

**MEMORIA TÉCNICA EJERCICIO 2006
FUNDACIÓN CENTRO TECNOLÓGICO
DE SUPERCOMPUTACIÓN
DE GALICIA**

Marzo 2006

ÍNDICE

- 1.- Utilización de recursos e eventos durante o ano 2006.**
 - 1.1.- Servidores de cálculo.**
 - 1.2.- Aplicacións científicas.**
 - 1.3.- Subsistema de almacenamento.**
 - 1.4.- Comunicaciones.**
 - 1.4.1.- Actividades máis significativas do ano.**
 - 1.4.2.- Tráfico transferido.**
- 2.- Contratos e Proxectos.**
 - 2.1.- Contratos e Proxectos facturados e subvencionados.**
 - 2.2.- Descripción de Proxectos.**
- 3.- Producción Científica.**
 - 3.1.- Producción científica de usuarios de computación do CESGA**
 - 3.2.- Producción científica do CESGA.**

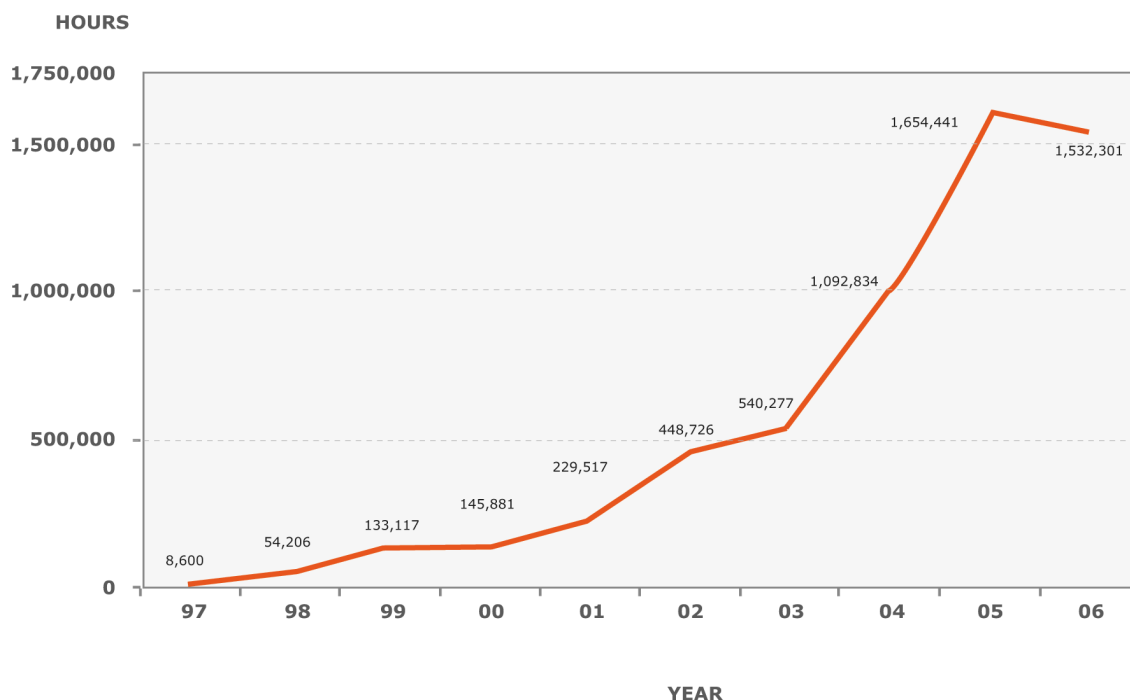
1.1.- Servidores de cálculo

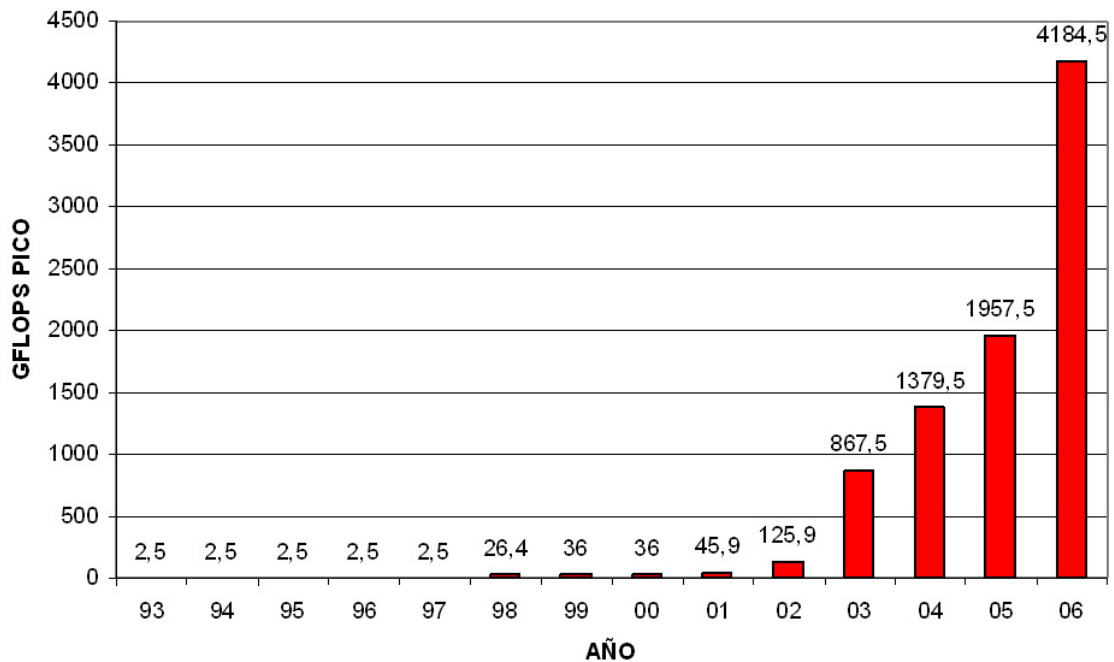
A Fundación CESGA conta con diferentes arquitecturas de sistemas de cálculo de altas prestacións dispoñibles para a comunidade de usuarios. Dependendo dos algoritmos de cálculo, o usuario opta pola arquitectura de computación máis adecuada.

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 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, diminuíndo con iso as horas de cálculo durante o ano. A arquitectura como a do Finis Terrae, vén resolver esta carencia de memoria.
- Firma do Convenio Finis Terrae entre Xunta de Galicia, CSIC e CESGA.

Nos gráficos seguintes reflíctense os datos máis significativos correspondentes á actividade de cálculo no CESGA:





No ano 1998 o CESGA multiplica por 10 a súa capacidade de cálculo.

No ano 2002 multiplica por 2 os seus GFLOPS.

No ano 2003 multiplica por 7 os GFLOPS.

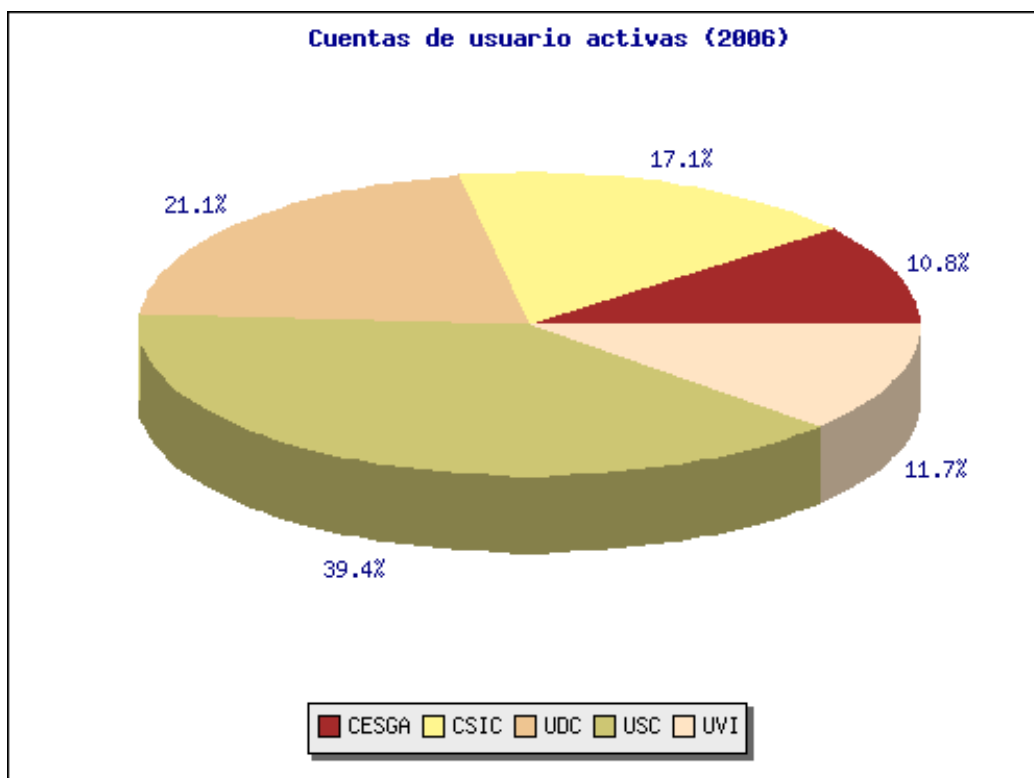
No ano 2004 pasou 1 TFLOPS de cálculo agregado.

No ano 2006 duplicanse os TFLOPS

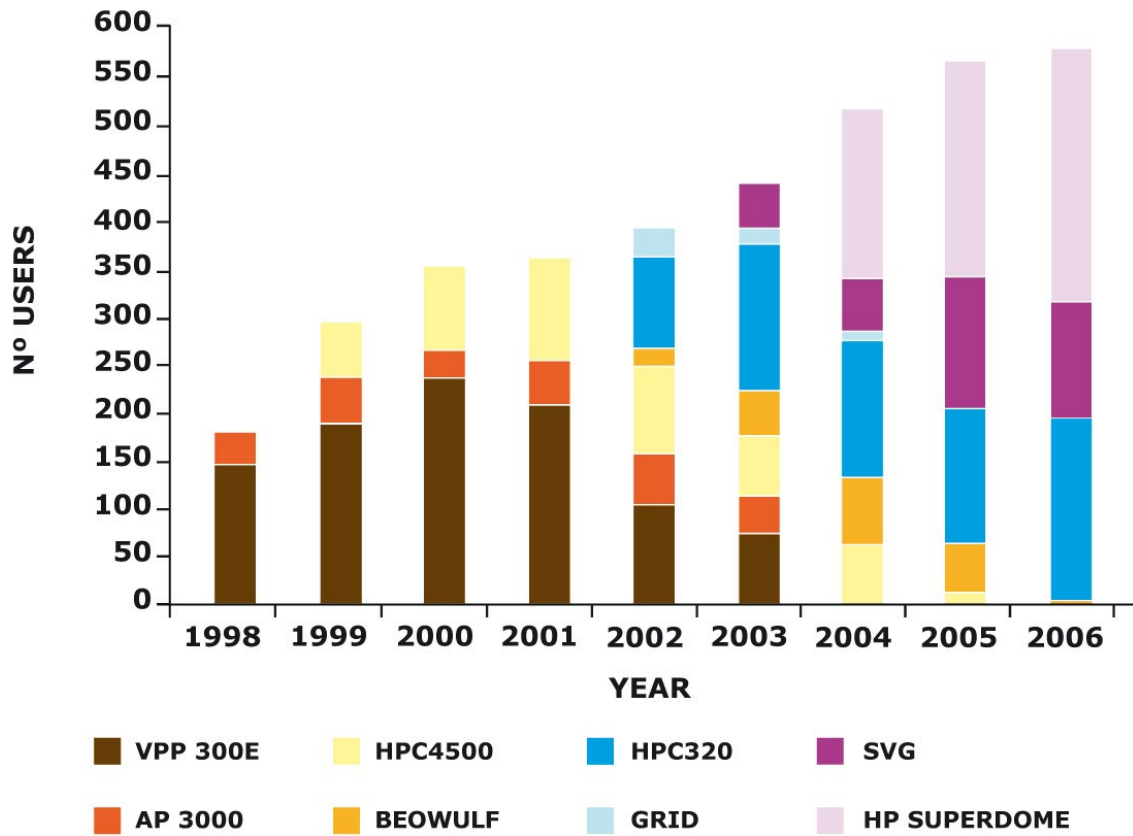
No ano 2006 o CESGA non levou a cabo novas adquisicións de equipamento de cálculo ata finais de Decembro en que se recepciónou un novo cluster de computación grid formado por 36 servidores DELL Poweredge 1955 e 1 servidor DELL Poweredge 2950 cun total de 1843 GFLOPS. Este sistema non entrou en produción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

Número de Contas Activas a diario e Ano

O sistema con maior número de contas activas (é dicir, 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 para rematar 127 do cluster SVG. En total, o número de contas activas creceu desde as 564 do ano 2005 a 572 este ano, o que supón un crecemento tan só do 2% (no ano 2005 o incremento no número de contas activas foi do 10%), fundamentalmente motivado pola saturación dos sistemas actuais.

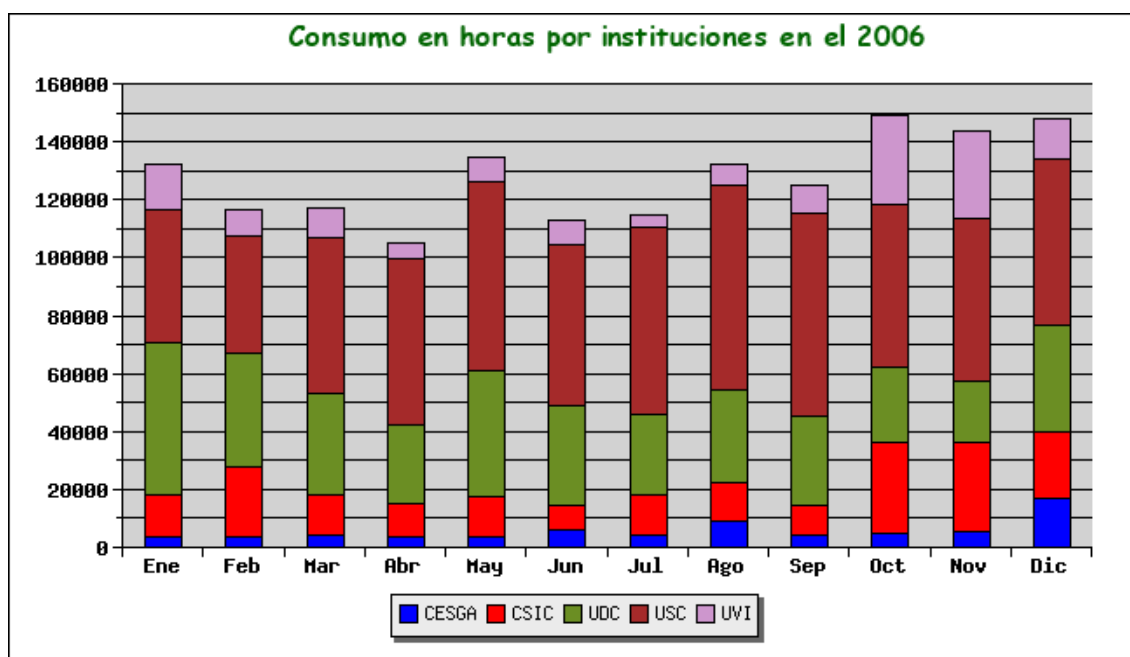


#	CESGA	CSIC	UDC	USC	UVI	Total
HPC320	17	41	35	76	20	189
SUPERDOME	21	41	54	105	35	256
SVG_DELL	22	16	32	45	12	127
Total	60	98	121	226	67	572



Evolución consumo de CPU a diario

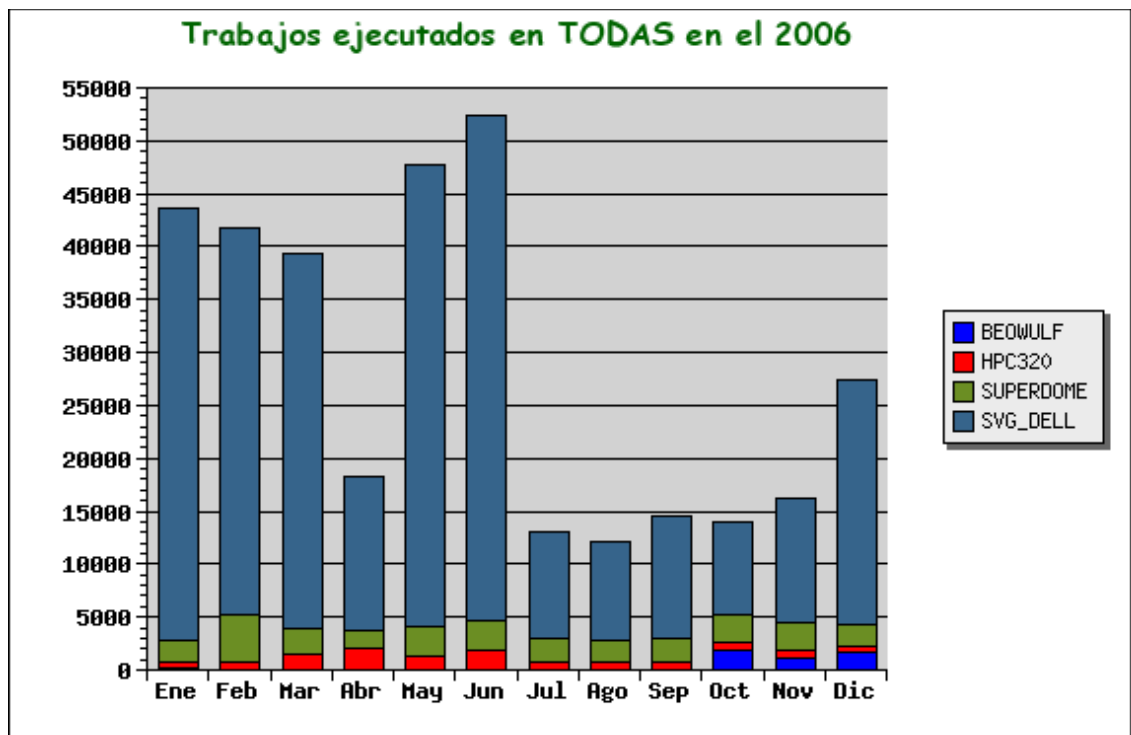
Durante o ano 2006 os servidores máis utilizados foron o cluster SVG e o servidor HP Integrity Superdome. Durante este ano non se realizou ningunha adquisición adicional (exceptuando a ampliación do cluster SVG con nodos grid pero que non se puxo en produción neste ano) mostrando todos os servidores uns niveis de ocupación próximos ao 100%. Diversas incidencias no servidor de cálculo Superdome, a priorización de traballos paralelos (cuxa eficiencia é peor que a dos secuenciais) e os requirimentos de maior cantidade de memoria, provocaron unha diminución no número de horas consumidas 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 (en torno ao 75%).



	Xan.	Feb.	Mar.	Abr.	Mai.	Xun.	Xul.	Ago.	Set.	Out.	Nov.	Dec.	Total
CESGA	3611:36	3537:06	4149:36	3870:23	3801:02	6195:21	4030:42	8854:11	3955:51	4603:42	5525:59	16880:34	69016:08
CSIC	14639:10	24147:42	13785:35	11497:47	13838:10	8431:45	14218:36	13447:00	10751:12	31879:41	30874:19	22886:28	210397:30
UDC	52570:34	39246:28	35224:48	26774:40	43111:37	34321:34	27925:36	32305:06	30322:28	25511:00	21113:32	36876:44	405304:13
USC	45897:35	40811:27	53966:21	57329:20	65712:48	55379:43	64559:54	70084:29	70411:59	56073:11	55756:57	57669:03	693652:52
UVI	15748:02	8560:29	10059:03	5645:27	8320:07	8325:22	4268:30	7782:10	9488:16	31273:15	30570:14	13889:17	153930:18
TOTAL	132466:59	116303:15	117185:25	105117:39	134783:47	112653:47	115003:21	132472:59	124929:48	149340:52	143841:03	148202:08	1532301:03

Número de trabajos ejecutados a diario

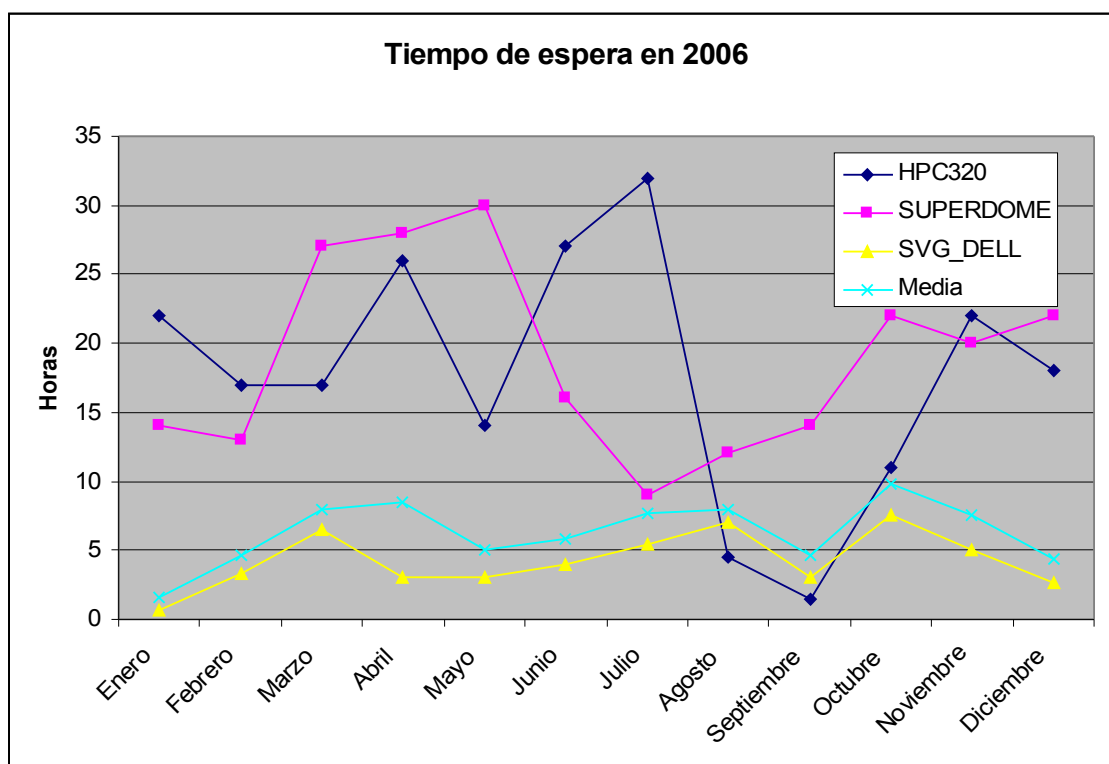
O número de traballos executados a diario representa a cantidade de simulacións que os usuarios realizaron en cada un dos servidores de cálculo. Este valor depende non só da capacidade de cálculo dispoñible senón tamén dos recursos necesarios para a execución das simulacións. Os sistemas con maior número 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.



	Xan.	Feb.	Mar.	Abr.	Mai.	Xun.	Xul.	Ago.	Set.	Out.	Nov.	Dec.	Total
BEOWULF	126	64	33	21	14	11	25	8	37	1788	1153	1626	4906
HPC320	597	774	1448	1959	1248	1931	799	824	728	737	660	622	12327
SUPERDOME	2164	4305	2367	1827	2851	2660	2199	1978	2307	2670	2586	2056	29970
SVG_DELL	40769	36571	35474	14375	43655	47778	9998	9346	11438	8797	11890	23181	293272
Total	43656	41714	39322	18182	47768	52380	13021	12156	14510	13992	16289	27485	340475

Tempo medio de espera en cola por sistemas

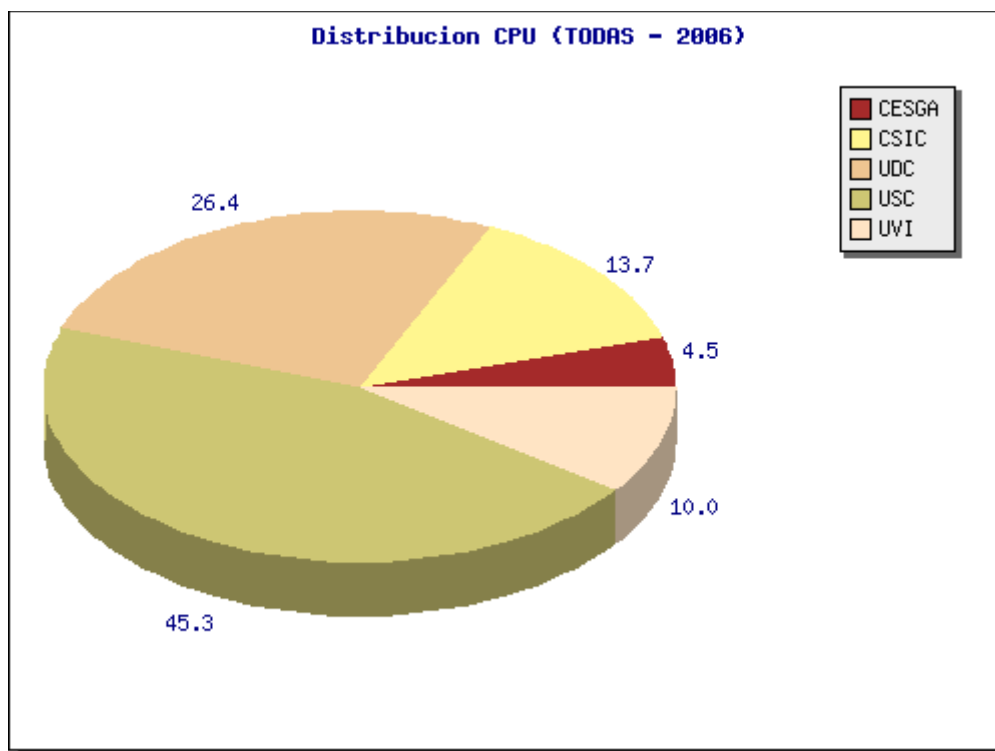
Os tempos medios de espera en cola representan o tempo que máis ou menos deben esperar as simulacións dos usuarios desde que solicitan os recursos do CESGA ata que as súas simulacións comezan a utilizalos. Estes tempos varían en función da cantidade de simulacións que se están realizando e idealmente debería ser o máis próximo a cero para evitar as esperas ata obter os resultados das simulacións. Con todo, canto máis alto é o nivel de ocupación dos sistemas de cálculo, é necesario esperar máis cantidade de tempo ata que existan 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 de verán e do Nadal 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.



	Xan.	Feb.	Mar.	Abr.	Mai.	Xun.	Xul.	Ago.	Set.	Out.	Nov.	Dec.	Media
HPC320	0d- 22:41:52	0d- 16:50:30	0d- 17:04:47	1d- 02:42:30	0d- 14:14:47	1d- 03:08:41	1d- 08:06:20	0d- 04:30:18	0d- 01:38:04	0d- 11:49:37	0d- 22:13:31	0d- 18:23:56	0d- 19:24:22
SUPERDOME	0d- 14:14:54	0d- 13:03:42	1d- 03:30:01	1d- 04:27:34	1d- 05:59:43	0d- 16:38:48	0d- 08:54:38	0d- 12:45:17	0d- 14:47:22	0d- 22:13:55	0d- 20:05:50	0d- 21:51:17	0d- 18:59:27
SVG_DELL	0d- 00:44:12	0d- 03:22:00	0d- 06:30:03	0d- 03:28:44	0d- 03:02:30	0d- 04:22:12	0d- 05:30:47	0d- 07:22:32	0d- 02:51:01	0d- 07:46:20	0d- 05:01:03	0d- 02:46:06	0d- 03:50:00
Media	0d- 01:42:24	0d- 04:38:40	0d- 08:10:17	0d- 08:31:02	0d- 04:57:13	0d- 05:51:35	0d- 07:46:58	0d- 08:14:26	0d- 04:40:49	0d- 09:52:25	0d- 07:50:12	0d- 04:25:07	0d- 05:42:42

DISTRIBUCIÓN POR INSTITUCIONES DAS HORAS DE CPU CONSUMIDAS EN TODOS Os SISTEMAS NO ANO 2006

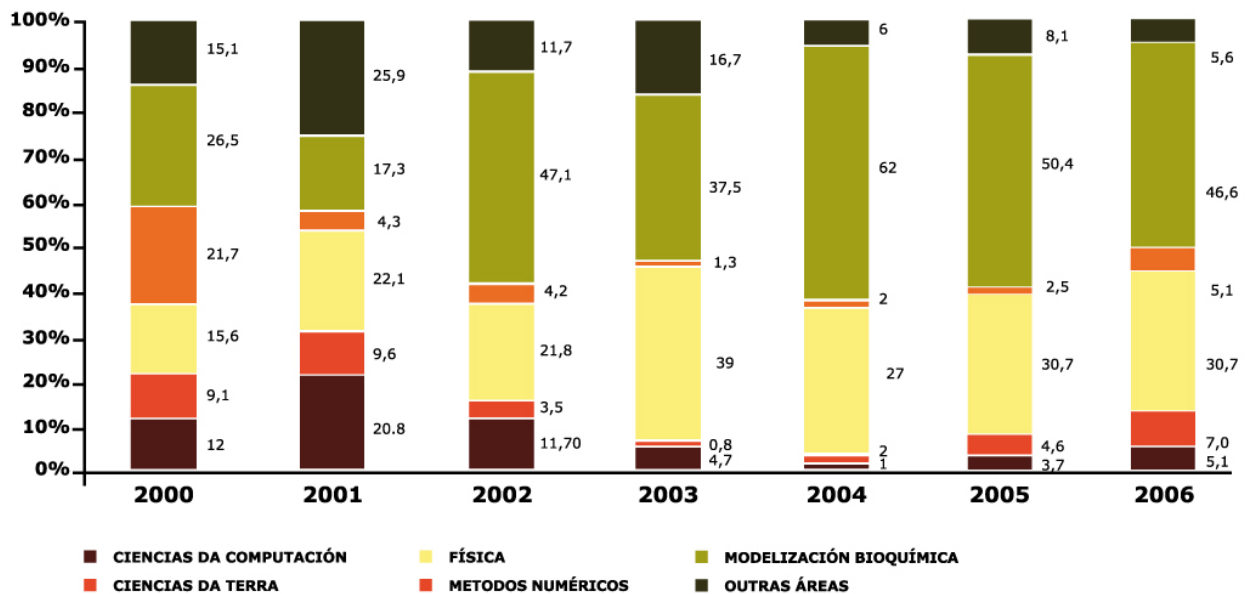
Por institucións, o maior consumo de horas de computación rexistraron no ano 2006 a Universidade de Santiago de Compostela cun 45.3% das horas, seguida da Universidade da Coruña cun 26.4% do consumo total. No seu conxunto, as tres universidades galegas representan o 81.7% do consumo, o CSIC o 13.7% das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



Institución	Consumo	Consumo (%)
CESGA	69204:50	4.5
CSIC	210058:50	13.7
UDC	404278:53	26.4
USC	694789:23	45.3
UVI	153969:6	10.0
TOTAL	1532301:3	100

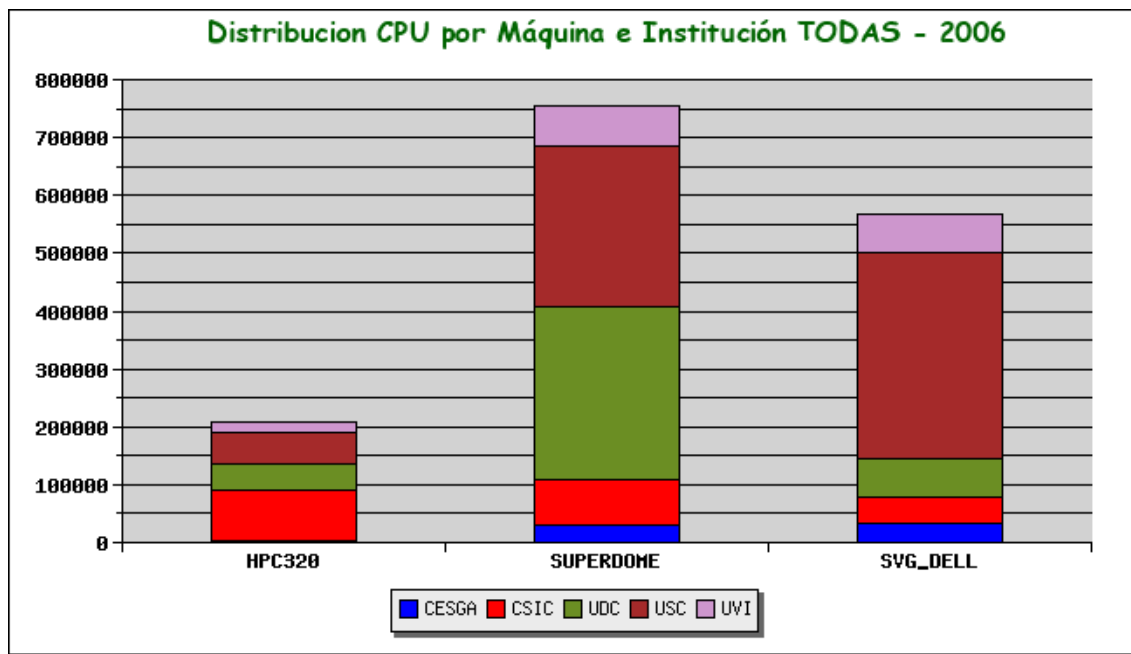
Distribución CPU por Área de Trabajo

Por áreas de traballo, os cálculos relacionados coa modelización bioquímica consumiron no ano 2006 o 46.6% das horas de cálculo, mentres que o 30.7% dedicáronse ao estudo da física, representando estas dúas áreas o 77.3% do consumo de horas. A modelización bioquímica volve ser, xa que logo, a área de maior demanda computacional, como sucedeu no ano 2005. A modelización 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, duplicouse a porcentaxe de utilización na área de métodos numéricos.



Porcentaxe de CPU por institución e máquina

Nesta gráfica podemos 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 repártese principalmente entre os investigadores das universidades de Santiago e de Coruña e o SVG é utilizado maioritariamente polos investigadores da Universidade de Santiago.



	HPC320	SUPERDOME	SVG_DELL
CESGA	1.8	4.1	6.1
CSIC	42.2	10.3	7.8
UDC	20.9	39.4	11.4
USC	26.9	36.8	63.2
UVI	8.2	9.4	11.6

1.2.- Aplicacións científicas

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 da contorno do SVG á inclusión de equipos con capacidade de 64bits e o desenvolvemento consecuente 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 librerías 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).

O catálogo de aplicacións e bibliotecas de utilidades instaladas a decembro de 2006 nos servidores de cálculo do CESGA son as seguintes:

Área	Aplicación	HPC 320	HP Superdome	SVGD	Outras
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, Flúidos e Magnetismo	Ansys	X			
Cálculo Molecular	abinit			X	
	Aimpac	X			
	Amber	X	X	X	
	CPMD	X	X	X	
	Dalton	X	X	X	
	Gamess	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		
	XPLOD-NIH			X	
Librerías Matemáticas	ACML			X	
	ATLAS			X	
	BLAS	X	X		
	cernlib			X	
	CLHEP			X	
	FETW	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			
Xestión de Software	CVS	X	X		

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 librerías 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 análises de datos. En concreto, crea a árbore filoxenético 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/Ou de ficheiros. Proporciona unha interface de fácil 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 potencias 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 cun 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".

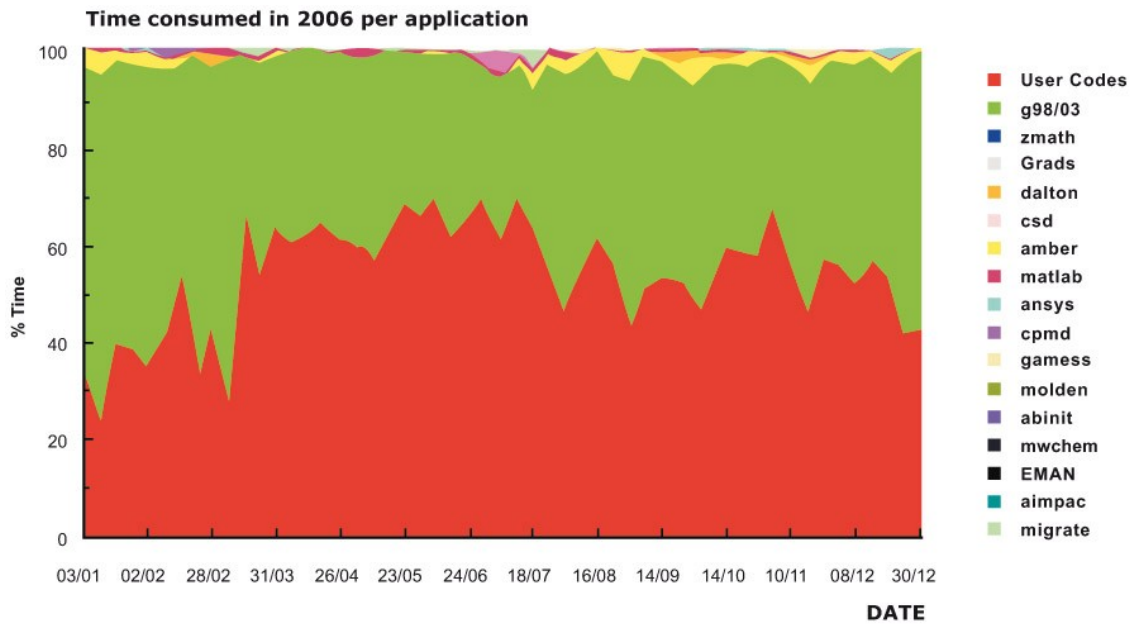
Aplicación	Tarefa
Migrate (nova versión no SVG e no hpc320, neva instalación no Superdome)	Migrate estima tamaños de poboación efectiva e índices de migración pasados entre n poboacións asumindo un modelo de matriz de migración con índices de migración asimétricos e diferentes tamaños de sobpoblación. Migrate utiliza máxima similitude ou inferencia Bayesiana para estimar conxuntamente todos os parámetros.
MrBayes (nova versión no SVG e no Superdome)	MrBayes é un programa para a estimación Bayesiana de filoxénese baseada nunha técnica de simulación chamada 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)	Librerías secuenciais e paralelas para a resolución de sistemas lineais, sparse e asimétricos utilizando factorización LU.
WRF (nova instalación no SVG)	The Weather Research and Forecasting (WRF) Model is a next-generation mesocale numerical weather prediction system designed to serve both operational forecasting and atmospheric research needs.
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.

Estatísticas de Uso de Aplicacións durante o ano 2006

Estatísticas de uso de aplicacións desde o 1 de xaneiro de 2006 ata o 31 de decembro de 2006. Estas estatísticas extraírense 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 cuxa tempo de execución sexa superior a 30 segundos (suma de tempo de sistema máis de usuario) para evitar saturar o sistema, excepto no CSD que o punto de corte é inferior xa que o consumo de tempo deste tipo de aplicacións é moi inferior.

Aplicacións	Jobs	Tempo			Memoria	I/Ou (Chars)	R/W (Blocks)
		sys	usr	elp			
CESGA							
amber	1	0.00	0.02	0.02	1.96	7,110,656	185
ARB	9	0.00	2.44	7.63	452.81	676,941,448	133,933
BEAMnrc	111	0.30	321.30	321.66	43.44	0	0
csd	385	0.00	0.00	6.16	25.95	0	0
dalton	5324	14.37	310.97	395.64	132.85	30,790,608,409	1,304,309
EMAN	805	0.41	42.24	64.32	2.40	0	0
g98/03	24061	711.76	1,128.11	2,035.64	2,177.00	3,364,593,369	42,740,740
Grads	3904	28.22	163.42	436.19	125.40	41,405,846,671	720,450
Gromacs	1	0.00	0.04	0.04	26.86	61,030	1
matlab	14	12.14	133.51	153.40	1,252.00	196,653,662	19,329
NAMD	10	0.01	0.51	0.67	153.69	144,293,344	9,614
nwchem	20	0.25	3.39	4.63	231.25	1,287,163,737	12,311,847
outro	88559	11,089.37	57,819.56	1,801,282.02	2,299.65	244,374,571,685	7,549,165,197
zmath	7	0.00	0.00	0.08	16.47	0	0
TOTALCESGA	123211	11,856.82	59,925.51	1,804,708.12	2,299.65	322,247,844,011	7,606,405,605
CSD							
outro	4	0.00	0.50	1.00	22.61	0	0
zmath	219350	0.90	8.12	55.42	45.02	0	0
TOTALCSD	219354	0.90	8.62	56.42	45.02	0	0
CSIC							
amber	12859	5.77	13,734.36	14,194.55	16.90	1,053,750,456	36,141
ARB	26	0.08	7.19	49.52	499.88	1,057,260,316	271,028
cpmd	120	10.86	1,594.96	1,829.78	32.96	40,978,839	1,423
EMAN	6239	1.86	216.61	218.79	1.63	0	0
g98/03	2816	875.36	68,767.62	70,759.29	1,957,120.00	28,149,700,174	17,796,271,957
gamess	107	274.60	2,018.31	3,186.82	538.00	264,179,579	1,885,772,694
IM	22	60.30	1,193.68	1,330.48	63.37	4,454,633	535
matlab	74	231.79	430.51	1,911.61	2,482.00	3,004,990,705	67,949,761
NAMD	53	0.59	11.00	45.31	23.20	2,531,674,366	11,423
outro	10536	1,526.66	137,539.28	159,310.77	9,672.00	34,825,454,648	5,765,753,777
TOTALCSIC	32852	2,987.86	225,513.52	252,836.91	1,957,120.00	70,932,443,716	25,516,068,739
OUTROS							

dalton	238	0.27	11.25	11.73	15.83	0	0
outro	3613	1.90	157.50	63,015.41	14.44	538	536
TOTAL OTROS	3851	2.16	168.74	63,027.14	15.83	538	536
UDC							
ansys	233	118.29	769.91	989.26	553.00	5,813,591	450,914,630
csd	60	0.00	0.00	0.54	16.47	0	0
g98/03	17989	1,702.80	334,807.38	282,049.29	1,679,872.00	104,610,370,588	561,463,825
matlab	693	753.29	5,667.94	6,549.40	10,016.00	329,597,330	7,827,792
outro	5918	128.43	75,008.65	91,833.62	897.50	2,733,025,450	203,344,219
TOTAL UDC	24893	2,702.80	416,253.88	381,422.10	1,679,872.00	107,678,806,959	1,223,550,466
USC							
aimpac	3	0.00	0.16	0.37	0.80	72,818,688	1,001
BEAMnrc	195	0.46	2,804.42	2,910.35	23.30	0	0
csd	1876	0.04	0.19	54.89	72.61	0	0
dalton	387	407.86	5,110.24	8,155.50	45.04	7,742,307,319	125,258,479
g98/03	112602	2,118.68	161,290.27	162,754.11	1,881,088.00	104,880,725,606	1,743,266,940
Gromacs	4	0.00	0.08	0.08	20.48	58,071	1
matlab	54	18.08	1,194.83	1,263.49	957.50	510,342,127	125,733
migrate	23	65.39	3,092.92	3,745.90	81.78	0	0
molden	1	0.02	0.01	0.29	6.44	29	4,414
outro	324810	9,381.75	519,858.06	832,963.33	2,570.00	739,134,049,951	2,263,446,052
TOTAL USC	439955	11,992.27	693,351.18	1,011,848.31	1,881,088.00	852,340,301,791	4,132,102,620
UVI							
amber	19818	15.86	12,569.02	13,006.67	96.67	4,596,130,949	162,205
g98/03	4032	567.87	88,171.44	86,571.18	1,996,288.00	45,163,498,096	543,967,774
gamess	66	18.29	293.78	330.24	23.00	253,633,797	712,159,820
matlab	24	14.16	374.02	390.69	4,108.00	43,854,644	2,655,379
molden	58	0.53	2.67	31.40	10.89	962,070,769	338
netcdf	1	0.07	0.01	0.40	0.27	20	7,641
outro	2600	1,028.77	47,806.80	52,562.03	1,026.50	13,711,789,449	561,999,947
TOTAL UVI	26599	1,645.55	149,217.75	152,892.62	1,996,288.00	64,730,977,724	1,820,953,104

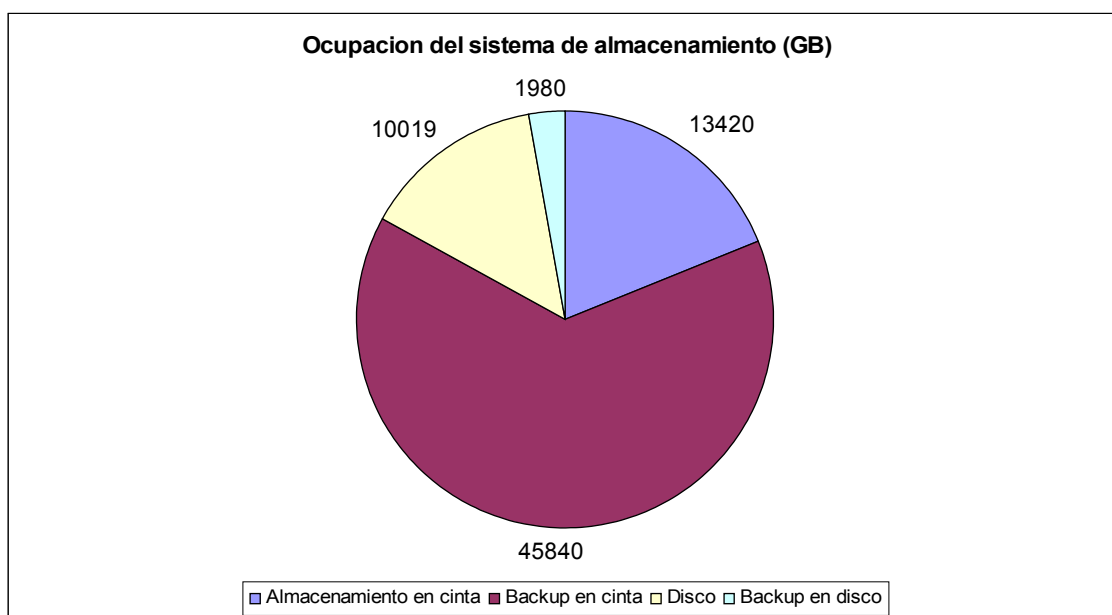
DISTRIBUCIÓN DE TIEMPO DE CPU CONSUMIDO POR APLICACIÓN


1.3.- Subsistema de Almacenamento

A capacidade total de almacenamento dispoñible para os usuarios do CESGA no ano 2006 supera os 140TB 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 atópase distribuída en distintos tipos de almacenamento da seguinte forma:

Tipo de almacenamento	Capacidade (Gigabytes)
Temporal ou Scrath	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 almacenamento en liña en cinta, 45.8 TB dedicáronse 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 almacenamento utilizado non variou de forma significativa. Así mesmo, o servizo de almacenamento 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 almacenamento foi de 45, dos cales 26 contan cun aumento da súa cota de usuario, 20 con almacenamento masivo de datos e 11 con copias de seguridade a disco (algúns usuarios están subscritos a máis dun servizo).



1.4.- Comunicaci3ns

1.4.1. Actividades m3is significativas do ano

As acci3ns m3is relevantes correspondentes a RECETGA, durante o ano 2006, res3mense nas seguintes:

Monitorizaci3n e xesti3n de rede

A Rede de Ciencia e Tecnolox3a de Galicia prestou o seu servizo cun nivel de dispoñibilidade do 99,55 %.

Novas conexi3ns a Centros:

- Conectouse 3 a rede o Centro Oncol3xico de Galicia, situado na cidade da Coru3a.
- Mellorouse a conexi3n da Universidade da Coru3a mediante a inclusi3n dun Gigarouter.
- Conectouse ao hospital Juan Canalejo mediante fibra 3ptica, proporcionando redundancia ao radioenlace.

Actividades de difusi3n e congresos:

- Presentouse un p3ster sobre RECETGA nas xornadas T3cnicas de Rediris 2006, celebradas en Granada.
- Presentouse a tecnolox3a Access Grid no Kick off meeting do proxecto europeo int.eu.grid, celebrado en Santander.
- Impartiuse a conferencia "Redes de Telecomunicaci3ns para I+D+i" na Escola T3cnica Superior de Enxe3eiros de Telecomunicaci3n da Universidade de Vigo.
- Elaborouse un informe t3cnico sobre a tecnolox3a Access Grid.

Proxectos m3is destacados:

- Execut3ronse os proxectos TORGA.net e Opera Dixital. Despregouse a sala Access Grid Movil.
- Continuouse co despregamento de Eduroam.

1.4.2.- Tr3fico transferido



Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia

Informe Anual - 2006

Centros conectados a RECETGA

CENTRO	Tráfico Entrada (MB)	Tráfico Saída (MB)	Dispoñib. (%)
C.I. Xunta			
Centro de Control de Calidade do Medio Mariño (CCMM - Vilaxoan)	521.051,69	375.681,15	99,735
Centro de Cultivos Mariños (CCM-Ribadeo)	3.882,37	15.279,58	100,000
Centro de Investigacións Mariñas (CIMA-Coron)	135.891,23	1.054.425,59	99,882
Centro de Investigacións Agrarias de Mabegondo (CIAM)	1.055,82	1.832,88	99,809
Centro de Investigacións Forestais e Ambientais de Lourizan	6.726.788,68	653.008,99	99,997
Centro Superior Bibliográfico de Galicia	426.675,86	203.539,44	96,623
Dirección Xeral de I+D+i	166.316,98	37.563,31	99,705
Total Grupo	7.981.662,62	2.341.330,95	99,393
CSIC			
Instituto de Estudos Galegos Pai Sarmiento	69.463,03	186.713,71	99,657
Instituto de Investigacións Agrobiolóxicas	348.182,00	322.961,03	98,508
Instituto de Investigacións Mariñas	2.592.690,37	1.527.829,90	99,372
Misión Biolóxica de Galicia	285.278,91	232.828,45	99,799
Total Grupo	3.295.614,31	2.270.333,09	99,334
Centros Tecnolóxicos			
AIMEN	904.498,23	976.599,78	98,988
ANFACO	553.707,25	325.162,22	99,893
CETMAR	97.079,51	94.264,56	99,312
CIS FERROL	1.897.517,75	371.654,45	99,190
CTAG	138.391,28	147.854,71	99,593
Parque Tecnolóxico de Galicia	1.291.224,67	1.261.555,37	99,993
Total Grupo	4.882.418,69	3.177.091,09	99,495

CENTRO	Tráfico Entrada (MB)	Tráfico Saída (MB)	Dispoñib. (%)
--------	----------------------	--------------------	---------------

Hospitals			
Hospital Cies	4.182.092,04	2.541.183,15	99,350
Hospital Clínico Universitario	1.674.447,29	1.307.542,43	99,981
Hospital Juan Canalejo	6.111.241,23	4.997.320,78	99,997
Hospital Meixoeiro	13.805.875,82	13.156.471,40	94,605
Total Grupo	25.773.656,38	22.002.517,77	98,483
IEO			
I.E.Ou. Delegación de Coruña	1.942.621,43	1.087.735,12	99,425
I.E.Ou. Delegación de Vigo	5.012.783,80	3.128.097,66	99,546
Total Grupo	6.955.405,22	4.215.832,78	99,486
Intercambio con otras redes			
GALNIX	22.800.257,21	90.968.364,96	99,905
JAZZTEL	51.436,88	129.352,25	99,672
REDIRIS	291.477.265,69	341.764.633,27	99,994
RETEGAL	2.118.894,32	2.634.166,71	99,917
SERGAS	878.629,55	2.580.631,09	99,902
Total Grupo	317.326.483,64	438.077.148,27	99,878
Organismos			
Aula Produtos Lácteos	612.053,06	783.496,09	99,916
CEIDA	98.082,60	112.518,67	99,122
Centro Multimedia de Galicia	2.713.840,29	1.525.084,71	99,895
FEUGA Santiago	606.776,09	366.876,68	99,851
Instituto Ramón Piñeiro	136.260,41	405.873,84	99,997
Total Grupo	4.167.012,45	3.193.849,99	99,756
Universidades			
UDC Coruña	177.317.491,18	98.966.993,41	99,687
UDC Ferrol	23.530.075,91	23.157.461,51	99,752
Universidade de Minho	28.532.281,70	26.431.325,94	99,940
USC	36.434.414,11	76.281.493,36	99,997
USC Lugo	11.726.673,94	22.451.051,87	99,797
USC Santiago	23.634,70	13.266,39	99,890
UVIGO Ourense	68.561.603,31	51.082.377,96	99,894
UVIGO Pontevedra	56.231.449,94	28.597.571,52	99,569
UVIGO Vigo	210.631.502,24	160.384.291,70	99,941
Total Grupo	612.989.127,03	487.365.833,65	99,830

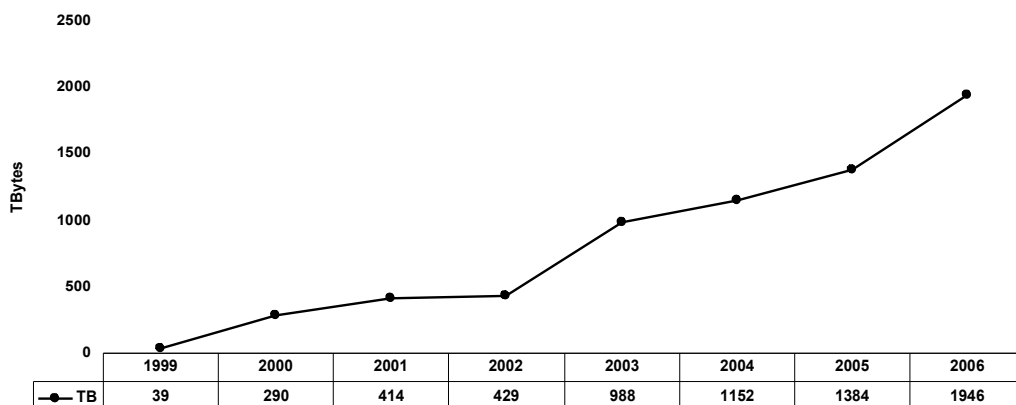
Nas páxinas seguintes recóllense gráficas onde se detalla información estatística significativa relativa á actividade do 2006:

- I. Tráfico interno
- II. Tráfico con RedIRIS
- III. Detección de Virus
- IV. Servizos Centrais
- V. GALNIX

I.- TRAFICO INTERNO INTERCAMBIADO:

No 2006, o volume de tráfico intercambiado ascendeu a 1.946 Terabytes, o que supón un incremento do 40,6 % con respecto ao ano anterior

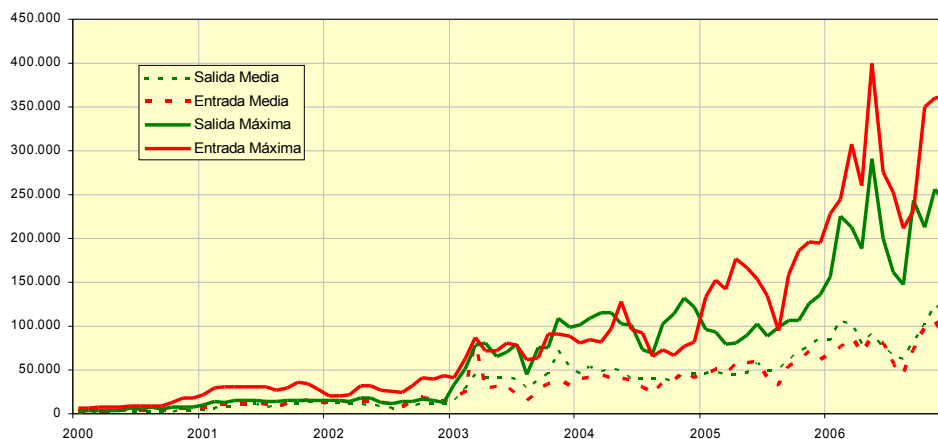
TRÁFICO INTERCAMBIADO EN RECETGA 1999 - 2006

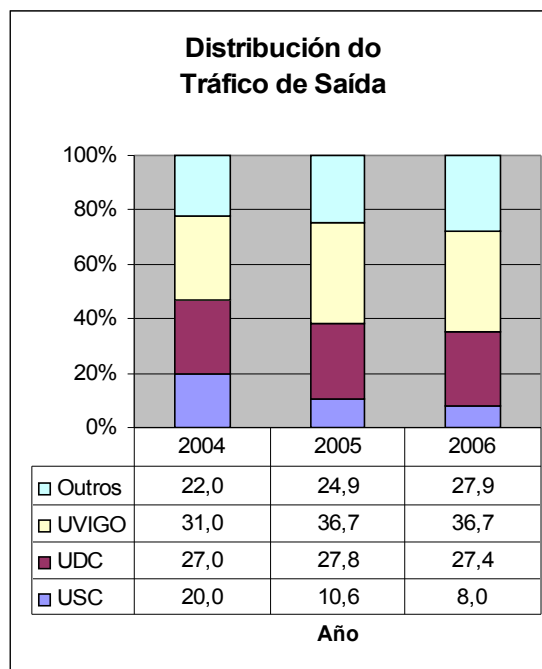
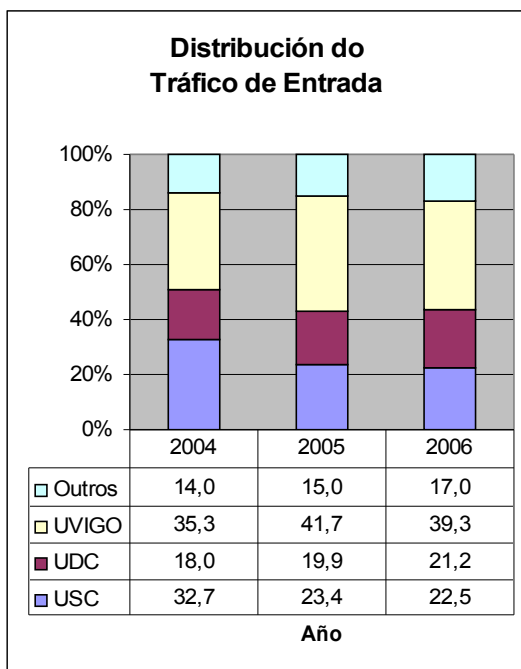


II.- TRÁFICO CON RedIRIS:

Durante o ano alcanzáronse picos de intercambio de tráfico con RedIRIS de 400 Mbps en saída e 291 Mbps en entrada.

**Intercambio de tráfico RECETGA-REDIRIS
2000-2006**



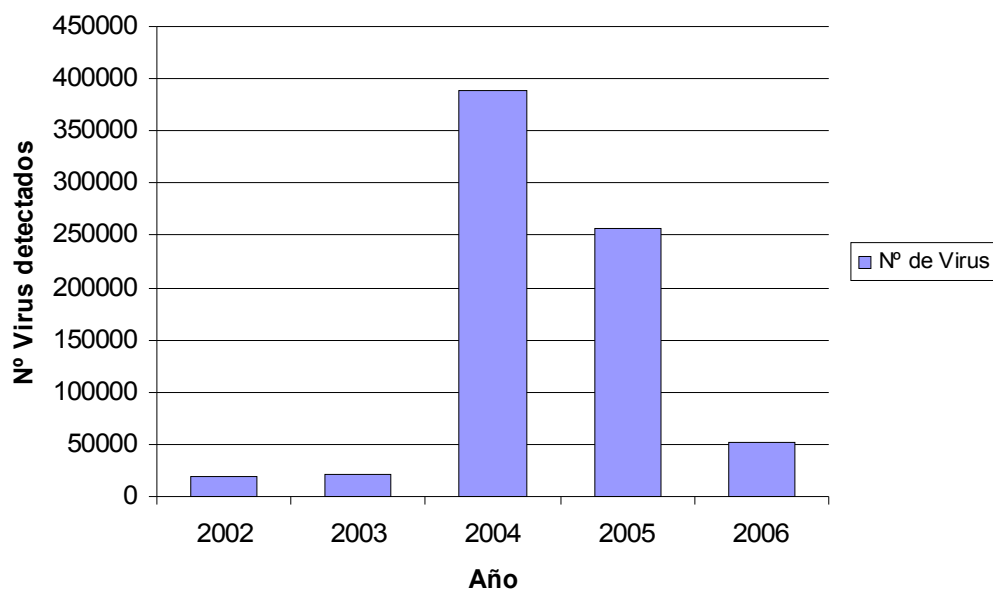


Todas as universidades incrementaron o seu tráfico de datos en números absolutos. Mantense a Universidade de Vigo como o maior usuario da conexión de RECETGA a RedIRIS.

Destaca a baixa porcentaxe do tráfico de saída cara á USC atribuíble, entre outros, ao sistema de xestión da rede dos seus campus.

III. - DETECCIÓN DE VIRUS
Desde 1 de Xaneiro de 2006 ata 31 de Decembro de 2006

2006	Virus/mes
Xaneiro	25.069
Febreiro	9.281
Marzo	2.116
Abril	2.153
Maio	1.391
Xuño	2.127
Xullo	1.786
Agosto	1.590
Setembro	2.965
Outubro	2.171
Novembro	592
Decembro	172
ANUAL	51.413

Virus detectados por año


IV. SERVICIOS CENTRAIS

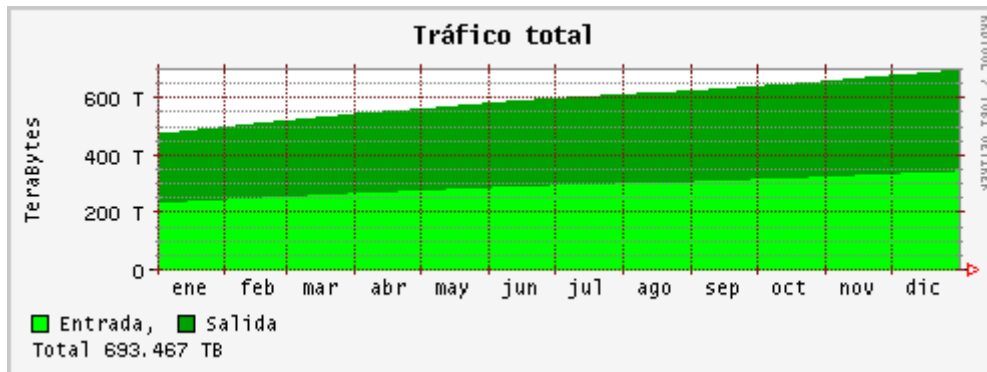
Correo								
	Mensaxes/Min. (Media)		Mensaxes (Total)		Bytes/Min (Media)		Bytes (Total)	
	Recibidos	Enviados	Recibidos	Enviados	Recibidos	Enviados	Recibidos	Enviados
ns1.cesga.es	11	20	5.729.040	10.722.240	3.005	440	1.579.165.150	231.474.233
ns2.cesga.es	32	37	16.714.079	19.342.079	5.252	647	2.760.345.992	340.115.749

Servidor de news						
	Artigos / Día		Total		Volume / Día (Mbytes)	Total (Mbytes)
	Ofertados	Aceptados	Ofertados	Aceptados		
Entrada	85.542	34.541	31.222.830	12.607.429	1.123	409.895
Saída	85.501	77.846	31.207.975	28.413.644	2.474	902.937

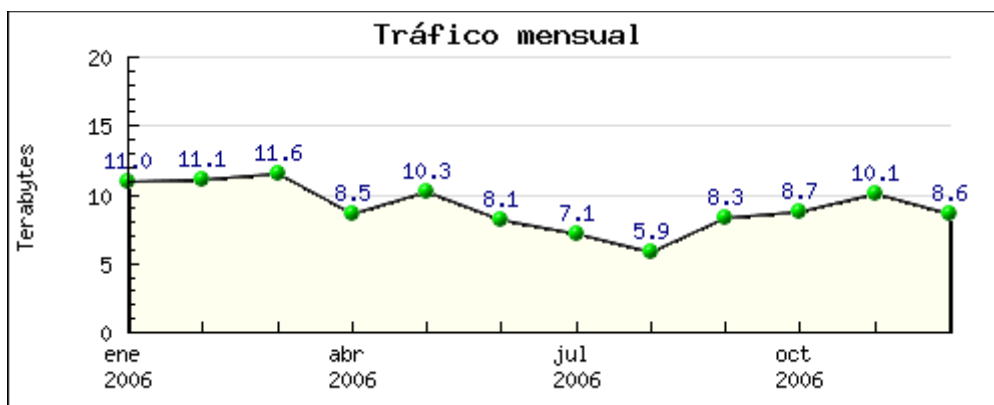
Usuarios de RADIUS						
Centro	Tempo de conx.	Bytes de entrada	Bytes de saída	Usuarios / Minuto		Nº de conx.
				Media	Máximo	
usc	8.209:37:22	7.697.753.770	42.444.160.359	6	14	26.168
udc	2.475:51:06	2.956.804.886	14.523.274.192	3	5	6.079
uvigo	6.398:32:25	12.512.776.365	46.483.410.471	4	9	12.436
outros	48:47:19	115.712.987	317.308.699	0	1	76

V. TRÁFICO GALNIX

- Desde o seu inauguración intercambiáronse 693.467 TB.
- No ano 2006 intercambiáronse 208.692 TB.



Evolución GALNIX



2.- Contratos e Proxectos

2.1.- Contratos e Proxectos Facturados e Subvencionados

Durante o ano 2006 realizáronse tarefas de investigación e soporte á investigación e desenvolvemento a través de proxectos e contratos, relacionando a continuación os ingresos habidos no exercicio:

- Torganet (8/03) Unión Europea INTERREG III A 58.471,89	
- EVOPROC (13/03) Xunta de Galicia - DX I+D+I	2.478,00
- Meteoroloxía (1/04) Xunta de Galicia	62.173,66
- EGEE (3/04) Unión Europea VI PM	24.639,72
- Labora (5/05) Xunta de Galicia	25.194,28
- Proxecto e-IMRT (7/05) Xunta de Galicia - DX I+D+I	13.775,00
- GIS - Riscos Medio Ambientais (8/05) Xunta de Galicia	33.051,00
- Folstein (9/05) Xunta de Galicia - DX I+D+I	23.925,00
- P. CTAG nav (10/05) Xunta de Galicia - DX I+D+I	1.250,00
- ENSIGNA (14/05) Xunta de Galicia - DX I+D+I	55.533,00
- Labora (16/05) Xunta de Galicia - DX Promoción Emprego	34.477,92
- Conv. Tecnólogos (1/06) Xunta de Galicia - DX I+D+I	103.000,00
- Enquisa Electrónica CSIC (2/06) CSIC	1.137,00
- Arqueoloxía Xunta (3/06) Xunta de Galicia	10.320,69
- EGEE II - int.eu.grid Xunta (4/06) Xunta de Galicia - DX I+D+I	6.207,20
- EGEE II (6/06) Unión Europea	50.701,49
- Partículas III (7/06) Xunta de Galicia	4.978,71
- GIS - SIFI Forestal (8/06) Xunta de Galicia - DX I+D+I	9.856,00
- e-intervención Discapacitados (9/06) Xunta de Galicia - DX I+D+I	30.000,00
- Plataforma Tecnolóxica TIC (12/06) Xunta de Galicia - DX I+D+I	89.860,00
- GALNIX Operadoras	12.449,20
- Outros cursos, congresos, dicitos etc:	5.500,00
- Ingresos Colaboración F.I.G.: - Convenio con SA	330.507,52
- S.A. Xestión CESGA / CSIC:	189.124,80

TOTAL INGRESOS 1.178.612,08

2.2.- Descripción Proxectos

Título	Financiamento	Estado	Descrición
o 2006			
COMPUTACIÓN			
Modelo de Predicción meteorolóxica.	Financia: Dirección Xeral do Centro de Información e Tecnoloxía Ambiental, Consellería de Medio Ambiente.	Execución	Provisión de servizo de cálculo numérico para ou desenvolvemento de simuladores dá prevención meteorolóxica en Galicia.
RETELAB	Financia: Ministerio de Educación e Ciencia	Inicio	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
Mathematica Consolider	Financia: Ministerio de Educación e Ciencia	Inicio	Proxecto INGENIO CONSOLIDER para incrementar tanto cualitativa como cuantitativamente a presenza das Matemáticas en ciencia, tecnoloxía e innovación.
Plataforma Tecnolóxica Galega das TIC	Financia: Dirección Xeral de I+D	Inicio	Constitución da Plataforma Tecnolóxica Galega das TIC
IRIS-GRID. Iniciativa Nacional de Grid	Financia: Ministerio de Industria, Innovación e Comercio. Participan: 24 Grupos e Institucións de I+D de Grid e e-Ciencia en España	Execución	A iniciativa IRISGrid aparece co obxectivo de coordinar a nivel académico e científico os grupos de investigación interesados nas tecnoloxías GRID a nivel estatal.
Evoproc: Arquitectura de axentes intelixentes para a xestión de centros de supercomputación	Financia: Dirección Xeral de I+D Colabora: UDC	Finalizado	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.

Título	Financiamento	Estado	Descripción
	o	2006	
EGEE: Enabling Grids for Escience	<u>Financia:</u> Unión Europea (VI Programa Marco) e a Dirección Xeral de I+D	Finalizado	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.
EGEE II: Enabling Grids for Escience II	<u>Financia:</u> Unión Europea (VI Programa Marco) e a Dirección Xeral de I+D	Inicio	Segunda fase da implantación dunha infraestrutura GRID a nivel mundial.
Int.eu.grid	<u>Financia:</u> Unión Europea (VI Programa Marco)	Inicio	Despregamento e operación dunha e-infraestrutura para aplicacións que demandan interactividade para uso polos investigadores.
Study of the phase separation in magnetic oxides combining theory and experiment	<u>Financia:</u> Ministerio de Educación e Ciencia	Inicio	Estudo dos fenómenos de coexistencia de fases magnéticas nalgúns óxidos de cobalto a través de medidas experimentais, modelos analíticos e técnicas ad initio.
Veas: Deseño evolutivo de velas para navegación	<u>Financia:</u> Dirección Xeral de I+D <u>Contratados por:</u> UDC	Execución	Deseño dun sistema de deseño óptimo de velas ríxidas para barcos baseado en simulación dinámica de fluídos e algoritmos evolucionistas.
e-IMRT	<u>Financia:</u> Dirección Xeral de I+D <u>Colabora:</u> USC, UVIGO, U. Wisconsin	Execución	Desenvolvo 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.
Folstein	<u>Financia:</u> Dirección Xeral de I+D <u>Colabora:</u> UDC,UVIGO,Tel eves	Execución	Desenvolvo dunha plataforma para a atención xerontolóxica a domicilio.
Partículas III	<u>Financia:</u> Ministerio de Educación e Ciencia	Inicio	Despregamento dunha infraestrutura GRID para o experimento LHCb do CERN.

Título	Financiamento	Estado	Descripción
	o	2006	
	<u>Colabora:</u> USC		
COMUNICACIONES			
Ópera Oberta	<u>Participan:</u> USC Uvigo UDC UMINHO	Execución	Este proxecto consiste na retransmisión en directo de Óperas desde o Liceo de Barcelona ás universidades para docencia.
GALNIX	<u>Financia:</u> Xunta de Galicia, Comunitel, Jazztel, R (agora Axunta) Retevisión e Retegal <u>Colaboran:</u> Autoestrada Galega dá Información (AGI)	Execución	Mantemento do Punto Neutro de Internet en Galicia, GALNIX.
TORGA.net	<u>Financia:</u> Unión Europea, Dirección Xeral de I+D <u>Participa:</u> Uvigo, Universidade de Minho, Centro de Computación Gráfica	Finalizado	<p>Enmarcado no contexto dos proxectos Interreg IIIA España- Portugal, o seu obxectivo consiste no establecemento dunha rede de comunicacións de banda ancha para interconectar os campus da Universidade de Vigo e a Universidade do Minho o CESGA e o Centro de Computación Gráfica. Utilizando esta infraestrutura instaláronse salas Access Gris para o traballo colaborativo en cada unha das institucións.</p> <p>Os obxectivos desta rede son:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Prover de servizos de comunicacións á comunidade académica e de investigación en Galicia e Portugal. • Prover dun contorno tecnolóxico que posibilite a I+D+I no campo das comunicacións en ambas as comunidades. • Favorecer o desenvolvemento da Sociedade da Información e o Coñecemento en Galicia e Portugal.

Resumo 2006

Desde a Fundación CESGA fixéronse ou participado en 15 solicitudes de proxectos: 9 de proxectos nacionais e 6 rexionais. Destas, concedéronse 3 nacionais (dous do Plan Nacional, un con IP do CESGA e outro en participación coa USC ademais da participación nun proxecto Consolider: MATHEMATICA) e un rexional. 4 están en fase de resolución e o resto foron denegados. Consegúronse menos proxectos rexionais dos previstos (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 de institución de I+D. É importante destacar que a Fundación está participando en dous proxectos europeos (EGEE e Int.eu.Grid) e forma parte de dúas plataformas tecnolóxicas españolas (INES e eMOV).

3. Producción Científica

3.1. Producción científica de usuarios de computación do CESGA.

O presente informe inclúe a produción científica correspondente ao ano 2006 e para o cal os usuarios declaran utilizar os recursos dispoñibles no CESGA.

A seguinte táboa presenta o número de artigos publicados, enviados ou in-press; presentacións ou póster en reunións científicas; teses doutorais, presentadas ou en proceso; libros ou capítulos de libros; Diplomas de Estudos Avanzados; tese de licenciatura e proxectos de investigación realizados:

CSIC, Consello Superior de Investigacións Científicas**Artigos científicos publicados:**

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

Jesús H. Busto, Gonzalo Jiménez-Osés, Juan L. Asensio, Jesús Jiménez-Barbeiro, 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-Ouses G, Asensio J.L., Jimenez-Barbeiro 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-Barbeiro J, Asensio JL, Peregrina JM, Avenoza A. "Effect of beta-Ou-glucosylation on L-Ser and L-Thr diamides: A bias toward alpha-helical conformations". **Chemistry-A European Journal** 12 (30): 7864-7871 OCT 16 2006

Freire F., Costa I., Corzana F., Revolta J., Gonzalez C., Hricovini, M., Bastida A ., Jimenez-Barbeiro 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-Ouses 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. Vilarreal and G. Delgado-Barrio. "A theoretical study of HeI₂ICl van der Waals cluster", **Journal of Chemical Physics.**, 014301-1-10 (2006)

A. García-Vela e 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. Lóopez-Durán, P. Vilarreal, F.A. Gianturco, and J. JELLINEK. "Polar dei-halogen molecules solvated in bosonic helium clusters: The paradigm of ICl(X)". **Physical Review A** , 053201 (2006).

M. P. de Lara-Castells, et.ao. "Polar dei-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 HeI-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 ao. "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

Ou. 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-Lagoa, E. Escamilla-Roia, V. Temón, 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 HeI for T = 50-300 K". **Astronomy & Astrophysics**.

Artigos científicos in-press:

Corzana, F., Costa, I., Freire, F., Revolta, J., Torrado, M., Bastida, A., Jimenez-Barbeiro, J., Asensio, J.I.. "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 Aydiillo, Gonzalo Jiménez-Osés, Jesús H. Busto, Jesús M. Peregrina, Marimar Zurbano, and Alberto Avenoza. "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**.

Ronsel Carmona-Xato, 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 e R.Dominguez-Gómez. "ZPVE correction to the FIR Spectrum to the propanal isotopomers". **Chemical Physics Letters**.

H. Manzano, A. Ayuela, J.S. Desbastado; "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.Feutrier, 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 honra of Pierre Encrenaz), F.Combes, F.Casoli, L.Falgarone and L.Pagani, Eds.

A. VALDÉS, R. PROSMITI, P. VILARREAL 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-Lamoneda, "Electronic energy transfer in $O_2(v)+O_2$ 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 HeI₂-dihalogen van der Waals Complexes". Conferencia Invitada, **MOLEC XVI**, Trento(Italy).

"ad initio simulations of materials for hydrogen storage". Charla invitada non **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. Prosmiti e A. García-Vela."Intracluster superelastic scattering of hydrogen upon photodissociation of I*-HI". **IBER 2006**, Aranzueu (España), Setembro, 2006.

F. Corzana, J. H. Busto, A. Fernández-Tejada, J. M. Peregrina, A. Avenoza, J. L. Asensio, J. Jiménez-Barbeiro. "Are the Hydrogen Bonds Truly Responsible for the Defined Conformation of the alfa-GalNAc-Ser/Thr Linkages?". **XXIII Ird 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 Luís, J. L. Asensio, J. Jiménez-Barbeiro, J. M. Peregrina, A. Avenoza. "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-Lagoa e C.I. Sainz-Díaz. "Influencia da substitución catiónica octaédrica sobre os espectros dos grupo hidroxilo nos filosilicatos 2:1 dioctaédricos por métodos computacionais." **XXVI Reunión (SEM) / XX Reunión da Sociedade Española de Arxilas**. Publicación: Macla, 6 (2006) 265

J. Ortega Castro, M. T. Dove, A. Hernández-Lagoa e C.I. Sainz-Díaz. "Distribucións catiónicas binarias na capa octaédrica dos filosilicatos 2:1 dioctaédricos por métodos mecano-

cuánticos". **XXVI Reunión (SEM) / XX Reunión da Sociedade Española de Arxilas.**
Publicación: Macla, 6 (2006) 337 - 339

M. E. Molina-Montes, D. Donaio, A. Hernández-Lagoa e C.I. Sainz-Díaz. "Mecanismos e dinámica molecular ad initio da reacción de deshidroxilación a través do oco dioctaédrico da pirofilita". **XXVI Reunión (SEM) / XX Reunión da Sociedade Española de Arxilas.**
Publicación: Macla, 6 (2006) 317 - 318

V. Temón, N. Hernández-Haro, C.I: Sainz-Díaz e A. Hernández-Lagoa . "Formación de estruturas tipo xeo en filosilicatos laminares 2:1 dioctaédricos". **XXVI Reunión (SEM) / XX Reunión da Sociedade Española de Arxilas.** Publicación: Macla, 6 (2006) 483 - 484

M. E. Molina Montes, D. Donadio, C.I. Sainz Diaz, A. Hernández Lagoa. "Investigación teórica dos mecanismos e dinámica molecular ad initio da reacción de deshidroxilación a través do oco dioctaédrico da pirofilita". **IV Encontro Franco-Español de Física e Química do Estado Sólido.**

V Timon, N. Hernandez-Haro, A Hernandez-Lagoa, C.I. Sainz-Diaz. "Estudo teórico da influencia do catión interlaminar na formación de láminas de xeo en filosilicatos 2:1 dioctaédricos." **IV Encontro Franco-Español de Física e Química do Estado Sólido.**

N. Hernández-Haro, M. Pruneda, A. Hernández-Lagoa, C. I. Sainz-Díaz. "Cálculo Teórico de Espectros Infravermellos en Filosilicatos 2:1 Dioctaédricos. **IV Encontro Franco-Español de Física e Química do Estado Sólido.**

J. Ortega-Castro, C.I.Sainz-Díaz, M. T. Dove and A. Hernández-Lagoa. "Estudo teórico da distribución catiónica AoVMg e AoVFe na capa octaédrica de filosilicatos 2:1 dioctaédricos." **IV Encontro Franco-Español de Física e Química do Estado Sólido.**

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

M. Vila, M.L.Senent e 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 Computacional Studies on Aromatic Compounds: Synthesis, Structure and Properties". **4th SpanishPortugueseJapanes 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: Síntese, estrutura e propiedades". **X Encontro Peptídico Ibérico (EPI)**. Zaragoza, 1-4 Febreiro 2006, Comunicación oral.

Pósteres en Congresos/Conferencias:

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

J. S. Desbastado, 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. Prosmi, P. Vilarreal, G. Delgado-Barrio. "ad initio Potential Surface and Vibrational Predissociation Dynamics of HeI₂(B) Cluster". Comunicacion e Poster, **MOLEC XVI**, Trento (Italy).

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

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

A. Valdés, R. Prosmi, P. Vilarreal, G. Delgado-Barrio, J.-H. Werner. "Vibrational predissociation dynamics of HeI₂(B) cluster using *ad initio* surfaces". Comunicacion e Poster, **IBER-2006**, Aranzue (Spain).

Jose I. Garcia, G. Jimenez-Ouses, 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 Avenoza. "Highly Diastereoselective Alkylation of Bicyclic N,Ou-Acetals: A Memory of Chirality Protocol". **4th Transmediterranean Colloquium on Heterocyclic Chemistry**, Aveiro-Portugal; 23-27 June, 2006

G. Jiménez-Osés, 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-HeI". **IBER 2006**, Aranzue (España), Setembro, 2006. Comunicación publicada en Libro de Resumos.

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

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

Ana María Mancho, Instituto de Matemáticas e Física Fundamental do 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 do 1er premio da seccion de Ecuacións en Derivadas Parciais.

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 honra 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-Lagoa. "Estudo teórico da distribución catiónica AoVMg e AoVFe na capa octaédrica de Filossilicatos 2:1 dioctaédricos". **4º Encontro Franco-Español de Química e Física do Estado Sólido**. Bilbao. (2006).

J. Ortega-Castro¹, M. T. Dove², A. Hernández-Lagoa¹, C.I.Sainz-Díaz³. "Distribucións catiónicas binarias na capa octaédrica de filossilicatos 2:1 dioctaédricos por métodos mecano-cuánticos". **XX Sociedade Española de Arxilas**. Oviedo, Setembro 2006.

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

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

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

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

Teses de doutoramento defendidas:

Alvaro Valdes De Luxan. "Superficies de Energia Potencial e Dinámica de Agregados de van der Waalstri atómicos e tertatómicos formados por gases nobre e moléculas dihalógenas". **Universidade Complutense de Madrid**. Facultade de Ciencias Físicas. 2006.

Universidade de A Coruña

Artigos científicos publicados:

Leonardo Casteláns, Carmenza Duque, Sven Zea, Afonso Espada, Jaime Rodríguez and Carlos Jiménez. "Isolation and Synthesis of (-)-(5 S)-2-Imino-1-methylpyrrolidine-5-carboxylic Acid from Cliona tenuis: Structure Revision of Pyrostatins". **Organic Letters**, 2006, Vol. 8, Non. 21, 4967-4970.

David Esteban-Gómez, Carlos Pratas-Igrexas, 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 do Carmen Fernández-Fernández, Rufina Bastida, Alejandro Macías, Paulo Pérez-Lourido, Carlos Pratas-Igrexas, 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; Branco, Ou; 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-Igrexas, Edina Balog, Carlos Pratas-Igrexas, 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 Neto, 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 Pratas-Igrexas, 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, Volume: 417, Páginas, 28-33. **Chemical Physics Letters**, 2006.

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

D. Rodríguez Ramos, R. Castelo, 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, Volume: 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. Publicarase próximamente adicionalmente como volume 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 no volume 33 da **Publication Series of the John von Neumann Institute for Computing** (NIC), ISBN 3-00-017352-8.

Daniel Rivero, Julián Dourado, 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 Dourado, Juan Rabuñal, Alejandro Pazos, "Building and Simplifying Artificial Neural Networks with Genetic Programming". **WSEAS Transactions on Information Science and Applications**. Volume: 4, Issue 3, Pags 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-Romeu 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

Pósteres 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. "Estudos fotofísicos e fotoquímicos sobre o aminoácido aromático N-fenilglicina", **Universidade dá Coruña**.

Teses de licenciatura/Proxectos Fin Carreira:

D. César Rodríguez López. "Complexos de Ru(II) con Ligandos Derivados de 2,2´Bipiridilo: Deseño, Síntese e Caracterización". Facultade de Ciencias **dá Universidade dá Coruña** en Xullo de 2006.

Ana Arda Freire. "Aplicación das constantes de axuste heteronucleares para a determinación da estereoquímica relativa de sistemas acíclicos, 1,3 nitrogenados quirales. Estrutura e síntese de Disitiazolamida". **Universidade dá Coruña**. Facultade de Ciencias. 31 de Marzo 2006

Marta Mato Igrexas (Directores: Carlos Pratas Igrexas, Andrés de Blas Varela, Teresa Rodríguez Blas). "Quelatos de Lantánidos Contendo Unidades Piridina con Potencial Aplicación como Axentes de Contraste para Resonancia Magnética de Imaxe". **Universidade dá 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, Luís Castedo, and Carlos Saá. "A New Ru-Catalyzed Cascade Reaction Forming Polycyclic Cyclohexadienes from 1,6-Diyne and Alkenes", **Journal of the American Chemical Society**, 2006, 128, 9262-9263

Jorge Caeiro, Diego Pena, Agustín Cobas, Dores 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, Dáche: 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, Louza A miña, Padin F, Gesteira A, Paz E, Paramo M, Brenlla J, Pumar. E, Igrexas 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 GdBaCo2O5.5". **Physical Review B** 73, 165117 (2006).

P. M. Botta, V.Pardo, D.Baldomir, C.da Rúa, 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 Aoiz and Jesús F. Castelo. "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-Dobrado 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 HeI-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 xeneral transition from stationary to moving forced Turing structures". **Physical Review E** 74, 036202 2006).

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

Fajin JLC, Fernandez B, Mikoszz A, et ao. "Accurate computations of the rovibrational spectrum of the HeI-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: ad 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, Non. 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 $^1\text{H-NMR}$ " **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-Dobrado F., Hartmann G. H., Pena J., Capote R., Paiusco 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 17 α ,21-cyclo-22-unsaturated analogues of calcitriol". **Journal of Organic Chemistry**, 2007, 72

Pena J, González-Castaño D M, Gómez F, Sánchez-Dobrado 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. Igrexas, 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, Luís Bernal, and Vicente Perez-Villar. "Complete synchronization of convective patterns between Gray-Scott systems". **European Physics Journal** 2006

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

Comunicacións/Presentacións en Congresos/Conferencias:

A.J.García Loureiro, N.Seoane e M.Aldegunde. "Estudo de técnicas de particionamiento aplicadas á simulación paralela de transistores". **XVII Xornadas 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, Setembro de 2006.

N.Seoane, A.J.García Loureiro. "Simulación tridimensional paralela de dispositivos HEMT usando o modelo de arrastre difusión". **XVII Xornadas 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 Veiga. **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 Sardiña, 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 Resumos. Zaragoza. Febreiro 2006

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

Howard Maskill, Juan Crugeiras, Ana Rios, William McFarlane, Miguel A. Rios. "New Chemistry of N-Nitroso- N,Ou-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. "A simulación meteorolóxica no estudo da orixe aloctono do ozono troposférico en zonas rurais do norte de Galicia", **Congreso da Asociación Meteorolóxica Española**, Pamplona, Abril 2006

J. Pena, D. González-Castaño, F. Gómez, G. Hartmann, F. Sánchez-Dobrado. "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. Mouriño, 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-Dobrado, 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-Dobrado, 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. "|a0-a2| 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. "|a0-a2| 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. Dourado.. "Emprego de modelos deterministas e estatísticos para a predición de enerxía eólica". **Xornadas 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**. Abril 19-21 2006. Vigo, Galicia. Spain.

Pósteres 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. Igrexas, 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 do 26 ao 30 de xuño de 2006.

D. Baldomir, V. Pardo, J. Castro, M. Igrexas, J.E. Arias and J.Rivas. "First principles calculations of charge ordering in manganites". **JEMS '06 (Joint European Magnetic Symposia)**, San Sebastián do 26 ao 30 de xuño de 2006.

García-Fandino, Rebeca; Castedo, L.; Granxa, J. R. "Enyne metathesis catalyzed by Grubbs Ruthenium carbene catalyst. A mechanistic study". Book of Abstracts ESPA Xullo 2006 **Electronic Structure: Principles and Applications**. Páx. 115

Jesús A. Varela*, Silvia G. Rubín, Carlos González-Rodríguez, Luís 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 Terra (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 Hei-HX (X=F, Cl, Br) Accurate Intermolecular Ground State Potentials and Rovibrational Spectra of Hei-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. Pena-Galego, 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 (Xapón/Xapón). Do 21/05/2006 ó 26/05/2006.

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

M.M. Montero Campillo, J. Rodríguez-Otero, E.M. Cabaleiro-Lago, A. Pena-Galego. "From Diademane to Triquinacene: a theoretical study of a pericyclic rearrangement catalyzed by

Lithium". **XIIth International Congress of Quantum Chemistry**. Kyoto (Xapón/Xapón). Do 21/05/2006 ó 26/05/2006.

Á. Pena-Galego, 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. Pena-Galego. "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. Pena-Galego. "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. Pena-Galego. "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 Sardiña, Lakshmanan Govindasamy, Mavis Agbandje-McKenna, Robert McKenna and Benn M. Dunn. "Induced fit of ligands by the HIV-1 protease". Libro de Resumos. Lisboa, outubro 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-Dobrado "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)

Xullo A. Seijas,* M. Alicerce Vázquez-Tato,* M. Raquel Carballido-Reboreda. "Prediction of Flavone UV-Vis spectrum: semiempirical versus ad-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 o 24 de marzo de 2006. **Universidade de Santiago de Compostela**.

Rebeca Garcia Fandiño. "Reaccións de Formación de Sistemas Policíclicos:I. Síntese de taxoesteroides mediante metátesis de dieninos.II. Estudos teóricos de reaccións de ciclación de metátesis e reaccións de cicloadición [3+2] catalizadas por Pd". Director/é: Luís Castedo Expósito e Juan R. Granxa Guillén. **Universidade de Santiago de Compostela**.

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

José Luís Cagide Fajín. "Estudo Coupled Cluster de Potenciais de Interacción en Complexos 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. Romeu. "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 Romeu Caamaño. "Transferencia Protónica en Sistemas con Enlace de Hidróxeno Intramoleculuar. Influencia do Disolvente" Setembro de 2006. **Universidade de Santiago de Compostela.**

Outros:

Conferencia: Ricardo Riguera Veiga. Universidade de Zaragoza, Dpto. de Q. Orgánica, Novembro 2006

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

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

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

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

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

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

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

A. Romeu. 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 Nin 2001 data.

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

Universidade de Vigo

Artigos científicos publicados:

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

Carlos Silva López, Olalla Neto Faza, and Anxo 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 Neto Faza, Rosana Álvarez, and Anxo 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-Barbeiro, J. L. Asensio, G. Cuevas, A. Canles, 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. "ad 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 Basees 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 Neto 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 Neto 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. Aurrecoechea and Aritz 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 (Marrocos), 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.

Jóse M. Hermida-Ramón and Carlos M. Estévez. Comunicación oral no 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 lixeiro of the quantum theory of atoms in"molecules . Conferencia plenaria en congreso **ESPA (Electronic Structure Principles and Applications)**, Santiago de Compostela, 19 xullo 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 fluíde using NPT Monte Carlo". **VII Iberoamerican conference on Phase Equilibria and Fluíde 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 volume integral formulation based on the current density", **COMPUMAG 2007**

Pósteres 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, xullo-2006

D.A. Recuncho 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, xullo-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, xullo-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, xullo-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, xullo-2006

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

Manuel M. Piñeiro, Amparo Galindo and Andrew Ou. 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 Neto 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-methyl-naphthalene 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. "Interaccións Proteína-Carbohidrato:Estudo Teórico Dos Requisitos Enerxéticos Para A Distorsión de Aneis de Piranosa e Orixe das Interaccións Carbohidrato-Anel Aromático". Defendida ou 17 de Xaneiro de 2006 na **Universidade de Vigo**.

Olalla Neto Faza. "Estudo computacional de reaccións pericíclicas en sistemas cargados: Estereoselectividade e Mecanismo". Defendida en Febreiro de 2006 na **Universidade de Vigo**.

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

Teses de licenciatura/Proxectos Fin Carreira:

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

Libros/Capítulos publicados:

Jesús Jiménez-Barbeiro, Javier Cañada, Juan Luís Asensio, Gabriel Cuevas, María del Carmen Fernández-Alonso, Nuria Aboitiz, Anxos Canles, Silvia Mari, Isabel Chávez, Pomba 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., Wáshington DC. (2006)

Outros:

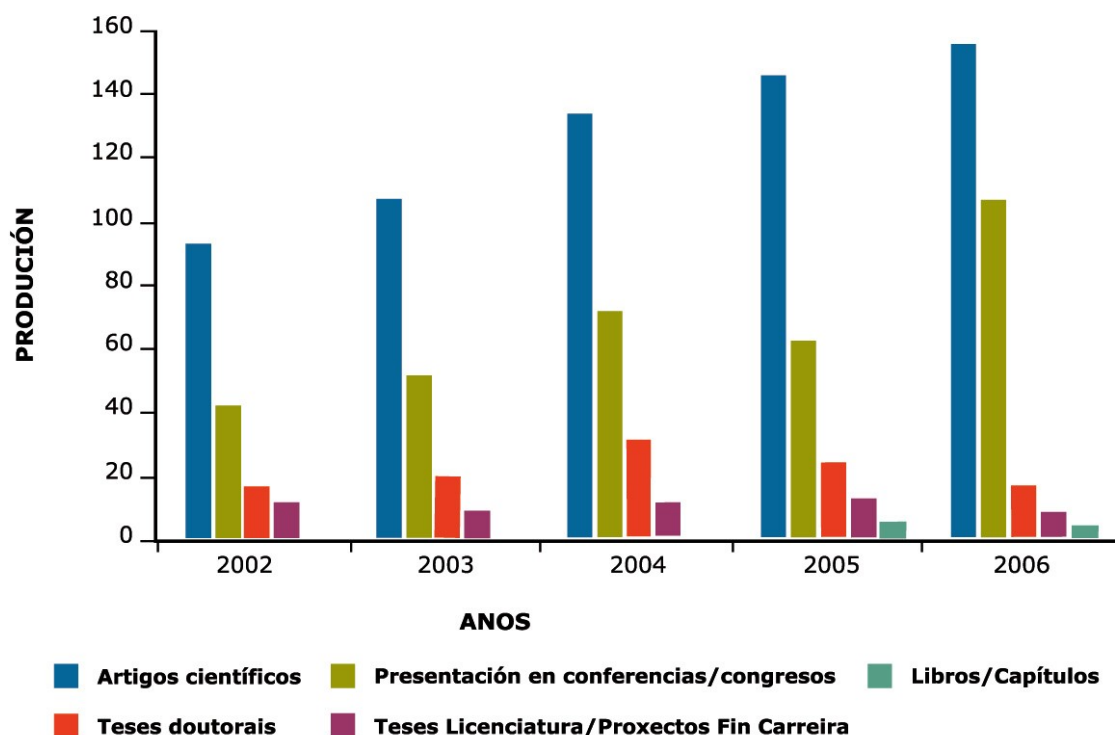
DEA, Laura Estévez Guance, Programa de Doutoramento Interuniversitario: Química Teórica e Computacional, Setembro-2006

J.C. López, "Resolución numérica das ecuacións de Maxwell en réxime armónico cuasiestacionario en base a unha formulación integro-diferencial na densidade de corrente", Tráballo de investigación tutelado no programa de doutoramento "Métodos matemáticos e simulación numérica en enxeñería e ciencias aplicadas".

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

	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%

A continuación, presentamos unha táboa comparativa da produción científica declarada polos usuarios nos anos 2002, 2003, 2004, 2005 e 2006, na que se pode observar o incremento constante da mesma:



É importante destacar que o CESGA contribúe en gran medida á produción científica das diferentes institucións. Isto pódese comprobar comparando as producións científicas totais (extraídas do Web of Science¹ para 2006) de cada institución, coas producidas utilizando recursos de cálculo do CESGA. Así, na táboa seguinte pódese apreciar que o peso relativo de cada institución mantívose con respecto ao obtido no 2005, excepto no caso da UDC, onde se ha máis que duplicado. Con todo, no CSIC houbo un importante descenso que é necesario corrixir no futuro.

¹ Procura sen filtrar efectuada cos seguintes criterios: CSIC: (OG=CSIC or SG=CONSEJ*) and CU=Spain; UDC: AD=(univ* same coru* same spain) and OG=(uni* and coru*) and CU=spain; USC: AD=(univ* same santiago same spain) and OG=(uni* and santiago) and CU=spain; UVIGO: AD=(univ* same vigo same spain) and OG=(uni* and vigo) and CU=spain

Instit 2005		2006				
	Producción Total	Producción CESGA	%	Producción Total	Producción CESGA	%
CSIC	3963	36	0,9%	4612	26	0,6
UDC	248	7	2,8%	222	16	7,2
USC	1048	37	3,5%	1083	39	3,6
UVIGO	552	25	4,5%	531	25	4,7

3.2. Producción Científica do CESGA

Congresos:

Autores	Javier Garcia Tobío
Título	Actividade GRID en España e CESGA
Tipo de participación	Relatorio
Congreso	INGRID'06
Lugar celebración	Braga (Portugal)
Data	Novembro 2006

Autores	F. J. González Castaño, P.S. Rodríguez Hernández, R.P. Martínez Álvarez, A. Gómez, I. López Cabido, J. Villasuso Barreiro
Título	Support Vector Machine Detection of Peer-to-Peer Traffic
Tipo de participación	Presentación
Congreso	CIMSA 2006 - IEEE International Conference on Computational Intelligence for Measurement Systems and Applications
Lugar celebración	A Coruña, Epaña
Data	12-14 Xullo 2006

Autores	J. Pena, F Gómez, D. González-Castaño, A. Gómez, C. Fernández, J. Mouriño, F. González-Castaño, D. Rodríguez-Silva, M. Pombar
Título	The eIMRT project: a web-based tool for Monte Carlo verification of treatment plans
Tipo de participación	Oral
Congreso	ESTRO 25 congress
Lugar celebración	Leipzig (Alemaña)
Data	8-12 outubro 2006

Autores	Ignacio López Cabido,
Título	Status and experiences with Itanium at CESGA
Tipo de participación	Presentación
Congreso	International Supercomputing Conference ISC 2006
Lugar celebración	Dresden (Alemania)
Data	28.06.06

Congresos. Posters:

Autores	Andrés Gómez, Javier López Cacheiro, Carlos Fernández Sánchez, Ignacio López Cabido, José Carlos Mouriño Galego, Javier Pena García, Faustino Gómez Rodríguez, Diego González Castaño, Francisco J. González Castaño, Daniel Rodríguez Silva
Título	IMRT Planning and Verification on
EGEE Tipo de Participación	Póster
Congreso	EGEE-06
Lugar	Xenebra (Suíza)
Data	25-29 de Setembro de 2006

Autores	Ignacio López Cabido, Juan Villasuso Barreiro
Título	Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia
Tipo de participación	Póster
Congreso	Xornadas Técnicas de Rediris
Lugar celebración	Selecta Spain
Data	13 de Novembro de 2006

Autores	Ignacio López Cabido, Carlos Fernández Sánchez
Título	Finisterrae
Tipo de participación	Póster
Congreso	Xornadas Técnicas de Rediris
Lugar celebración	Selecta Spain
Data	13 de Novembro de 2006

Publicacións:

Autores	Andrés Gómez, Carlos Fernández Sánchez, José Carlos Mouriño Galego, Francisco J. González Castaño, Daniel Rodríguez-Silva, Javier Pena García, Faustino Gómez Rodríguez, Diego González Castaño, Miguel Pombar Cameán
Título	Remote Radiotherapy Planning: The eIMRT Project.
Tipo (libro, artigo, capítulo, outra)	Artigo
Referencia	Challenges and Opportunities of HealthGrids, V. Hernández and others, eds., IOS Press, 2006

Autores	Natalia Costas Lago
Título	Informe técnico CESGA 2006-002. AccessGrid: Novos contornos de colaboración.
Tipo (libro, artigo, capítulo, outra)	Artigo
Referencia	Informe técnico CESGA 2006-002