informacións ó centro de Galicia. Precisamente para isto se está a crear un Manual para a Creación de Centros de Comercio Electrónico.

As tres rexións participantes deron gran importancia á divulgación e á promoción do comercio electrónico. Isto materializouse na celebración de cursos e conferencias nas que se formaron a máis de 2.600 empresarios; ademais de manter páxinas web de carácter divulgativo (www.e-negociogalicia.com) e de publicar revistas nas que se xeraba información útil e actual sobre o comercio electrónico.

O Centro de Competencias en Comercio Electrónico de Galicia desenvolveu tamén servizos de asesoramento e soporte ás PEMEs no tocante ás novas tecnoloxías da información e a comunicación e ó comercio-e. Desde a súa creación ata xullo do 2003, este centro prestou servizo a máis de 350 empresas, o que da idea do forte interese que existe en Galicia polas novas tecnoloxías e por este novo modelo de negocio.



A nivel de cooperación, o centro participou activamente, formando parte da rede de centros e-MINDER, da European e-Business Support Network (eBSN) e da Rede Internacional para as PEMEs (INSME).

O pasado setembro finalizaba o Proxecto Europeo e-MINDER. As actividades desenvolvidas nas áreas de formación, soporte, observatorio, comunicación e cooperación serviron para que pequenos e medianos empresarios galegos coñeceran un novo tipo de comercio que está a crecer fortemente no mundo. A grande demanda do servizo de asesoramento demostraron ademais que en Galicia existe xa interese por desenvolver estas novas fórmulas empresariais.

PROXECTO e-MINDER

Nome do Proxecto: e-MINDER
Proxecto Tipo: Information Society Technologies
 V Programa Marco da Unión Europea
Contido do Proxecto: Fomento e axuda ó desenvolvemento do comercio electrónico e das novas tecnoloxías nas rexións periféricas e menos desenvolvidas de Europa
Duración: setembro 2001 - setembro 2003
Orzamento Total: 4.345.318 Eu
Investimento en Galicia: 1.670.814 Eu
Institucións Participantes:
Coordinador: SchlumbergerSema (España)
Galicia
 Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA)
 Universidade de Santiago de Compostela (USC)
 Universidade da Coruña (UDC)
Pomerania (Polonia)
 Presidencia da Pomerania
 Computer Center Regional
 Data Bank
Chipre
 Virtual IT
 Cyprus Telecommunication Authority (CYTA)
 UCY (University of Cyprus)
Enlaces e-MINDER
www.eminderproject.com
www.e-minder.com.cy (Chipre)
www.eminder.pl (Polonia)
www.e-negociogalicia.com (Galicia)

I+D APOIA Ó CESGA E Á UDC NO DESEÑO DUN SISTEMA DE ALMACENAMENTO MASIVO

A necesidade dun sistema de almacenamento masivo de datos de baixo custo para pequenas e medianas empresas, así como para laboratorios de investigación, está moi presente no mercado tecnolóxico actual. O Centro de Supercomputación de Galicia e a Universidade de A Coruña traballan no proxecto CheapTB (Cheap TeraByte), co que se pretende deseñar un sistema deste tipo cun custo de fabricación e mantemento reducido fronte ós sistemas clásicos como, por exemplo, o almacenamento baseado en cintas. O proxecto está sendo apoiado economicamente pola Dirección Xeral de I+D da Consellería de Innovación, Industria e Comercio.

Tradicionalmente, o almacenamento masivo de datos vense facendo con dispositivos coma os sistemas baseados en cintas. Na actualidade, e debido á demanda e á velocidade da evolución da tecnoloxía, é necesario buscar novas fórmulas que permitan almacenar grandes cantidades de información optimizando os custos dos sistemas clásicos de almacenamento. Nesta liña de traballo enmárcase o proxecto de investigación CheapTB, promovido polo CESGA, que durante o pasado ano xa ampliou o seu sistema de almacenamento de datos para usuarios ata os 54.500 Xigabytes. Esta ampliación combínase co labor de investigación que está a levar a cabo o centro para xerar innovacións que redunden tamén na eficacia dos servizos que lles presta a outros centros e empresas. De aí o proxecto de deseño dun sistema de almacenamento masivo de datos en rede de baixo custo.

ALMACENAMENTO MASIVO

"No mercado existen moitas solucións para o almacenamento de grandes cantidades de datos. Normalmente este tipo de solucións están deseñadas como sistemas de propósito xeral (para almacenar calquera tipo de información) o que fai que teñan un custo moi elevado. Sen embargo, moitas veces as necesidades existentes nas empresas e nos centros de investigación pódense abordar dun modo máis simple, o que, a un tempo, permite abarata-los custos e aumenta-las prestacións dos sistemas", asegura José Ignacio López, subdirector técnico do CESGA.

Os dispositivos utilizados para almacena-la información son discos magnéticos, cintas magnéticas ou unha combinación de ambos. Os sistemas baseados en cintas teñen como inconveniente o retraso na localización da información; nos sistemas de discos o principal problema é o custo de mantemento, que depende do consumo eléctrico e a disipación térmica.

A través do Cheap TB, o grupo de investigación está a desenvolver un sistema de almacenamento de datos masivo conectable á rede que, no seu prototipo, poderá acumular aproximadamente uns 6 Terabytes (TB) de información de ficheiros de gran tamaño (películas, datos, copias de seguridade...) accesibles desde calquer ordenador conectado a Internet. Ademais, o novo sistema reducirá o custo de mantemento empregando tecnoloxías de baixo custo e baseándose no sistema operativo Linux.

A solución estará enfocada ó sector empresarial e de investigación e poderá crecer en capacidade facilmente. "Á relación entre cantidade de datos e custo económico deberíamos engadir un terceiro factor que entra en xogo: a velocidade de acceso. O tempo de latencia (tempo de espera) no CheapTB será moi curto, da orde de segundos, similar polo tanto ós tempos dun sistema xeráquico de almacenamento baseado en cintas.

O software de control permite ofrecerlles ós clientes unha visión uniforme de múltiples volumes distribuídos en diversos nodos computacionais configurados a modo de cluster ou dispersos xeograficamente entre distintas localizacións. Este software toma decisións respecto ó apagado e encendido de compoñentes, á reorganización de información para explotar patróns de acceso ós datos e á xestión de numerosas peticións concurrentes", indica Víctor Gulías, membro do LFCIA-UDC.



Técnicos do CESGA participantes no Proxecto flanqueando o prototipo do Cheap TB: (de esq. a dta.) Carlos Fernández, Javier Fontán e Jesus Arribi.

Os investigadores están a traballar nun prototipo de servidor con catro nodos de almacenamento, así como no software de control e nos frontais de acceso. Paralelamente pretenden defini-las especificacións da plataforma de almacenamento en función dos requerimentos actuais das aplicacións científicas e industriais e despois adaptarán varias aplicacións para proba-los sistema nun contorno de traballo real, realizando probas de rendemento e comportamento. Na fase final do proxecto levarase a cabo un estudo comparativo de custos de funcionamento con outros sistemas de almacenamento comerciais.

INNOVACIÓN TECNOLÓXICA

A innovación deste proxecto atópase, por unha banda, na parte económica, non só no que se refire á compra do hardware (discos duros IDE en lugar de cintas), senon tamén na relación entre a cantidade de datos que se vai poder almacenar e o custo global das tecnoloxías empregadas.

Pola outra banda, a innovación tamén aparece reflectida na utilización de software de desenvolvemento propio, xa que estes ofrecen unha solución moi competitiva fronte a outras solucións comerciais e cunha utilidade inmediata para os novos sistemas de e-business, así como para as PEMEs que precisen do almacenamento de ficheiros grandes de lectura secuencial, como distribuidoras de vídeo baixo demanda (radios, televisións, empresas de teleformación) ou produtoras cinematográficas, entre outras. Tamén poderá ser empregado en empresas que dispoñan de oficinas dispersas xeograficamente, consolidando a súa información e facendo que esta dispoñible en todo momento en calquera parte.

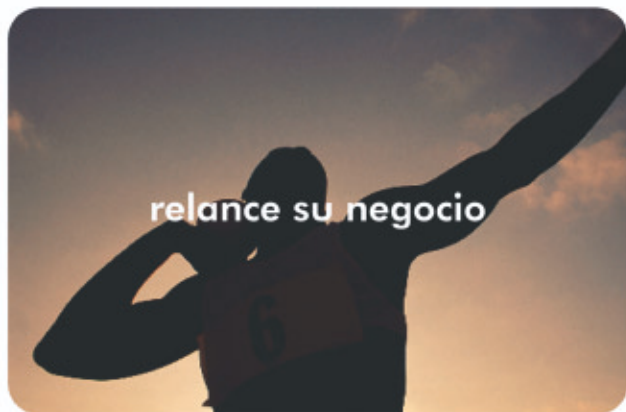
BUGALICIA, COOPERACIÓN INTERBIBLIOTECARIA

APOIO CONTINUO ÓS SERVICIOS BIBLIOTECARIOS DAS TRES UNIVERSIDADES GALEGAS

BASES DE DATOS • E-REVISTAS • E-BOOKS



WWW.BUGALICIA.ORG



relance su negocio

actualizaciones
de sistemas
HP AlphaServer

Para usuarios de Tru64
UNIX/Open VMS

Para obtener más información

902 10 14 14

http://www.hp.es/promociones/alpha_remove



invent

PRIMEPOWER | Lider en rendimiento

PRIMEPOWER 2500
el nuevo superordenador de Fujitsu

16.384 procesadores SPARC64

88.5 TERAFLIPS

Hasta 128 nodos SMP de 128
procesadores SPARC64™ V con
1.35 GHz y 5.4 GFLOPS,
funcionando con SOLARIS™, el
sistema operativo líder en el
mercado

Primepower 2500

es la evolución de Fujitsu en el campo de
supercomputación, proporcionando a sus usuarios
el entorno de trabajo más avanzado.

es.fujitsu.com



FUJITSU

THE POSSIBILITIES ARE INFINITE

FUJITSU ESPAÑA, S.A.