

**MEMORIA TÉCNICA EJERCICIO 2007  
FUNDACIÓN CENTRO TECNOLÓGICO  
DE SUPERCOMPUTACIÓN  
DE GALICIA**

**Marzo 2008**

## **ÍNDICE**

- 1.- Eventos e utilización de recursos durante o ano 2007.**
  - 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.- Ingresos por proxectos e axudas.**
  - 2.2.- Descripción de Proxectos.**
  - 2.3.-Redes e Plataformas Tecnolóxicas internacionais, nacionais e rexionais.**
  
- 3.- Producción Científica.**
  - 3.1.- Producción científica de usuarios de computación do CESGA.**
  - 3.2.- Producción científica do CESGA.**

## **1.- Eventos e utilización de recursos durante o ano 2007.**

O ano 2007 foi de especial actividade orientada á planificación estratéxica do CESGA e a súa evolución futura. A modo de resumo enuméranse a continuación as accións máis significativas:

- Adaptación do edificio CESGA para o aloxamento do Finis Terrae e adecuación de espazo adicional para persoal.
- Inclusión do Finis Terrae no Mapa de Instalacións Científico-Tecnolóxicas Singulares de España.
- Proposta do plan de evolución do CESGA para converterse en Centro de Excelencia en Ciencia Computacional.
- Xestións para a construción dun novo edificio CESGA.
- Arranque do proxecto Hispano – Portugues IBERGRID para a implantación dun espazo común de I+D+I.
- Plan de evolución da RECETGA.
- Participación activa do CESGA na Plataforma Tecnolóxica das TIC, a Rede e-Ciencia, e nas Redes Temáticas de HPC e Bioinformática de Galicia.

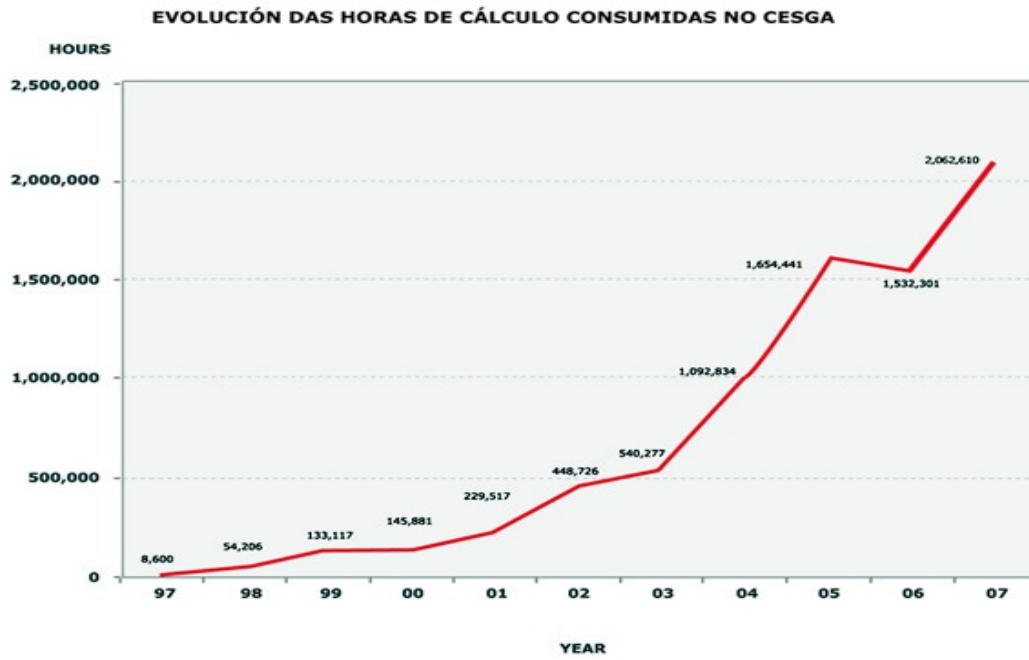
### **1.1.- Servidores de cálculo**

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.

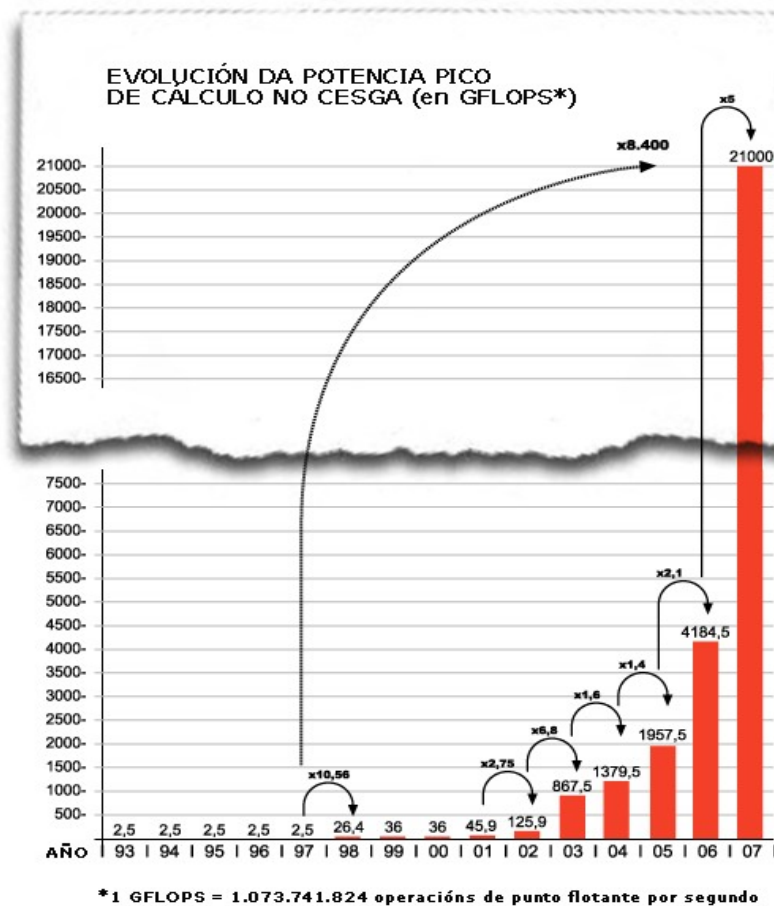
Os fitos máis relevantes durante o ano 2007 en canto a servidores de cálculo, foron:

- Preparación da infraestrutura de soporte de Finis Terrae
- Ampliación da sala de CPD. Movemento dos actuais servidores de produción á súa nova localización dentro do CPD.
- Instalación del Supercomputador Finis Terrae.

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



**Nota:** no ano 2007 200.443 horas/cálculo corresponden ao sistema GRID localizados no CESGA



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

No ano 2002 multiplícase por 2 os GFLOPS.

No ano 2003 multiplícase por 7 os GFLOPS.

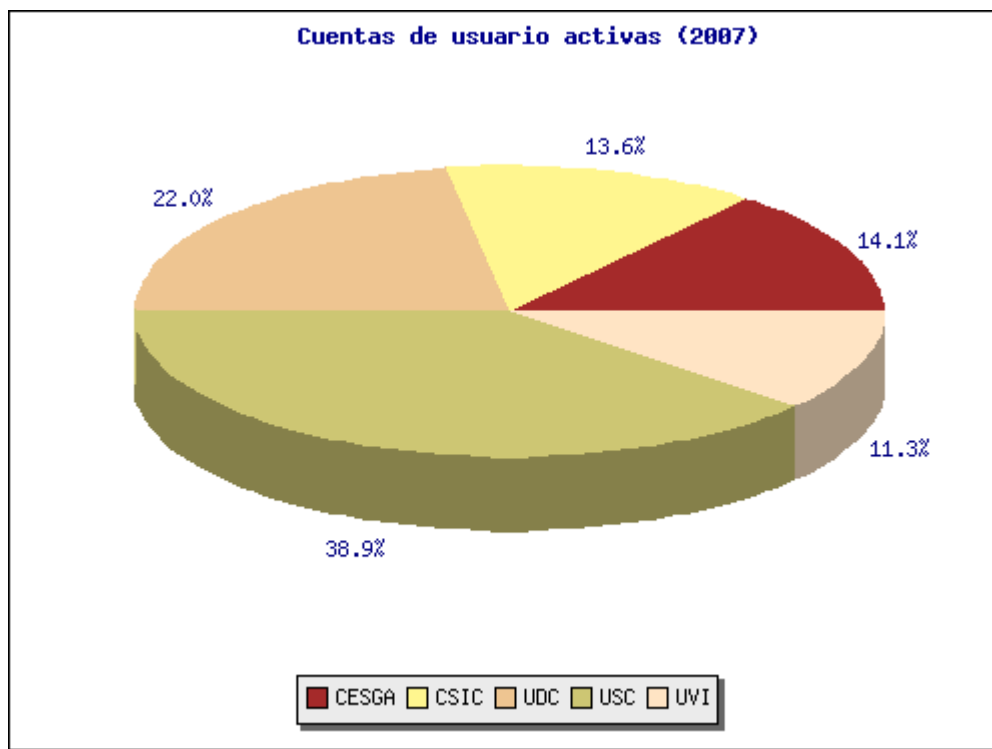
No ano 2004 pasouse de 1 TFLOPS de capacidade de cálculo agregada.

No ano 2006 dúplícanse os TFLOPS

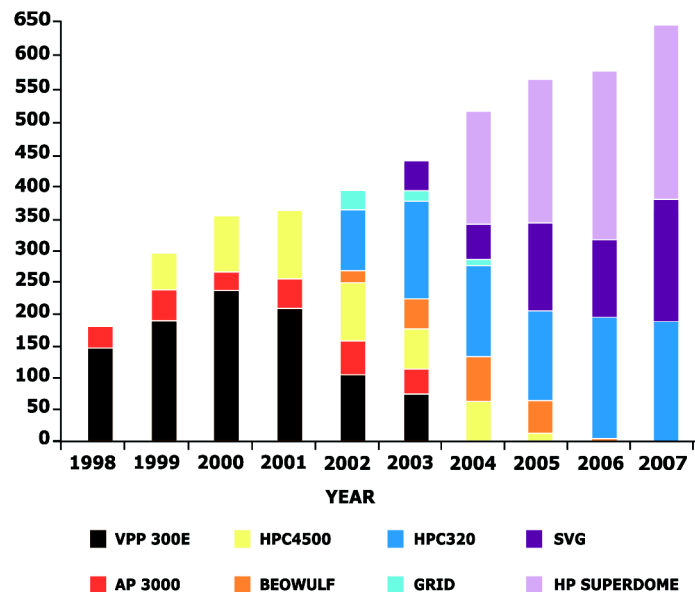
No ano 2007 multiplícanse por 5 os TFLOPS

## Número de Contas Activas

O sistema con maior número de contas activas (é dicir, usuarios con consumo significativo de horas de cálculo ao longo do ano) son o HP Superdome, con 264 usuarios con consumo (8 máis que o ano 2006). O HPC320 ocupa a terceira posición con 187 contas activas (2 menos que o ano anterior), a pesar de que este sistema deixará de prestar servizo ao longo do 2008. O cluster SVG experimentou o maior aumento en contas activas, ao contar con 194 (67 máis que o 2006), ademais dos usuarios de proxectos grid. En total, o número de contas activas creceu desde as 572 do ano 2006 ás 645 deste ano, o que supón un crecemento do 12% (no ano 2006 o incremento no número de contas activas foi tan só do 2%), fundamentalmente motivado polo incremento no número de usuarios no cluster SVG, grazas á actualización tecnolóxica do mesmo a finais do ano 2006.

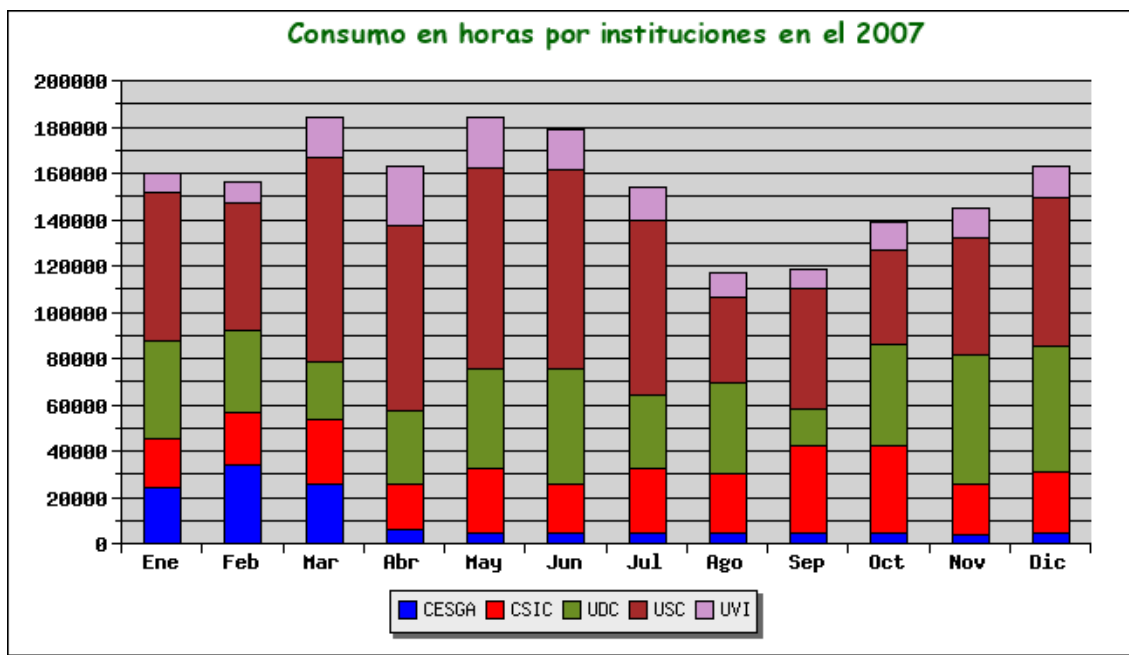


#	CESGA	CSIC	UDC	USC	UVI	Total
HPC320	12	34	47	72	22	187
SUPERDOME	23	38	54	117	32	264
SVG_DELL	56	16	41	62	19	194
Total	91	88	142	251	73	645



## Evolución do consumo da CPU

Durante o ano 2007 os servidores máis utilizados foron o cluster SVG e o servidor HP Integrity Superdome. Durante este ano púxose en produción a ampliación do cluster SVG con nodos grid, o que incrementou o consumo deste cluster (ademais de 200,443 horas de CPU utilizadas en proxectos grid que non se reflicten nestas gráficas) mostrando todos os servidores uns niveis de ocupación próximos ao 100%. A pesar das diversas incidencias no servidor de cálculo Superdome, así como as paradas debidas ás obras de adecuación do novo CPD e das instalacións eléctricas e de aire acondicionado, a priorización de traballos paralelos (a súa eficiencia é inferior que a dos traballos secuenciales) e os requirimentos de maior cantidade de memoria, o número de horas consumidas aumentou e superou os 2 millóns (2,062,610 de horas) fronte ás 1,654,411 horas do ano pasado, o que representa un incremento do 24%. Durante todo o ano o servidor HPC320, instalado no 2002 e cuxa retirada de produción está prevista ao longo do 2008, tamén continuou un nivel de utilización do 71,2%.

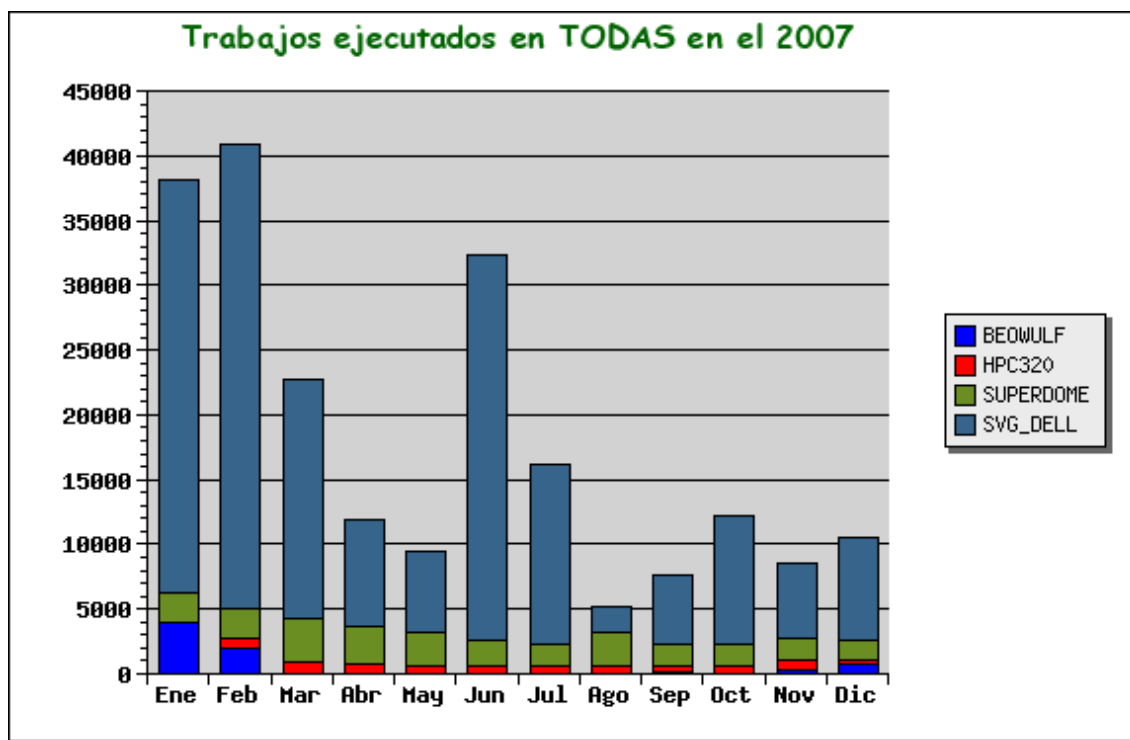


	CESGA	CSIC	UDC	USC	UVI	TOTAL
Xaneiro	24.518:16	20.472:47	42.206:50	64.603:32	8.423:35	160.225:03
Febreiro	34.121:30	22.573:49	35.095:50	55.518:25	8.679:21	155.988:58
Marzo	25.433:42	28.045:36	24.685:10	88.289:48	17.332:21	183.786:40
Abril	6.221:29	19.631:49	31.134:35	80.592:47	25.267:25	162.848:07
Maio	4.418:26	28.031:23	43.137:39	87.026:07	21.598:58	184.212:35
Juño	4.903:40	20.428:38	50.010:48	86.112:58	17.764:30	179.220:37
Jullo	4.604:33	28.069:09	31.381:47	75.698:50	13.839:53	153.594:14
Agosto	4.899:42	25.494:21	38.856:45	37.215:55	10.396:42	116.863:27
Setembro	4.530:03	37.428:05	16.114:49	52.071:13	8.285:25	118.429:38
Octubro	4.263:13	37.708:52	43.951:08	41.193:21	11.948:41	139.065:15
Novembro	3.907:53	22.079:30	55.554:03	50.545:47	12.747:43	144.834:59
Decembro	4.753:18	26.565:26	53.819:31	64.097:45	13.861:45	163.097:48
Total	126.575:50	316.529:32	465.949:00	782.966:33	170.146:25	1.862.167:21
Total GRID						200.443:00
<b>TOTAL GLOBAL</b>						<b>2.062.610:21</b>

### Número de traballos executados

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 HP Superdome. Especialmente o primeiro, debido a que é un servidor

orientado a productividad, é dicir, a realización dun gran número de traballos independentes con necesidades de cálculo relativamente baixas. Ademais, nos servidores dedicados a proxectos grid, realizáronse outros 100,115 traballos dentro do proxecto EGEE e 26,534 do proxecto int.eu.grid

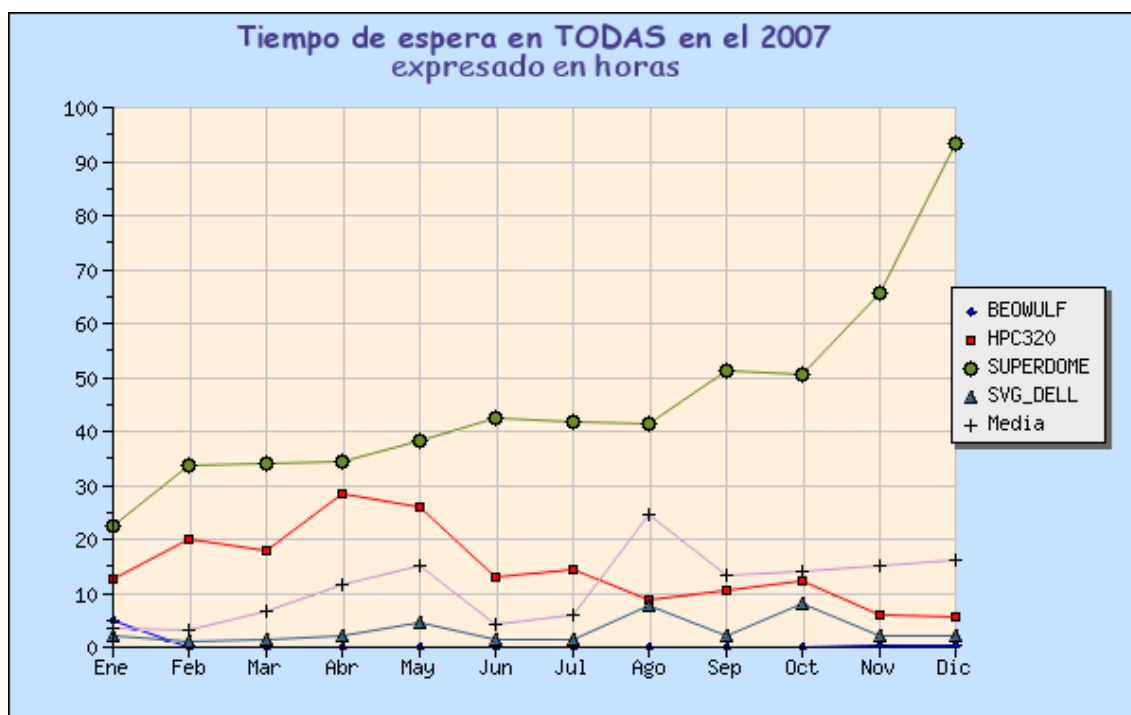


	BEOWULF	HPC320	SUPERDOME	SVG_DELL	TOTAL
Enero	3.990	37	2.177	31.978	38.182
Febrero	1.968	721	2.293	35.826	40.808
Marzo		984	3.287	18.496	22.767
Abril		745	2.980	8.206	11.931
Mayo		617	2.512	6.312	9.441
Junio	4	531	2.026	29.719	32.280
Julio		544	1.675	14.001	16.220
Agosto		584	2.556	2.028	5.168
Septiembre	181	455	1.672	5.390	7.698
Octubre		629	1.677	9.955	12.261
Noviembre	331	717	1.730	5.812	8.590
Diciembre	776	231	1.656	7.874	10.537
Total	7.250	6.795	26.241	175.597	215.883
Total EGEE					100.115
Total GRID int.eu.grid					26.534
<b>TOTAL GLOBAL</b>					<b>342.532</b>



### Tempo medio de espera en cola por sistema

Os tempos medios de espera en cola representan o tempo que deben esperar en media 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 dos investigadores 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 estean dispoñibles os recursos suficientes. Xa que logo, esta medida tamén é un bo indicador de cal é o nivel de saturación existente nos recursos de computación. Normalmente os tempos de espera diminúen nos períodos estivais de verán e 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 durante todo o ano e aumentando por encima de 50 no último cuarto do ano) e o HPC320, con menores tempos de espera durante os meses de Xullo e Agosto. Mentres que o tempo medio de espera subiu no Superdome de 19 a 43 horas, no HPC320 baixou de 19 a 15 horas e no SVG non variou.



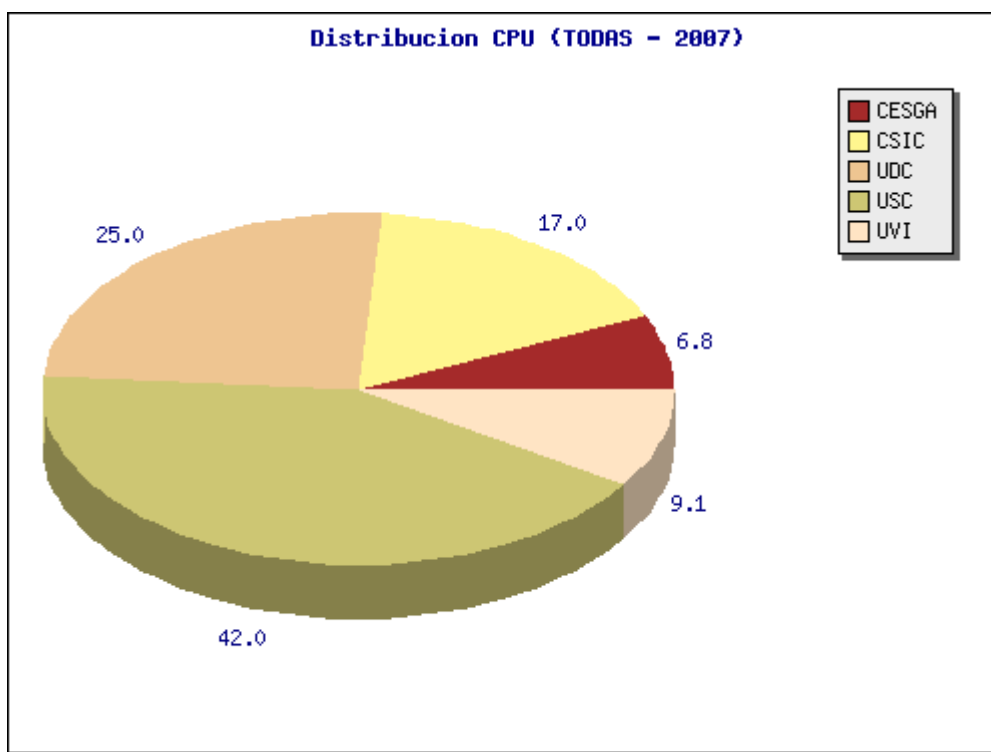
	BEOWULF	HPC320	SUPERDOME	SVG_DELL	MEDIA
Enero	0d-04:44:24	0d-12:27:46	0d-22:28:36	0d-02:01:22	0d-03:28:59
Febrero	0d-00:08:30	0d-19:54:07	1d-09:46:44	0d-00:56:49	0d-03:05:16
Marzo		0d-17:49:11	1d-09:57:21	0d-01:23:24	0d-06:48:06
Abril		1d-04:22:39	1d-10:18:35	0d-01:58:58	0d-11:42:18

	<b>BEOWULF</b>	<b>HPC320</b>	<b>SUPERDOME</b>	<b>SVG_DELL</b>	<b>MEDIA</b>
Mayo		1d-01:56:03	1d-14:19:28	0d-04:33:02	0d-14:56:04
Junio	0d-00:00:07	0d-12:51:59	1d-18:26:52	0d-01:23:06	0d-04:09:04
Julio		0d-14:26:29	1d-17:54:49	0d-01:30:58	0d-06:07:17
Agosto		0d-08:42:24	1d-17:27:48	0d-07:39:53	1d-00:29:55
Septiembre	0d-00:04:14	0d-10:32:40	2d-03:21:19	0d-02:03:37	0d-13:13:19
Octubre		0d-12:20:27	2d-02:28:04	0d-07:59:28	0d-14:01:27
Noviembre	0d-00:13:47	0d-05:55:13	2d-17:32:16	0d-02:12:49	0d-15:11:59
Diciembre	0d-00:19:23	0d-05:44:40	3d-21:16:53	0d-01:59:11	0d-16:17:39
Media	0d-02:41:38	0d-15:48:17	1d-19:19:52	0d-02:05:12	0d-07:33:08

### **Distribución por institucións das horas de CPU consumidas en todos os sistemas.**

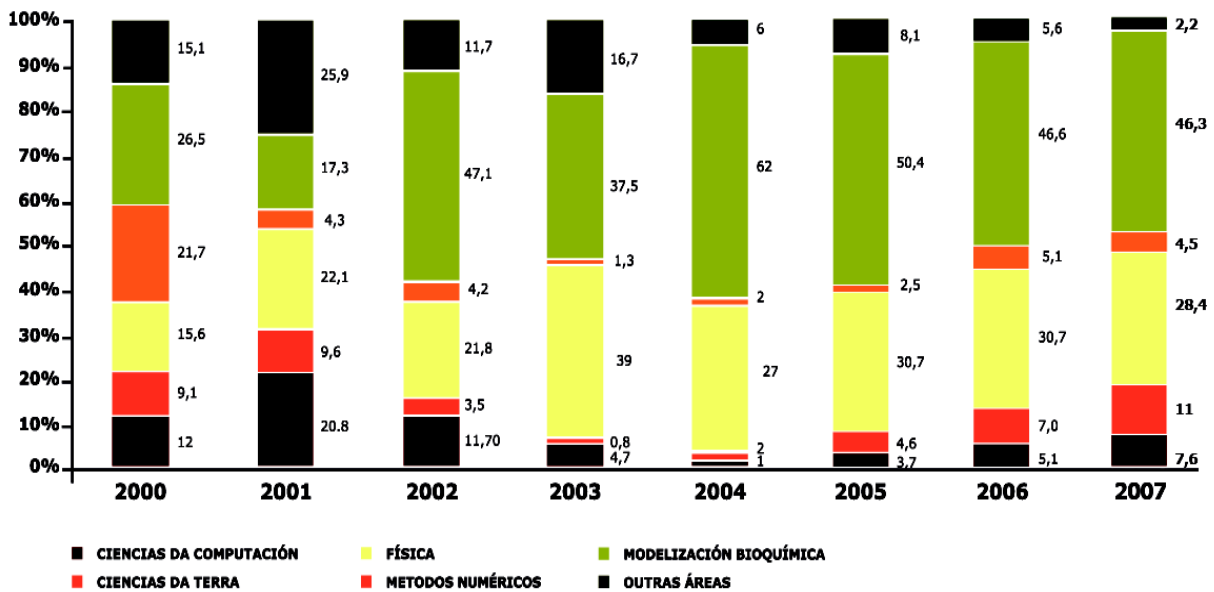
Todas as institucións incrementaron o número de horas de cálculo consumidas respecto ao ano seguinte. Por institucións, o maior consumo de horas de computación rexistrouse na Universidade de Santiago de Compostela co 42% das horas (un 2.3% menos que o ano anterior), seguida pola Universidade da Coruña cun 25% de consumo total (un 1.4% inferior ao ano pasado). No seu conxunto, as tres universidades galegas representan un 76.1% do consumo, e o CSIC o 17% do total (fronte ao 13.7% do ano anterior). Os proxectos nos cales participa o CESGA foron responsables dun 6.8% do consumo de horas.

<b>Institución</b>	<b>Consumo</b>	<b>Consumo (%)</b>
CESGA	126557:21	6.8
CSIC	316542:29	17.0
UDC	465953:36	25.0
USC	782962:47	42.0
UVI	170151:5	9.1
TOTAL	1862167:21	100



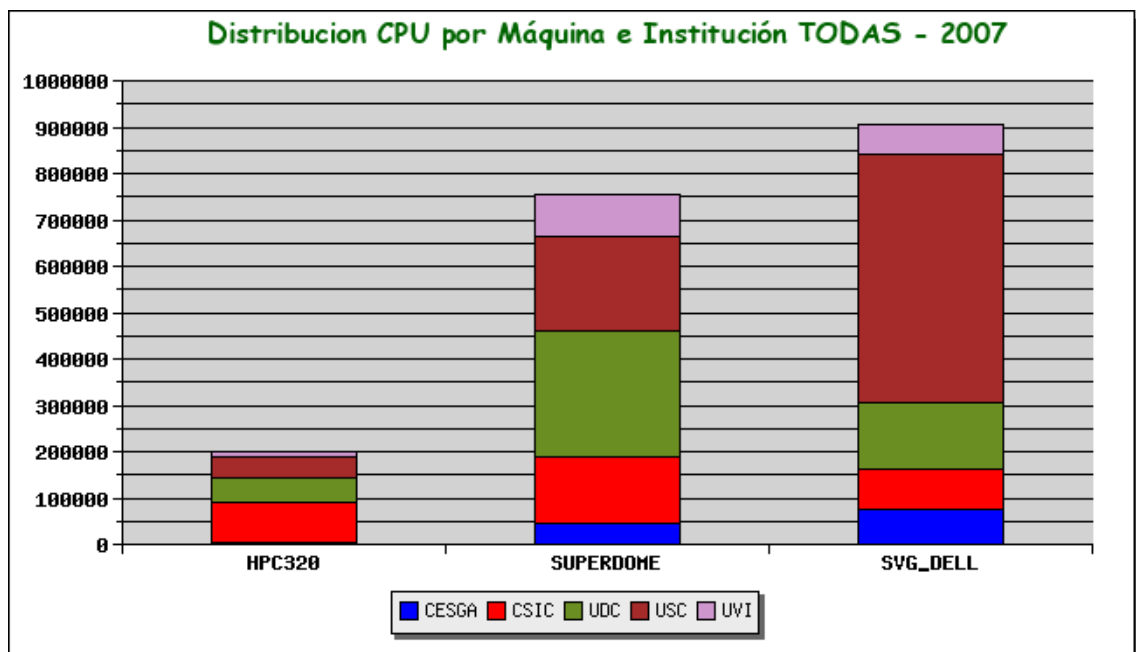
### Distribución de CPU por Área de Trabajo

Por áreas de traballo, os cálculos relacionados con modelización bioquímica consumiron no ano 2007 o 46.3% das horas de cálculo, mentres que o 28.4% dedicáronse ao estudo dá física, representando estas dúas áreas o 74.7% do consumo total de horas. A modelización bioquímica volve ser, do mesmo xeito que o ano anterior, a área de maior demanda computacional, aínda que diminuíu un 0.3%. Tamén é destacable o aumento da área de ciencias da terra, que se incrementou desde o 4.6% do ano 2005 ao 11% no 2007, e as ciencias da computación que pasaron do 3,7% do 2005 ao 7.6% do 2007.



### 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 Coruña e o SVG é utilizado maioritariamente polos investigadores da Universidade de Santiago.



	HPC320	SUPERDOME	SVG_DELL	Total
CESGA	2896:57	46929:30	76695:02	126521:29
CSIC	88461:40	142754:24	85508:29	316724:33
UDC	51330:49	272174:05	142452:44	465957:38
USC	45261:04	200634:39	536936:42	782832:25
UVI	12369:12	92050:20	65711:42	170131:14
TOTAL	200319:44	754542:58	907304:39	1862167:21

## 1.2.- Aplicacións científicas

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

- O elevado número de accións de soporte feitas durante o ano (123), o que representa un **incremento interanual do 35%**.
- A portabilidade das aplicacións máis importantes ao futuro servidor FINIS TERRAE. Portáronse aplicacións como:
  - AMBER versión 9.0
  - GAUSSIAN 03 versiones C01, D.02 e E.01
  - GROMACS versiones 3.3.1 e 3.3.2
  - NAMD versión 2.6b1
  - OCTOPUS versión 2.1.0
  - GAMESS versión 24 Mar 2007 (R1)
  - SIESTA versión 2.0.1
  - CODE-ASTER versión 9.1.0
  - Librerías como:
    - Librería FFTW versión 3.1.2
    - Librería GSL versión 1.9
    - Librería NETCDF versiones 3.6.1 e 3.6.2
- A organización de 6 cursos de formación interna e externa:
  - Para o proxecto i-MATH de dous cursos de computación: MATEMÁTICA COMPUTACIONAL: Compilación, execución e optimización de programas e Programación paralela utilizando directivas OpenMP.
  - Globus 4
  - Programación con UPC
  - AJAX, un enfoque práctico.
  - Seminario sobre Protección de Datos de Carácter Persoal (LOPD).
- O análise das novas infraestruturas do CESGA (servidores Quad Core,

maqueta do Finis Terrae, Finis Terrae) que xenerou un informe técnico relacionado cos novos procesadores Intel Quad-core.

- O análise da situación dos ficheiros de datos pessoais do CESGA con respecto á LOPD e a súa reestructuración.
- Ao mesmo tempo facilitouse o uso das aplicacións ao usuario mediante a súa configuración vía a utilidade modules que permite a configuración dinámica dun entorno UNIX para calquera número de paquetes de software cos seus correspondientes versións.
- O elevado número de peticións de novas instalacións ou actualizacións (29) ou de soporte á compilación de aplicacións de usuario ou con licencia de usuario (17).
- O análise, en conxunción con Mancomún e coas tres universidades galegas das ferramentas de software libre para CAD e simulación numérica, para incluílas como soporte no CESGA.
- O inicio dunha colaboración có CSCS (**Swiss National Supercomputing Centre**) na área de visualización química a través da rede COST GRIDCHEM.

Esta actividade se resume nas seguintes cifras:

- 55 aplicacións uo librerías de cálculo científico en produción.
- 36 aplicacións novas instaladas ou actualizadas.
- 2 aplicacións de usuario paralelizadas.
- 1 desenvolvemento de aplicación.
- Publicación de 1 informe técnico CESGA.
- 123 solicitudes de axuda atendidas.
- Unha aplicación de xestión posta en produción (xestión da calidade).

O catálogo de aplicacións e bibliotecas de utilidades instaladas a decembro do 2007 nos servidores de cálculo do CESGA con acceso para todos os usuarios son as seguintes:

Área	Aplicación	HPC 320	HP Superdome	SVG D	Outros
Análise Científico	<a href="#">ROOT</a>	X			
Bases de Datos Científicas	<a href="#">CSD</a>				<a href="http://csd.cesga.es">csd.cesga.es</a>
	<a href="#">ZENTRALBLATT</a>				<a href="http://zmath.cesga.es">zmath.cesga.es</a>
Bioinformática	<a href="#">BEAMnrc</a>			X	
	<a href="#">Blast</a>	X		X	
	<a href="#">GlimmerM</a>			X	
	<a href="#">IM</a>		X		
	<a href="#">Migrate</a>	X		X	
	<a href="#">MrBayes</a>		X	X	
	<a href="#">MSVAR</a>		X		
	<a href="#">Phylip</a>			X	
	<a href="#">r8s</a>		X	X	X
Cálculo Estructural, Flúidos e Magnetismo	<a href="#">Ansys</a>	X			

Área	Aplicación	HPC 320	HP Superdome	SVG D	Outros
Cálculo Molecular	<a href="#">abinit</a>			X	
	<a href="#">Aimpac</a>	X			
	<a href="#">Amber</a>	X	X	X	
	<a href="#">CPMD</a>	X	X	X	
	<a href="#">Dalton</a>	X	X	X	
	<a href="#">Gamess</a>	X	X	X	
	<a href="#">Gaussian 03</a>	X	X	X	
	<a href="#">Gaussian 98</a>	X	X	X	
	<a href="#">Gromacs</a>	X	X	X	
	<a href="#">LAMMPS</a>		X		
	<a href="#">Molden</a>	X	X		
	<a href="#">NAMD</a>	X			
	<a href="#">NWChem</a>	X	X		
	<a href="#">SIESTA</a>		X		X
<a href="#">XPLOR-NIH</a>				X	
Librerías Matemáticas	<a href="#">ACML</a>			X	
	<a href="#">ATLAS</a>			X	
	<a href="#">BLAS</a>	X	X		
	<a href="#">cernlib</a>			X	
	<a href="#">CLHEP</a>			X	
	<a href="#">FFTW</a>	X	X	X	
	<a href="#">GMP</a>		X		
	<a href="#">LAPACK</a>	X	X		
	<a href="#">Numeric Python</a>				
	<a href="#">ScaLAPACK</a>		X		
<a href="#">SUPERLU</a>		X			
Simulación	<a href="#">Bsoft</a>	X		X	
	<a href="#">EMAN</a>			X	
	<a href="#">Geant</a>			X	
	<a href="#">Matlab</a>	X		X	
	<a href="#">SPIDER</a>	X		X	
	<a href="#">Xmipp</a>			X	
Visualización Científica e Animación	<a href="#">Ferret</a>	X		X	
	<a href="#">Grace</a>			X	
	<a href="#">Grads</a>	X	X	X	
	<a href="#">Ncarg</a>	X	X	X	
	<a href="#">ncBrowse</a>	X			
	<a href="#">ncl</a>	X			
	<a href="#">Ncview</a>	X			
	<a href="#">NetCDF</a>	X	X	X	
<a href="#">udunits</a>	X				
Xestión de Software	<a href="#">CVS</a>	X	X		

As novas aplicacións ou bibliotecas de utilidades incorporadas durante o ano 2007 a petición dos usuarios ou por incorporación de novas versións son:

Aplicación	Tarea
<b>Bases de Datos Científicas</b>	
<b>CSD (Instalada nova versión)</b>	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.
<b>Cálculo Molecular</b>	
<b>Amber (nova)</b>	AMBER é un conxunto de programas que permiten ao usuario realizar

Aplicación	Tarea
versión no SVG e Superdome / portada ao Finis Terrae)	simulacións de dinámica molecular, fundamentalmente en biomoléculas, baseadas en teorías de campos de forza.
<b>EON</b> (nova instalación no SVG)	EON é un programa para a comparación de potenciais electroestáticos en moléculas do paquete Openeye. é un programa que pode ser de gran axuda no deseño de librerías de compostos nos procesos de deseño de fármacos por computador.
<b>Gamess</b> (nova versión no SVG, HPC320 y Superdome / portada ao Finisterrae)	É un paquete análogo a GAUSSIAN que incorpora métodos ab initio, aínda que presenta solucións específicas para a descrición de orbitais, e outros métodos de optimización.
<b>Gaussian 03</b> (novas versións no SVG e Superdome / portada ao Finisterrae)	Gaussian 03 é un dos paquetes máis usados en Química computacional que permite o cálculo de propiedades (energías, frecuencias de vibración, xeometría óptima, etc.) de moléculas e intermedios de reacción, fundamentalmente mediante métodos ab initio (teóricos).
<b>Gold</b> (nova instalación no SVG)	GOLD é un programa para o cálculo de ?docking? de pequenas moléculas en proteínas. GOLD está altamente considerado dentro da comunidade de modelado molecular debido á súa alta precisión e eficacia.
<b>Materials Studio</b> (nova instalación no SVG)	Materials Studio é un paquete de modelado e simulación de fácil uso para o estudo de sustancias químicas e materiais incluíndo estruturas cristalinas e procesos de cristalización, polímeros, catálisis e actividade estrutural.
<b>MOLPRO</b> (nova versión no Superdome)	Molpro é un completo sistema de programas ab initio para o cálculo de estrutura electrónica en moléculas. Este paquete especialízase en cálculos altamente precisos, cun tratamento intensivo do problema de correlación electrónica a través de métodos multiconfiguración CI, coupled-cluster e similares.
<b>NWChem</b> (nova versión no SVG, HPC320 e Superdome)	NWChem é un paquete de química computacional deseñado para a súa execución sobre supercomputadores paralelos de altas prestacións do mesmo xeito que sobre clusters de estacións de traballo convencionais. Pretende ser escalable tanto na súa capacidade para tratar grandes problemas dun xeito eficiente como no seu uso dos recursos de computación paralelos dispoñibles.
<b>OMEGA</b> (nova instalación no SVG)	OMEGA é un programa para a xeración de bases de datos de confórmeros estruturais do paquete Openeye necesarias nos procesos de deseño de fármacos por computador.
<b>OpenBabel</b> (nova instalación no SVG e no Superdome)	Open Babel é un conxunto de ferramentas deseñadas par falar e entender as múltiples linguaxes usadas actualmente nos datos químicos. é un proxecto aberto e colaborativo que permite buscar, converter, analizar e almacenar datos en áreas de modelado molecular, química, materiais ou bioquímica.
<b>Q5COST</b> (nova instalación no SVG e Superdome)	Librería para o uso do formato de datos estándar en Química Cuántica Q5COST baseado en HDF5.
<b>Qdyn</b> (nova instalación no SVG)	Qdyn é un paquete de dinámica molecular deseñado para cálculos de enerxía libre en sistemas biomoleculares.
<b>ROCS</b> (nova instalación no SVG)	ROCS é un programa para a comparación de volumes e formas en moléculas. é parte do paquete Openeye usado nos procesos de deseño de fármacos por computador.
<b>SIESTA</b> (nova instalación no SVG e no Superdome /	Sesta (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms) é tanto un método como o seu implementación como programa informático, para levar a cabo cálculos de estrutura



Aplicación	Tarea
portada ao Finisterrae)	electrónica e simulacións de dinámica molecular ab inicio de moléculas e sólidos.
<b>Turbomole</b> (nova instalación no SVG e no Superdome)	TURBOMOLE é un paquete de programas especializados en Química Cuántica. Actualmente é un dos códigos máis estable e rápido para métodos estándar en Química Cuántica (HF, DFT, MP2). A diferenza doutros códigos na súa área o seu obxectivo principal é posibilitar o estudo de moléculas de relevancia industrial en tempo e requirimentos computacionais razoables.
<b>WIEN2K</b> (nova instalación no SVG e no Superdome / portada ao Finisterrae)	WIEN2k permite realizar cálculos de estrutura electrónica en sólidos usando teoría da funcional da densidade (DFT).
<b>XPLOR-NIH</b> (nova instalación no Superdome)	PLOR-NIH é un programa de determinación de estrutura molecular construído sobre o programa XPLOR, que inclúe ferramentas adicionais.
<b>Bioinformática</b>	
<b>ALLEGRO</b> (nova instalación no SVG)	Esta aplicación, coa funcionalidade básica de Genehunter, dá solución a problemas de optimización que utilizan as metodoloxías máis avanzadas de algoritmia xenética.
<b>IM</b> (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".
<b>MEGA2</b> (nova instalación en el SVG)	Utilidade de conversión de datos en proxectos de análise de relacións xenéticas ("linkage")
<b>MERLIN</b> (nova instalación no SVG)	Un dos paquetes de software de análise de pedigree máis rápidos na actualidade.
<b>MSVAR</b> (nova instalación no Superdome)	Programa para a detección de crecementos ou declives en poboacións usando "autosomal microsatellite frequencies". Este programa está deseñado para axudar ao usuario a explorar as historias demográficas e genealóxicas máis probables consistentes cun conxunto de cromosomas recollidos nun ou máis "loci". Ten o seu fundamento nunha simulación Markov Chain Monte Carlo (MCMC).
<b>MULTIDIVTIME</b> (nova instalación no SVG)	Programa para o estudo de velocidades de evolución molecular e estimación de tempos de diverxencia.
<b>PAML</b> (nova instalación no SVG)	PAML é un conxunto de programas para análise filoxenético do DNA ou secuencias de proteínas usando algoritmos de "maximum likelihood".
<b>SIMWALK2</b> (nova instalación no SVG)	SimWalk2 é unha aplicación de estatística xenética para haplotipos, "parametric linkage", "non-parametric linkage" (NPL), "identity by descent" (IBD) e "mistyping analyses on any size of pedigree". SimWalk2 usa algoritmos Markov chain Monte Carlo (MCMC) e "simulated annealing" para levar a cabo estes análises multipunto
<b>Simulación Metereolóxica</b>	
<b>WRF/NMM</b> (nova instalación no SVG)	El modelo Weather Research and Forecasting (WRF) es un sistema de predicción metereolóxica numérico diseñado tanto para predicciones operativas como para investigación atmosférica.
<b>Simulación Microscopía electrónica</b>	
<b>EMAN</b> (nova versión no SVG)	EMAN é un paquete de software completo para a construción de modelos 3D desde un conxunto de imaxes de partículas orientadas aleatoriamente. Esta técnica úsase tipicamente xunto imaxes de moléculas individuais obtidas usando criomicroscopía electrónica.
<b>XMIPP</b> (nova instalación no SVG)	Xmipp, "X-Window-based Microscopy Image Processing Package", é un conxunto de programas para o procesado de imaxes procedentes de microscopía electrónica e cuxo fin é a reconstrución 3D de

Aplicación	Tarea
	partículas individuais.
<b>Optimización</b>	
<b>XPRESS-MP</b> (nova instalación no Superdome)	Xpress-MP é un conxunto de ferramentas de optimización e modelado matemático usado para resolver problemas lineais, de enteiros, cuadráticos, non lineais e de programación estocástica.
<b>Cálculo Estructural, Fluidos e Magnetismo</b>	
ANSYS(nova instalación no SVG)	ANSYS é un paquete de elementos finitos orientado inicialmente ao cálculo de estruturas sólidas e análises térmicas, que nos últimos anos estendeu o campo de aplicación dos elementos finitos á mecánica de fluidos e magnetismo, co paquete ANSYS Multiphysics.
CODE-ASTER(nova instalación no SVG)	Code Aster é un paquete de software para análise de elementos finitos e simulación numérica en mecánica estrutural.
SALOME(nova instalación no SVG)	SALOME é un software que achega unha plataforma xenérica para Pre e Post-procesado en simulación numérica. Está baseado nunha arquitectura aberta e flexible composta de compoñentes reusablees dispoñibles como software libre.
OpenFOAM(nova instalación no SVG)	OpenFOAM CFD Toolbox (Open Field Operation and Manipulation) pode permitir facer simulacións desde fluxos de fluídos complexos involucrando reaccións químicas, turbulencia e transferencia de calor, ata dinámica de sólidos e electromagnetismo.
HEMCUVE ++ (portada ao Finisterrae)	HEMCUVE é un código electromagnético propio que implementa o Fast Multipole Method de forma paralela.
<b>Simulación</b>	
AUGER(nova instalación no SVG)	O Observatorio Auger foi deseñado para a detección e o estudo, cunha calidade e precisión sen precedentes, dos raios cósmicos de enerxías próximas e por encima do límite de GZK, ou o que é o mesmo, con enerxías de máis de 10 <sup>19</sup> eV. Dentro dos límites do coñecemento actual, non hai ningunha explicación satisfactoria dos mecanismos de produción no universo de partículas a tales enerxías macroscópicas. O proxecto Auger é, xa que logo, o único medio que a comunidade científica pode propor co obxecto de resolver un enigma astrofísico que dura xa máis de 30 anos.
MATHEMATICA(nova instalación no SVG)	Un dos sistemas software matemáticos máis recoñecido con miles de algoritmos orixinais e un deseño global unificado permite desde simples operacións de cálculo e demostracións educativas ata desenvolvemento de sistemas a longa escala con computación de altas prestacións.
MATLAB(nova versión no SVG)	Paquete de cálculo simbólico, con múltiples aplicacións en control de procesos, resolución de ecuacións, simulación dinámica, análise de sinais, comunicacións, etc. Permite levar a cabo tarefas computacionalmente moi demandantes necesitado un tempo de desenvolvemento moito menor que con linguaxes tradicionais como C, C++, e Fortran.
<b>Visualización Científica e Animación</b>	
NCVIEW(nova versión no SVG, Superdome e HPC320)	Ncview é unha aplicación gráfica para a representación de ficheiros con formato netCDF.
<b>Librerías</b>	
JASPER(nova instalación no Superdome)	O proxecto JasPer Project é unha iniciativa open-source para proporcionar unha implementación de referencia do codec especificado no estándar JPEG-2000 Part-1 (i.e., ISO/IEC 15444-1)
LIBPNG(nova instalación no HPC320)	libpng é librería oficial de referencia do formato PNG. Soporta practicamente todas as especificacións PNG sendo extensible e habendo sido amplamente probado por preto de 12 anos.
ZLIB(nova instalación no HPC320)	zlib está deseñada como unha librería de propósito xeral totalmente open-source para comprensión de datos e uso en virtualmente

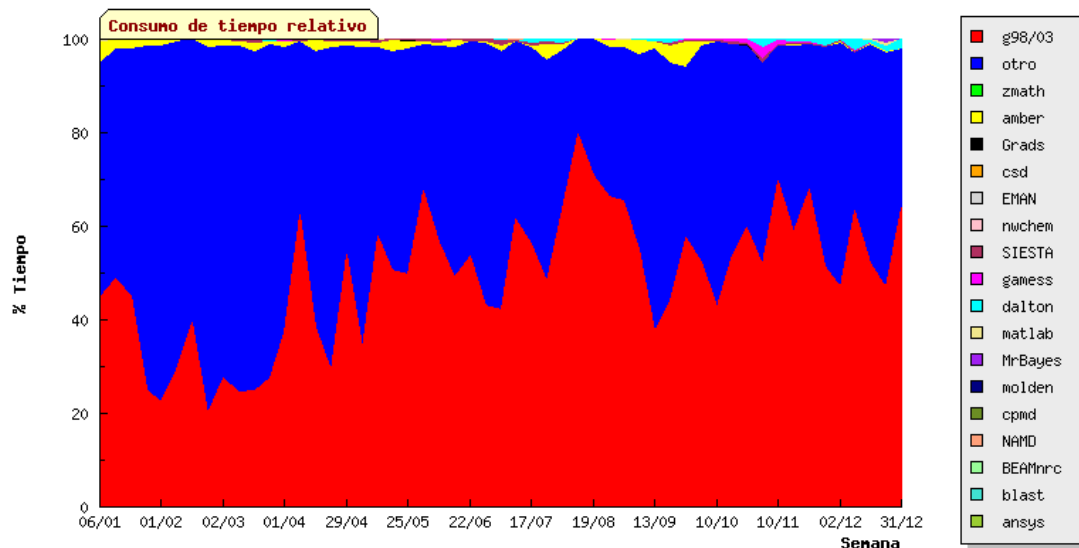
Aplicación	Tarea
HPC320)	calquera hardware ou sistema operativo.
HDF5(nova instalación no SVG e Superdome)	HDF5 é un software con tecnoloxía única que fai posible o manexo de coleccións de datos extremadamente grandes e complexo.
<b>Java</b>	
JROCKIT(nova instalación no SVG)	BEA JRockit está deseñado para un rendemento óptimo de aplicacións Xava en contornas de longa escala. Con iso, os desenvolvedores Xava non necesitan coñecer a programación interna da JVM para alcanzar un rendemento óptimo da súa aplicación.

### Estatísticas de Uso de Aplicacións durante o ano 2007

Estatísticas de uso de aplicacións dende o 1 de xaneiro do 2007 incluído o 31 de decembro do 2007. 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 nas que o 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 sys	usr	elp	Memoria	I/O (Chars)	R/W (Blocks)
<b>CESGA</b>							
amber	18	0.11	1.18	1.30	204.15	6,288,321	374
BEAMnrc	14	0.07	66.76	66.84	23.30	0	0
blast	11	0.11	0.64	3.85	2.85	0	0
csd	724	0.02	0.01	349.20	72.05	0	0
EMAN	1363	0.21	33.98	41.09	1.09	0	0
g98/03	2028	29.48	752.37	768.72	199.99	5,668,618,194	332,159
gamess	31	0.14	24.85	25.41	10.99	0	0
Grads	3843	29.29	79.25	357.44	24.25	45,352,525,320	784,492
matlab	2	0.00	0.10	0.14	47.16	69,992,448	1,155
nwchem	374	12.04	217.46	265.17	375.31	15,656,888,536	61,315,459
otro	92061	2,133.99	142,319.29	2,031,936.25	29,368.00	312,999,144,245	6,389,725,070
SIESTA	23	0.01	0.83	0.88	58.33	3,376,495	374
<b>TOTALCESGA</b>	<b>100492</b>	<b>2,205.46</b>	<b>143,496.72</b>	<b>2,033,816.30</b>	<b>29,368.00</b>	<b>379,756,833,559</b>	<b>6,452,159,083</b>
<b>CSD</b>							
otro	8	0.00	0.86	2.00	37.27	0	0
zmath	284601	1.21	10.07	38.91	50.00	0	0
<b>TOTALCSD</b>	<b>284609</b>	<b>1.21</b>	<b>10.93</b>	<b>40.91</b>	<b>50.00</b>	<b>0</b>	<b>0</b>
<b>CSIC</b>							
amber	16444	17.54	17,229.93	20,113.91	40.17	741,324,782	149,935
dalton	16	1.07	2.60	4.60	302.06	418,782,907	14,609
g98/03	27658	1,380.89	92,018.99	81,323.30	1,866,240.00	25,674,012,101	5,111,848,710
gamess	47	50.47	296.13	508.61	207.25	114,923,065	1,102,497,265
matlab	3	35.27	53.94	300.23	2.68	0	0
MrBayes	84	0.81	453.36	718.74	107.21	299,241,994	1,276
NAMD	21	0.42	70.58	71.45	221.62	1,083,504	574,320
nwchem	3	7.47	13.73	30.32	145.55	65,011,714	434,057
otro	15366	4,310.22	169,083.87	212,670.86	7,328.00	122,145,635,514	3,858,701,360
SIESTA	1	0.02	9.92	11.47	2.13	23,844,618	1,487
<b>TOTALCSIC</b>	<b>59643</b>	<b>5,804.20</b>	<b>279,233.05</b>	<b>315,753.49</b>	<b>1,866,240.00</b>	<b>149,483,860,199</b>	<b>10,074,223,019</b>
<b>OTROS</b>							
otro	4	0.09	1.00	1,868.18	1.08	0	0
<b>TOTALOTROS</b>	<b>4</b>	<b>0.09</b>	<b>1.00</b>	<b>1,868.18</b>	<b>1.08</b>	<b>0</b>	<b>0</b>
<b>UDC</b>							
ansys	4	1.05	6.49	7.94	550.00	174,744	4,362,744

Aplicaciones	Jobs	Tempo sys	usr	elp	Memoria	I/O (Chars)	R/W (Blocks)
g98/03	292598	1,823.42	397,929.21	372,015.71	1,796,608.00	93,355,175,598	7,330,882,192
matlab	57	11.10	296.51	314.41	2,811.50	71,057,613	1,379,576
otro	2866	125.04	57,760.84	63,572.40	947.73	41,680,367	73,491
<b>TOTALUDC</b>	<b>295525</b>	<b>1,960.60</b>	<b>455,993.05</b>	<b>435,910.47</b>	<b>1,796,608.00</b>	<b>93,468,088,322</b>	<b>7,336,698,003</b>
<b>USC</b>							
cpmd	62	0.07	20.14	20.99	511.95	119,667,153	2,548
csd	1866	0.06	0.77	40.02	76.62	0	0
dalton	191	383.49	4,999.47	7,106.33	102.70	1,724,391,461	72,080,993
EMAN	2	0.00	1.11	1.11	0.49	0	0
g98/03	48583	2,181.20	201,958.42	201,166.89	1,511,168.00	36,905,607,363	3,487,200,363
gamess	21	1.83	47.46	67.91	42.95	93,729,260	100,445
matlab	10	8.79	334.87	358.95	132.75	218,300,056	13,080
nwchem	1	0.00	0.16	0.17	85.38	19,912	62,344
otro	193278	9,456.89	468,930.86	612,984.40	1,510.50	495,614,843,389	1,159,769,883
SIESTA	349	17.10	4,773.75	4,875.66	1,318.00	116,978,922	138,799,891
<b>TOTALUSC</b>	<b>244363</b>	<b>12,049.42</b>	<b>681,067.01</b>	<b>826,622.42</b>	<b>1,511,168.00</b>	<b>534,793,537,510</b>	<b>4,858,029,547</b>
<b>UVI</b>							
amber	2728	1.72	1,531.67	2,131.70	60.86	411,303,938	11,095
g98/03	4888	803.86	118,550.11	113,299.05	760,320.00	62,754,234,006	318,879,884
gamess	261	114.59	1,435.35	2,042.33	32.05	1,197,832,426	2,606,755,962
matlab	25	1.46	217.62	265.45	29.47	4,407	0
molden	81	0.48	2.67	27.12	10.53	1,155,447,313	569
otro	3696	859.09	46,260.52	51,895.15	1,035.50	8,225,204,427	1,584,231,479
<b>TOTALUVI</b>	<b>11679</b>	<b>1,781.20</b>	<b>167,997.93</b>	<b>169,660.81</b>	<b>760,320.00</b>	<b>73,744,026,517</b>	<b>4,509,878,989</b>



### **1.3.- Subsistema de Almacenamento**

A capacidade total de almacenamento dispoñible para os usuarios do CESGA aumentou considerablemente no ano 2007 coa incorporación de Finis Terrae. A capacidade en almacenamento temporal aumentou en 124TB, a do almacenamento paralelo en 216TB e a do almacenamento en cinta en 160TB coa incorporación dun novo robot de cintas con capacidade de ata 1400 cartuchos de 1,6 TB cada un. En total o almacenamento dispoñible para os usuarios chega agora ata os 642 Terabytes, o que supón multiplicar por 4,5 veces a capacidade de almacenamento do ano anterior. A seguinte táboa mostra a distribución do almacenamento:

<b>Tipo de almacenamento</b>	<b>Capacidade (Gigabytes)</b>
Temporal ou Scrath	133.484
Temporal Paralelo	228.800
Permanente en disco	25.538
Cinta	255.000
Total	642.822

Así mesmo, o servizo de almacenamento de datos conta agora cunha jerarquización do tipo de datos que se almacenan para asegurar a mellor calidade de servizo en función da información (criticidad dos datos e velocidade de acceso). O número de usuarios do servizo de almacenamento foi de 49, dos cales 30 contan cun aumento da súa cota de usuario nos servidores de cálculo, 11 con almacenamento masivo de datos e 8 con copias de seguridade a disco (algúns usuarios están subscritos a máis dun servizo).

### **1.4.- Comunicaci3ns**

#### **1.4.1. Actividades máis significativas do ano**

As accións máis relevantes correspondentes a RECETGA, durante o ano 2007, resúmense nas seguintes:

##### Monitorización e xestión de rede

A Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia prestou o seu servizo cun nivel de dispoñibilidade do 99,604 %. Iste porcentaxe de dispoñibilidade vese afectado nalgúns centros por non dispoñer de persoal en fines de semana, polo que as incidencias coma o corte de suministro eléctrico non se ven subsanadas ata a primeira xornada laboral.

##### Novas conexións a Centros:

Para a evolución e mellora da rede, realizáronse as seguintes accións:

- Cambio do equipo de acceso de H.Cies para unificar direccionamiento dos

hospitais H. Cies e Meixoeiro e mellora da xestión e capacidade do primeiro.

- Co fin de realizar o plan das futuras inversións realizáronse os seguintes estudos:
  - Estudio de evolución de red y diseño del **Plan de Evolución de RECETGA 2007-2013**.
  - Estudio de eliminación progresiva del ATM en RECETGA.

#### Actividades de difusión e congresos:

- Contribuíuse a difusión das tecnoloxías multimedia mediante a colaboración e redacción do artigo "La educación en universidades. Infraestructuras técnicas" solicitado pola Universidade de Sevilla e presentando os seus contidos na sectorial TIC da CRUE en Alicante e nas xornadas de e-Ciencia en Granada.

#### Proxectos máis destacados

- Participouse na solicitude do proxecto "Sistema Distribuido Para a Síntese Masiva de canles de Tv interactiva usando codificación tempo real en Gpus", en colaboración con UDC. Este proxecto foi recentemente concedido.
- Colaboración con RedIris no diseño do testbed de tecnoloxías de red PASITO,
- Colaboración con RedIris para o despregue en Galicia do nodo da Unidade Militar de Emerxencias (UME)
- Prosegue o mantemento da rede de roaming internacional Eduroam.
- Participación na rede de sensores de INTECO (Alerta antivirus).

#### Adaptación das infraestructuras de CESGA para aloxamento do Supecomputador Finis Terrae:

Debido a chegada do sistema Finis Terrae, o CESGA debeu adoptar diversas medidas para a adecuación da infraestructura ao mesmo. Estas operacións afectaron na área de comunicacións, tendo que realoxarse os equipamentos en novas ubicacións e realizando cambios no suministro eléctrico.

#### **1.4.2.- Tráfico transferido**

<b>CENTRO</b>	<b>Tráfico Entrada (MB)</b>	<b>Tráfico Saida (MB)</b>	<b>Dispoñib. (%)</b>
Centro de Control de Calidade do Medio Mariño (CCMM-Vilaxoan)	187.465,501	395.600,726	99,764
Centro de Cultivos Mariños (CCM-Ribadeo)	6.524,896	21.128,065	100
Centro de Investigacións Mariñas (CIMA-Coron)	115.733,574	654.012,405	99,591
Centro de Investigacións Agrarias de Mabegondo (CIAM)	43.229,101	78.075,801	98,936
Centro de Investigacións Forestais e Ambientais de Lourizan	7.094.906,488	792.385,136	99,997



CENTRO	Tráfico Entrada (MB)	Tráfico Salida (MB)	Disponib. (%)
Centro Superior Bibliográfico de Galicia	1.152.708,743	608.980,56	98,945
Dirección Xeral de I+D+i	357.882,917	49.751,433	99,002
<b>Total Grupo</b>	<b>8.958.451,219</b>	<b>2.599.934,127</b>	<b>99,462</b>
Instituto de Estudios Galegos Padre Sarmiento	843.058,31	1.413.787,269	99,909
Instituto de Investigaciones Agrobiológicas	372.171,67	443.247,57	99,994
Instituto de Investigaciones Marinas	1.702.318,197	1.811.422,371	98,032
Misión Biológica de Galicia	1.011.810,153	673.272,824	99,403
<b>Total Grupo</b>	<b>3.929.358,33</b>	<b>4.341.730,033</b>	<b>99,335</b>
AIMEN	713.008,716	543.727,051	99,128
ANFACO	262.992,135	369.172,824	99,168
CETMAR	132.538,58	72.134,068	98,024
CIS FERROL	1.360.271,738	764.849,363	99,916
CTAG	212.133,477	185.756,552	99,916
<b>Total Grupo</b>	<b>2.680.944,647</b>	<b>1.935.639,859</b>	<b>99,23</b>
Centro Oncológico Galicia	202,744	1.634,888	99,934
<b>Total Grupo</b>	<b>202,744</b>	<b>1.634,888</b>	<b>99,934</b>
Hospital Cies	4.859.392,012	2.833.882,893	99,239
Hospital Clínico Universitario	732.465,401	763.422,597	99,994
Hospital Juan Canalejo	2.979.880,35	8.879.437,455	99,992
Hospital Meixoeiro	1.068.884,55	697.591,922	99,258
<b>Total Grupo</b>	<b>9.640.622,313</b>	<b>13.174.334,867</b>	<b>99,621</b>
I.E.O. Delegación de Coruña	2.192.445,026	1.546.573,75	99,916
I.E.O. Delegación de Vigo	2.805.665,498	3.381.016,191	99,389
<b>Total Grupo</b>	<b>4.998.110,523</b>	<b>4.927.589,941</b>	<b>99,653</b>
GALNIX	22.016.034,84	95.360.913,337	99,688
REDIRIS	450.669.572,933	580.705.607,602	99,997
RETEGAL	3.033.551,632	5.070.904,552	99,731
SERGAS	1.480.788,301	4.264.943,979	99,882
<b>Total Grupo</b>	<b>477.199.947,706</b>	<b>685.402.369,469</b>	<b>99,825</b>
Aula Productos Lácteos	672.890,983	1.496.849,957	99,914
CEIDA	135.492,753	197.076,265	99,881
Centro Multimedia de Galicia	4.757.381,073	2.855.347,577	99,685
FEUGA Santiago	978.553,165	454.319,538	99,5
Instituto Ramón Piñeiro	378.994,422	519.683,321	99,997
<b>Total Grupo</b>	<b>6.923.312,396</b>	<b>5.523.276,657</b>	<b>99,795</b>
UDC Coruña	347.163.002,759	133.461.502,32	99,986
UDC Ferrol	12.079.936,829	12.308.381,371	98,972
Universidade de Minho	563.974,534	11.144.448,562	99,987
USC	58.585.343,494	134.462.111,659	99,997
USC Lugo	17.679.925,153	34.423.697,318	99,152

CENTRO	Tráfico Entrada (MB)	Tráfico Salida (MB)	Disponib. (%)
USC Santiago	38.114,256	20.886,014	99,929
UVIGO Ourense	64.561.069,765	58.077.369,61	99,984
UVIGO Pontevedra	65.467.009,344	25.447.311,168	99,957
UVIGO Vigo	222.260.074,504	158.495.421,228	99,988
<b>Total Grupo</b>	<b>788.398.450,637</b>	<b>567.841.129,25</b>	<b>99,772</b>
<b>Total</b>	<b>1.302.729.400,514</b>	<b>1.285.747.639,093</b>	<b>99,602</b>

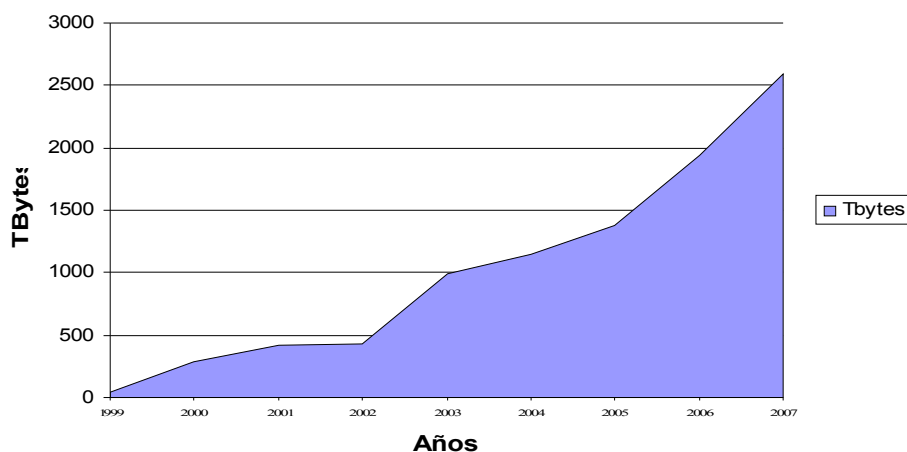
Nas páxinas seguintes recóllense gráficas onde se detalla información estatística significativa relativa á actividade do 2007:

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

### I.- TRAFICO INTERNO INTERCAMBIADO:

No 2007, o volume de tráfico intercambiado ascendeu a 2588 Terabytes, o que supón un incremento do 33 % con respecto ao ano anterior

Tráfico intercambiado en RECETGA  
1999-2007

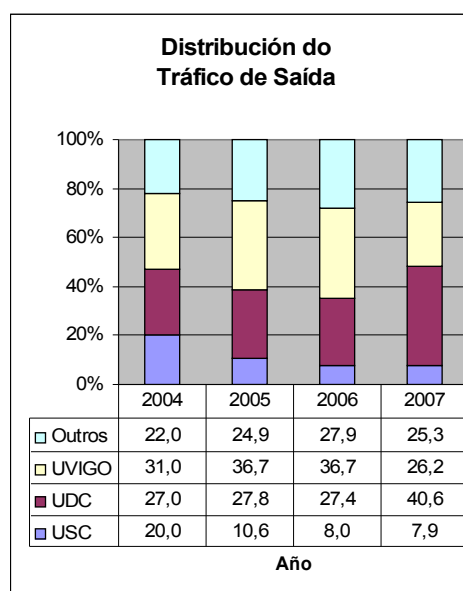
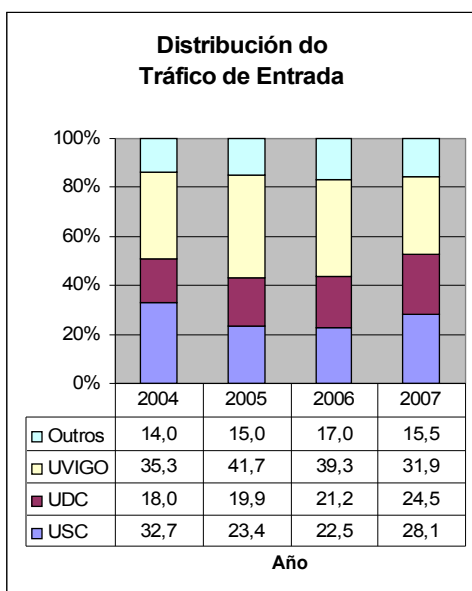
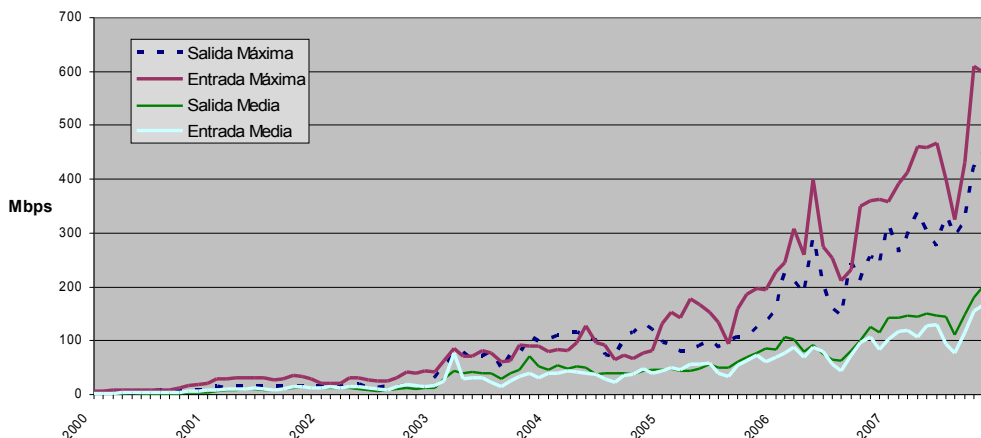


### II.- TRÁFICO CON RedIRIS:

Durante o ano alcanzáronse picos de intercambio de tráfico con RedIRIS de 453 Mbps en saída e 610 Mbps en entrada.



**Intercambio de tráfico RECETGA-REDIRIS  
2000-2007**



Todas as universidades incrementaron o seu tráfico de datos en números absolutos. As Universidades de Vigo e da Coruña son os maiores usuarios da conexión de RECETGA a RedIRIS.

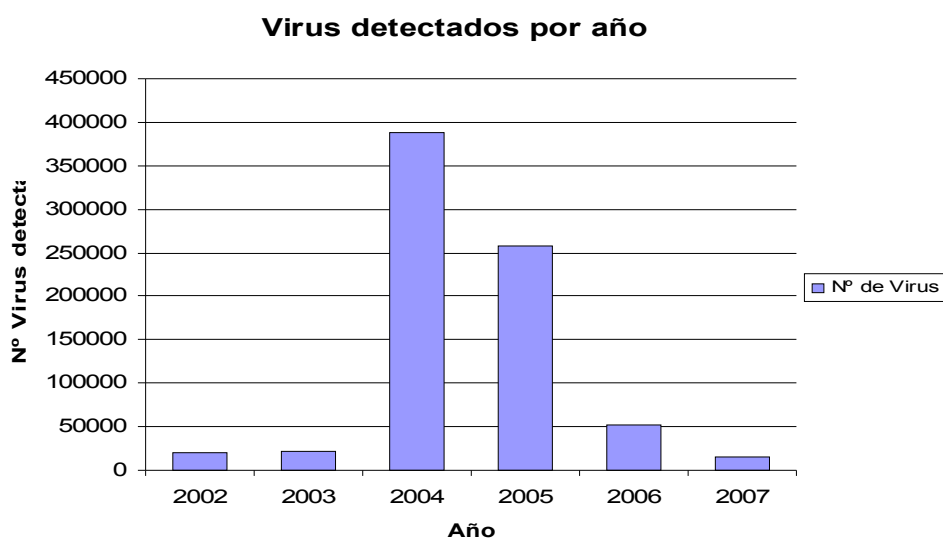
Destaca a baixa porcentaxe do tráfico de saída cara á USC atribuíble, entre outros, ao sistema de xestión da rede dos seus campus e as políticas de uso de red nos períodos nocturnos.

### III. - DETECCIÓN DE VIRUS e SPAM

Fixéronse esforzos para a minimización do efecto do SPAM instalando e mellorando con novas técnicas de greylisting e motor antispam. Éstos foron aplicados tanto a usuarios internos como a usuarios das insitucions externas as que se lle proporciona servizo.

Dende 1 de Xaneiro de 2007 ata 31 de decembro de 2007 temos as seguintes estadísticas de virus, observándose una enorme mellora global na redución na difusión dos virus e tamén o impacto do spam nas estafetas de correo e a importancia da implementación de medidas para a súa erradicación:

<b>2007</b>	<b>Virus/mes</b>	<b>Spam/mes</b>
Xaneiro	3150	20210
Febreiro	2309	78622
Marzo	625	64881
Abril	673	22717
Maio	701	28981
Xuño	291	29037
Xullo	5060	61311
Agosto	1031	27575
Setembro	569	46947
Outubro	788	58167
Novembro	154	39203
Decembro	165	39879
<b>ANUAL</b>	<b>15516</b>	<b>517530</b>



#### IV. SERVICIOS CENTRAIS

A actividade destes servicios durante o ano 2007, concrétese cas seguintes estatísticas:

Servicio de correo:

CORREO								
	Mensaxes/Mi n. (Media)		Mensaxes (Total)		Bytes/Min (Media)		Bytes (Total)	
	Rx	Tx	Rx.	Tx.	Rx.	Tx.	Rx.	Tx.
ns1	11	25	5.991.840	13.192.560	2.766	1.172	1.454.019.794	615.792.940
ns2	36	34	18.658.799	17.817.839	5.240	710	2.754.301.593	373.175.988

Servicio comunicacións multimedia:

No relativo as actividades no ámbito das comunicacións multimedia, proporcionouse soporte ó seguinte número de eventos:

	<b>Videoconf.</b>	<b>Grabacións</b>	<b>AccessGrid</b>	<b>Streaming</b>
2006	33	5	45	1
2007	40	24	18	15

A razón da merma das sesións AccessGrid obedece a que tivo que desinstalarse a sala debido ás obras realizadas no CESGA.

Servizos de aloxamento web e hosting:

No ámbito dos servicios web, maioritariamente facendo uso da nova plataforma de hosting mediante máquinas virtualizadas, proporcionouse servicio os seguintes aloxamentos web de I+D+i:

	<b>Dominios internos</b>	<b>Dominios externos</b>	<b>Hosting de máquinas</b>
2006	97	15	5
2007	117	25	11

Seguridade

No ámbito dos servicios, tamén se atenderon os incidentes relativos á seguridade no ámbito de RECETGA, resolvendo, entre outros, ata 14 tickets emitidos polo CERT de RedIris.

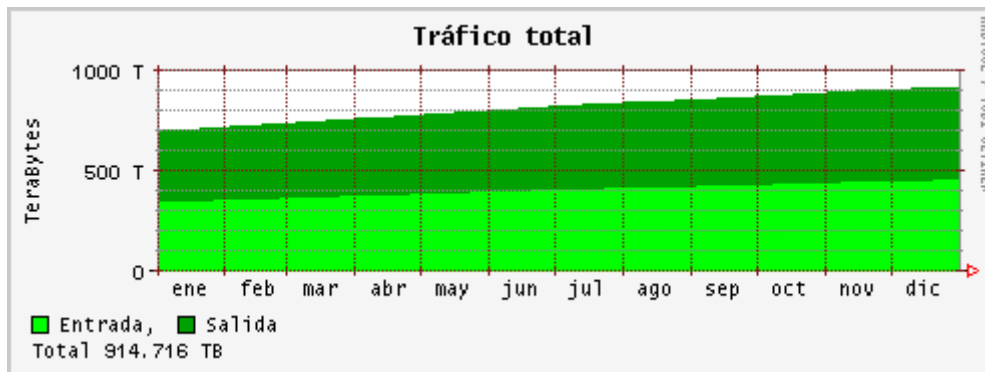
Servizo de acceso remoto\*\*

Usuarios de RADIUS						
Centro	Tempo de conx.	Bytes de entrada	Bytes de saída	Usuarios / Minuto		Nº de conx.
				Media	Máximo	
usc	2.530:52:11	2.842.540.445	14.130.484.637	2	8	7.888
udc	362:53:42	458.393.928	2.771.978.629	1	3	969
uvigo	2.003:55:4	3.515.284.994	13.246.184.105	2	6	3.051
outros	4:50:3	11.095.156	25.962.683	0	1	11

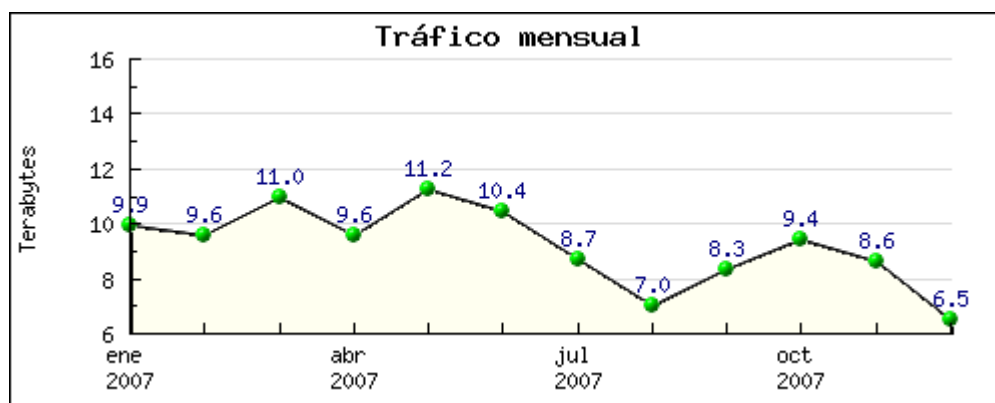
(\*\*) Este servicio foi dado de baixa o día 1 Xullo de 2007.

## V. TRÁFICO GALNIX

- Desde su inauguración se intercambiaron 914.716TB
- En el año 2007 se intercambiaron 221.249TB



Evolución Galnix



A finais do 2007, as operadores presentes no Punto Neutro acordaron en xunta extraordinaria da comisión administrativa do 14/12/2007, que o GALNIX cesará a

súa actividade co comezo do ano 2008, por resolverse técnica-economicamente as razóns que xustificaron a súa implantación, quedando o CESGA como punto de encontro de operadoras.

## 2.- Contratos e Proxectos

### 2.1.- Contratos y Convenios ejecutados.

Durante o ano 2007 realizáronse tarefas de investigación e soporte á investigación e desenvolvemento a través de proxectos e contratos, relacionando a continuación os ingresos habidos no exercicio:

Proxecto e-IMRT (7/05) Xunta de Galicia - CX I+D+I	4.000,00
GIS - Riesgos Medio Ambientales (8/05) Xunta de Galicia	6.209,00
Folstein (9/05) Xunta de Galicia - DX I+D+I	10.575,00
EGEE II - int.eu.grid Xunta (4/06) Xunta de Galicia - DX I+D+I	62.965,02
EGEE II (6/06) Unión Europea	83.176,66
INTEUGRID (5/06) Unión Europea	72.151,00
Partículas III (7/06) Xunta de Galicia	4.978,71
GIS - SIFI Forestal (8/06) Xunta de Galicia	5.652,00
e-intervención Discapacitados (9/06) Xunta de Galicia - DX I+D+I	25.000,00
Subvención PIEG (10/06) Xunta de Galicia	56.217,56
Convenio Finisterrae (13/06) Xunta de Galicia	72.750,00
Convenio Finisterrae (13/06) Xunta de Galicia	72.750,00
IBERGRID (2/07) Ministerio de Educación y Ciencia Esponsor varias empresas	53.909,06
RETELAB (3/07) Ministerio de Educación y Ciencia	11.579,15
COTESA (4/07) Centro de Observación y Teledetección Espacial S.A.U.	46.958,00
MATEMATICA (5/07) A B Universidad de Cantabria	37.468,57
Meteorología (6/07) Xunta de Galicia	62.173,66
Vindeira Xunta (7/07) Xunta de Galicia	150.000,00
ISEC (8/07) Xunta de Galicia	30.631,00
G-Fluxo (9/07) Xunta de Galicia	306,00
IFEC (11/07) Ministerio de Industria, Turismo y Comercio	2.075,26

MATHEMATICA (13/07) Xunta de Galicia Universidad de Santiago	12.203,98
Formiga (14/07) Xunta de Galicia	26.913,00
GALNIX Operadoras	12.591,84
Otros cursos, congresos, díxitos etc:	17.551,70
Ingresos Colaboración F.I.G.: Convenio con SA	360.000,00
S.A. Xestión CESGA / CSIC:	211.598,00

**TOTAL FACTURADO**

**1.512.384,17**

## 2.2.- Descripción Proxectos

Título	Financiación	Estado 2007	Descripción
<b>COMPUTACIÓN</b>			
Modelo de Predicción meteorolóxica.	<u>Financia:</u> 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	<u>Financia:</u> Ministerio de Educación y Ciencia  <u>Participan:</u> Universidad de Santiago de Compostela, AZTI, ICCM y CESGA	Execución	Desenvolvemento dunha contorna de traballo colaborativo e distribuído que constitúa un laboratorio virtual para o desenvolvemento de proxectos de investigación interdisciplinares relacionados coa teledetección oceanográfica
Ingenio Mathematica	<u>Financia:</u> Ministerio de Educación y Ciencia  <u>Participan:</u> Más de 200 grupos de investigación en Matemáticas de todo el estado	Execución	Proxecto ENXEÑO CONSOLIDER para incrementar tanto cualitativa como cuantitativamente a presenza das Matemáticas en ciencia, tecnoloxía e innovación.
IRIS-GRID. Iniciativa Nacional de Grid	<u>Financia:</u> Ministerio de Industria, Innovación y Comercio.  <u>Participan:</u> 24	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.

Título	Financiación	Estado 2007	Descripción
	Grupos e Institucións de I+D de Grid y e-Ciencia en España		
FORMIGA2007	<u>Financia:</u> Dirección Xeral de I+D+I (Xunta de Galicia)	Inicio	O proxecto integrará todos os recursos dispoñibles nas aulas de informática das Universidades Galegas, empregando a tecnoloxía GRID, para facilitar o seu aproveitamento polos investigadores para a resolución de problemas científicos.
g-Fluxo: Ferramenta de WorkFlow en contornos distribuídos. Aplicación á Química Computacional	<u>Financia:</u> Dirección Xeral de I+D+I (Xunta de Galicia)  <u>Participa:</u> CESGA	Inicio	Relación dunha utilidade de desenvolvemento de fluxos de traballo para a computación distribuída que permita o uso de diferentes aplicacións e dos recursos computacionais existentes no CESGA ou accesibles a través de GRID como unha única contorna.
IFEC. Infraestrutura de Firma Electrónica Cualificada	<u>Financia:</u> CDTI y Dirección Xeral de I+D+I (Xunta de Galicia)  <u>Participan:</u> Aldaba Servicios Profesionales, Aldaba Soluciones y Proyectos S.L., Universidad de Vigo y CESGA	Inicio	O obxectivo do proxecto é o estudo, deseño e desenvolvemento dunha Infraestrutura de Firma Electrónica Cualificada baseada sobre a tecnoloxía de Infraestrutura de Xestión de Privilexios (PMI) e unha Autoridade de Selado de Tempo (TSA), que utilizando software libre existente, permita a súa fácil inclusión en aplicacións que necesitan control de autorización así como a contorna de xestión corporativo das autorizacións.
EGEE II: Enabling Grids for Escience II	<u>Financia:</u> Unión Europea (VI Programa Marco) e a Dirección Xeral de I+D+I	Execución	Segunda fase da implantación dunha infraestrutura GRID a nivel mundial.
Int.eu.grid	<u>Financia:</u> Unión Europea (VI Programa Marco)	Execución	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 y Ciencia	Execución	Estudio de los fenómenos de coexistencia de fases magnéticas en algunos óxidos de cobalto a través de medidas experimentales, modelos analíticos y técnicas ab initio.
Velas: Deseño evolutivo de velas para navegación	<u>Financia:</u> Dirección Xeral de I+D+I  <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+I	Execución	Desenvolvemento dunha plataforma de computación distribuída e acceso a través de servizos web para o cálculo optimizado

Título	Financiación	Estado 2007	Descripción
	<u>Colabora:</u> USC, UVIGO, U. Wisconsin		de tratamientos en radioterapia con aceleradores e a súa verificación a través de simulación.
Folstein	<u>Financia:</u> Dirección Xeral de I+D+I <u>Colabora:</u> UDC, UVIGO, Televes	Execución	Desenvolvemento dunha plataforma para a atención gerontolóxica a domicilio.
Partículas III	<u>Financia:</u> Ministerio de Educación y Ciencia <u>Colabora:</u> USC	Rematado	Despregamento dunha infraestrutura GRID para o experimento LHCb do CERN.
Partículas IV	<u>Financia:</u> Ministerio de Educación y Ciencia <u>Colabora:</u> USC	Inicio	Despliegue de una infraestructura GRID para el experimento LHCb del CERN.
<b>COMUNICACIONES</b>			
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 Auna) Retevisión e Retegal  <u>Colaboran:</u> Autopista Galega da Información (AGI)	Inicio	Mantenemento do Punto Neutro de Internet en Galicia, GALNIX.
Sistema Distribuido para a Síntese Masiva de Canles de Tv Interactiva usando Codificación Tempo Real en Gpus	<u>Financia:</u> Dirección Xeral de I+D+I (Xunta de Galicia)	Inicio	Utilización das capacidades de proceso dos cartóns gráficos para codificar múltiples streams de vídeo para transmitirse pola rede.
PASITO	<u>Financia:</u> Ministerio de Industria	Execución	Despregamento dunha rede de comunicacións de ámbito nacional para probas de novos servizos

### 2.3- Redes e Plataformas Tecnolóxicas internacionais, nacionais e rexionais.



Nome	Financia	Estado 2007	Membros
e-Ciencia de España	Financia: Ministerio de Educación y Ciencia	Inicio	68 grupos e casi 700 investigadores nos ámbitos de aplicacións, middleware e infraestructura Grid e de Supercomputación de España
CytedGrid	CYTED	Execución	21 Universidades de Argentina, España, Venezuela, Portugal, Colombia, Chile, Paraguay, Uruguay, Brasil, Perú e Méjico.
Red de Computación de Altas Prestaciones sobre Arquitecturas Paralelas Heterogéneas (CAPAP-H)	Ministerio de Educación y Ciencia	Inicio	16 Grupos de Investigación de diversas universidades Españolas e o CESGA.
Red Gallega de Computación de Altas Prestaciones	Dirección Xeral de Promoción Científica e Tecnolóxica do Sistema Universitario de Galicia (Xunta de Galicia)	Inicio	<ul style="list-style-type: none"> <li>Arquitectura de Computadores (GAC-UDC)</li> <li>Arquitectura de Computadores (GAC-USC)</li> <li>Laboratorio de Sistemas (LDS-USC)</li> <li>Resolución numérica de ecuacións en derivadas parciais e simulación numérica na inxeñería (MAP-USC)</li> <li>Modelos e Métodos Numéricos en Ingeniería e Ciencias Aplicadas (MAP-UDC)</li> <li>Centro de Investigación e Información Ambiental (CINAM)</li> <li>Integrado de Inxeñería (ING-UDC)</li> <li>Química Teórica e Computacional (QTC-USC)</li> <li>Antenas (ANT-UVI)</li> <li>Física No Lineal (FNL-USC)</li> <li>High Performance Computing Group-Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA)</li> </ul>
MATHEMATICA CONSULTING & COMPUTING DE GALICIA	Dirección Xeral de Promoción Científica e Tecnolóxica do Sistema Universitario de Galicia (Xunta de Galicia)	Execución	<ul style="list-style-type: none"> <li>Modelización estatística e aplicacións (código USC: GI-1914)</li> <li>Resolución numérica de ecuacións en derivadas parciais e simulación numérica na inxeñería (código USC: GI-1563)</li> <li>Modelos Matemáticos e Simulación Numérica en Mecánica de Sólidos (código USC: GI-1564)</li> <li>Modelización en Fluxos Hidrodinámicos (código USC: GI-1566)</li> <li>Arquitectura de Computadores (código USC: GI-1638)</li> <li>Grupo de Ecuacións Diferenciais e Simulación Numérica (código UVIGO: MA1)</li> <li>Optimización, Control e Modelado Numérico (código UVIGO: MA8)</li> <li>Inferencia Estatística (código UVIGO: IO1)</li> </ul>

Nome	Financia	Estado 2007	Membros
			<ul style="list-style-type: none"> <li>Modelos e Métodos Numéricos en Inxeñería e Ciencias Aplicadas (código UDC: G000272)</li> <li>Modelización e Inferencia Estatística. MODES</li> <li>Arquitectura de Computadores (código UDC: G000265)</li> <li>Fundación Centro de Supercomputación de Galicia (Fundación CESGA)</li> </ul>
Red Gallega de Bioinformática	Dirección Xeral de Promoción Científica e Tecnolóxica do Sistema Universitario de Galicia (Xunta de Galicia)	Inicio	<ul style="list-style-type: none"> <li>Biofarma-USC</li> <li>Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA)</li> <li>Complex Systems Research Group-USC</li> <li>Xenética de poboacións e citogenética-UVI</li> <li>Imedir-RNAsa- UDC</li> <li>Mathbioinfo- USC</li> <li>Medicina Xenómica-USC</li> </ul>
Grid Computing in Chemistry: GRIDCHEM	COST	Execución	Entidades de 18 países europeos
INES- Iniciativa Española de Software y Servicios	Ministerio de Industria, Turismo y Comercio	Execución	136 empresas e institucións Españolas.
eMOV – Plataforma Tecnológica de Comunicaciones Inalámbricas	Ministerio de Industria, Turismo y Comercio	Execución	136 organizacións españolas.

### **Resumo 2007**

Durante o ano 2007 a actividade de proxectos na Fundación CESGA foi moi intensa e cuns resultados destacables. Realizouse ou colaborouse en máis de 20 propostas de proxectos rexionais, nacionais e internacionais. Destaca a consecución de dous proxectos do VII PM da UE e dun primeiro proxecto no programa PROFIT. Ademais, o índice de éxito das peticións que se resolveron durante este ano foi tamén moi alto (73%), todo elo sen deixar de atender ao desenvolvemento dos proxectos en marcha, onde tamén se conseguiron importantes fitos como en EGEE, e-IMRT ou int.eu.grid. Tamén foi importante a actividade na creación e participación en redes nacionais, rexionais e internacionais.

### 3. Producción Científica

#### 3.1. Producción científica de usuarios de computación do CESGA.

O presente informe inclúe a produción científica correspondente ao ano 2007 e para o cal os usuarios declaran utilizar os recursos dispoñibles no CESGA.

#### Desglose da produción científica declarada no ano 2007 por Institución.

PRODUTO	CSIC	UDC	USC	UVIGO	TOTAL
<b>ARTIGOS CIENTÍFICOS</b>	66	28	63	51	208
ACEPTADOS	5	3	7	4	19
ENVIADOS	11	5	4	4	24
PUBLICADOS	50	20	52	43	165
<b>PRESENTACIÓNS EN CONFERENCIAS</b>	36	10	36	19	101
PRESENTACIÓNS	21	7	10	8	46
POSTERS	14	3	19	11	47
EN PREPARACIÓN	1		7		
<b>TESES DOUTORAIS</b>	4	4	7	3	18
DEFENDIDAS	1	3	4	3	11
PRESENTADAS	2	1	2		5
EN PROCESO	1		1		2
<b>TESES LICENCIATURA PROXECTOS FIN DE CARREIRA</b>	1	2	3	4	10
DEFENDIDAS	1	2	1	4	8
EN PROCESO			2		2
<b>LIBROS / CAPÍTULOS</b>	1			2	3
ACEPTADOS	1				1
PUBLICADOS				2	2
<b>OUTROS</b>	1		10		11
ENVIADOS			1		
PUBLICADOS			9		
EN PREPARACIÓN	1				
<b>TOTAL</b>	109	44	119	79	351

\*\*\* SIN CESGA

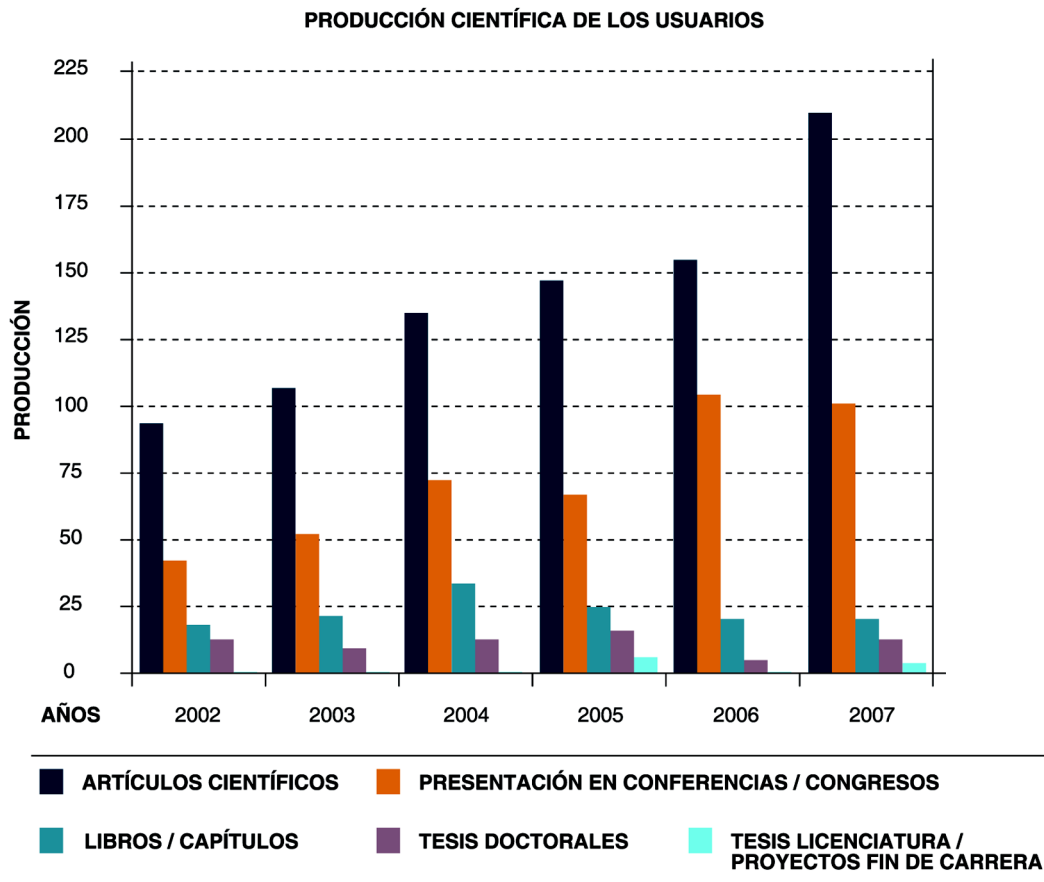
**Desglose da produción científica declarada nos anos 2002 ao 2007**

PRODUCTO	2002	2003	2004	2005	2006	2007
<b>ARTÍCULOS CIENTÍFICOS</b>	93	107	134*	147	154	208
<b>ACEPTADOS</b>	4	8	20	16	26	19
<b>ENVIADOS</b>	16	29	26	27	23	24
<b>PUBLICADOS</b>	73	70	91	104	105	165
<b>PRESENTACIONES EN CONFERENCIAS</b>	42	52	72*	65	105	101
<b>PRESENTACIONES</b>	33	40	53	37	53	46
<b>POSTERS</b>	9	12	35	28	52	47
<b>TESIS DOCTORALES</b>	17	21	32	24	18	18
<b>DEFENDIDAS</b>	9	4	5	9	10	11
<b>PRESENTADAS</b>	0	0	0	0	3	5
<b>EN PROCESO</b>	8	17	27	15	5	2
<b>TESIS LICENCIATURA PROYECTOS FIN DE CARRERA</b>	12	9	12	14	5	10
<b>DEFENDIDAS</b>	6	4	5	13	3	8
<b>EN PROCESO</b>	6	5	7	1	2	2
<b>LIBROS / CAPÍTULO</b>	ND	ND	ND	5	4	3
<b>ACEPTADOS / IN PRESS</b>	ND	ND	ND	4	1	1
<b>ENVIADOS</b>	ND	ND	ND	1	0	2
<b>PUBLICADOS</b>	ND	ND	ND	0	3	0
<b>OTROS</b>	5	5	6	5	15	11
<b>TOTAL</b>	169	194	256	260	301	351

\* 8 PUBLICACIONES Y 16 CONGRESOS CON AUTORES DE MÁS DE UNA INSTITUCIÓN

	2004	2005	2006	2007
<b>Porcentaje de Usuarios que declaran Producción</b>	78,57%	87,40%	74,43%	85,26%
<b>Porcentaje de Horas Consumidas por estos</b>	90,01%	98,32%	94,65%	99,45%

A continuación, presentamos unha táboa comparativa da produción científica declarada polos usuarios, na que se pode observar o incremento constante da mesma, desde o ano 2002 ao 2007 fundamentalmente en publicacións en revistas científica.



Este ano é importante destacar o incremento no número de artigos científicos (próximo ao 30%). O aumento neste número pódese explicar parcialmente polo cambio na metodoloxía de medida. Este ano é a primeira vez que se lle solicitan as publicacións a usuarios que aínda que non fixeron uso dos supercomputadores en 2007, si o fixeron en 2006 e estaban preparando ou ían presentar unhas publicacións, pero aínda non estaba aceptado. Con todo, aínda que se aceptasen todos os artigos declarados como enviados en 2006, por se mesmo non explica a subida importante para o ano 2007.

Por outra banda existe unha pequena baixada no número de presentacións a congresos, mentres se mantén o ritmo das teses doutorais presentadas ou, fundamentalmente, defendidas.

En resumo, a entrada en funcionamento do Superdome en 2004 e a actualización permanente do SVGD en capacidade de cálculo vén dar os seus froitos na produción científica dos usuarios, dobrando as publicacións de artigos científicos nos últimos 5 anos, de 107 en 2003 a 208 en 2007, o que demostra a necesidade dunha infraestrutura de Supercomputación estable, e os bos resultados conseguidos neste curto espazo de tempo.

**CSIC  
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS****Artículos científicos publicados**

- F.Dayou; M.I.Hernández; J.Campos Martinez and R. Hernández Lamonedá. *1-Spin-orbit coupling in O<sub>2</sub>(v)+O<sub>2</sub> collisions. II. Quantum scattering calculations on dimer states involving the X 3Sg<sup>+</sup>, a 1Dg, and b1Sb<sup>+</sup> states of O<sub>2</sub>* **Journal of Chemical Physics**. 126. 194309. 2007.
- M.Villa; M.L.Senent and R.Dominguez-Gómez. *ZPVE correction to the FIR Spectrum to the propanal isotopomers*, **Chemical Physics Letters**. 436. 15-18. 2007.
- B.García; S.Gonzalez; F.J.Hoyuelos; S.Ibeas; J.M.Leal; M.L.Senent; T.Biver; F.Secco and M.Venturin. *Thermodynamic and kinetic of the Nickel II- Salicylhydroxamic Acid system. Phenol rotation induced by metal ion binding*. **Inorganic Chemistry**. 46. 3680-3687. 2007.
- A.Spielfiedel; N.Feautrier; C.Balanca; F.Dayou, F.Lique and M.L.Senent. *3) Molecules as Diagnostic Tools in the Interstellar Medium*. **Molecular Physics**. 105 (9). 1263-1269. 2007.
- F.Lique; M.L.Senent; A.Spielfiedel and N.Feautrier. *4) Rotationally inelastic collisions of SO (X<sup>3</sup> &#61523;-) with H<sub>2</sub>: potential energy surface and first results with para-H<sub>2</sub>*. **Journal of Chemical Physics**. 126. 164312. 2007.
- H. Massó; V. Veryazov; P. Malmqvist; B.O. Roos and M.L.Senent. *5) Ab initio characterization of the C5*. **Journal of Chemical Physics**. 127 (15). 154318. 2007.
- B.García; F.Secco; S.Ibeas; A. Muñoz; F. J. Hoyuelos; J.M. Lea; M.L. Senent and M.Venturini. *6) Structural NMR and ab initio Study of Salicylhydroxamic and p-Hydroxybenzohydroxamic acids: Evidence for an Extended Aggregation*. **Journal of Organic Chemistry**. 72 (21). 7832-7840. 2007.
- M.L.Senent H. Massó and M.Hochlaf. *7) Anharmonic spectroscopic study of the ground electronic state of various C<sub>4</sub> radical isotopomers*, **The Astrophysical Journal**. 670. 1510. 2007.
- Rivera-Calzada; Spagnolo L; Pearl LH; Llorca O. *Structural model of full-length human Ku70-Ku80 heterodimer and its recognition of DNA and DNA-PKcs*. **EMBO Reports**. 2007 Jan;8(1):56-62. Epub 2006 Dec 8.

- Alex Mansergas; Josep M. Anglada; Santiago Olivella; Manuel F. Ruiz-López and Marilia Martins-Costa. *On the nature of the unusually long OO bond in HO3 and HO4 radicals*. **Physical Chemistry Chemical Physics**. 9. 5865. 2007.
- Enrique Marcos; Ramon Crehuet; and Josep M. Anglada. *Inductive and External Electric Field Effects in Pentacoordinated Phosphorus Compounds*. **Journal of Chemical Theory and Computation**. Publicado en la web el 5/12/2007.
- Martínez-Cruz B; Godoy JA ;. *Genetic evidence for a recent divergence and subsequent gene flow between Spanish and Eastern imperial eagles*. **Bmc Evolutionary Biology** 7, 2007.
- A. García-Vela i. *Intramolecular vibrational redistribution in Ne-Br<sub>2</sub>: The signature of intermediate resonances in the excitation spectrum*. **Journal of Chemical Physics**. 126. 124306. 2007.
- S. López López; R. Prosmitt; and A. García Vela. *Nonadiabatic photodissociation dynamics in (HI)<sub>2</sub> induced by intracluster collisions*. **Journal of Chemical Physics**. 126. 161102. 2007.
- S. López López; R. Prosmitt and A. García Vela. *Modeling the (HI)<sub>2</sub> photodissociation dynamics through a nonadiabatic wave packet study of the I<sup>\*</sup>-HI complex*. **Journal of Chemical Physics**. 126. 184307. 2007.
- E. Carmona-Novillo, M. Bartolomei, M. I. Hernandez, J. Campos-Martinez, *Quasiclassical trajectory study of reactive and dissociative processes in H<sub>2</sub> + H<sub>2</sub>: Comparison with quantum mechanical calculations*, **Journal of Chemical Physics**. {f 126} 124315-1:124315-11 (2007)
- F. Dayou; M. I. Hernández; J. Campos Martínez; R. Hernández Lamonedá. *Spin-orbit coupling in O<sub>2</sub>(v)+O<sub>2</sub> collisions. II. Quantum scattering calculations and dimer states involving the X<sup>3</sup>Σ<sub>g</sub><sup>-</sup>, a<sup>1</sup>Δ<sub>g</sub> and b<sup>1</sup>Σ<sub>g</sub><sup>+</sup> states of O<sub>2</sub>*. **Journal of Chemical Physics**, {f 126}, 194309-1:194309-13 (2007).
- J. Campos Martínez; M. Bartolomei; E. Carmona Novillo; Marta I. Hernández; R. Hernández Lamonedá; F. Dayou. *Interactions and collision dynamics in O<sub>2</sub>+O<sub>2</sub>*. **Progress in Theoretical Chemistry and Physics**, 2007.
- Lopez Lopez S.; Prosmitti R.; Garcia Vela A.; *Nonadiabatic photodissociation dynamics in (HI)<sub>2</sub> induced by intracluster collisions*. **Journal of Chemical Physics** 126 (16): Art.



No. 161102 APR 28 2007.

- Valdes A.; Prosmi R.; Villarreal P.; *Ab initio potential energy surface and spectrum of the B((3)Pi) state of the HeI2 complex. Journal of Chemical Physics* 126 (20) 204301 MAY 28 2007
- Valdes A.; Prosmi R.; Villarreal P.; et al. *Ab initio vibrational predissociation dynamics of He-I-2(B) complex. Journal of Chemical Physics* 126 (24): Art. No. 244314 JUN 28 2007.
- Villarreal P.; De Lara Castells MP.; Prosmi R.; et al. *Spectral simulations of polar diatomic molecules immersed in He clusters: application to the ICl (X) molecule. Physica Scripta* 76 (3): C96-C103 SEP 2007.
- Diez Pardos C.; Valdes A.; Prosmi R.; et al. *Additive intermolecular potentials from ab initio calculations: trends in Rg(2)-dihalogen van der Waals trimers. Theoretical Chemistry Accounts* 118 (3): 511-517 SEP 2007.
- Diez Pardos C.; Valdes A.; Prosmi R.; et al. *Additive intermolecular potentials from ab initio calculations: trends in Rg(2)-dihalogen van der Waals trimers. Theoretical Chemistry Accounts* 118 (3): 511-517 SEP 2007.
- Roncero O.; De Tudela RP.; De Lara Castells MP.; et al. *Exact and quantum Chemistry-Like calculations in helium doped clusters: The He2Br2(l) example. International Journal of Quantum Chemistry* 107 (14): 2756-2762 NOV 15 2007.
- Lopez Lopez S.; Prosmi R.; Garcia Vela A. *Modeling the (HI)(2) photodissociation dynamics through a nonadiabatic wave packet study of the I\*-HI complex. Journal of Chemical Physics* 127 (18): Art. No. 184307 NOV 14 2007.
- Delgado Barrio G.; Lopez Duran D.; Valdes A.; et al. *Potential energy surfaces and dynamics of HeNBr2 van der Waals complexes. 10th European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics. Topics in the Theory of Chemical and Physical Systems.* 193-202, 2007. SEP. 2005.
- Delgado Barrio G.; Valdes A.; Lopez Duran D.; et al. *Dynamics and potential energy surfaces for small to medium size He-n-dihalogen clusters. 8th International Symposium on Frontiers of Fundamental Physics. Frontiers of Fundamental Physics.* 48-49, 2007. OCT 17-19, 2006.



- Alonso M.; and Herradon B.; *Neural networks as a tool to classify compounds according to aromaticity criteria*. **Chemistry-a European Journal** 13, 3913-3923. 2007.
- L. Barrio; J. M. Campos Martin; J. L. G. Fierro. *A spectroscopic and DFT study of tungstic acid peroxocomplexes*. **Journal of Physical Chemistry A**, 111, 2166, 2007.
- M. C. Navarro; A. M. Mancho; H. Herrero. *Instabilities in buoyant flows under localized heating*. **Chaos** 17 (2007), 2, 023105-1- 023105-10.
- J. M. Martín García; R. Portugal and L. Manssur. *The Invar tensor package*. **Computer Physics Communications** 177 (2007) 640-648.
- Mohammad Solimannejad; Ibon Alkorta and Jose Elguero. *Stabilities and properties of O3-HOCl complexes. A computational study*. **Chemical Physics Letters**. 23-27. 449. 2007.
- Oscar Picazo; Ibon Alkorta; José Elguero; Markku R. Sundberg and Jaana Valo. *Bonding Properties Related with Chiral Discrimination in Dinuclear Metal Complexes of Group 10 Eur*. **Journal of Inorganic Chemistry**. 324-332. 2007.
- Ibon Alkorta; Jose Elguero and Krzysztof Zborowski. *Chiral Recognition in Diaziridine Clusters and the Problem of Racemization Waves*. **Journal of Physical Chemistry. A** 2007. 111. 1096-1103.
- Ibon Alkorta; Jose Elguero and Janet E. Del Bene. *HCP and H3C-CP as Proton Acceptors in Protonated Complexes Containing Two Phosphorus Bases: Structures, Binding Energies, and Spin-Spin Coupling Constants*. **Journal of Physical Chemistry. A** 2007. 111. 9924-9930.
- K. Zborowski; I. Alkorta and J. Elguero. *A Theoretical Study of Chiral Recognition in Bis[amino(phenyl)methanol]chromium(0) Complexes Polish*. **J. Chem.** 81. 621-629 (2007).
- Krzysztof Zborowski; Ibon Alkorta and Jose Elguero. *Enantiodifferentiation in protonation processes. A theoretical study*. **Journal of Molecular Structure: THEOCHEM**. 811 (2007) 37-44.
- Corzana, F; Cuesta, I; Freire, F. *The pattern of distribution of amino groups modulates the structure and dynamics of natural aminoglycosides: Implications for RNA recognition*. **Journal of The American Chemical Society**. 129 .10 Pages: 2849-2865. Published. MAR 14 2007

- Freire, F; Cuesta, I and Corzana, F. *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**. Issue: 2 Pages: 174-176 Published: 2007
- Corzana, F; Busto, JH and Jimenez Oses, G. *Serine versus threonine glycosylation: The methyl group causes a drastic alteration on the carbohydrate orientation and on the surrounding water shell .* **Journal of The American Chemical Society**. 129 Pages: 9458-9467 Published: 2007
- Victor L. Cruz; Sonia Martínez; Javier Martínez Salazar and José Sancho. *Proposed Polymerization Termination Mechanism for 3-R-Indenyl ansa-Zirconocenes (R = n-Alkyl) Based on DFT Calculations and Experimental Observations.* **Macromolecules**. 40. 7413–7415. 2007.
- Victor L. Cruz; Jorge Martinez; Javier Martínez Salazar; Javier Ramos; Manuel L. Reyes; Alejandro Toro-Labbe and Soledad Gutierrez. *QSAR model for ethylene polymerisation catalysed by supported bis(imino)pyridine iron complexes.* **Polymer**. 48(26). 7672-7678. 2007.
- V.L. Cruz; S. Martinez; J. Martinez Salazar; D. Polo-Cerón; S. Gómez-Ruiz; M. Fajardo and S. Prashar. *3D-QSAR study of ansa-metallocene catalytic behavior in ethylene polymerization.* **Polymer**. Volume 48. Issue 16. 27 July 2007. Pages 4663-4674.
- Francisco Corzana; Jesús H. Busto; Gonzalo Jiménez Osés; Marisa García de Luis; Juan L. Asensio; Jesús Jiménez Barbero; Jesús M. Peregrina and Alberto Avenoz. *Serine versus threonine glycosylation. The methyl group causes a drastic alteration on the carbohydrate orientation and on the surrounding water shell.* **Journal of the American Chemical Society**. 129. 9458-9467. 2007.
- Gonzalo Jiménez Osés; Carlos Aydillo; Jesús H. Busto; María M. Zurbano; Jesús M. Peregrina and Alberto Avenoz. *The role of the counteraction in diastereoselective alkylations of pyramidalized bicyclic serine enolates. An easy approach to alfa-benzylserine.* **The Journal of Organic Chemistry**. 72. 5399-5402. 2007.
- Alberto Avenoz; Jesús H. Busto; Noelia Canal; José I. García; Gonzalo Jiménez Osés; Jesús M. Peregrina and Marta Pérez Fernández. *Mechanistic study of the ring-size modulation in Michael–Dieckmann type reactions of 2-acylaminoacrylates with ketene diethyl acetal.* **New Journal of Chemistry**. 31. 224-229. 2007.

- José I. García; Gonzalo Jiménez-Osés; Víctor Martínez Merino; José A. Mayoral; Elísabet Pires and Isabel Villalba. *QM/MM modeling of enantioselective pybox-ruthenium and box-copper-catalyzed cyclopropanation reactions. Scope, performance and applications to ligand design. Chemistry – A European Journal.* 13. 4064-4073. 2007.
- Manzano H and Ayuela A. Dolado JS. *On the formation of cementitious C-S-H nanoparticles. Journal of Computer-Aided Material Design.* 14 (1). 45-51 APR 2007.
- Manzano H.; Dolado JS. and Guerrero A. *Mechanical properties of crystalline calcium-silicate-hydrates: comparison with cementitious C-S-H gels Physica Status Solidi. A-Applications and Materials Science* 204 (6). 1775-1780 JUN 2007.

### **Artículos científicos in-press**

- N. Inostroza; J. R. Letelier; P. Fuentealba and M.L.Senen. *1- Theoretical ro-vibrational spectrum of CF<sup>+</sup>. Spectrochimica Acta A.*
- S. López López; R. Prosimiti and A. García Vela. *Effect of the Excitation Energy on the (HI)<sub>2</sub> Nonadiabatic Photodissociation Dynamics. Journal of Physical Chemistry A.*
- Alonso, M.; Casado, S.; Miranda, C.; Tarazona, J. V.; Navas, J. M.; Herradón, B. *Decabromobiphenyl (PBB-209) activates the aryl hydrocarbon receptor while decachlorobiphenyl (PCB-209) is inactive. Experimental evidences and computational rationalization of the different behavior of some halogenated biphenyls. Chemical Research in Toxicology.* 2008, in press
- D. Díaz; M. C. Fernández Alonso; G. Cuevas; F. J. Cañada and J. Jiménez Barbero. *On the role of aromatic-sugar interactions in the molecular recognition of carbohydrates. A 3D view by using NMR. Pure and Applied Chemistry.*
- Estudios conformacionales de carbohidratos y pequeños peptidos **Pure and Applied Chemistry**

### **Libros/capítulos**

### **Comunicacións/presentacións en congresos/conferencias**

- M.Villa; M.L.Senent and R.Hidalgo. *Ethane C-H stretching vibrational spectra coupling. Molecular Spectroscopy Conference*. Ohio State University. 2007.
- F.J. Melendez; M.C. Sicilia; C. Muñoz-Caro; A. Niño and M. L. Senent. *Estudio teórico del comportamiento energético y estructural del catión C3H+*. **XXXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina**. La Habana, Cuba. 2007.
- M.L.Senent; M.Hochlaf; H.Massó and R.Letelier. *Química teórica aplicada a la astrofísica molecular: cadenas carbonadas Tipo Cn*. **XXVII Jornadas Chilenas de Química**, Termas de Chillán Chile. Noviembre de 2007.
- N.Inostroza; M.L.Senent; M.Hochlaf and R.Letelier. *Caracterización de especies de interés astrofísico mediante métodos ab initio: SiC3 lineal*. **XXVII Jornadas Chilenas de Química**, Termas de Chillán. Chile, Noviembre de 2007.
- R. Letelier; N. Hinostraza; M. L. Senent. *Autovalores del oscilador anarmónico tridimensional. Aplicación a la rotación-vibración de un trompo esférico*. **XXVII Jornadas Chilenas de Química**, Termas de Chillán. Chile. Noviembre de 2007.
- Angel Rivera-Calzada; Laura Spagnolo; Laurence H. Pearl and Oscar Llorca. *3D structure of the Non-Homologous End-Joining (NHEJ) machinery*. **CNIO cancer conferences. Links between Cancer, Replication Stress and Genomic Integrity**. Madrid. 5-7 Nov 2007.
- MA. Recuero-Checa; A. Dore; A. Rivera-Calzada; LH. Pearl and Oscar Llorca. *Estudios estructurales mediante microscopía electrónica del complejo xrcc4-dna ligasa iv implicado en la reparación de roturas de adn*. **XXIII Biental de la Sociedad de Microscopía de España**. Bilbao, 3-6 Julio 2007.
- Recuero-Checa MA; Arias-Palomo E; Dore AS; Rivera-Calzada A; Pearl LH; Llorca O. *Estudios estructurales mediante microscopía electrónica del complejo xrcc4-dna ligasa iv implicado en la reparacion de roturas de adn*. **XXIII Biental de la Sociedad de Microscopía de España**. Bilbao, 3-6 Julio 2007
- A. García Vela. *Nonadiabatic photodissociation dynamics in (HI)<sub>2</sub> induced by intracluster collisions*. **COMET XX, International Conference on Molecular Energy Transfer**, Arcachon (Francia), 2007.
- M. Alonso; B. Herradón; *Towards a quantitative scale of aromaticity*. **XXXI Reunión Biental de la Real Sociedad Española de Química**, Toledo, 9-14 de septiembre 2007. Conferencia invitada.

- Marisa García; Francisco Corzana; Jesús H. Busto; Gonzalo Jiménez Osés Luis; Juan L. Asensio; Jesús Jiménez Barbero; Jesús M. Peregrina and Alberto Avenoz. *alfa-O-Glicosidación de serina versus treonina: efecto en la orientación del carbohidrato y en la primera esfera de hidratación*. **XXXI Reunión Bienal de la RSEQ**. Toledo. Septiembre 2007
- J.S. Dolado; H. Manzano; A. Porro; A. Ayuela; J. Hamaekers and M. Griebel. *On the formation of cementitious C-S-H nanoparticles: A computational bottom-up approach*. **12th International Congress on the Chemistry of Cement**. Montreal (Canada) July 8-13 2007.
- J. S. Dolado. *On the formation of cementitious C-S-H nanoparticles: A computational bottom-up approach*. **Trends in Nanotechnology**. San Sebastián (Spain). September 3-7 2007.
- V Timon; N. Hernandez Haro; A Hernandez Laguna and C.I. Sainz-Diaz. *Estudio teórico de la adsorción de películas de agua en superficies de mica*. **Encuentro internacional de HIELOCRIS (proyecto frontera del CSIC)**. Menorca, 25 - 28 de Abril 2007.
- E. Molina Montes; D. Donadio; A. Hernández Laguna; C.I. Sainz-Díaz and M. Parinello. *First principles molecular dynamic of the dehydroxylation reaction of pyrophyllite*. **EUROCLAY 2007** Aveiro (Portugal) , 22-27 de Julio 2007.
- N. Hernández Haro; V. Timón; C.I. Sainz Díaz and A. Hernández Laguna. *Theoretical study of like ice films adsorbed on muscovite surface*. **EUROCLAY 2007**. Aveiro (Portugal) , 22-27 de Julio 2007.
- V. Timón; N. Hernández Haro; C.I. Sainz Díaz and A. Hernández Laguna. *Estudio dinámico de la formación de estructuras tipo hielo adsorbidas sobre la superficie de los filosilicatos laminares 2:1 dioctaédricos*. **XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física / 17 Encuentro Ibérico para la enseñanza de la Física**. Libro de Resúmenes 232. Granada, 10 – 14 de Septiembre 2007.
- E. Molina Montes; D. Donadio; M. Parinello; A. Hernández Laguna and C. I. Sainz Díaz. *Dinámica molecular ab initio de las reacciones de deshidroxilación de los minerales de la arcilla*. **XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física / 17 Encuentro Ibérico para la enseñanza de la Física**. Libro de Resúmenes 232. Granada, 10 – 14 de Septiembre 2007.

- N. Hernández Haro; V. Timón; C.I. Sainz Díaz and A. Hernández Laguna. *Estudio DFT de películas de agua adsorbidas sobre modelos de superficie de mica*. **XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física / 17 Encuentro Ibérico para la enseñanza de la Física**. Libro de Resúmenes 232. Granada, 10 – 14 de Septiembre 2007.
- V. Timón; N. Hernández Haro; C.I. Sainz Díaz and A. Hernández Laguna. *Estudio DFT de la influencia de la presión sobre el volumen de la pirofilita*. **XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física / 17 Encuentro Ibérico para la enseñanza de la Física**. Libro de Resúmenes 232. Granada, 10 – 14 de Septiembre 2007.

### **Posters en congresos/conferencias**

- A. García Vela. *Intramolecular vibrational redistribution in Ne-Br<sub>2</sub>: The signature of intermediate resonances in the excitation spectrum*. **COMET XX, International Conference on Molecular Energy Transfer**, Arcachon (Francia), 2007.
- S. López-López; R. Prosmiiti and A. García-Vela. *Nonadiabatic photodissociation dynamics in (HI)<sub>2</sub> induced by intracluster collisions*. **ECAMP 2007**. Trento (Italia), 2007.
- A. García Vela. *Intramolecular vibrational redistribution in Ne-Br<sub>2</sub>: The signature of intermediate resonances in the excitation spectrum*. **ECAMP 2007**, Trento (Italia), 2007.
- R. Prosmiiti; A. Valdes; C. Diez Pardos; P. Villarreal and G. Delgado-Barrio. *Ab initio intermolecular potentials: structure and dynamics of Rg<sub>2</sub>-dihalogen van der Waals clusters*. **Quantum Systems in Chemistry and Physics-XII** London(UK) 2007.
- V. Alemán; G. Delgado; B. González; J.S. Medina; R. Prosmiiti; P. Villarreal and G. Winter. *Viscosidades del agua líquida pura*. **XXXI Reunión Bienal de Física**. Granada 2007.
- V. Alemán; G. Delgado; B. González; J.S. Medina; R. Prosmiiti; P. Villarreal and G. Winter. *Viscosidades del agua líquida pura*. **XXXI Reunión Bienal de Física**. Granada 2007.
- R. Prosmiiti; A. Valdes; P. Villarreal; G. Delgado-Barrio; D. Lemoine and B. Lepetit. *Vibrational predissociation dynamics of He-*I*<sub>2</sub>(B) cluster*. **COMET-XX. International**

**Conference on Molecular Energy Transfer**, Arcachon (France) 2007.

- S. Lopez Lopez; R. Prosmiiti; and A. Garcia Vela. *Nonadiabatic photodissociation dynamics in HI<sub>2</sub> induced by intracuster collisions*. **ECAMP-9**. Crete (Greece) 2007.
- Jorge Martínez; Víctor L. Cruz; Javier Martínez Salazar and Alejandro Toro-Labbe. *Iron based post-metallocene catalyst for ethylene polymerization: Establishing the Nature of the Active Species*. **European Polymer Congress**. Portoroz (Eslovenia). Julio 2007.
- Carlos Aydillo; Gonzalo Jiménez Osés; Jesús H. Busto; Jesús M. Peregrina; María M. Zurbano and Alberto Avenoz. *Síntesis de alfa-alquilserinas mediante alquilación diastereoselectiva de N,O-acetales bicíclicos*. **XXXI Reunión Bienal de la RSEQ**. Toledo (España). Septiembre 2007.
- J. Ortega Castro; C.I. Sainz Díaz and A. Hernández Laguna. *Theoretical high pressure study of substituted 2:1 dioctahedral phyllosilicates*. **EUROCLAY 2007**. Aveiro (Portugal) , 22-27 de Julio 2007.
- E. Molina Montes; V. Timón; C.I. Sainz Díaz and A. Hernández Laguna. *Ab initio study of the mechanism for the dehydroxylation process in models of 2:1 dioctahedral phyllosilicates*. **EUROCLAY 2007**. Aveiro (Portugal) , 22-27 de Julio 2007.
- J. Ortega Castro; C.I. Sainz Díaz and A. Hernández Laguna. *DFT elastic constants of 2:1 dioctahedral phyllosilicates*. **EUROCLAY 2007**. Aveiro (Portugal) , 22-27 de Julio 2007.
- N. Hernández Haro; M. Pruneda; A. Hernández-Laguna and C.I. Sainz-Díaz. *Vibrational absorbance of hydroxyl groups in 2:1 dioctahedral phyllosilicates*. **EUROCLAY 2007**. Aveiro (Portugal) , 22-27 de Julio 2007.

### **Tesis de doutoramento defendidas**

- Doctorando: D. Sergio López López; Director: A. García Vela. *Fotodisociación UV de agregados de van der Waals con enlaces de hidrógeno*. **Universidad Complutense de Madrid, Facultad de Física**. 2007.

### **Tesis de doutoramento presentadas**

- Doctoranda: Helena Massó Gonzalez. Directora: María Luisa Senent. *Estudio ab initio espectroscopico de las cadenas carbonadas C4, C5 y C6 de interés astrofísico*.



Universidad Autónoma de Madrid.

- D. Joaquín Ortega Castro. *Investigación mecano-cuántica del orden/desorden catiónico y propiedades elásticas de filosilicatos 2:1 dioctaédricos*. Universidad de Granada. 28 de Julio del 2007.

## UDC UNIVERSIDADE DE A CORUÑA

### Artículos científicos publicados

- D. Andrade, B. B. Fraguela, R. Doallo. *Precise Automatable Analytical Modeling of the Cache Behavior of Codes with Indirections*. **ACM Transactions on Architecture and Code Optimization (TACO)**. 4(3). p.16. Sept. 2007.
- D. Andrade; M. Arenaz; B.B. Fraguela; J. Touriño; R. Doallo. *Automated and Accurate Cache Behavior Analysis for Codes with Irregular Access Patterns*. **Concurrency and Computation: Practice and Experience**. 19(18). pp. 2407-2423. Dec. 2007.
- Emilio J. Padrón; Margarita Amor; Montserrat Bóo; Ramón Doallo. **Proc. of the 15th Euromicro Conference on Parallel, Distributed and Network Based Processing (PDP 2007)**, pp. 134-138, 2007
- Lea Vaiana; Carlos Platas-Iglesias; David Esteban-Gómez; Fernando Avecilla; Andrés de Blas and Teresa Rodríguez-Blas. *Receptor versus Counterion: Capability of N,N-bis(2-aminobenzyl)-diazacrowns for Giving Endo and/or Exocyclic Coordination of Zn(II)*. **European Journal of Inorganic Chemistry**. 1874-1883 (2007).
- David Esteban-Gómez; Carlos Platas-Iglesias; Fernando Avecilla; Andrés de Blas and Teresa Rodríguez-Blas. *Effect of Protonation and Interaction with Anions on a Lead(II) Complex with a Lateral Macrobicycle Containing a Phenol Schiff-base Spacer*. **European Journal of Inorganic Chemistry**. 1635-1643. (2007).
- Martín Regueiro-Figueroa; David Esteban-Gómez; Carlos Platas-Iglesias; Andrés de Blas and Teresa Rodríguez-Blas. *Metal ion Complementarity: Effect of the Ring Size Variation on the Conformation and Stability of Lead(II) and Cadmium(II) Complexes with Pendant-armed Crowns*. **European Journal of Inorganic Chemistry**. 2198-2207 (2007)
- Bertha Guijarro Berdiñas; Oscar Fontenla Romero; Beatriz Pérez Sánchez; Paula Fraguela. *A Fast Semi-Linear Backpropagation Learning Algorithm*. **17th International**



*Conference on Artificial Neural Networks, ICANN 2007. Lecture Notes in Computer Science.* ISSN: 0302-9743 Vol: 4668 pp.190-198

- Marcos Chas; Dolores Abella; Víctor Blanco; Elena Pía; Gerardo Blanc,; Antonio Fernández; Carlos Platas-Iglesias; Carlos Peinador and José M. Quintela. *Synthesis of New Self-assembled Pd(II) and Pt(II) Rectangular Metallomacrocycles. A Comparative Study of their Inclusion Complexes* **Chemistry – A. European Journal.** 13, 8572-8582 (2007)
- Esteban-Gomez D; Platas-Iglesias C; Avecilla F; et al. *Effect of protonation and interaction with anions on a lead(II) complex with a lateral macrobicycle containing a phenol Schiff-base spacer.* **European Journal of Inorganic Chemistry** Issue: 12 Pages: 1635-1643 Published: 2007
- Miriam Rega; Paloma Candal; Carlos Jiménez and Jaime Rodríguez. *Mycothiazole: Synthesis of the C8–C18 Subunit and Further Evidence of the (Z)- $\pi$ - $\pi$  Double Bond Configuration,* **European Journal of Organic Chemistry.** 934–942.2007
- Javier Poza; Miriam Rega; Vanessa Paz; Beatriz Alonso; Jaime Rodríguez; Nélica Salvador; Antonio Fernández and Carlos Jiménez. *Synthesis and evaluation of new 6-hydroximinosteroid analogs as cytotoxic agents.* **Bioorganic & Medicinal Chemistry** 15, 4722–4740, (2007)
- Raquel G. Soengas; Cristina Anta; Alfonso Espada; Rosa M. Nieto; Marta Larrosa; Jaime Rodríguez and Carlos Jiménez. *Vanchrobactin: absolute configuration and total synthesis.* **Tetrahedron Letters** 48 (2007) 3021–3024
- Miriam Rega; Carlos Jiménez; Jaime Rodríguez. *6E-Hydroximinosteroid homodimerization by cross-metathesis processes.* **Steroids**, 2007, 72, 729–735
- Leonardo Castellanos; Carmenza Duque; a Jaime Rodríguez and Carlos Jiménez. *Stereoselective synthesis of (–)-4-epiaxinyssamine.* **Tetrahedron** 63 (2007) 1544–1552
- Daniel Rivero; Juan Rabuñal; Julián Dorado; Alejandro Pazos. *Automatic Design of ANNs by Means of GP for Data Mining Tasks: Iris Flower Classification Problem.* **Lecture Notes in Computer Science.** Vol. 4431, pags. 500-507. 2007.
- Daniel Rivero; Julián Dorado; Juan Rabuñal; Marcos Gestal. *A comparison between ANN generation and training methods and their development by means of graph evolution: 2 sample problems.* **Lecture Notes in Computer Science.** Vol. 4507. Pag. 94-101. 2007.

### **Artículos científicos in-press**

- D. R. Ramos; M. V. García; M. Canle L.; J. A. Santaballa; P. G. Furtmüller; C. Obinger. *Myeloperoxidase-catalyzed chlorination: the quest for the active species*. **Journal of Inorganic Biochemistry**

### **Libros/capítulos**

### **Comunicacións/presentacións en congresos/conferencias**

- D. Rodríguez Ramos; M. Canle-López; J.A. Santaballa; P. G. Furtmüller; C. Obinger. *Human Myeloperoxidase: the quest for the chlorinating species*. **5th International Meeting on Human Peroxidases**. Akaroa (Nueva Zelanda) Fecha: 20 al 23 de febrero de 2007
- M. Canle L.; M. I. Fernández P.; M. V. García; J.A. Santaballa. *Mechanisms of oxidation of biologically relevant substrates by N-chloro-aurine*. **XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química Lugar**. Toledo (España) 9 al 14 de setiembre de 2007
- Jaime Rodríguez. *Heteronuclear coupling constants studies for the relative stereochemistry determination in 1,2 and 1,3 acyclic nitrogen chiral centers*. **Euromar 2007 Magnetic Resonance Conference**. Tarragona. 01/07/2007 - 05/07/2007
- M. I. Fernández ; Josep M. Oliva; M. Canle L. and J.A. Santaballa. *Radical Species Derived from s-Triazine Pesticides: Geometry, Thermodynamics and Kinetics*. **XI European Symposium in Organic Chemistry (ESOR XI)** Faro (Portugal) 1 al 6 de julio de 2007
- Jaime Rodríguez. *J-Based Analysis and DFT-NMR Assignations to Natural Complex Molecules: Application to 7-Hydroxy-5,6-epoxycholestanes*. **2nd Spanish-Moroccan Symposium on Organic Chemistry and the 5th Andalusian-Moroccan Meeting on Natural Products Chemistry** Torremolinos (Málaga). 15/10/2007 - 17/10/2007

### **Posters en congresos/conferencias**

- E.Carro; M. Canle; L. M. Fernández González; J. A. Santaballa. *Oxidation of*

*Pyrimidine Bases: Mechanism of Thymine Chlorination. XI European Symposium in Organic Chemistry (ESOR XI).* Faro (Portugal) 1 al 6 de julio de 2007

- D. R. Ramos; MV. García; M. Canle L.; J.A. Santaballa. *Modelling the active site of Myeloperoxidases. XI European Symposium in Organic Chemistry (ESOR XI)* Faro (Portugal) 1 al 6 de julio de 2007
- E. Carro; M. Canle L.; J. A. Santaballa. *Oxidation of Pyrimidine Bases: mechanism of Uracil Chlorination. XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química.* Toledo (España) 9 - 14 de septiembre de 2007

### **Tesis de doutorado defendidas**

- Antonio Freire Corbacho. Directores: M. Canle López e J. Arturo Santaballa L. *Degradación de contaminantes orgánicos persistentes: estudio teórico - experimental del mecanismo de hidrólisis y de la fotofísica del asulam.* 17 de diciembre de 2007. Facultade de Ciencias. **Universidade da Coruña.**
- Daniel Rivero. *Desarrollo y Simplificación de Redes de Neuronas Artificiales mediante el uso de técnicas de Computación Evolutiva.* **Universidade da Coruña.**

### **Tesis de doutorado presentadas**

- José París López. Directores: Manuel Casteleiro, Ignasi Colominas. *Restricciones en tensión y minimización del peso: Una metodología general para la optimización topológica de estructuras.* Diciembre 2007. **Universidade da Coruña.**
- Diego Andrade Canosa. *Systematic Analysis of the Cache Behavior of Irregular Codes.* Depto. Electrónica e Sistemas, **Universidade da Coruña.** Abril 2007.

### **Tesis de licenciatura/Proyectos defendidos**

- Paula Fragueta. Un nuevo algoritmo de aprendizaje neuronal basado en gradiente descendente y mínimos cuadrados. Septiembre, 2007
- Félix Manuel; Carballal Fortes. *Análisis de algoritmos de aprendizaje máquina para la detección de intrusos en redes de ordenadores.* **Facultad de Informática. Universidade da Coruña.** Septiembre, 2006

**Artículos científicos publicados**

- Quintero, Javier; Rodríguez-Castro, J. ; Rey-Méndez, Manuel. *Population genetic structure of the stalked barnacle *Pollicipes pollicipes* (Gmelin, 1789) in the north-eastern Atlantic: influence of coastal currents and mesoscale hydrographic structures.* **Marine Biology** 153(1): 47-60.2007
- Lorenzo Freire, S.; Alonso Meijide, J. M.; Casas Méndez, B. and Fiestras Janeiro, M. G. *Characterizations of the Deegan-Packel and Johnston power indice.* **European Journal of Operational Research**, 177, 1, 431-444, Ed. Elsevier Science.(2007)
- Lorenzo Freire, S.; Alonso Meijide, J. M.; Casas Méndez, B. y Hendrickx, R. *Balanced contributions for multi-issue allocation situations.* **Center Discussion Paper 2005-93, Tilburg University**, Tilburg, The Netherlands. ISSN: 0924-7815, (2007),
- Lorenzo Freire, S.; Alonso Meijide, J. M.; Casas Méndez, B. y Hendrickx, R. *Balanced contributions for TU games with awards and applications.* **European Journal of Operational Research** 182, 2, 958-964, Ed. Elsevier Science. (2007)
- Bergantiños Cid, G.; Casas Méndez, B.; Fiestras Janeiro, M. G. and Vidal Puga, J. *A solution for bargaining problems with coalition structure.* **Working Paper Series 11-05. Mathematical Social Sciences** 54, 35-58.(2007).
- J.A.Lorenzo and J.L.Albín and D.E.Singh and T.F.Pena and F.F.Rivera *An inspector/executor based strategy to efficiently parallelize N-Body simulation programs on shared memory systems.* **Parallel and distributed computing; proceedings. International Symposium on Parallel and Distributed Computing.** Pages: 45-52, Hagenberg, Austria, ISBN 978-0-7695-2917-2. 2007.
- M.Aldegunde; A.J.García Loureiro; K.Kalna; A.Asenov. *Study of fluctuations in advanced MOSFETs using a 3D finite element parallel simulator.* **Journal of Computational Electronics**, vol. 5, issue 4, pp. 311-314, 2006
- M. Rodríguez-Damián; E. Cernadas; A. Formella; M. Fernández-Delgado and P. Sá-Otero. *Automatic detection and classification of grains of pollen based on shape and texture.* **IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics**, Part C, Vol 36, No 4, pp. 531-542, 2006.

- D. Gomes; M. Fernández-Delgado and S. Barro. *Polytope ARTMAP: pattern classification without vigilance based on general geometry categories*. **IEEE Transactions on Neural Networks**, Vol. 18, No 5, pp. 1306-1325, Septiembre 2007.
- N.Seoane; A.J.García Loureiro; K.Kalna, A.Asenov. *Impact of intrinsic parameter fluctuations on the performance of HEMTs studied with a 3D parallel drift-diffusion simulator*. **Solid-State Electronics**, vol. 51. pp. 481-488. 2007
- G. Rodríguez; P. González; M. Martín; J. Touriño. *Enhancing Fault-Tolerance of Large-Scale MPI Scientific Applications*. **Parallel Computing Technologies**, volumen 4671 de **Lecture Notes in Computer Science**, 2007. ISBN: 3-540-73939-4
- J.C. Mouriño; M.J. Martín; P. González and R. Doallo. *Fault Tolerant Solutions for a MPI Compute Intensive Application*. **Proceedings 15th Euromicro Conference on Parallel, Distributed and Network-based Processing**, Napoles, Italia, Febrero (2007)
- Ángel Piñeiro; Xavier Banquy; Silvia Pérez-Casas; Édgar Tovar; Abel García; Alessandra Villa; Alfredo Amigo; Alan E. Mark; Miguel Costas. *On the Characterization of Host-Guest Complexes: Surface Tension, Calorimetry, and Molecular Dynamics of Cyclodextrins with a Non-ionic Surfactant*. **The Journal of Physical Chemistry B** , 111 (2007), 4383-4392.
- Jorge Hernández-Pascacio; Cristina Garza; Xavier Banquy; Norma Díaz-Vergara; Alfredo Amigo; Salvador Ramos; Rolando Castillo; Miguel Costas; Ángel Piñeiro. *Cyclodextrin-Based Self-Assembled Nanotubes at the Water/Air Interface*. **The Journal of Physical Chemistry B** , 111 (2007), 12625-12630.
- V.Pardo; P.Blahá; M.Iglesias; K.Schwarz; D.Baldomir; J.E.Arias. *Erratum:Magnetic structure and orbital ordering in BaCoO3 from first principles calculations [Phys.Rev.B70,144422(2004)]* **Physical Review B** Clave: A Volume: 75 pag. 059902 – 059902. 2007 ISBN: 0163-1829
- S.Blanco-Canosa; F.Rivadulla; V.Pardo; D.Baldomir; J.-S.Zhou; M.Garcia Hernandez; M.A.Lopez- Quintela; J.Rivas; J.B.Goodenough. *Enhanced Pressure Dependence of Magnetic Exchange in A2+[V2]O4 Spinels Approaching the Itinerant Electron Limit*. **Physical Review Letters A**, 99 Pag. 187201 - 187201-4. 2007. ISBN: 0031-9007
- V. Pardo; P. Blaha; R. Laskowski; D. Baldomir; J. Castro; K. Schwarz; J. E. Arias. *Ising-type behavior in the antiferromagnetic phase of BaCoO3 from first principles*. **Physical Review B** Clave: A Volume: 76 pag. 165120 - 16512-6. 2007. ISBN:

0163-1829

- M. Pereiro; D. Baldomir; S. V. Mankovsky; K. Warda; J. E. Arias; L. Wojtczak and J. Botana. *Calculations of giant magnetoresistance in Fe/Cr trilayers using layer potentials determined from ab initio methods*. **Journal of Physics - Condensed Matter** Clave: A Volume: 19 Pag.106210-1 - 106210-14. 2007
- K. Warda; L. Wojtczak; M. Pereiro; D. Baldomir and J. Arias. *GMR via temperature-dependent layered potential distribution*. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials** Clave: A Volume: 316 Pag. e320 - e322. 2007 ISBN: 0304-8853/01
- D. Baldomir; J. Rivas; D. Serantes; M. Pereiro; J.E. Arias; M.C. Bujan-Nuñez; C. Vazquez-Vazquez. *Magnetocaloric effects in magnetic nanoparticle systems: A Monte Carlo study*. **Journal of Non-Crystalline Solids** Clave: A Volume: 353 Pag. 790 – 792. 2007. ISBN: 0022-3093
- D. Baldomir; J. Rivas; D. Serantes; M. Pereiro; J.E. Arias; M.C. Bujan-Nuñez; C. Vazquez-Vazquez. *Magnetic field dependence of the magnetocaloric effect in magnetic nanoparticle systems: A Monte Carlo simulation*. **Journal of Non-Crystalline Solids** Clave: A Volume: 353 Pag.793 – 795. 2007. ISBN: 0022-3093
- M. Pereiro and D. Baldomir. *Structure of small silver clusters and static response to an external electric field*. **Physical Review A** Clave: A Volume: 75 Pag. 033202-1 - 033202-10. 2007. ISBN: 1050-2947
- V. Pardo; D. Baldomir; J. Castro; M. Iglesias and J.E. Arias. *Ising-type anisotropy and spin state transitions in GdBaCo2O5.5 from first-principles calculations*. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials** Clave: A Volume: 316 Pag. e656 - e658. 2007. ISBN: 0304-8853
- P.M. Botta; V. Pardo; C. de la Calle; D. Baldomir; J.A. Alonso and J. Rivas. *Ferromagnetic clusters in polycrystalline BaCoO3*. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials** Clave: A Volume: 316 Pag. e670 - e673. 2007. ISBN: 0304-8853
- J. Botana; M. Pereiro; D. Baldomir; J.E. Arias; K. Warda and L. Wojtczak. *Electronic configuration of nFe/3Cr/nFe (n=1 - 6) trilayers in FM state*. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials** Clave: A Volume: 316. Pag. e360 - e364. 2007. ISBN: 0304-8853
- Jorge Botana; 1 Manuel Pereiro; Daniel Baldomir; Juan Enrique Arias; 2 Krzysztof Warda and Leszek Wojtczak. *Magnetic-dependent structure in eight-atom gold clusters*. **Journal of Applied Physics** Clave: A Volume: 103. Pag. 07B716-1 - 07B716-3



ISBN: 0021-8978.2007.

- B. Hernando; J. L. Sanchez Llamazares; J. D. Santos; LI. Escoda; J.J. Suñol; R. Varga; D. Baldomir and D. Serantes. *Thermal and magnetic field-induced martensite-austenite transition in Ni<sub>50.3</sub>Mn<sub>35.3</sub>Sn<sub>14.4</sub> ribbons*. **Applied Physics Letters** Clave: A Volume: 92. Pag. 042504-1 - 042504-4. ISBN: 0003-6951. 2007.
- M.Pereiro; D.Baldomir and J.E.Arias. *Unespected Magnetism of Small Silver Clusters*. **Physical Review A** Clave: A Volume: 75. Pag. 063204-1 - 063204-6 ISBN: 1050-2947. 2007.
- M.M.G. Alemany; R.C. Longo; L.J. Gallego; D.J. González, L.E. González; Murilo L. Tiago and James R. Chelikowsky. *Ab initio molecular dynamics simulations of the static, dynamic, and electronic properties of liquid Pb using real-space pseudopotentials*. **Physical Review B** **76**, 214203 (2007)
- M.M.G. Alemany; Xiangyang Huang; Murilo L. Tiago; L.J. Gallego and James R. Chelikowsky. *The Role of Quantum Confinement in P-Type doped Indium Phosphide Nanowires*. **Nano Letters** **7**, 1878 (2007).
- M.M.G. Alemany, Manish Jain, Murilo L. Tiago, Yunkai Zhou, Yousef Saad, and James R. Chelikowsky. *Efficient first-principles calculations of the electronic structure of periodic systems*. **Computer Physics Communications** **117**, 339 (2007).
- Alemany, M. M. G.; Longo, R. C.; Gallego, L. J.; González, D. J.; González, L. E.; Tiago, Murilo L.; Chelikowsky, James R. *Ab initio molecular dynamics simulations of the static, dynamic, and electronic properties of liquid Pb using real-space pseudopotentials* **Physical Review B**, vol. 76, 214203 (2007)
- J. Alvarez-Muniz (Santiago de Compostela U.) , P. Brogueira (Lisbon, IST) , R. Conceicao (LIP, Coimbra) , J. Dias de Deus (Lisbon, CENTRA & Lisbon, IST) , M.C. Espirito Santo, M. Pimenta (LIP, Coimbra & Lisbon, IST) *Percolation and high energy cosmic rays above 10<sup>17</sup> eV*. **Astropart.Phys.**27:271-277,2007. e-Print: hep-ph/0608050
- Penabad, E. et al. *Comparative analysis between operational weather prediction models and QuikSCAT wind data near the Galician coast*, **Journal of Marine Systems**. (2007), doi:10.1016/j.jmarsys.2007.07.008.
- Martorell L; Costas J; Valero J; Gutierrez-Zotes A; Phillips C, Torres M; Brunet A;

- Garrido G; Carracedo A; Guillamat R; Vallès V; Guitart M; Labad A; Vilella E. *Analyses of variants located in estrogen metabolism genes (ESR1, ESR2, COMT and APOE) and schizophrenia. Schizophrenia Research.* 2007 Dec 28; [Epub ahead of print] PMID: 18164902
- Vilella E; Costas J; Sanjuan J; Guitart M; De Diego Y; Carracedo A; Martorell L, Valero J; Labad A; De Frutos R; Nájera C; Moltó MD; Toirac I; Guillamat R; Brunet A; Vallès V; Pérez L; Leon M; de Fonseca FR; Phillips C; Torres M. *Association of schizophrenia with DTNBP1 but not with DAO, DAOA, NRG1 and RGS4 nor their genetic interaction. Journal of Psychiatric Research.* 2007 Apr 2; [Epub ahead of print] PMID: 17408693
  - Fernandez-Ramos, A.; Martinez-Nunez, E.; Vazquez, S. A.; Rios, M. A.; Estevez, C. M.; Merchan, M.; Serrano-Andres, L. *Journal of Physical Chemistry A* 2007, 111, 5907. Hydrogen Transfer vs Proton Transfer in 7-Hydroxy-quinoline·(NH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>: A CASSCF/CASPT2 Study
  - Mousavipour, S. H.; Fernandez-Ramos, A.; Meana-Paneda, R.; Martinez-Nunez, E.; Vazquez, S. A.; Rios, M. A. *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, 719.
  - Ramiłowski JA; Mikosz AA; Farrelly D. *Rotational structure of small He-4 clusters seeded with HF, HCl, and HBr molecule. Journal of Physical Chemistry.* 111. 49. 12275-12288. 2007.
  - Calvo, P.; Crugeiras, J.; Rios, A.; Rios, M. A. *Nucleophilic Substitution Reactions of N-Chloramines: Evidence for a Change in Mechanism with Increasing Nucleophile Reactivity. Journal of Organic Chemistry.* 72(9). 3171-3178. 2007
  - Peña-Gallego, Ángeles; Rodríguez-Otero, Jesús; Cabaleiro-Lago, Enrique M. *A theoretical study of the influence of BF<sub>3</sub> on the reaction path of the [4 + 2] cycloaddition of vinylketene with formaldimin. Tetrahedron.* A. 63 11617-11621. 2007. ISBN : 0040-4020
  - Rodríguez-Otero, Jesús; Cabaleiro-Lago, Enrique M; Peña-Gallego, Angeles. *Theoretical study of the walk rearrangement in perfluorotetramethyl (Dewar thiophene) exo-S-oxid. Tetrahedron.* A. 63.2191-2198. 2007. ISBN : 0040-4020
  - Montero-Campillo, M.; Merced Rodríguez-Otero, Jesús; Cabaleiro-Lago. *Ab initio and DFT study of the aromaticity of some Fulvalenes derived from*



- Methylenecyclopropabenzen*. **Journal of Molecular Modeling**. A. 13. 919-926. 2007. ISBN : 0948-5023
- Pena-Gallego, Angeles; Rodriguez-Otero, Jesus; Cabaleiro-Lago, Enrique M. *A DFT study of the [4+2] cycloadditions of conjugated ketenes (vinylketene, imidoylketene and formylketene) with formalimine. The pericyclic or pseudopericyclic character from magnetic properties*. **Tetrahedron A**. Volume. 63. 4937-4943. 2007. ISBN : 0040-4020
  - Cabaleiro-Lago, Enrique M.; Rodriguez-Otero, Jesus; Pena-Gallego, Angeles. *A computational study of the electrocyclization of o-divinylbenzene and derivatives*. **Journal of Molecular Structure-Theochem A**. 811. 141-151. 2007. ISBN : 0166-1280.
  - Pena-Gallego, A.; Rodriguez-Otero, J.; Cabaleiro-Lago, E. M. *A Comparative Theoretical Study of the Pericyclic-pseudopericyclic Character in a Group of Cyclizations of Dienylketenes to Cyclohexadienones*. **Journal of Physical Chemistry A** 111. 2935-2940. 2007. ISBN : 1089-5639.
  - Pena-Gallego, A.; Rodriguez-Otero, J.; Cabaleiro-Lago, E. M. *A Comparative Theoretical Study of the Pericyclic-pseudopericyclic Character in a Group of Cyclizations of Dienylketenes to Cyclohexadienones*. **Journal of Physical Chemistry A** 111. 2935-2940. 2007. ISBN : 1089-5639.
  - Hosein Mousavipour, S; Fernández Ramos, Antonio; Meana Pañeda, Rubén; Martínez Núñez, Emilio; Vázquez, Saulo A.; Ríos, Miguel A. *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*. **J. Physical Chemistry A**. 111 (4). 719-725. 2007.
  - Fernandez-Ramos, Antonio; Emilio Martínez-Nunez, Emilio; Vazquez, Saulo A.; Ríos, Miguel A.; Estevez, Carlos M.; Merchan,Manuela; Serrano-Andres, Luis. *Hydrogen Transfer vs Proton Transfer in 7-Hydroxy-quinoline-(NH3)3: A CASSCF/CASPT2 Study*. **Journal of Physical Chemistry.A**. 111, 5907-5912. 2007.
  - Harmata, Michael; Zheng, Pinguan; Schreiner, Peter R.; Navarro-Vazquez, Armando. *Diastereoselectivity in an electrocyclization reaction of cyclopentadienones*. **Tetrahedron Letters**. 48 (33). 5919-5922. 2007. ISSN: 0040-4039
  - Navarro-Vazquez, A ; Rodriguez, D ; Martinez-Esperon, MF; Garcia, A ; Saa, C. ; Dominguez, D. *Acid-catalyzed cyclization of acyliminium ions derived from allenamides. A new entry to protoberberines*. **Tetrahedron Letters**. 48 (15). 2741-2743.

2007 ISSN: 0040-4039

- Freire, Félix; Seco, José Manuel; Quiñoá, Emilio; Riguera, Ricardo. *Challenging the absence of observable hydrogens in the assignment of absolute configurations by NMR: Application to chiral primary alcohols*. **Chemical Communications**. 1456-8. 2007
- Freire, Félix; Calderón, Félix; Seco, José Manuel; Quiñoá, Emilio; Riguera, Ricardo. *The Relative and Absolute Stereochemistry of Secondary/Secondary Diols: The Low Temperature <sup>1</sup>H NMR of Their bis-MPA esters*. **Journal of Organic Chemistry**. 72. 2297-2301. 2007
- Porto, Silvia; Seco, José Manuel; Ortiz, Aurelio; Quiñoá, Emilio; Riguera, Ricardo. *Chiral thiols: the assignment of their absolute configuration by <sup>1</sup>H*. **NMR REVISTA: Org.** (24), 5015 - 5018, 2007.
- Rebeca García Fandiño, Rebeca; Gulías, Moisés; Castedo, Luís; Granja, Juan R.; Mascareñas, José L.; Cárdenas, Diego J. *Palladium-Catalysed [3+2] Cycloaddition of Alk-5-ynylidenecyclopropanes to Alkynes: A Mechanistic DFT Study*. **Chemistry - A European Journal**. 14, 272 – 281. 2008.
- Riveros, R; Rumbo, A; Sarandeses, LS; Mouriño, A. *Synthesis and Conformational Analysis of 17 $\alpha$ ,21-Cyclo-22-Unsaturated Analogues of Calcitriol*. **Journal of Organic Chemistry**. 72, 5477-5485. 2007

### **Artículos científicos in-press**

- Alonso Meijide, J. M.; Casas Méndez, B.; Holler, M. J.; and Lorenzo Freire, S. (2007), *Computing Power Indices: Multilinear extensions and new characterization*. Discussion Paper 153. Sozialökonomisches Seminar der Universität Hamburg. Germany. **European Journal of Operational Research**.
- Carpente Rodríguez, L.; Casas Méndez, B.; García Jurado, I. and Van den Nouweland, A. (2007). *Coalitional interval games for strategic games in which players cooperate*. Working Paper 2005-16, University of Oregon. Economics Department. **Theory and Decision**.
- Longo Pazos, Roberto. *A density-functional study of the possibility of noncollinear magnetism in small Mn clusters using SIESTA and the generalized gradient*

*approximation to exchange and correlation. Journal of Chemical Physics* (2008)

- D. Díaz; X. C. Pardo; M. Martín; P. González; G. Rodríguez. *CPPC-G: Fault-Tolerant Applications on the Grid. Lecture Notes in Computer Science*
- Nestor Armesto; Leticia Cunqueiro; Carlos A.Salgado and W.C.Xiang. *Medium-evolved fragmentation functions. Journal of High Energy Physics.* arXiv:0710.3073
- Pilar Salgado Rodriguez. *A finite element method for the magnetostatic problem in terms of scalar potentials. SIAM Journal on Numerical Analysis* (en prensa).
- Varela, J. A.; Rubín, S. G.; Castedo, L.; Saá, C. J. "Formal" and Standard Ruthenium-Catalyzed [2 + 2 + 2]. *Cycloaddition Reaction of 1,6-Diynes to Alkenes: A Mechanistic Density Functional Study". Org. Chem.* 2008.
- Clemente, José C.; Robbins, Arthur; Graña, Paula; Paleo, M. Rita; Correa, Juan F.; Villaverde, M.; Sardina, F. Javier; Govindasamy, Lakshmanan; Agbandje-McKenna, Mavis; McKenna, Robert; M. Dunn, Ben; Sussman, Fredy. *Design, synthesis, evaluation and crystallographic based structural studies of HIV-1 protease inhibitors with reduced response to the V82A mutation. Journal of Medicinal Chemistry.*, 51, 0000, 2008.

### **Libros/capítulos**

NONE

### **Comunicaciones/presentaciones en congresos/conferencias**

- J.C. Mouriño; A.Gómez; C. Fernández; F. J. González; D.A. Rodríguez; J. Pena; F. Gómez; D. González and M. Pombar. *The eIMRT project: Planning and Verification of IMRT treatments on GRID. IBERGRID: 1st Iberian Grid Infrastructure.* pp. 341--352. Santiago de compostela, May 2007.
- A. Gómez; C. Fernández; J.c. Mouriño; J. López; F.J. G. Castaño; D. Rodríguez; L. Domínguez; D. González; J. Pena; F. Gómez; D. G. Castaño and M. Pombar. *Monte Carlo Verification of IMRT treatment plans on Grid. HealthGrid* 2007. 105-114. Ginebra, Suiza 2007.
- M.Aldegunde; A.J.García Loureiro; K.Kalna. *3D Parallel Finite Element Monte Carlo Simulation of nano-MOSFETs. 6th International Conference on Large-Scale Scientific Computations.* 2007

- N.Seoane; A.J.García Loureiro. *Análisis del rendimiento de la simulación 3D paralela de dispositivos semiconductores utilizando el resolutor BiCGSTABJ. CEDI 2007. XVIII Jornadas de Paralelismo*, vol. II, Zaragoza, Spain, Thomsom, pp. 619-627, 11/09/2007.
- B. Gómez; E. Penabad; C. F. Balseiro; V. Pérez-Muñuzuri. *PEIXE, An application for verification of forecast time series. Third international Workshop on verification methods*. ECMWF, Reading, Reino Unido
- Gomez, B.; Balseiro, C. F.; Penabad, E.; Perez-Muñuzuri, V. *Improvements on a limited area parameterization ensemble forecasting system. From one to several boundary conditions. 7th EMS Annual Meeting*. San Lorenzo de El Escorial, Spain
- Miguez-Macho, G.; Fernandez-Diaz, I.; Malvesada, M. L.; Gomez-Hombre, B. X.; Balseiro, C. F.; Penabad, E. *Numerical study of the fall 2006 flooding events in Galicia with WRF-NMM: the role of the warm sea surface temperature anomaly. 7th EMS Annual Meeting*
- Alfredo Bermúdez; Pilar Salgado. *A finite element method for the magnetostatic problem in terms of scalar potentials. The Second Chilean Workshop on Numerical Analysis of Partial Differential Equations (WONAPDE 2007)*, Concepción, Chile, Enero 16-19, 2007.
- Mascareñas, J.L.; Granja, J.R.; Castedo, L.; García Fandiño, Rebeca. *Palladium-Catalyzed [3+2] Cycloaddition of ALK-5-Ynylidene cyclopropanes to Alkynes and Alkenes. A mechanistic DFT study. Chemistry - A European Journal*. 2007

### **Posters en congresos/conferencias**

- J.C. Mouriño; A. Gómez; C. Fernández; J. López; F.J. González Castaño; D.A. Rodríguez; J. Pena; F. Gómez; D. González Castaño and M. Pombar. *El proyecto eIMRT: Planificación y Verificación de tratamientos IMRT en GRID. XVI Congreso Nacional de Física Médica*. Granada, 2007.
- Carpenente, L.; Casas, B.; Fiestras, G.; García Jurado, I.; Jácome, C. and Puerto, J. *A model and heuristic algorithms for solving a time optimization problem in an agricultural cooperative. VIII Congreso Galego de Estatística e Investigación de Operacións*, 179-184. ISBN: 978-84-690-9136-4.(2007)

- M.Aldegunde; A.J.García Loureiro; A.Martinez; K.Kalna. *Parallel 3D Monte Carlo Simulation of MOSFETs Using Tetrahedral Finite Elements*. **12th International Workshop on Computational Electronics**. 2007
- N.Seoane; K.Kalna; A.García Loureiro; A.Asenov. *Threshold voltage variability in nanoscaled In<sub>0.75</sub>Ga<sub>0.25</sub>As implant free MOSFET*. **12th International Workshop on Computational Electronics**. Amherst (USA), 08/10/2007.
- N.Seoane; A.J.García Loureiro; K.Kalna; A.Asenov. *Analysis of the impact of intrinsic parameter fluctuations in a 50 nm InP HEMT*. **6ª Conferencia de Dispositivos Electrónicos**. El Escorial. 2007.
- P. Brocos; N. Díaz-Vergara; A. Villa; A. E. Mark; Á. Piñeiro. *Potential of mean force calculations by MD simulation for cyclodextrin + octyl-b-D-glucopyranoside complexes*. **Thermodynamics 2007**, Rueil-Malmaison, 26-28 Septiembre 2007
- Lucía Gestal Souto and Gonzalo Míguez Macho. *A high resolution calculation of the equilibrium water table depth and the equilibrium soil moisture profile for the Iberian Peninsula*. Preprint volume of the **7th EMS Annual Meeting**.
- Pre-operational WRF validation in Galicia: a comparison with MM5. M. Malvesada; E. Penabad ; B.Gómez ; C.F. Balseiro ; G. Míguez-Macho ; I. Fernández; Grupo de Física No Lineal. Universidade de Santiago de Compostela. (2) MeteoGalicia. Consellería de Medio Ambiente e Desenvolvemento Sostible. Xunta de Galicia ([maria@fmares.usc.es](mailto:maria@fmares.usc.es))
- M.N. Lorenzo; J.J. Taboada and I. Iglesias. **7th EMS Annual Meeting / 8th ECAM**. *Thermohaline circulation as an example of nonlinear-processes in the climate system*
- M.N. Lorenzo; J.J. Taboada and I. Iglesias. *Transitions of the thermohaline circulation induced by noise in an earth model of the intermediate complexity*. **Second International Conference on Earth System Modelling (ICESM)**
- Malvesada, M.; Penabad, E.; Gómez, B.; Balseiro, C.F.; Míguez-Macho, G.; Fernández, I. *Pre-operational WRF validation in Galicia: a comparison with MM5*. **7th EMS Annual Meeting**. San Lorenzo de El Escorial
- Saavedra, S.; Méndez, M.R.; Souto, J.A.; Bermúdez, J.L.; Vellón, M.; Costoya, M. *Regional transport of tropospheric ozone: a case study in the northwest coast of Iberian Peninsula*. **29th NATO/SPS International Technical Meeting on Air Pollution Modelling**

and its Application. Aveiro. September 2007.

- Docobo, J. A.; Tamazian, V. S.; Andrade, M.; Ling, J. F.; Balega, Y. Y.; Lahulla, J. F.; Maximov, A.; Gonzalez-Romay, J. R. Affiliation: AA(Observatorio Astronómico Ramón María Aller, Santiago de Compostela, Spain), AB(Observatorio Astronómico Ramón María Aller, Santiago de Compostela, Spain), AC(Observatorio Astronómico Ramón María Aller, Santiago de Compostela, Spain), AD(Observatorio Astronómico Ramón María Aller, Santiago de Compostela, Spain), AE(Special Astrophysical Observatory, Karachai-Cherkessia, Russia), AF(Observatorio Astronómico Nacional, Madrid, Spain), AG(Special Astrophysical Observatory, Karachai-Cherkessia, Russia), AH(Observatorio Astronómico Ramón María Aller, Santiago de Compostela, Spain) Title: *Double Stars Speckle Interferometry With The 3.5 m Telescope At Calar Alto (Almeria, Spain)*. **Binary Stars as Critical Tools and Tests in Contemporary Astrophysics, International Astronomical Union**. Symposium no. 240, held 22-25 August, 2006 in Prague, Czech Republic, S240, p. 62 Publication Date: 08/2007 Origin: IAU Bibliographic Code: 2007IAUS..240...62D
- Cabaleiro Lago, Enrique M.; Rodríguez Otero, Jesús; Merced Montero, M.; Angeles Peña Gallego, Angeles. *Características de la interacción en complejos C10H8...(H2X)1,2; X= O, S*. **XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina**. La Habana (Cuba). 17/09/2007 – 21/09/2007.
- Rodríguez Otero, Jesús; Cabaleiro Lago, Enrique M.; M. Merced Montero Campillo, M. Merced; Peña Gallego, Angeles. *Interacciones catión-p y anión-p: efecto de la formación del complejo sobre la aromaticidad*. **XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina**. La Habana (Cuba). 2007.
- Montero, M. Merced; Rodríguez Otero, Jesús; Cabaleiro Lago, Enrique M.; Peña Gallego, Angeles. *Estudio teórico del mecanismo de la cicloadición [2+2+2+1] de monóxido de carbono y enediinos catalizada por rodio*. **XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina**. La Habana (Cuba). 2007.
- Rodríguez-Otero, Jesús; Cabaleiro Lago, Enrique M.; Peña-Gallego, Angeles; Montero Campillo, M. Merced. *Cation-pi and anion-pi interactions. changes in aromaticity upon complexation*. **11th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry**. 3-906980-19-7. Lugo (España). 2007.
- Montero-Campillo, M. Merced; Cabaleiro Lago, Enrique M.; Rodríguez-Otero, Jesús.

M.Merced Montero-Campillo Enrique M. Cabaleiro-Lago Jesús Rodríguez-Otero. **11th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry**. 3-906980-19-7. Lugo (España). 01/11/2007 – 30/11/2007.

- Meana Pañeda, Rubén. *Direct Dynamics calculations of the CH<sub>3</sub>OH + H hydrogen abstraction reaction in gas phase and aqueous solution*. **ISOTOPES** Benicassim. 2007
- Saá, Carlos; Varela, Jesús A.;Rubín, Silvia G.; Carlos González Rodríguez, Carlos; Varela Fernández, Alejandro; Castedo, Luis. *Cicloadiciones "formales" catalizadas por rutenio entre 1,6-dianos y arenos vinílicos*. **XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química**. Toledo, España. 2007

### **Tesis de doutoramento defendidas**

- Dinani Gomes Amorim. Directores: Manuel Fernández Delgado e Senén Barro Ameneiro. *Redes ART con categorías internas de geometría irregular*. Departamento: Electrónica e Computación. **Universidade de Santiago de Compostela**.
- Natalia Seoane Iglesias. *Optimización de un simulador 3D paralelo aplicado al estudio de fluctuaciones de parámetros intrínsecos en dispositivos HEMT*. Departamento: Electrónica e Computación. **Universidade de Santiago de Compostela**
- Daniel Vazquez Martinez. *Reconstrucción tomografica de gradientes de indice con simetria rotacional: Aplicaciones a cristalinos*. **Universidade de Santiago de Compostela**.
- Cezar Rodrigues, Luis. *Diseño, síntesis y actividad biológica de un nuevo ligando superagonista (AMCR277A) del receptor buclear de la vitamina D*. 2007. **Universidade de Santiago de Compostela**.

### **Tesis de doctoramiento presentadas**

- Romero Vidal. *Precision Determination of the S-wave p<sub>1</sub> Isospin Scattering Length Difference  $|a_0 - a_2|$  in the DIRAC experiment*.



- Carballido Reboredo, María Raquel; Director(es): Julio A. Seijas Vázquez, Julio A; Vázquez Tato, M. Pilar. *Síntesis asistida por microondas de compuestos de interés biológico e industrial: haloarenos, fulvenos, tricoloropirrolidonas, azoles y flavonoides. Modelado de espectros de absorción electrónica de flavonoides.* Universidade de Santiago de Compostela.

### **Tesis de licenciatura/proxectos fin de carreira**

#### **Outros**

- B. Adeva, A. Romero; O. Vázquez Doce; C. Mariñas and J. L. Fungueiriño Pazos. *K+K- and K<sub>p</sub> production in DIRAC using time-of-flight measurements. Study of K<sub>p</sub>.* **Nota interna de DIRAC 2007-02.**
- A. Romero; B. Adeva; J. L. Fungueiriño Pazos and O. Vázquez Doce. *Final results for ponium lifetime measurement with 2001 data.* **Nota interna de DIRAC 2007-07.**
- A. Romero; B. Adeva; J. L. Fungueiriño Pazos and O. Vázquez Doce. *Ponium lifetime and |a<sub>0</sub>-a<sub>2</sub>| measurement with the full DIRAC Ni data sample.* **Nota interna de DIRAC 2007-14**
- A. Romero; B. Adeva; J. L. Fungueiriño Pazos and O. Vázquez. *Doce Ponium lifetime measurement with DIRAC 2002 and 2003 Ni data.* **Nota interna de DIRAC 2007-15.**
- Andrade, M. *New orbit for WDS 16198+2646.* **IAU Commision 26. (Double Stars) Information Circular Publication.** 10/2006 Origin: IAUDS Bibliographic Code: 2006IAUDS.160....2<sup>a</sup>
- Docobo, J. A.; Ling, J. F. *New orbits for WDS 14138+3059, WDS 20311+3333* Publication: **IAU Commision 26. (Double Stars) Information Circular Publication.** 10/2006 Origin: IAUDS Bibliographic Code: 2006IAUDS.160....2D
- Docobo, J. A.; Tamazian, V. *New orbitS for WDS 16450+2928, WDS 18044+0337.* Publication: **IAU Commision 26. (Double Stars) Information Circular Publication.** 02/2007 Origin: IAUDS Bibliographic Code: 2007IAUDS.161S...1D



**Artículos científicos publicados**

- Fernández, José Luis; Fernández Doval, Angel; Trillo, Cristina; Deán, J. Luis; López, José Carlos. *Video Ultrasonics by Pulsed TV Holography: A New Capability for Non-Destructive Testing of Shell Structures*. **International Journal of Optomechatronics**, 1, 122-53, 2007, ISSN: 1559-9620 (electrónico) 1559-9612 (papel).
- Pineiro, Manuel M.; Galindo, Amparo; Parry, Andrew O. *Surface ordering and capillary phenomena of confined hard cut-sphere particles*. **SOFT MATTER** 3 (6). 768-778, 2007.
- Hermida Ramón, J.M; Graña, A.M. *Blue-Shifting Hydrogen Bond in the Benzene-Benzene and Benzene-Naphthalene Complexes*. **Journal of Computational Chemistry**. 28, 540, 2007.
- Hermida Ramón, J.M; Graña, A.M; Estévez, C. *Structural Study of Methane Hydrate*. **Journal of Structural Chemistry**. 18(5) 649-652 2007.
- Hermida Ramón, José M.; Estévez, Carlos M. *Towards the Design of Neutral Molecular Tweezers for Anion Recognition*. **Chemistry - A European Journal**. 13(17) 4743 - 4749. 2007
- Fernández-Ramos, Antonio, Martínez Núñez, Emilio; Vázquez, Saulo A.; Ríos, Miguel A.; Estévez, Carlos M.; Merchán, Manuela; Serrano Andrés, Luís. *Hydrogen Transfer vs Proton Transfer in 7-Hydroxy-quinoline $\hat{a}$ (NH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>: A CASSCF/CASPT2 Study*. **Journal of Physical Chemistry. A**, 111 (26), 5907-5912. 2007.
- Hermida Ramón, José M; Graña, Ana M.; M. Estévez, Carlos M. *Structural Study of Methane Hydrate*. **Structural Chemistry Issue**. 18, 5, 649-652. 2007.
- Sardinha, Joao; Guieu, Samuel; Deleuze, Aurélie; Fernández Alonso, Carmen M.; Pilar Rauter, Amelia; Sinay, Pierre; Marrot, Jerome; Jiménez-Barberoc, Jesús; Sollogouba, Matthieu. *gem-Difluoro-carbasugars, the cases of mannopyranose and galactopyranose*. **Carbohydrate Research**. 342, , 1689-1703. 2007.
- Hermida Ramón, José M.; Graña, Ana M. *Blue-Shifting Hydrogen Bond in the*

- Benzene–Benzene and Benzene–Naphthalene Complexes. Journal of Computational Chemistry*, 28, 540-546. 2007.
- Rodríguez Otero, Jesús; Hermida Ramón, José M.; Cabaleiro-Lago, Enrique M. *Analysis of the Nucleophilic Addition of Water to Ketenes. A DFT Study. European Journal of Organic Chemistry*. 14, 2344-2351. 2007.
  - Hermida-Ramón, José M.; Estévez, Carlos M. *Towards the Design of Neutral Molecular Tweezers for Anion Recognition. Chemistry - A European Journal*. 13, 4743-4749. 2007.
  - Hermida-Ramón, José M.; Graña, Ana M.; Estévez, Carlos M. *"Structural Study of the Methane Hydrate". STRUCTURAL CHEMISTRY*, 18(5), 649-652. 2007.
  - Alvarez, Rosana; Nieto Faza, Olalla; De Lera, Angel R.; Cárdenas, Diego J. *A Density Functional Theory Study of the Stille Cross-Coupling via Associative Transmetalation. The Role of Ligands and Coordinating Solvents. Wiley-VCH Verlag GmbH&Co. KGaA. www.asc.wiley-vch.de*. 2007.
  - Silva López, Carlos; Nieto Faza, Olalla; Alvarez, Rosana; De Lera, Angel R. *Pseudopericyclic Design Drives Antara-Antara [1,5] Methylene Sigmatropic Shifts from a Stepwise to a Concerted Mechanism. Journal of Computational Chemistry* 28: 1411–1416, 2007
  - Alvarez, Rosana; De Lera, Angel R.; Aurrecoechea M.; Durana, Aritz. *Bimetallic Intermediates in the Formation of Nucleophilic Allenylzincs from Allenylpalladiums: A DFT Study. American Chemical Society*. Publication on Web. 2007.
  - Silva López, Carlos; Nieto Faza, Olalla; Feldman, K.S.; Iyer M.R.; Hester, D.K. *Cyclization cascade of allenyl azides: A dual mechanism. Journal of the American Chemical Society*. 129 (24), 7638-7646, 2007.
  - Silva López, Carlos; Nieto Faza, Olalla; Souto, José A.; Alvarez, R.; De Lera, Angel R. *Pseudopericyclic design drives antara-antara [1,5] methylene sigmatropic shifts from a stepwise to a concerted mechanism. Journal of Computational Chemistry*, 28 (8), 1411-1416, 2007.
  - Nieto Faza, Olalla.; Silva López, Carlos ; De Lera, Angel R. *"Sulfoxide-induced*

- stereoselection in [1,5]-sigmatropic hydrogen shifts of vinylallenes. A computational study*". **Journal of Organic Chemistry**. 72 (7), 2617-2624, 2007.
- Alvarez,S.; Germain, P.; Alvarez, R.; Rodríguez Barrios, F.; Gronemeyer,H.; de Lera Angel R. *Structure, Function and Modulation of Retinoic Acid Receptor beta, a Tumor Supresor*. **International Journal of Biochemistry & Cell Biology**. 39(7-8):1406-1415. 2007.
  - Nahoum, V.; Perez, E.; Germain, P.; Rodriguez-Barrios, F.; Manzo, F.; Kammerer, S.; Lemaire, G.; Hirsch, O.; Royer, C. A.; Gronemeyer, H.; de Lera, Angel R.; Bourguet, W. *Modulators of the structural dynamics of the retinoid X receptor to reveal receptor function*. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**. 104 (44): 17323-17328, 2007.
  - Silva López, Carlos ; Nieto Faza, Olalla; De Lera, Angel R.; "*Electrocyclic ring opening of cis-bicyclo[m.n.0] alkenes: The anti-woodward-hoffmann quest*". **Chemistry - A European Journal**. 13 (17), pp. 5009-5017, 2007.
  - López Silva, Carlos; Nieto Faza, Olalla; Feldman, K.S.; Iyer, M.R.; Hester, D.K. *Cyclization cascade of allenyl azides: A dual mechanism*. **Journal of the American Chemical Society**. 129 (24), 7638-7646, 2007.
  - López Silva, Carlos; Nieto Faza, Olalla ; De Lera, Angel.R. *Electrocyclic ring opening of cis-bicyclo[m.n.0]alkenes: The anti-woodward-hoffmann quest*. **Chemistry - A European Journal**. 13 (17), 5009-5017, 2007.
  - López Silva, Carlos ; Nieto Faza, Olalla; Souto, José A.; Alvarez, R.; De Lera, Angel R. *Pseudopericyclic design drives antara-antara [1,5] methylene sigmatropic shifts from a stepwise to a concerted mechanism*. **Journal of Computational Chemistry**. 28 (8), 1411-1416, 2007.
  - Nieto Faza, Olalla ; López Silva, Carlos ; De Lera, Angel R. *Sulfoxide-induced stereoselection in [1,5]-sigmatropic hydrogen shifts of vinylallenes. A computational study*.**Journal of Organic Chemistry**. 72 (7), 2617-2624, 2007.
  - Alvarez, R.; Nieto Faza, Olalla ; De Lera, Angel R.; Cárdenas, D.J. *A density functional theory study of the stille cross-coupling via associative transmetalation. the role of ligands and coordinating solvents*. **Advanced Synthesis and Catalysis**. 349 (6),

887-906, 2007.

- Álvarez, Rosana; Nieto Faza, Olalla; De Lera, Angel R.; Cárdenas, Diego J. *A DFT Study of the Stille Cross-Coupling via Associative Transmetalation. The Role of Ligands and Coordinating Solvents.* [www.asc.wiley-vch.de](http://www.asc.wiley-vch.de). Web. 2007.
- Silva López, Carlos; Nieto Faza, Olalla; Souto, José A.; Alvarez, Rosana; De Lera, Angel R. *Pseudopericyclic design drives [1a,5a] methylene sigmatropic shifts from a stepwise to a concerted mechanism.* **Journal of Computational Chemistry**. 28: 1411–1416. 2007.
- Alvarez, Rosana; De Lera, Angel R.; Aurrecochea, Jose M.; Durana, Aritz. *Bimetallic Intermediates in the Formation of Nucleophilic Allenylzincs from Allenylpalladiums: A DFT Study.* **American Chemical Society. Organometallics**. 26, 2799-2802. 2007.
- Vila, A; Mosquera, R.A. *Atoms in Molecules Interpretation of the Anomeric Effect in the O–C–O Unit.* **Journal of Computational Chemistry**. 28. 1516, 2007.
- A. Vila, A; R. A. Mosquera, R.A. *QTAIM explanation of the anomeric effect in the O–C–O unit II: 2-Methoxyoxane and 2,2-dimethoxypropane.* **Chemical Physics**. 443, 22, 2007.
- Eskandari, K.; Vila, A.; Mosquera, R. A. *Interpretation of Anomeric Effect in the N-C-N Unit with the Quantum Theory of Atoms in Molecules.* **Journal of Physical Chemistry**. 111, 8491, 2007.
- Mandado, M.; González Moa, M.J.; Mosquera, R.A. *QTAIM n-center delocalization indices as descriptors of aromaticity in mono and poly heterocycles.* **Journal of Computational Chemistry**. 28, 127-136, 2007.
- Estévez, L; González Moa, M.J; Terán, C.; Mosquera, R.A. *Conformational study and electron density analysis of 9-[tetrahydropyran-3-yl]purine derivatives.* **Tetrahedro**. 63, 717-726, 2007.
- Eskandari, K.; Mandado, M.; Mosquera, R.A. *Approximate transferability in conjugated polyenes.* **Chemical Physics**. 437, 1-7, 2007.
- González Moa, M.J; Mandado, M.; Mosquera, R.A. *A computational study on the*

- stacking interactoin in quinhydrone. Journal of Physical Chemistry. A*, 111, 1998-2001, 2007.
- González Moa, M.J; Mandado, M.; Mosquera, R.A. *A computational study on the stacking interactoin in quinhydrone. Journal of Physical Chemistry. A*, 111, 1998-2001, 2007.
  - Vila, A.; Mosquera, R.A. *Atoms in molecules interpretation of the anomeric effect in the O-C-O unit. Journal of Computational Chemistry*. 28, 1516-1530, 2007.
  - Mandado, M.; González Moa, M.J; Mosquera, R.A. *Chemical Graph Theory and n-center Electron Delocalization Indices: A Study on Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. Journal of Computational Chemistry*. 28, 1625-1633, 2007.
  - Otero, N.; Mandado, M.; Mosquera, R.A. *Nucleophilicity of indole derivatives: Activating and deactivating effects based on proton affinities. Journal of Physical Chemistry A*. 111, 5557-5562, 2007.
  - Otero, N.; Mandado, M.; Mosquera, R.A. *Revisiting the Calculation of Condensed Fukui Functions using QTAIM, Journal of Chemical Physics*. 126, 234108, 2007.
  - Vila, A.; Mosquera, R.A. *QTAIM explanation of the anomeric effect in the O-C-O unit II. 2-methoxyoxane and 2,2-dimethoxypropane. Chemical Physics*. 443, 22-28, 2007.
  - De Carvalho, M.F.; Mosquera, R.A.; Rivelino, R. *A density functional theory study of the hydrogen bond interactions in glycine dimers. Chemical Physics*. 445, 117-124 2007.
  - González Moa, M.J.; Mandado, M; Cordeiro, M.N.D.S. Mosquera, R.A. *QTAIM electron density study of natural chalcones. Chemical Physics*. 446, 1-7, 2007.
  - Estévez, L.; Mosquera, R.A. *A density functional theory study on pelargonidin. Journal of Physical Chemistry. A*. 111, 11100-11109, 2007.
  - Rodríguez, J.L.; García-Tuñón, I.; Taboada, J.M.; Obelleiro, F. *Broadband HF Antenna Matching Network Design Using a Real-coded Genetic Algotihm. IEEE Transactions on Antennas & Propagation Special Issue on Synthesis and Optimization Techniques in Electromagnetics and Antenna System Design, vol. 55, no. 3. 611-618, 2007.*

### **Artículos científicos in-press**

- López Bravo, Cristina; González Castano, Francisco J.; Rodelgo Lacruz, Miguel; Pavón Mariño, Pablo; García Haro, Joan. *LBWS: a load-balanced distributed scheduler for WAsPNET optical packet switches*. **European Transactions on Telecommunications**. 2007. ISSN: 1124-318X Issues/Year: 6
- Mandado, Marcos; Hermida Ramón, José M.; Estévez, Carlos M. *Molecular Tweezers as Receptors for Anions. An Energetic and Topological Study*. **Journal of Molecular Structure, THEOCHEM**. Accepted Manuscript, Available online. 2007.
- Álvarez, Rosana; Pérez, Martín; Nieto Faza, Olalla; De Lera, Angel R. *The Associative Transmetalation in the Stille Cross-Coupling Reaction to Form Dienes: Theoretical Insights into the Open Pathway*.
- Rodríguez Molaes, Alfonso; Seoane Sobreira, M.A.; Gimenez Pena, A; Guijarro Torres, S. *The influence of positional uncertainty in free-field microphone calibration*. Provisionally

### **Libros/capítulos**

- Mosquera, R.A.; González Moa, M.J.; Graña, A.M.; Mandado, M.; Vila, A. *Exploring basic chemical concepts with the quantum theory of atoms in molecules*. **Chapter 4 in Chemical Physics Research Trends (Horizons in World Physics)**. 252, 165-213, B.V. Arnold (Ed.), NovaPublishers, New York. 2007. ISBN: 1-60021-554-8.
- Mandado, M.; González Moa, M.J.; Mosquera, R.A. *Exploring basic chemical concepts with the quantum theory of atoms in molecules. II. Aromaticity*. **Progress in Quantum Chemistry Research**, Nova Publishers, New York.

### **Comunicacións/presentacións en congresos/conferencias**

- Nieto, R; Gimeno, L; *The project VALIMOD*. **Oral European Geosciences Union, General Assembly 2007 (EGU 2007)**. Viena - Austria, 2007.
- Nieto, R.; Gimeno, L.; Lorenzo, N.; Trigo, R.; de la Torre, L. *A tri-reanalysis climatology of COLs occurrence and an exploratory analysis of their predictability using*

*reforecast. 7th EMS Annual Meeting / 8th ECAM.* El Escorial, Madrid. 2007.

- Piñeiro, M.M; Cerdeiriña, C.A; Medeiros, A. *Response Functions of fluids: a Microscopic approach based on NpT Monte Carlo.* **Thermodynamics 2007.** Rueil Malmaison, Francia, 2007.
- Nieto, R.; Gimeno, L. *The project VALIMOD.* **WORKSHOP DE LA ACCIÓN COST 733 'Harmonisation and Applications of Weather Types Classifications for European Regions.** Florencia- Italia, 2007.
- Nieto, R.; Gimeno, L.; Lorenzo, N.; Trigo, R.; de la Torre, L. *A tri-reanalysis climatology of cut-off low systems occurrence and an exploratory analysis of their predictability using reforecast.* **7TH EMS ANNUAL MEETING / 8TH ECAM.** El Escorial, Madrid - España, 2007
- Rodríguez Molares, Alfonso; Sobreira Seoane, Manuel A. *A Numerical study of the influence of sound lever meter case.* **19th International Congress on Acoustics.** Madrid. 2007.
- Araújo, M.G.; García-Tuñón, I.; Taboada, J.M.; Rodríguez, J.L.; Obelleiro, F.; Landesa, L. *Modelo de fase progresiva para la densidad de corriente en el Fast Multipole Method.* **V Encuentro Ibérico de Electromagnetismo Computacional 2007, Aiguablava (Costa Brava).** 2007.
- Taboada, J.M.; Landesa, L.; Araujo, M.G.; Obelleiro, F.; Rodríguez, J.L.; García-Tuñón, I. *Compression of the Fast Multipole Method using the Singular Value Decomposition.* **European Conference on Antennas and Propagation (EUCAP 2007).** Edinburgh. 2007
- Araujo, M.G.; Obelleiro, F.; Rodríguez, J.L.; García-Tuñón, I.; Taboada, J.M. *Evaluation of Singular Potencial Integrals in the Method of Moments using Linearly Paced RWG Basis Functions.* **European Conference on Antennas and Propagation (EUCAP 2007),** Edinburgh. 2007

### **Posters en congresos/conferencias**

- Dopazo Paz, Ana; González-Salgado, Diego; Romani, Luís. *Molecular simulation of the Thermodynamic Behaviour of the {METHANOL + WATER} system.*



**Thermodynamics.** París .2007

- Dopazo Paz, Ana María. *Simulación molecular del comportamiento termodinámico del sistema metanol + agua*. XXXI Reunión Bienal de la RSEF Granada. 2007.
- Nieto, R.; Gimeno, L.; Lorenzo, M.; Trigo, R.; Taboada, I. *Predecibilidad de los sistemas de depresiones aislados en niveles altos (DANAs) utilizando datos de repredicción*. XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física (RSEF). Granada. 2007.
- A. Bermúdez, A; Fernández J.L; Lopez, C; Salgado, P. *Análisis of probe response in nondestructive testing of tubes using a volumen integral formulation based on the currente density*. COMPUMAG2007 - 16th Internacional Conference on the Computation of Electromagnetic Fields. Achen, ALEMANIA. 2007.
- Nieto, R; Gimeno, L; Trigo, R; Lorenzo, N. *Predictability of cut-off low systems occurrence using reforecasts*. Final Workshop de la Acción Cost 723 'Data exploitation and modelling for the upper troposphere and lower stratosphere. Sofía-Bulgaria, 2006.
- Nieto, R.;Gimeno, L.; Lorenzo, N.; Trigo, R. *Predictability of cut-off low systems occurrence using reforecasts*. EUROPEAN GEOSCIENCES UNION, GENERAL ASSEMBLY 2007 (EGU 2007). 2007.
- Nieto, R; Gimeno, L; Lorenzo, M; Trigo, R; Taboada, I. *Predecibilidad de los sistemas de depresiones aislados en niveles altos (DANAs) utilizando datos de repredicción*. Real Sociedad Española de Física (RSEF). Granada - España, 2007.
- Rodríguez Barrios, Fátima. *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, USA. 2007.
- Rodriguez Perez, Martín. *Computational Organic Chemistry*. I Jornadas dos Investigadores Parga Pondal e Ramón y Cajal de Galicia, Santiago de Compostela. 2007.
- Rodriguez Perez, Martín. *Química Orgánica Computacional*. ECiMUVI (Encontro Científico Multidisciplinar da Universidade de Vigo). 2007.

**Tesis de doutoramento defendidas**



- Pérez- Ojeda y Pérez, José Francisco. *Contribución a la predicción y medida de la superficie equivalente radar de buques. Universidade de Vigo*
- Pérez Santín, Efrén. *Diseño, síntesis y evaluación biológica de buevos retinoides. Universidade de Vigo*
- Alvarez, Susana. *Moduladores de receptores de retinoides: diseño, síntesis y caracterización. Universidade de Vigo.*

### **Tesis de licenciatura/Proxectos fin de carreira**

- Fontán Filgueira, Noelia. *Síntesis de Ureas Simétricas con Potencial Actividad como Inhibidores de las Histonas Metiltransferasas de Aeginina.* Directores: De Lera, Angel R; Álvarez Rodríguez, Rosana. **Facultad de Química. Universidade de Vigo.** 2007.
- García Domínguez, Patricia. *Aproximación a la Síntesis de los Peyssoneninos A y B.* Directores: Angel R. De Lera, Angel; Álvarez Rodríguez, Rosana. **Facultad de Química. Universidade de Vigo.** 2007.
- Otero Martínez, Nicolás. *Estudio QTAIM de las protonaciones del indol y derivados.* **Facultad de Química. Universidad de Vigo.** 2007.
- Lenain, Pieterjan. *QTAIM based multicenter delocalization analysis of resonance assisted hydrogen bonds.* **Universidad de Gante** (Bélgica). 2007.

### **OUTROS USUARIOS / INSTITUCIÓN**

### **ARTIGOS PUBLICADOS**

- Leo González; Vassilis Theofilis and Rafael Gómez Blanco. *Finite Element Methods for Viscous Incompressible BiGlobal Instability Analysis on Unstructured Meshes.* **American Institute of Aeronautics and Astronautics, AIAA Journal.** 0001-1452 vol.45 no. 4 (840-854) 2007.

### 3.2. Producción Científica da Fundacion CESGA

#### Congresos. Presentaciones orales.

<b>Autores</b>	Autores: A. Gómez, C. Fernández, J.C. Mouriño, J. López, F.G. G. Castaño, D. Rodríguez, L. Domínguez, D. González, J. Pena, F. Gómez, D. G. Castaño, M. Pombar
<b>Título</b>	Monte Carlo Verification of IMRT treatment plans on Grid
<b>Tipo de participación</b>	Comunicación oral
<b>Congreso</b>	HealthGrid 2007
<b>Lugar celebración</b>	Ginebra (Suiza)
<b>Data</b>	01/04/2007 al 01/04/2007

<b>Autores</b>	J.C. Mouriño, A.Gómez, C. Fernández, F. J. González, D.A. Rodríguez, J. Pena, F. Gómez, D. González, M. Pombar
<b>Título</b>	The eIMRT project: Planning and Verfication of IMRT treatments on GRID
<b>Tipo de participación</b>	Comunicación Oral
<b>Congreso</b>	IBERGRID
<b>Lugar celebración</b>	Santiago de Compostela
<b>Data</b>	14/05/2007 al 16/05/2007

<b>Autores</b>	F.J. González-Castaño, P.S. Rodríguez-Hernández, R.P. Martínez-Álvarez, A. Gómez-Tato
<b>Título</b>	SUPPORT VECTOR MACHINE DETECTION OF PEER-TO-PEER TRAFFIC IN HIGH-PERFORMANCE ROUTERS WITH PACKET SAMPLING: NONLINEAR KERNEL APPROACH
<b>Tipo de participación</b>	Comunicación Oral
<b>Congreso</b>	COMPUTATIONAL SCIENCE - ICCS 2007 7TH INTERNATIONAL CONFERENCE
<b>Lugar celebración</b>	BEIJING (China)
<b>Data</b>	27/05/2007 al 30/05/2007

<b>Autores</b>	M.David, G. Barreira, G. Boreges, N. Dias, J. Gomez, J.P. Martins, E. Acción, C. Borrego, M. Delfino, G. Merino, K. Neuffer, A. Pacheco, M.C. Porto, A. Sainz, J. López, P. Rey, C. Fernández, A. Simón, A. Lumbreras, F. Pérez, G. Amoros, J. SALT, A. Fernández, A. Lamas,
<b>Título</b>	South-West Regional Operations Centre.: Operation and management as part of the EGEE Gris infrastructure

<b>Tipo de participación</b>	Comunicación Oral
<b>Congreso</b>	IBERGRID
<b>Lugar celebración</b>	Santiago de Compostela
<b>Data</b>	14/05/2007 al 16/05/2007

<b>Autores</b>	P.Rey, C.Fernández, J.López, D.Kant, y J.Gordon
<b>Título</b>	The accounting infrastructure in EGEE
<b>Tipo de participación</b>	Comunicación Oral
<b>Congreso</b>	IBERGRID
<b>Lugar celebración</b>	Santiago de Compostela
<b>Data</b>	14/05/2007 al 16/05/2007

<b>Autores</b>	G.Borges, M.David, J.Gomes, J.López, P.Rey, A.Simón, C.Fernández, D.Kant, y K.M.Sephton
<b>Título</b>	Sun Grid Engine, a New Scheduler for EGEE Middleware
<b>Tipo de participación</b>	Comunicación Oral
<b>Congreso</b>	IBERGRID
<b>Lugar celebración</b>	Santiago de Compostela
<b>Data</b>	14/05/2007 al 16/05/2007

<b>Autores</b>	C.Fernández, L.García, C. Veiga, J.López, I.Campos, S.Stork, and M.Plociennik
<b>Título</b>	A Study and Implementation of Virtual Servers for a Parallel Grid
<b>Tipo de participación</b>	Comunicación Oral
<b>Congreso</b>	IBERGRID
<b>Lugar celebración</b>	Santiago de Compostela
<b>Data</b>	14/05/2007 al 16/05/2007

### Congresos. Posters.

<b>Autores</b>	Sagarminaga, Yolanda; Pérez, Javier; López, Ignacio; Cotos, José
<b>Título</b>	RETELAB: Desarrollo de un Laboratorio Virtual
<b>Tipo de Participación</b>	Poster
<b>Congreso</b>	XII Congreso de la Asociación Española de Teledetección
<b>Lugar</b>	Mar de Plata (Argentina)

<b>Data</b>	Septiembre 2007
<b>Autores</b>	Autores: J.C. Mouriño, A. Gómez, C. Fernández, J. López, F.J. González Castaño, D.A. Rodríguez, J. Pena, F. Gómez, D. González-Castaño, M. Pombar
<b>Título</b>	El proyecto eIMRT: Planificación y Verificación de tratamientos IMRT en GRID
<b>Tipo de participación</b>	Poster
<b>Congreso</b>	XVI CONGRESO NACIONAL DE FÍSICA MÉDICA
<b>Lugar celebración</b>	GRANADA
<b>Data</b>	22/05/2007 al 25/05/2007

**Publicaciones (revistas/capítulos de libros/etc).**

<b>Autores</b>	García Tobío, Javier; Doallo Biempica, Ramón; López Cabido, Ignacio; Martín Santamaría, M <sup>a</sup> José; Gómez Tato, Andrés; Touriño Domínguez, Juan (Editores)
<b>Título</b>	1st Iberian Grid Infrastructure Conference Proceedings
<b>Tipo (libro, artículo, capítulo, otra)</b>	libro
<b>Referencia</b>	ISBN 978-84-611-6634-3

<b>Autores</b>	J.Carlos Mouriño, Aurelio Rodríguez
<b>Título</b>	Benchmarks para el análisis de nuevas arquitecturas: Xeon Single, Dual y Quadcore
<b>Tipo (libro, artículo, capítulo, otra)</b>	Otro
<b>Referencia</b>	INFORME TÉCNICO CESGA-2007-001

<b>Autores</b>	Jesús Otero, Andrés Gómez
<b>Título</b>	Integración de dispositivos biomédicos en sistemas de teleasistencia
<b>Tipo (libro, artículo, capítulo, otra)</b>	Otro
<b>Referencia</b>	INFORME TÉCNICO CESGA-2007-002

