
**FUNDACIÓN CENTRO TECNOLÓGICO DE SUPERCOMPUTACIÓN
DE GALICIA**

MEMORIA TÉCNICA EJERCICIO 2008

Marzo 2009

ÍNDICE

INTRODUCCIÓN

1.- Actividades do área de Cálculo ao longo do ano 2008.....	4
1.1.- Servidores de cálculo.....	4
1.2.- Aplicacións científicas.....	14
1.3.- Subsistema de almacenamento.....	29
2.- Actividades do área de Comunicacións.....	31
2.1.- Actividades mais destacadas do ano.....	31
2.2.- Tráfico transferido.....	32
3.- Actividades do área de Tele-ensino.....	38
4.- Actividades do área de e-Business.....	40
4.1.- Proxecto "mancomun.org".....	41
5.- Actividades do área de GIS.....	45
6.- Actividades do área de Comunicación e Difusión.....	47
7.- Contratos e Proxectos.....	53
7.1.- Contratos e convenios executados.....	53
7.2.- Descripción de Proxectos.....	54
7.3.-Redes e Plataformas Tecnolóxicas internacionais, nacionais e rexionais.....	60
8.- Producción Científica	63
8.1.- Producción científica de usuarios de computación do CESGA.....	63
8.2.- Producción científica do CESGA.....	96

INTRODUCCIÓN

Durante o ano 2008 a Fundación a cabo unha actividade intensa en aspectos organizativos, estratéxicos e de infraestruturas.

A modo de resúmen enuméranse as actividades máis significativas realizadas ao longo do 2008:

- Posta en produción estable do supercomputador Finis Terrae, o cal ocupa o nº 100 na lista TOP500 de supercomputación.
- Resolución de 6 grandes retos computacionais: o problema matemático dos Puntos de FEKETE, HEMCUVE , que resolveu 150 millóns de incognitas pasando a ser un record a nivel mundial, wien2k para a resolución do 3º/4º problema físico dos AIP, Algoritmo xenético do IEM, LAMMPS do IEM.
- O CESGA multiplica por 5 o número de horas de cálculo executadas o ano anterior.
- Sinatura de convenio de colaboración entre o Ministerio de Ciencia e Innovación, Xunta de Galicia e CESGA para o financiamento da nova sede do CESGA.
- Publícase e adxudica o concurso de ideas para a nova sede do CESGA.
- A Dirección Xeral de Tráfico e o CESGA asinan un convenio de colaboración para compartir infraestruturas de comunicacións e supercomputación.
- O Ministerio de Ciencia e Innovación, a Consellería de Innovación e Industria, CESGA e Rede.é, asinan un convenio de colaboración para a interconexión das redes de comunicacións académicas e de investigación, española (RedIRIS), portuguesa (FCCN) e galega (RECETGA).
- A Fundación modifica a súa organigrama e acolle as áreas de produción da SAX CESGA.
- Elaboración e presentación do plan científico-tecnolóxico do C2SRC. (CESGA, Computational Science Research Centre).
- Elaboración do Plan Estratéxico do CESGA 2010-2013. Pendente de aprobación.
- O CESGA recibe o premio APPLUS+, á calidade na xestión.

1.- Actividades do área de Cálculo ao longo do ano 2008.

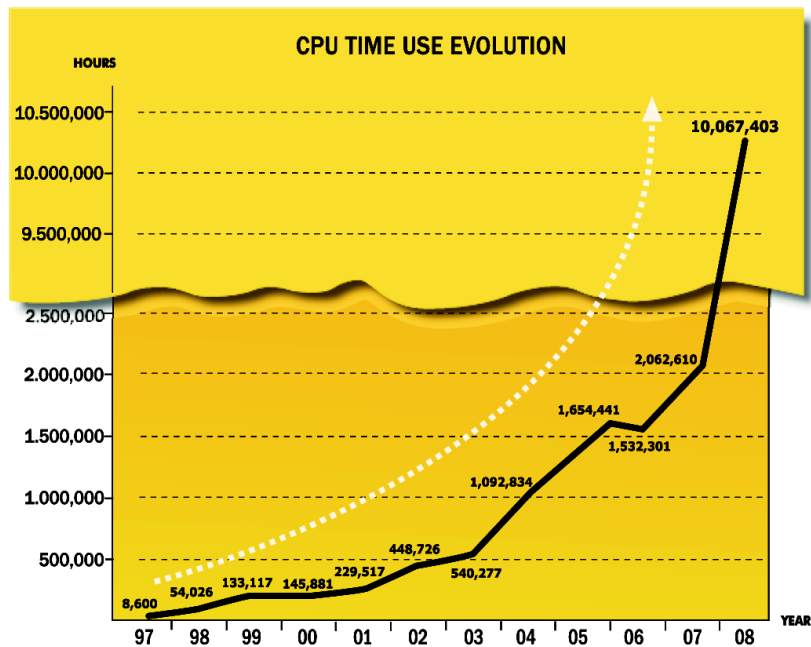
1.1.- Servidores de cálculo.

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.

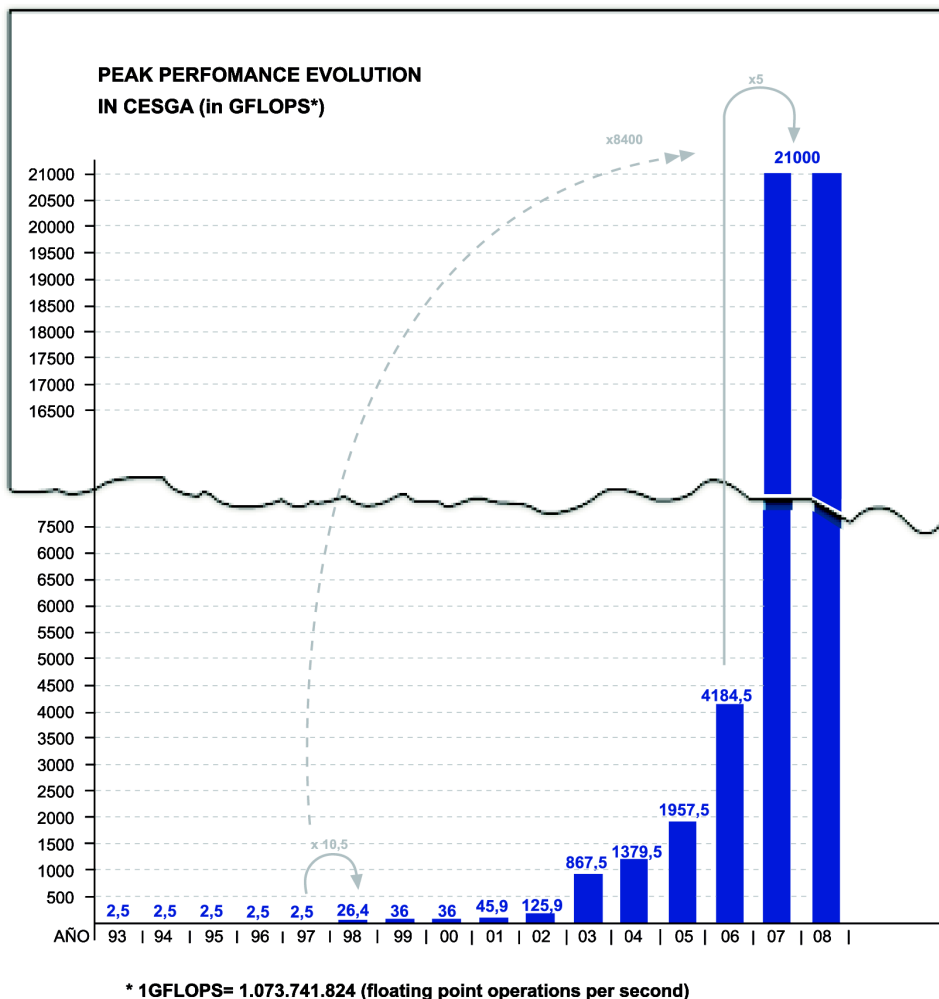
Os fitos máis relevantes durante o ano 2008 en canto a servidores de cálculo, foron:

- Posta en funcionamento de Finis Terrae
- Integración dos servidores HP-Superdome en Finis Terrae
- Baixa do servidor HPC-320, inaugurado no ano 2002.
- Supéranse os 10 millóns de horas de cálculo .

Nos gráficos seguintes representáanse os datos máis significativos correspondentes á actividade de cálculo no CESGA.



Evolución das horas de cálculo



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

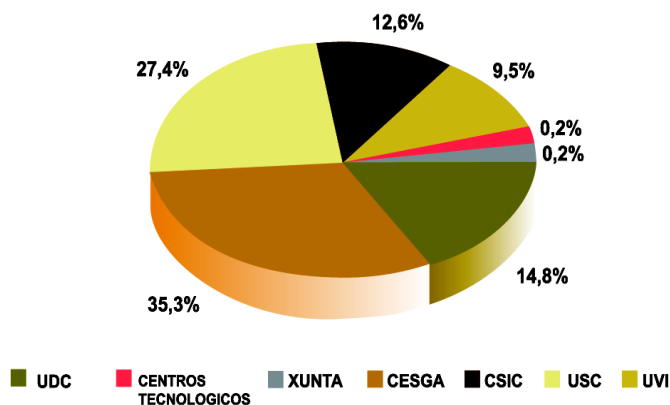
No ano 2007 multiplícanse por 5 os TFLOPS

No ano 2008 o CESGA non realizou adquisicións significativas nos servizos de cálculo e centrouse na posta en produción e soporte de Finis Terrae. Este sistema aparece no número 100 na lista dos Top500 de Novembro de 2007 e comezou a dar servizo en febreiro de 2008 para a realización de retos computacionais de gran relevancia e a todos os usuarios en abril de 2008.

Número de Contas Activas

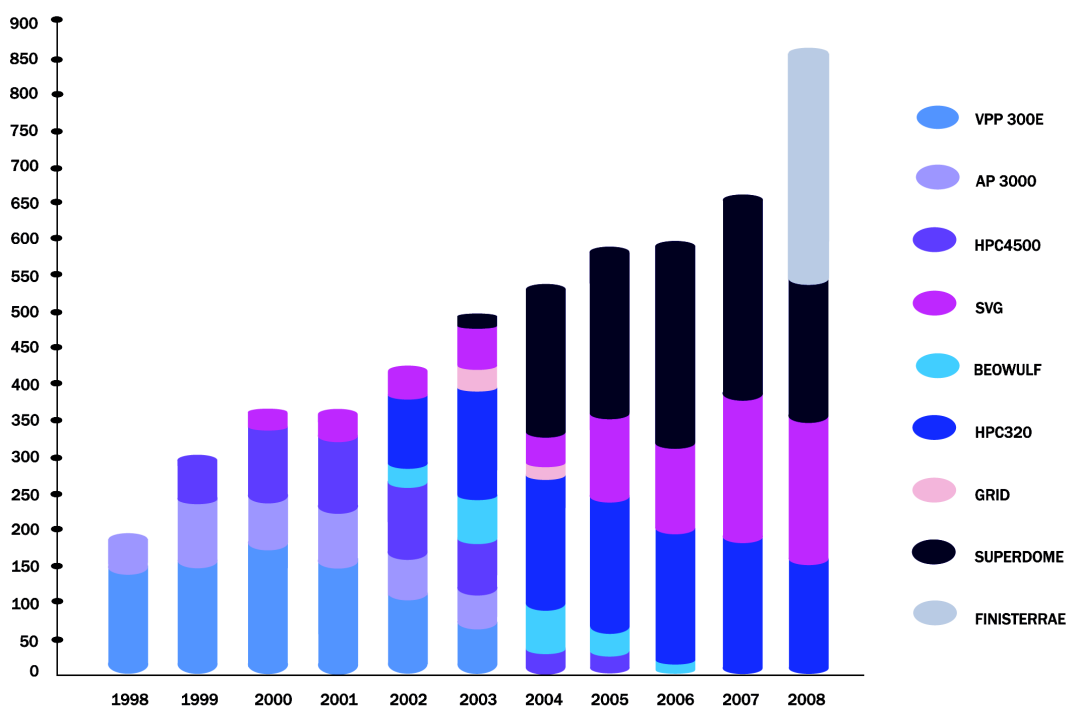
O sistema con maior número de contas activas (é dicir, usuarios con consumo significativo de horas de cálculo ao longo do ano) é Finis Terrae, con 313 usuarios durante o seu primeiro ano de posta en funcionamento. O SVG tivo 213 contas de usuarios activos, aumentando en 26 o número de contas respecto ao ano anterior, ademais dos usuarios de proxectos grid, que aparecen encadrados dentro dos proxectos do CESGA e que pertencen a institucións nacionais e internacionais participantes nas distintas iniciativas grid nas que participa o CESGA (Rede española de e-Ciencia, proxectos europeos como EGEE, EELA e int.eu.grid, proxecto español como RETELAB e CYTEDGRID e proxectos autonómicos como FORMIGA e G-FLUXO). En total, o número de contas activas creceu desde as 645 do ano 2007 ás 986 deste ano, o que supón un crecemento do 53%, fundamentalmente motivado polo incremento no número de usuarios no sistema Finis Terrae e a incorporación dos usuarios de computación grid.

CUENTAS DE USUARIO ACTIVAS 2008



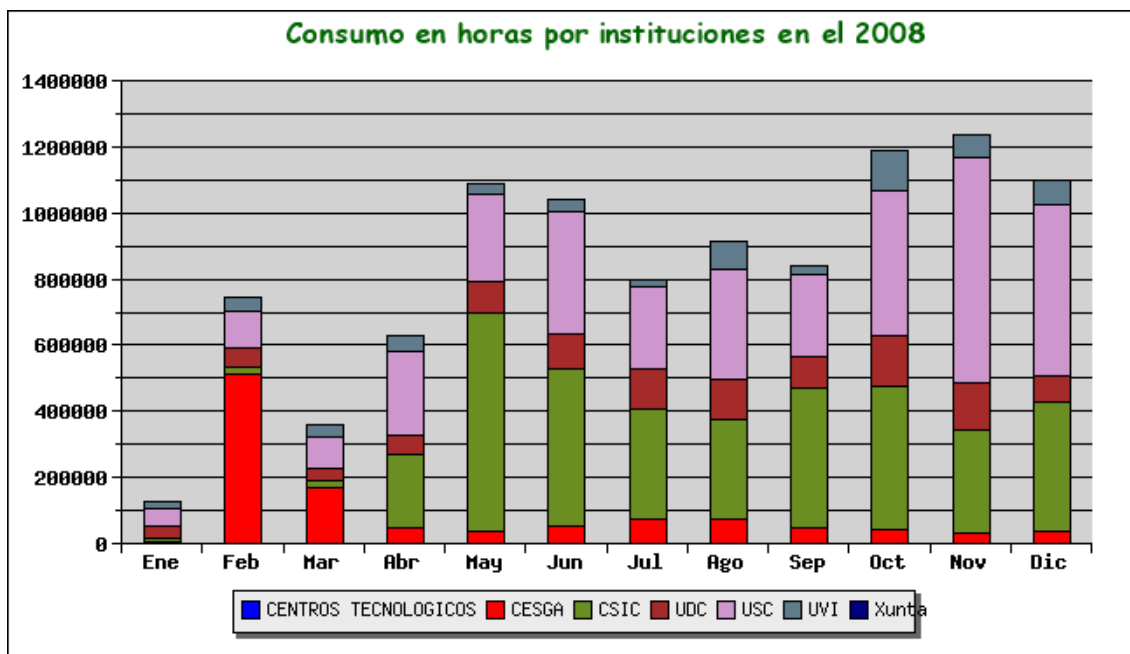
	Centros Tecnolóxicos	CESGA	CSIC	UDC	USC	UVI	XUNTA	Total
FINIS TERRAE	2	56	70	45	105	33	2	313
GRID	0	212	0	0	0	0	0	212
HPC320	0	8	7	11	27	10	0	63
SUPERDOME	0	26	22	42	68	27	0	185
SVG_DELL	0	46	25	48	70	24	0	213
Total	2	348	124	146	270	94	2	986

USER ACCOUNT EVOLUTION PER SYSTEM PER YEAR



Evolución do consumo de CPU

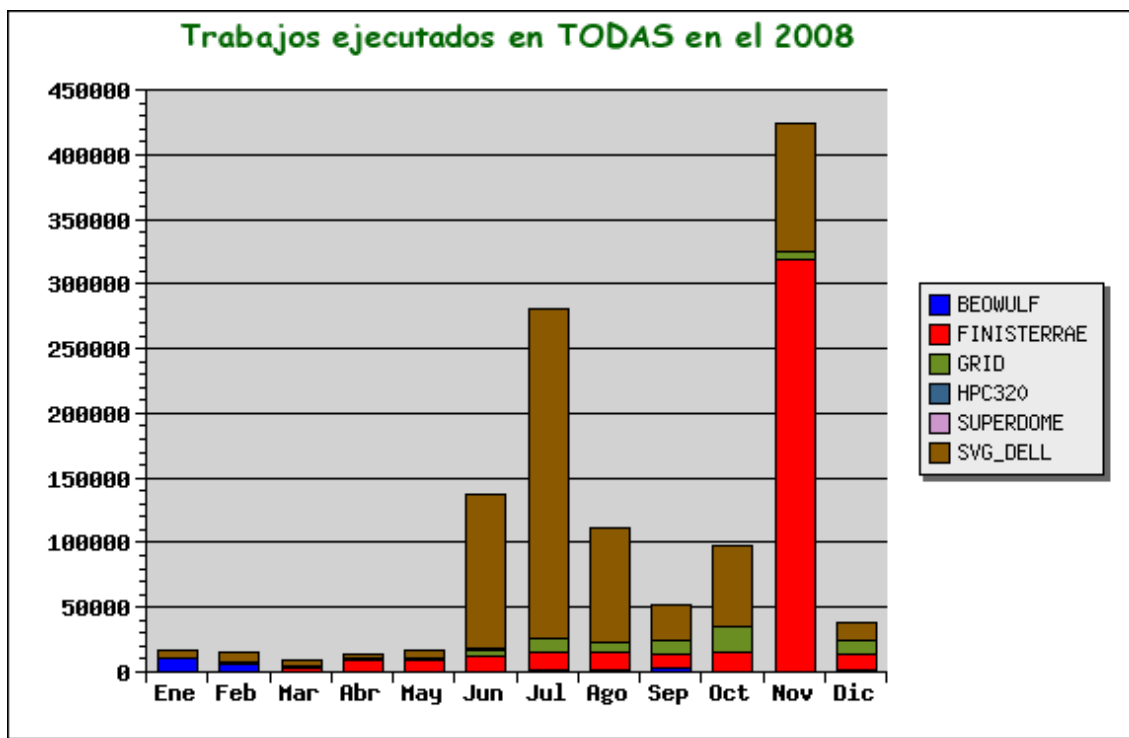
Durante o ano 2008 os servidores máis utilizados foron o novo sistema Finis Terrae e o cluster SVG. Durante este ano aínda se mantivo operativo un dos sistemas HP Superdome para que a transición a Finis Terrae fose máis sinxela para os usuarios. O número de horas consumidas aumentou significativamente, multiplicándose case por 5 e pasando dos 2 millóns (2,062,610 de horas) do ano 2007 aos 10,067,403 horas deste ano.



	CENTROS TECNOLOX	CESGA	CSIC	UDC	USC	UVI	Xunta	Total
Xan.	0:00	4035:37	10824:54	40181:13	51572:55	20378:06	0:00	126992:45
Feb.	0:00	513749:13	20061:53	58367:31	111836:56	42077:21	0:00	746092:54
Mar.	0:00	169011:15	19407:33	40035:26	91211:19	39458:30	0:00	359124:03
Abr.	0:00	45631:20	223454:03	58091:23	252109:05	47875:48	0:00	627161:39
Mai.	0:00	38645:21	659773:32	92877:12	262713:52	34742:59	0:00	1088752:56
Xuñ.	0:00	54768:22	473369:07	106292:19	366995:22	40390:58	0:00	1041816:08
Xul.	0:00	73035:53	333149:17	122635:07	249004:41	19953:21	0:00	797778:19
Ago.	0:00	73356:23	302070:58	123458:17	331538:49	84104:20	0:00	914528:47
Set.	0:00	73356:23	424520:31	91979:25	250745:11	25029:45	0:00	839880:52
Out.	0:00	47606:00	431446:03	151874:49	436866:11	126085:10	11:50	1190822:44
Nov.	447:36	28890:00	313258:57	143836:39	681535:05	67488:06	6:56	1235463:19
Dec.	2210:34	34095:40	394126:42	77819:47	514906:50	75826:12	3:23	1098989:08
Total	2658:10	1127363:45	3605463:30	1107449:08	3601036:16	623410:36	22:09	10067403:34

Número de traballos executados

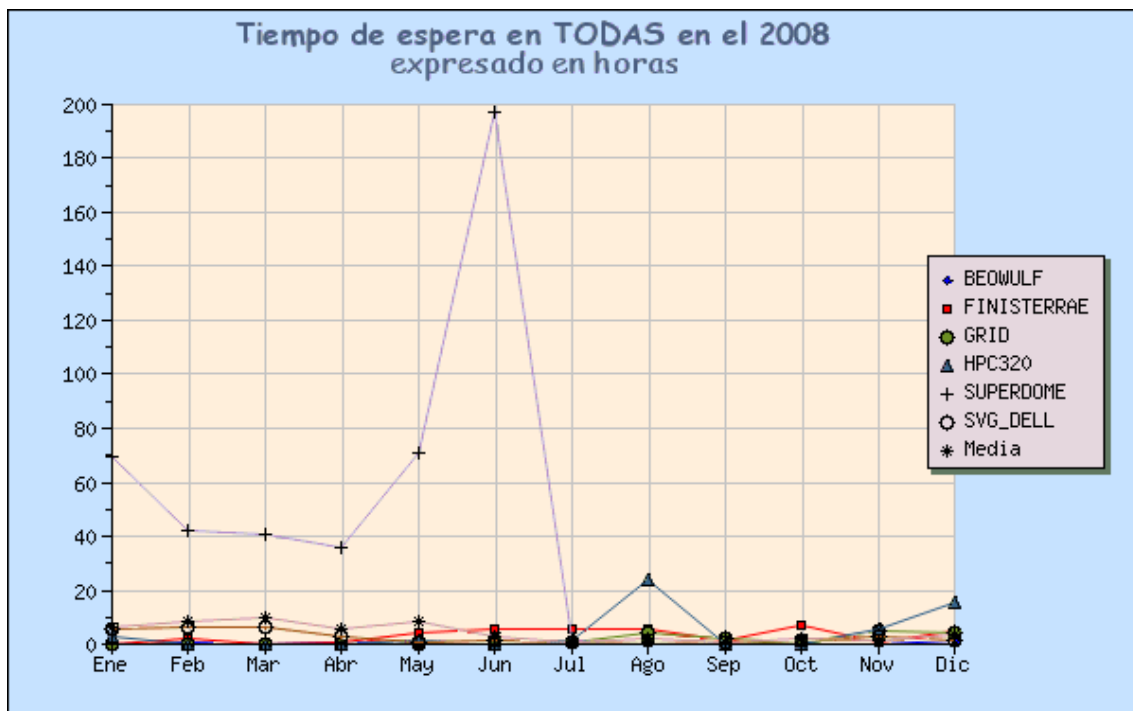
O número de traballos executados representa a cantidade de simulacións que os usuarios realizaron en cada un dos servidores de cálculo. Este valor depende non só da capacidade de cálculo dispoñible senón tamén dos recursos necesarios para a execución das simulacións. Os sistemas con maior número de traballos foron o SVG e o Finis Terrae. Especialmente o primeiro, debido a que é un servidor orientado a produtividade, é dicir, a realización dun gran número de traballos independentes con necesidades de cálculo relativamente baixas. En total superouse o millón de traballos (1,214,079) fronte a 215,883 traballos do ano 2007.



	BEOWULF	FINISTERRAE	GRID	HPC320	SUPERDOME	SVG_DELL	Total
Xan.	10156			55	991	5455	16657
Feb.	5508	468		30	1907	7059	14972
Mar.	183	2895		200	1662	4270	9210
Abr.	1	8516		278	1958	3381	14134
Mai.	5	8676	1090	149	1358	4875	16153
Xuñ.	444	11916	4648	51	611	119801	137471
Xul.	209	13482	10302	199	243	255075	281310
Ago.	1239	13539	7764	62	252	89094	111950
Set.	2518	11306	10418	15	240	26963	51460
Out.		14638	20427	15	247	62571	97898
Nov.	141	318576	6070	57	245	99205	424294
Dec.	1003	12805	10729	211	242	13580	38570
Total	23207	416817	71448	1322	9956	691329	1214079

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 utilizarlos. 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 até 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. Por tanto, 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 de verán e Nadal e aumentan significativamente a medida que se van incorporando novos usuarios. En conxunto, os tempos de espera reducíronse en gran medida, grazas á incorporación do servidor Finis Terrae, pasándose dunha media de máis de 7 horas no 2007 a tan só 2 horas de tempo medio de espera en todos os servidores de cálculo. Máis importante é a diminución do tempo de espera no servidor de maior capacidade, que no 2007 era de 43 horas no HP Superdome, e reduciuse no 2008 a menos de 2 horas en Finis Terrae. Isto permite aos investigadores realizar máis simulacións e esperar menos tempo nos seus resultados, mellorando a seu competitividade.

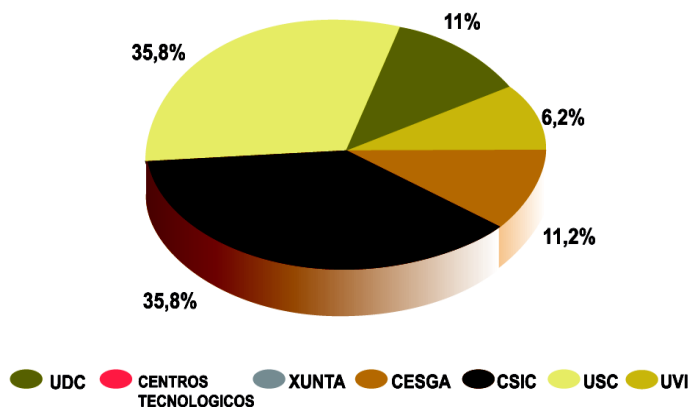


	BEOWULF	FINIS TERRAE	GRID	HPC320	SUPERDOME	SVG_DELL	Media
Xan.	0d-00:17:29			0d-02:50:11	2d-21:13:00	0d-05:30:59	0d-06:06:42
Feb.	0d-00:23:27	0d-01:56:36		0d-00:00:46	1d-17:52:39	0d-06:33:31	0d-08:37:51
Mar.	0d-00:15:53	0d-00:06:52		0d-00:13:41	1d-16:21:34	0d-06:05:22	0d-10:09:09
Abr.	0d-00:59:43	0d-00:22:12		0d-00:14:18	1d-12:03:11	0d-02:43:52	0d-05:52:32
Mai.	0d-00:00:13	0d-04:22:17	0d-00:00:16	0d-01:09:28	2d-22:48:34	0d-00:50:09	0d-08:33:51
Xuñ.	0d-00:10:11	0d-05:39:02	0d-00:17:19	0d-00:01:03	8d-05:15:27	0d-01:41:33	0d-02:51:06
Xul.	0d-00:23:53	0d-05:35:56	0d-00:37:21	0d-01:25:06	0d-01:15:43	0d-00:46:21	0d-00:59:47
Ago.	0d-00:56:33	0d-05:32:13	0d-04:10:33	0d-23:53:45	0d-00:00:53	0d-01:33:25	0d-02:13:19
Set.	0d-00:40:05	0d-01:17:34	0d-02:09:10	0d-00:01:03	0d-00:01:06	0d-00:34:17	0d-01:03:07
Out.		0d-07:08:22	0d-00:58:02	0d-00:00:58	0d-00:01:04	0d-01:43:01	0d-02:22:00
Nov.	0d-00:15:49	0d-00:51:58	0d-04:54:15	0d-05:26:45	0d-00:00:55	0d-02:29:19	0d-01:18:11
Dec.	0d-01:19:05	0d-04:57:25	0d-03:56:40	0d-15:34:09	0d-00:00:53	0d-01:24:27	0d-03:21:29
Media	0d-00:26:30	0d-01:43:26	0d-02:09:42	0d-04:23:18	2d-02:32:08	0d-01:30:31	0d-02:00:21

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

Por institucións, o maior consumo de horas de computación rexistrouse na Universidade de Santiago de Compostela co 35.8% das horas (un 6.2% menos que o ano 2007), igualada co CSIC que subiu do 17% do 2007 ao 35.8% do 2008. No seu conxunto, as tres universidades galegas representan un 53% do consumo (baixando un 24.1% respecto ao ano anterior). Os proxectos nos cales participa o CESGA foron responsables dun 11.2% do consumo de horas, onde se inclúen algún dos retos computacionais realizados en Finis Terrae.

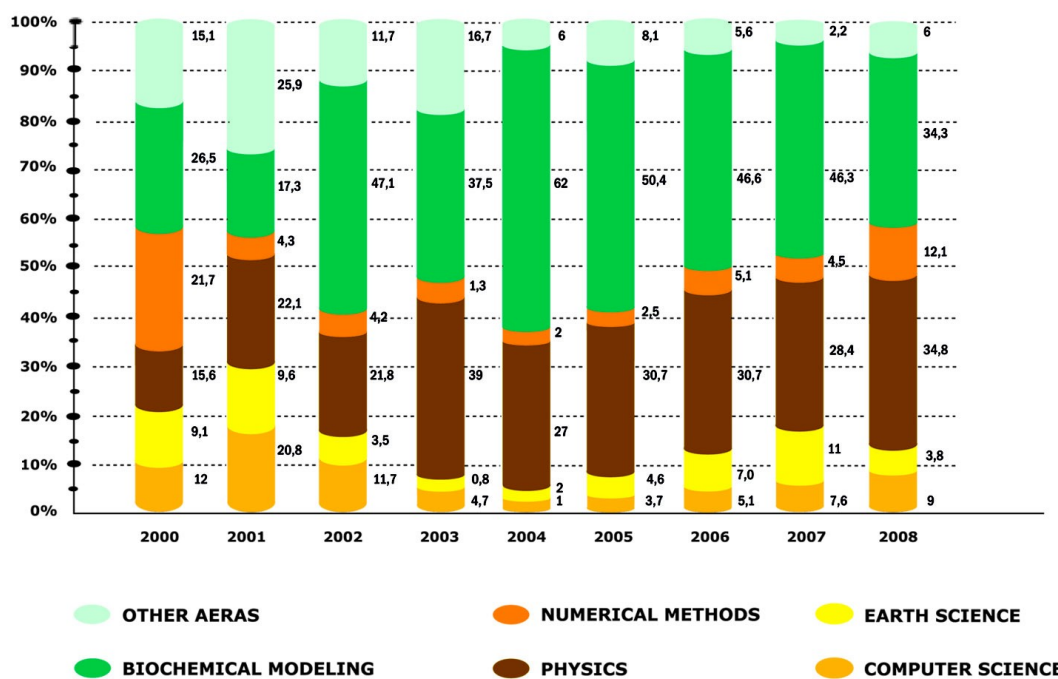
Institución	Consumo	Consumo (%)
CENTROS TECNOLÓXICOS	2658:10	0.0
CESGA	1127363:45	11.2
CSIC	3605463:30	35.8
UDC	1107449:8	11.0
USC	3601036:16	35.8
UVI	623410:36	6.2
Xunta	22:9	0.0
TOTAL	10067403:34	100

CPU USE DISTRIBUTION BY INSTITUTION 2008

Distribución de CPU por Área de Trabajo

Por áreas de traballo, os cálculos relacionados coa física representan o 34.8% das horas consumidas, superando por primeira vez á modelización bioquímica que representa o 34.3% (un 14.8% menos que no ano 2007), representando estas dúas áreas o 69.2% do consumo total de horas. Tamén é destacable o aumento da área de ciencias da computación, que se incrementou desde o 2.2% do ano 2007 ao 9% no 2008.

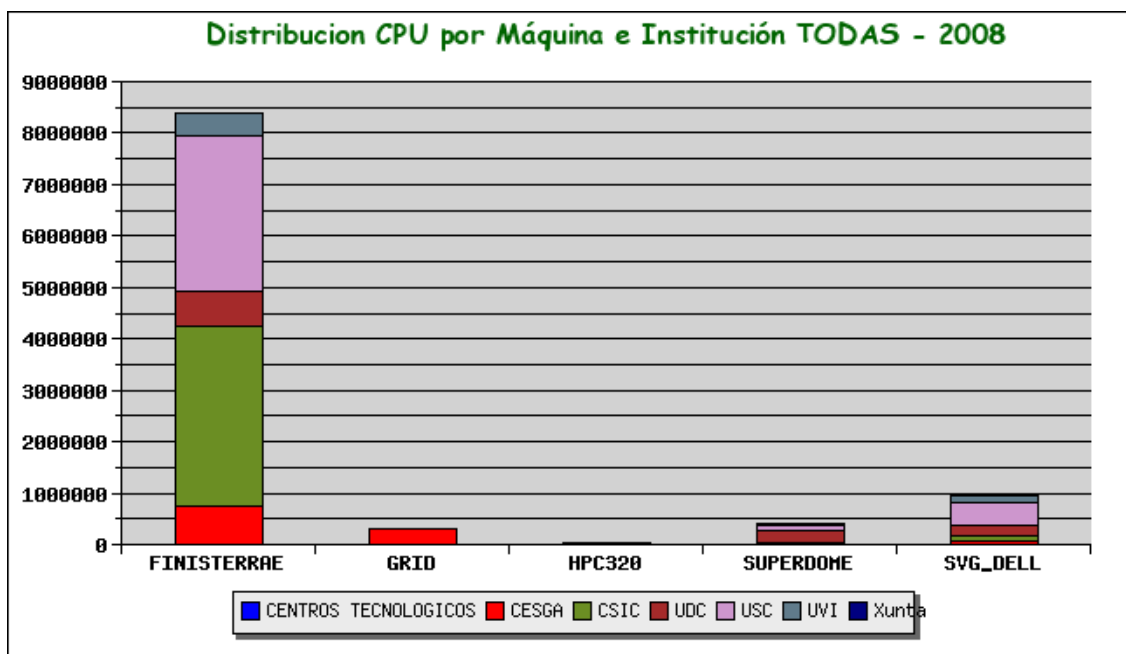
Área de traballo	Consumo	Porcentaxe
Ciencias da Computación	913834:57	9.0
Ciencias da Terra	383350:56	3.8
Física	3509917:22	34.8
Métodos Numéricos	1221436:39	12.1
Modelización Bioquímica	3461416:7	34.3
Outras Áreas	608156:3	6.0
Total	10098112:4	100.0

CPU USE DISTRIBUTION BY RESEARCH AREA



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 Finis Terrae, con máis dun 40% da utilización do sistema, mentres que o SVG repártese principalmente entre os investigadores das universidades de Santiago e Coruña e os sistemas grid utilízanse fundamentalmente para os proxectos grid nos que participa o CESGA.

Porcentaxe de CPU por institución e máquina



	FINISTERRAE	GRID	HPC320	SUPERDOME	SVG_DELL	Total
CENTROS TECNOLOGICOS	2658:10					2658:10
CESGA	758646:55	289086:29	567:26	18868:10	60194:45	1127363:45
CSIC	3468600:33		1888:51	19128:34	115845:32	3605463:30
UDC	698506:36		5260:07	222646:53	181035:32	1107449:08
USC	3003651:35		12209:50	116447:31	468727:20	3601036:16
UVI	453050:12		5706:44	32339:58	132313:42	623410:36
Xunta	22:09					22:09
TOTAL	8385136:10	289086:29	25632:58	409431:06	958116:51	10067403:34

1.2.- Aplicacións científicas

A actividade da área de aplicacións estivo marcada este ano pola posta en produción do Finis Terrae e a demostración das súas capacidades a través da execución de retos científicos. En concreto realizáronse as seguintes actividades:

- Execución de 6 retos científicos, 4 en febreiro e 2 ao longo do ano.
- Un elevado número de accións de soporte realizadas durante o ano (241), o que representa un incremento interanual do 96%.
- A instalación de practicamente todas as aplicacións soportadas no CESGA ao servidor FINIS TERRAE, así coma as aplicacións demandadas por usuarios continuando a laboura do ano anterior. Isto supuxo o porting ao Finis Terrae de mais do 95% das aplicacións planificadas. Portáronse aplicacións como:
 - Amber versión 9.0
 - CHARMM versión c34b2

- CPMD versión 3.11.1
- Crystal versión 06
- deMon2k versión 2.3
- Elmer versión 5.4.1
- FLEXPART versión 8.0
- FLUENT versión 6.3
- Gamess versiones 24 MAR 2007 (R1) e 11 APR 2008 (R1)
- Gaussian 03 versión E.01
- Grads versión 2.0.a1
- Gromacs versiones 3.3, 3.3.2, 3.3.3, 4.0 e 4.0.2
- LAMMPS versiones 21May2008 e 22Jan2008
- Leadmix versión 28-08-2005
- Macaulay 2 versión 1.1
- Materials Studio versión 4.3
- MOLCAS versión 6.4
- Molden versión 4.6
- molpro versión 2006.1
- MrBayes versión 3.1.2
- NAMD versión 2.6
- NWChem versión 5.1
- R versiones 2.7.0 y 2.7.2
- SIESTA versión 2.0.1
- Singular versión 3.0.4
- Stata/MP versión 10.0
- Turbomole versión 5.10
- uunits versión 1.12.4
- VASP versión 4-6-28
- VMD versión 1.8.6
- Wien2k versión 08.1
- XcrySDen versión 1.4
- Librerías coma:
 - CGAL versión 3.3.1
 - FFTW versiones 3.1.2 e 3.2alpha3
 - HDF versiones 4.2r3-ia64 e 5 1.8.1
 - HP MPI 2.2.5.1
 - Intel MPI Library 3.0 3.1 2 3.2.0.011
 - Jrookit R27.5.0-jdk1.5.0_14
 - MKL 10.0.011 10.0.2.018 9.1 10.1.0
 - NumPy 1.0.4
 - pyMPI 2.5b0
 - Ncarg 5.0.0
 - NetCDF 4.0 3.6.2
- Compiladores coma:
 - Intel C++ Compiler versiones 9.1.052, 10.1.012 e 11.0.069
 - Intel Fortran Compiler versiones 9.1.052, 10.1.012 e 11.0.069
- Utilidades de xestión de software coma:
 - Modules versión 3.1.6
 - Subversion versión 1.5.3
- A instalación da maioría de ferramentas de desenvolvemento de Intel no servidor SVG unificando deste xeito as ferramentas de desenvolvemento soportadas nos servidores do CESGA.
- A organización de cursos de formación interna e externa, asociados a aplicacións e ferramentas:
 - Organizados enteiramente polo CESGA:

- Ferramentas de software libre para o DEBUGGING e análise do rendimento de aplicacións
 - Programación paralela mediante directivas OPENMP
 - Curso de Fortran (2ª edición)
 - Curso de Fortran (1ª edición)
 - Ferramentas de desenvolvemento de Intel
 - Organizados dentro do nodo CESGA do proxecto I-MATH:
 - Introducción á programación en MPI
 - MATEMÁTICA COMPUTACIONAL: Compilación, execución e optimización de programas.
 - Curso intensivo I-MATH de software libre orientado a ciencias e inxeñería: Simulación en Multifísica: ELMER (SMF).
- A impartición dun curso de formación de usuarios:
- Introducción a códigos de química computacional no CESGA (Gaussian, GAMESS, NWCHEM)
- 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 calquer número de paquetes de software cos seus correspondentes versións. Modules é actualmente o método de configuración de entorno usado por defecto en todos os servidores de cálculo do CESGA (SVG e Finis Terrae).
 - Un elevado número de peticións de novas instalacións ou actualizacións (83) ou de soporte á compilación de aplicacións de usuario ou con licenza de usuario (12).
 - Continuación da colaboración co CSCS (Swiss National Supercomputing Centre) na área de visualización química a través da rede COST GRIDCHEM que reflexouse na publicación dun informe técnico en conxunto: “.Quantum Chemistry common data format Q5COST and OpenBabel: A first answer to interoperability in Quantum Chemistry”.

Esta actividade resúmese nas seguintes cifras:

- 59 aplicacións ou librerías de cálculo científico en produción.
- 83 versións de aplicacións novas instaladas ou actualizadas.
- Soporte a 6 retos computacionais que conlevou a adaptación e modificación de varias aplicacións.
- Publicación de 1 informe técnico CESGA.
- 241 solicitudes de axuda atendidas.

O catálogo de aplicacións e bibliotecas de utilidades instaladas a decembro do 2008 nos servidores de cálculo do CESGA con acceso para todos os usuarios son as seguintes:

Área	Aplicación	FINIS TERRAE	SVGD	Outros
Análise Científica	R	X		
	Singular	X		
Bases de Datos Científicas	CSD		X	
	ZENTRALBLATT			zmath.cesga.es

Área	Aplicación	FINIS TERRAE	SVGD	Outros
Bioinformática	BEAMnrc		X	
	Blast		X	
	IM		X	
	Lamarc		X	
	Leadmix	X	X	
	Migrate		X	
	MrBayes	X	X	
	PHYML		X	
	r8s		X	
	Structure		X	
Cálculo Estructural, Fluídos e Magnetismo	Elmer	X		
Cálculo Molecular	abinit		X	
	Amber	X	X	
	CPMD	X		
	Dalton		X	
	Gamess	X	X	
	Gaussian 03	X	X	
	Gaussian 98		X	
	Gromacs	X	X	
	LAMMPS	X		
	Molden	X		
	NAMD	X	X	
	NWChem	X	X	
	SIESTA	X	X	
	XPLOR-NIH		X	
Compiladores				
Librerías Matemáticas	ACML		X	
	ATLAS		X	
	CGAL	X		
	CLHEP		X	
	FFTW	X	X	
	MKL	X	X	
	Numeric Python		X	
	NumPy	X		
MPI	HP MPI	X		
	Intel MPI Library	X		
Simulación	Bsoft		X	

Área	Aplicación	FINIS TERRAE	SVGD	Outros
	EMAN		X	
	F2PY		X	
	Geant		X	
	Matlab		X	
	pyMPI	X	X	
	SPIDER		X	
	Xmipp		X	
Visualización Científica e Animación	Ferret		X	
	Grace		X	
	Grads	X	X	
	HDF	X		
	HDF5	X		
	JasPer		X	
	Ncarg		X	
	NetCDF	X	X	
Xestión de Software	Intel C++ Compiler	X	X	
	Intel Fortran Compiler	X	X	
	Modules	X	X	

As novas aplicacións ou bibliotecas de utilidades incorporadas durante o ano 2008 a petición dos usuarios ou por incorporación de novas versións son:

Aplicación	Tarefa
BASES DE DATOS CIENTÍFICAS	
CSD (Migrada ao servidor SVGD e Instalada nova versión V5.30 (2009))	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.
CÁLCULO MOLECULAR	
Amber (nova instalación, versión 9.0, no Finis Terraes)	AMBER é un conxunto de programas que permiten ao usuario realizar simulacións de dinámica molecular, fundamentalmente en biomoléculas, baseadas en teorías de campos de forza.
CPMD (nova instalación, versión 3.11.1, no Finis Terraes)	CPMD é unha implementación da teoría da funcional da densidade usando ondas planas/pseudopotenciales, particularmente deseñado para levar a cabo estudos de dinámica molecular ab-initio.
Gamess (Nova Instalación, versións 11 APR 2008 (R1) e 24 MAR 2007 (R1), no Finis)	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.

Aplicación	Tarefa
Terrae)	
Gaussian 03 (nova instalación versión E.01, no Finis Terrae)	Gaussian 03 é un dos paquetes máis usados en Química computacional que permite o cálculo de propiedades (enerxías, frecuencias de vibración, xeometría óptima, etc.) de moléculas e intermedios de reacción, fundamentalmente mediante métodos ab initio (teóricos).
Gromacs (Nova versión, 3.3.2, no SVG. Nova instalación, versións 4.0.2, 4.0, 3.3, 3.3.3 e 3.3.2, no Finis Terrae)	GROMACS é un software versátil para cálculos de dinámica molecular, é dicir, simular as ecuacións de Newton do movemento para sistemas de centos a millóns de partículas. Está principalmente deseñada para o estudo de moléculas bioquímicas como proteínas e lípidos cun gran número de complexas interaccións de ligazón.
LAMMPS (nova instalación, versións 21 May 2008 e 22 Jan 2008, no Finis Terrae)	LAMMPS é un simulador de dinámica molecular. LAMMPS pode correr en máquinas monoprocesador ou en paralelo utilizando técnicas de pase de mensaxes e unha descomposición do dominio de simulación. O código está deseñado para que poida ser facilmente modificado ou engadirle novas funcionalidades.
Molden (nova instalación, versión 4.6, no Finis Terrae)	Molden é un paquete para a visualización de Densidade Molecular procedente de paquetes Ab initio como GAMESS-UK, GAMESS-US e GAUSSIAN e os paquetes Semi-Empíricos Mopac/Ampac, tamén soporta outros programas. Molden toma toda a información necesaria das saídas de GAMESS / GAUSSIAN.
NAMD (nova instalación, versión 2.6, no SVG e no Finis Terrae)	NAMD é un código de dinámica molecular paralelo deseñado para conseguir un alto rendemento na simulación de grandes sistemas biomoleculares.
NWChem (nova instalación, versión 5.1, no Finis Terrae)	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 dunha maneira eficiente como no seu uso dos recursos de computación paralelos dispoñibles.
SIESTA (nova instalación, versión 2.0.1, no Finis Terrae)	Siesta (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms) é tanto un método como a súa implementación como programa informático, para levar a cabo cálculos de estrutura electrónica e simulacións de dinámica molecular ab initio de moléculas e sólidos.
Aplicacións con licenzia limitada (Usuario ou institución única)	
CHARMM (nova instalación, versión c34b2, no Finis Terrae)	CHARMM (Chemistry at HARvard Macromolecular Mechanics): é un programa de simulación molecular versátil e amplamente usado cunha gran aplicación a sistemas multipartícula.
Crystal (nova instalación, versión 06, no Finis Terrae)	Crystal é unha ferramenta computacional para simulacións de física e química de estado sólido.
DeMon2k (nova instalación, versión 2.3, no Finis Terrae)	DeMon é un paquete de software deseñado para cálculos de teoría da funcional da densidade (DFT)
Materials Studio (nova instalación, versión 4.3, no Finis Terrae)	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.
MOLCAS (nova instalación, versión 6.4, no Finis Terrae)	Software de Química Cuántica para a descrición precisa de estados altamente degenerados (como é o caso dos estados excitados) en estados de transición, en sistemas biradicalarios, en sistemas con átomos pesados, etc onde unha descrición monodeterminantal non é válida.
MOLPRO (nova instalación, versión)	Molpro é un completo sistema de programas ab initio para o cálculo de estrutura electrónica en moléculas. Este paquete especialízase en cálculos

Aplicación	Tarefa
2006.1, no Finis Terrae)	altamente precisos, cun tratamento intensivo do problema de correlación electrónica a través de métodos multiconfiguración CI, coupled-cluster e similares.
Turbomole (nova instalación, versión 5.10, no Finis Terrae)	TURBOMOLE é un paquete de programas especializados en Química Cuántica. Actualmente é un dos códigos mais 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.
VASP (nova Instalación, versión 4-6-28, no Finis Terrae)	VASP é un complexo paquete de software especializado en simulacións de dinámica molecular ab-initio usando pseudopotenciales e ondas planas.
WIEN2K (nova instalación, versión 08.1, no Finis Terrae)	WIEN2k permite realizar cálculos de estrutura electrónica en sólidos usando teoría da funcional da densidade (DFT).
BIOINFORMÁTICA	
IM (nova versión 3/2/2008 no SVG)	Implementación do método MCMC (Markov Chain Monte Carlo) para a análise de datos xenéticos mediante o modelo de diverxencia de poboación "Isolation with Migration".
Lamarc (nova instalación, versións 2.1.2b y 2.1.3, en el SVG)	LAMARC é unha suite de dous programas moi usados en filogenias moleculares como MIGRATE e FLUCTUATE, ambos os baseado en métodos de máxima verosimilitud e bayesianos empregando coalescencia nas inferencias de parámetros
Leadmix (nova instalación, versión 28-08-2005, no SVG e Finis Terrae)	LEADMIX é un programa Fortran para estimar as proporcións de mestura e a desviación xenética utilizando datos de marcadores xenéticos, baseado no método de máxima similitud
MrBayes (nova instalación, versión 3.1.2, no Finis Terrae)	Mrbayes é un programa para o cálculo da estimación bayesiana da filogenesis baseándose nunha técnica de simulación coñecida como Markov chain Monte Carlo (ou MCMC).
Structure (nova instalación, versión 2.2.3, no SVG)	O programa structure é un paquete de software gratuíto para investigar a estrutura de poboacións usando datos do genotipo multi-locus.
Unphased (nova instalación, versión 3.0.13 no SVG)	UNPHASED é unha aplicación para a análise de de asociacións xenéticas.
SIMULACIÓN METEREOLÓXICA	
ECBILT/CLIO (nova instalación, versión 3, no SVG)	O modelo ECBilt-Clio model é un modelo xeral de circulación de complexidade intermedia e tridimensional axustando atmo?fera-oceano-xeo.
Field (nova instalación, versión 1.2 no SVG)	A librería Field proporciona acceso de alto nivel a datos correspondentes a un grid con formato independente. Esta librería é requirida por modelos como ECBILT.
CÁLCULO ESTRUCTURAL, FLUIDOS E MAGNETISMO	
Elmer (nova instalación, versión 5.4.1, no Finis Terrae)	Elmer é un software de código aberto para simulación multifísica mediante o método de elementos finitos (FEM) desenvolvido por CSC. Entre outros pode resolver problemas en dinámica de fluídos, mecánica estrutural, electromagnetismo, transferencia de calor e acústica.
OpenFOAM(nova versión, 1.4.1, 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, até dinámica de sólidos e electromagnetismo.

Aplicación	Tarefa
Aplicacións con licencia limitada (Usuario ou institución única)	
FLUENT (nova instalación, versión 6.3, no Finis Terrae)	Fluent é un paquete de software comercial dedicado ao modelado de fluídos e foi aplicado a un gran espectro de problemas industriais.
SIMULACIÓN	
FLEXPART (nova instalación, versión 8.0, no Finis Terrae)	FLEXPART é un modelo de dispersión de partículas usado cada vez por máis usuarios.
Macaulay 2 (nova instalación, versión 1.1, no Finis Terrae)	Macaulay 2 é un software de cálculo simbólico para a investigación en xeometría algebraica e a álgebra conmutativa.
MATLAB (novas versións, R2007b e R2008b, 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 necesitando un tempo de desenvolvemento moito menor que con linguaxes tradicionais como C, C ++, e Fortran.
VISUALIZACIÓN CIENTÍFICA E ANIMACIÓN	
Grads (nova instalación, versión 2.0.a1, no Finis Terrae)	GrADS, Grid Analysis e Display System, é unha ferramenta interactiva usada para acceder, manipular e visualizar datos de Ciencias da Terra. Acepta datos en diferentes formatos: binarios, GRIB, NetCDF ó HDF-SDS (Scientific Data Sets).
HDF (nova instalación, versión 4.2r3-ia64, no FinisTerrae)	A baixo nivel, HDF é un formato de ficheiro físico para almacenar datos científicos. Nun nivel máis alto, HDF é unha colección de utilidades e aplicacións para manipular, ver e analizar datos en ficheiros HDF. Entre estes niveis, HDF é unha librería que proporciona APIs de alto nivel e unha interfaz de datos a baixo nivel.
HDF5(nova instalación, versión 1.8.1, no Finis Terrae)	HDF5 é un software con tecnoloxía única que fai posible o manexo de coleccións de datos extremadamente grandes e complexo.
JASPER(nova instalación, versión 1.900.1, no Finis Terrae)	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).
Ncarg(nova instalación, versión 5.0.0, no Finis Terrae)	Librería gráfica de representación de datos científicos.
NCO (nova instalación, versión 3.9.3, no SVG)	Os operadores netCDF, ou NCO, son un conxunto de programas que toman ficheiros netCDF como input, executan unha serie de operacións (manipulación de metadata, medias...) e producen un novo ficheiro netCDF.
NetCDF (nova instalación, versións 3.6.2 e 4.0, no Finis Terrae. Nova versión, 3.6.2, no SVG)	Librería para o uso do formato de datos estándar netCDF, utilizado por un gran número de paquetes gráficos e modelos meteorolóxicos.
Udunits (Nova instalación, versión 1.12.4, no Finis Terrae)	UDUNITS é unha librería para a manipulación de unidades físicas.
VMD (nova instalación, versión 1.8.6, no Finis Terrae)	VMD foi deseñado para a visualización e a análise de sistemas biolóxicos talles como proteínas, acedos nucleicos, estruturas de lípidos bicapa.
XcrySDen (nova instalación, versión 1.4.1,	XCrySDen é un programa de visualización de estruturas cristalinas e moleculares. Este programa busca a visualización de isosuperficies e

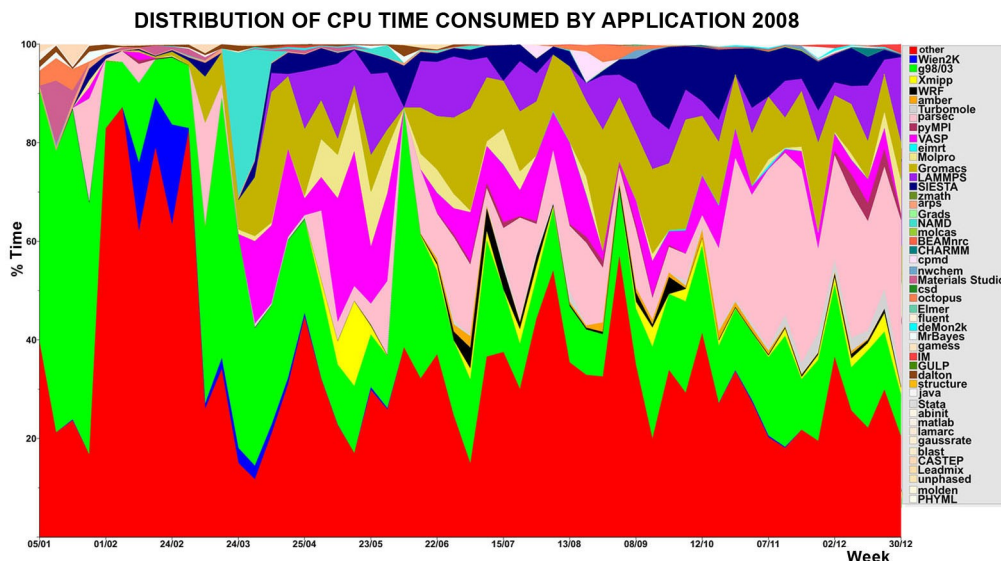
Aplicación	Tarefa
no Finis Terrae)	contornos, os cales poden ser superimpuestos sobre as estruturas cristalinas e rotados e manipulados interactivamente.
LIBRARÍAS MATEMÁTICAS	
CGAL (nova instalación, versión 3.3.1, no Finis Terrae)	CGAL é unha librería de estruturas de datos e algoritmos xeométricos robusta, eficiente e fácil de usar, en C . A librería CGAL contén: Primitivas xeométricas básicas, talles como puntos, vectores, rectas, predicados talles como posicións relativas de puntos, e operacións talles como interseccións e cálculo de distancias. Unha colección de estruturas de datos e algoritmos estándar, talles como envolvente convexa, triangulación (de Delaunay), poliedro, círculo recubridor mínimo, e estruturas de consulta multidimensional. Interfaces con outros paquetes, en particular, para visualización, input/output ou aritmética.
FFTW (nova instalación, versións 3.1.2 e 3.2alpha3, no Finis Terrae)	FFTW é unha librería de subrutinas C para calcular a transformada discreta de Fourier (DFT) nunha ou máis dimensións, de tamaño arbitrario, tanto para datos reais como complexos. Ademais, por ser gratuito, cremos que será a librería FFT que elixan a maioría das aplicacións. Segundo algunhas probas realizadas polo fabricante en varias plataformas, o rendemento de FFTW é xeralmente superior ao doutras librerías ou software para calcular a FFT, e é competitivo coas de pago. Ademais FFTW é portable: o mesmo programa pódese executar en moitas arquitecturas sen modificación.
Libmcrypt (nova instalación, versión 2.5.8, no SVG)	Librería de base de Mcrypt que contén as funcións de encriptación e facilita un mecanismo estándar de acceso a elas.
Mcrypt (nova instalación, versión 2.6.7, no SVG)	Mcrypt permite aos desenvolvedores usar un amplo rango de funcións de encriptación. Permite ao usuario encriptar ficheiros ou fluxos de datos sen a necesidade de grandes coñecementos de criptografía.
MKL (nova instalación, versións 9.1, 10.0.011, 10.0.2.018 e 10.1.0, no Finis Terrae. Novas versións, 9.1.023 e 10.0.3.020, no SVG)	MKL contén versións robustas e optimizadas para o procesador dos seguintes conxuntos de funcións: BLAS, Sparse BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, Sparse Solver routines, Vector Mathematical Library functions, Vector Statistical Library functions, Fourier Transform functions (FFT), Cluster FFT, Interval Solver routines, Trigonometric Transform routines, Poisson, Laplace, and Helmholtz Solver routines and Optimization (Trust-Region) Solver routines.
NumPy (nova instalación, versión 1.0.4, no Finis Terrae)	NumPy é unha extensión á linguaxe de programación Python, que engade funcionalidades para o manexo de grandes arrays e matrices multidimensionales así como librerías de funcións matemáticas de alto nivel para operar con estes arrays.
ANÁLISE CIENTÍFICO	
R (nova instalación, versións 2.6.1, 2.7.0 e 2.7.2, no Finis Terrae)	R é unha linguaxe e unha contorna para cálculos estatísticos e representacións gráficas destes. R proporciona unha ampla variedade de técnicas gráficas e estatísticas sendo altamente extensible.
Singular (nova instalación, versión 3.0.4, no Finis Terrae)	SINGULAR é un paquete de algebra computacional para cálculos polinómicos con especial énfase nas necesidades do algebra conmutativa, xeometría algebraica e teoría da singularidade.
Aplicacións con licenza limitada (Usuario ou institución única)	
Stata/MP (nova instalación, versión 10.0, no Finis Terrae)	Stata é un paquete estatístico completo e integrado que proporciona todo o que necesitas para análise de datos, manexo de datos e gráficos. Stata/MP é a versión de Stata que se executa en máquinas multiprocesadoras.
JAVA	
JROCKIT(nova instalación, versión R27.5.0-	BEA JRockit está deseñado para un rendemento óptimo de aplicacións Xava en contornas de longa escala. Con iso, os desenvolvedores Xava non

Aplicación	Tarefa
jdk1.5.0_14, no Finis Terrae)	necesitan coñecer a programación interna da JVM para alcanzar un rendemento óptimo da súa aplicación.
LIBRARÍAS DE PARALELIZACIÓN	
HP MPI (Nova instalación, versión 2.2.5.1, no Finis Terrae)	HP-MPI para Linux é unha implementación do estándar Message-Passing Interface (MPI) de alto rendemento para servidores e estacións de traballo HP.
Intel MPI Library (Nova Instalación, versións 3.0, 3.1 3.2.0.011, no Finis Terrae)	A librería Intel MPI implementa MPI-2 de alto rendemento sobre múltiples tipo de redes. A librería Intel MPI permite obter un rendemento máximo ao usuario final mesmo se se cambia a rede de interconexión do cluster, sen requirir grandes cambios no software ou no sistema operativo. Intel tamén distribúe o kit gratuito da contorna de "runtime" necesario para a execución dos produtos desenvolvidos coa librería Intel MPI.
PyMPI (nova instalación, versión 2.5b0, no Finis Terrae)	A linguaxe interpretada Python proporciona unha gran contorna de construción de scripts e contornas de control. Mentres que Python presenta un modelos baseado en threads, o seu deseño básico non é particularmente apropiado para a programación paralela. A extensión pyMPI foi deseñada para proporcionar operacións paralelas para Python sobre plataformas paralelas distribuídas usando MPI.
COMPILADORES	
Intel C++ Compiler (nova instalación, versións 9.1.052, 10.1.012 e 11.0.069, no Finis Terrae. Nova instalación, versión 10.1.017, no SVG)	O compilador de C de Intel ofrece o mellor soporte para a creación de aplicacións "multi-threaded". Proporciona optimización avanzada, "multi-threading", e soporte do procesador que inclúe optimización automática do tipo de procesador, vectorización, auto-paralelización, OpenMP*, "data prefetching", e "loop unrolling", xunto con altamente optimizadas C templates para paralelismo, procesado matemático e librerías multimedia.
Intel Fortran Compiler (nova instalación, versións 9.1.052, 10.1.012 e 11.0.069, no Finis Terrae. Nova instalación, versión 10.1.017, no SVG)	O compilador de fortran de Intel proporciona un rápido desenvolvemento e un gran rendemento para todas as plataformas baseadas nos procesadores de Intel. é un compilador de Fortran 95 completo con moitas opcións do estándar Fortran 2003, máis unha ampla variedade das extensións máis populares. Automaticamente optimiza e paraleliza software para conseguir o rendemento máis óptimo dos procesadores de Intel multi-core.
PGI Fortran Workstation (Nova versión, 8.0.1, no SVG)	Os compiladores PGI Fortran Workstation Fortran proporcionan gran rendemento en procesadores de 64-bit x64 e 32-bit x86, e permiten programación paralela e portable para sistemas tanto de memoria compartida como solucións cluster.
XESTIÓN DE SOFTWARE	
Modules (nova instalación, versión 3.1.6, no Finis Terrae. Nova instalación, versión 3.2.6, no SVG)	Modules é unha utilidade que permite configurar a contorna de forma dinámica para diferentes paquetes e aplicacións. Desta forma evítase que o usuario teña que preocuparse sobre os datalles do software que quere utilizar, a súa instalación, contorna, librerías e as súas dependencias. Calquera aplicación accédese e configura do mesmo xeito.
Subversion (nova instalación, versión 1.5.3, no Finis Terrae)	Subversion é un sistema de control de versións de código aberto.

Estatísticas de Uso de Aplicacións durante o ano 2008

Estatísticas de uso de aplicacións desde o 1 de xaneiro de 2008 até o 31 de decembro de 2008. 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, é posible que exista un pequeno erro na asignación do mesmo a unha aplicación (moi improbable). Só se recollen entradas cuxa tempo de execución sexa superior a 30 segundos (suma de tempo de sistema máis de usuario) para evitar saturar o sistema, excepto no CSD ou outras aplicacións marcadas explicitamente no que o punto de corte é menor, xa que o consumo de tempo deste tipo de aplicacións é moi inferior. Na táboa recóllense as 20 aplicacións con máis uso (outros significa aplicacións non clasificadas, fundamentalmente instaladas ou desenvolvidas polos propios usuarios).

Aplicacións	Tempo (sys+user)	%
outro	3.086.506,12	33,84%
g98/03	1.404.474,31	15,40%
Gromacs	953.299,39	10,45%
VASP	599.610,84	6,57%
LAMMPS	519.521,92	5,70%
SIESTA	446.359,51	4,89%
Molpro	186.146,53	2,04%
Xmipp	124.290,49	1,36%
Wien2K	82.906,14	0,91%
Turbomole	78.492,37	0,86%
WRF	65.163,67	0,71%
NAMD	56.254,23	0,62%
pyMPI	48.552,01	0,53%
amber	45.353,31	0,50%
octopus	22.426,55	0,25%
Materials Studio	21.948,28	0,24%
cpmd	19.371,95	0,21%
dalton	12.420,19	0,14%
IM	11.744,46	0,13%



Durante o primeiro ano de funcionamento do Finisterrae executáronse 6 retos computacionais, grandes problemas computacionais que ou ben non foran expostos até o momento, ou ben que se puideron completar grazas á excelente potencia de cálculo que este equipo nos ofrece. Expuxéronse primeiro 3 problemas durante o período de probas, cun enfoque bilateral, tanto para beneficiarse do feito de que a máquina estivese libre de carga, como para medir a capacidade da propia máquina e detectar posibles erros, pescozos de botellas ou problemas de configuración. Tras o éxito cultivado con estes 3 primeiros retos computacionais, seleccionáronse 3 máis procedentes de investigadores do CSIC. Os retos executados foron os seguintes:

Fekete:

Investigadores do grupo VARIDIS do Departamento de Matemática Aplicada III da Universidade Politécnica de Cataluña, encabezados por Enrique Bendito, xunto co persoal do CESGA, estiveron probando un novo algoritmo robusto, versátil e eficaz para a resolución do problema dos puntos de Fekete. Denominamos problema de Fekete ao consistente en minimizar baixo restricións xerais calquera funcional de enerxía potencial que dependa das distancias relativas entre N puntos iguais, e chamamos puntos de Fekete ás configuracións que dan as enerxías mínimas nese tipo de problemas. Este problema ten estreita relación co problema de atopar un algoritmo capaz de obter en tempo polinómico en N unha boa estimación do mínimo global da enerxía logarítmica na 2-esfera (constitúe o sétimo "Problema matemático para o século XXI" de S. Smale).

Este algoritmo non presenta ningunha complexidade computacional en se mesmo, pero se pretendía extraer estatística suficiente para obter resultados concluíntes, polo que se realizaron millóns de execucións con distinto número de puntos, concretamente uns 70 millóns. Para iso empregáronse unhas 350.000 horas de cálculo utilizando o 50% da capacidade do FT (O que equivalería a uns 40 anos sobre unha soa CPU).

Os resultados obtidos corroboraron todas as previsións que se fixeron previamente en canto ao comportamento do Método das Forzas, o que confirma que con este método conséguese superar a incerteza inherente a outros algoritmos de optimización, tanto polo que se refire a condicións suficientes de converxencia como a predición de tempos de cálculo.

Como resultado destas execucións conseguíuse reunir máis de cincuenta millóns de mínimos locais para a enerxía logarítmica na 2-esfera. Esta é, con moito, a maior mostra xamais obtida en relación ao problema de Fekete e ao sétimo problema de Smale. Da análise estatística de toda a información muestral obtida inférese que moi probablemente sexa posible formular unha resposta positiva á versión probabilística do sétimo problema de Smale. Ademais, a análise realizada ha permitida identificar as liñas mestras dunha posible demostración.

Por mor destes cálculos publicáronse os seguintes resultados científicos:

- E. Bendito, A. Carmona, A.M. Encinas, J.M. Gesto, A. Gómez, C. Mouriño, T. Sánchez, Computational cost of the Fekete problem I: the Forces Method on the 2-sphere, aceptado en la revista Journal of Computational Physics.
- TESIS DOUTORAL
Título: Estimation of Fekete points.
Autor: Jose Manuel Gesto Beiroa.
Directores: Enrique Bendito Pérez e Andrés Marcos Encinas Bachiller.
Data de lectura: 23 de xullo de 2008.
Programa de Doutoramento: Matemática Aplicada, Universidade Politécnica de Cataluña.

Hemcuve:

Un grupo mixto de investigadores en electromagnetismo computacional das Universidades de Vigo e Estremadura, xunto con persoal do CESGA, implementaron un código para realizar cálculos electromagnéticos. Devandito código está en desenvolvemento constante e parte dunha aproximación xa antiga de abordar o problema, moi superada por algoritmos máis recentes, pero que ten a particularidade de escalar moito mellor. Algoritmos multinivel actuais son moi eficientes sobre poucos procesadores pero presentan problemas de escalado. Esta aproximación mononivel, en principio moito máis custosa, escala case linealmente mesmo sobre máis de 100 CPUs, e por tanto permite, a base de utilizar recursos, abordar problemas moito máis grandes.

Inicialmente o reto expúxose cun problema de 35 millóns de incógnitas, a pouca distancia do record mundial de entón situado en 42 millóns. Este reto conseguíuse finalmente tras facer múltiples adaptacións da aplicación á plataforma, sobre 512 CPUs, utilizando 64 nodos do FT e 8Tb de memoria RAM. Pero esta primeira execución deixou abertas moitas portas de posibles melloras para abordar problemas máis grandes nun futuro próximo, xa que os problemas se magnifican cando a utilización de recursos leva ao máximo.

Nunha mellora continua do código, durante o verán executouse un problema de 150 millóns de incógnitas utilizando 1024 CPUs e 5,4 Tb de memoria, esta vez si superando a marca do mundo. Pode apreciarse que un problema 5 veces máis grande consome menos memoria

que o anterior, o que dá a entender onde se centraron os reforzos de optimización de código. Prevese ter unha nova versión máis refinada do código para tentar executar durante Xaneiro de 2009 un problema con máis de 500 millóns de incógnitas.

Cabe resaltar que para executar este reto levouse ao extremo a capacidade de cálculo de medio Finisterrae, utilizando unha paralelización MPI para comunicacións entre nodos, e unha paralelización OpenMP sobre memoria distribuída dentro dos nodos. Demostrando que esta máquina é perfecta para este tipo de problemas dada a gran cantidade de memoria por CPU que nos ofrece. A aplicabilidade deste proxecto é a resolución de problemas electromagnéticos en grandes estruturas dotadas de sistemas de radio, como barcos, avións e vehículos terrestres. Así, conséguese dunha maneira máis eficiente, simular o comportamento electromagnético das estruturas na etapa do deseño para poder verificar e garantir o cumprimento dos requisitos electromagnéticos impostos, minimizando así os problemas posteriores ao proceso de fabricación.

Este reto deu lugar ás seguintes publicacións científicas:

- L. Landesa, J.M. Taboada, F. Obelleiro, J.L. Rodríguez, J.C. Mouriño, A. Gómez, "FMM en problemas electromagnéticos con decenas de millóns de incógnitas", XXIII Simposium Nacional da Unión Científica Internacional de Radio (URSI 2008), Madrid, 22-24 setembro de 2008.
- L. Landesa, J.M. Taboada, F. Obelleiro, J.L. Rodríguez, J.C. Mouriño, A. Gómez, "Fast Multipole Method in Supercomputers", VI Encuentro Ibérico de Electromagnetismo Computacional, Chiclana de la Frontera, Cádiz, 21 outubro de 2008.
- J.C. Mouriño, A. Gómez, L. Landesa, J. M. Taboada, F. Obelleiro, J. L. Rodríguez, "High Performance Computing Electromagnetics Challenge: solving tens of millions of unknowns." Proceedings of IBERGRID 2008, Oporto (Portugal), 12-14 maio de 2008.

Outras dúas foron enviadas, pero todavía non se publicaron nin están totalmente aceptadas

Wien2K:

Un grupo de investigadores do Departamento de Física Aplicada da Universidade de Santiago de Compostela, coordinado polo profesor Daniel Baldomir, xunto con perosonal do CESGA expuxéronse resolver o 3º/4º problema físico máis importante da década seún o American Institute of Physics. O problema consiste en descubrir como se produce exactamente o fenómeno denominado transición de fase. Trátase dun punto crítico no que un material adquire propiedades magnéticas efectivas a partir da intervención humana, concretamente engadindo outros compostos ou variando a súa temperatura. Até agora, a manipulación das características magnéticas dun composto foi común, sen que se puidese coñecer a súa dinámica máis que de forma aproximada. Con este descubrimento, poderase controlar a través do seu coñecemento exhaustivo e, en consecuencia, afinar as súas aplicacións.

Cos resultados deste reto, para o que se utilizaron 384 CPUs do FT durante varios centos de horas, iníciase líneas de investigación para optimizar a tecnoloxía das baterías dos teléfonos móbiles, para dar un salto cualitativo nas memorias dos computadores portátiles, que tamén son magnéticas, ou para optimizar os sensores

magnéticos, empregados para detectar campos magnéticos moi pequenos, e outras múltiples aplicacións.

Isto mesmo terá aplicacións moito máis pegadas á vida diaria: o sensor medirá o magnetismo e 'escaneará' así os produtos dunha vez, o que suporía un aforro de tempo ao facer a compra, cobrando todos os elementos dun carro da compra dunha vez, sen sacalos, en lugar de pasalos polo código de barras un por un. Tamén permitirá afinar as medicións das radiacións, por exemplo para controlar as emisións en hospitais e zonas determinadas de poboación, afinando neste caso o modelo exacto para reducir os límites de erro establecidos neste caso por razóns de saúde.

Até o momento non se publicou ningún dos resultados obtidos, pero se está traballando niso.

Algoritmo xenético:

Este reto foi exposto por Francisco Najarro, investigador do Departamento de Astrofísica Molecular Infraroja (DAMIR) do Instituto de Estrutura da Materia (IEM) do CSIC.

Os algoritmos xenéticos propuxéronse como un método alternativo na obtención de parámetros estelares que reproduzan as observacións en modelos astrofísicos de atmosfera para estrelas masivas. A precisión e eficiencia dos algoritmos xenéticos depende en gran maneira do axuste fino dos parámetros xenéticos ao problema de optimización. O labor, por tanto, consistiu na adecuación dos diagnósticos necesarios, as líneas espectrales, e os parámetros xenéticos, codificación e número de parámetros, para abordar o problema astrofísico dunha forma realista.

Neste reto, iniciouse o estudo cuantitativo de estrelas masivas a partir de observacións no infravermello. Até a data, só utilizáronse estes métodos nos espectros ópticos estelares. O infravermello é importante xa que permite o estudo de rexións, como o centro da nosa galaxia, que están obscurecidas no óptico e non se poden observar.

Os estudos, aínda en curso, están a revelar o enorme potencial deste método. Na actualidade estamos a adaptar as nosas observacións para a posterior análise automática co algoritmo xenético implantado no Finis Terrae.

Os recursos típicos usados no método corresponden ao cálculo duns 20000 a 40000 modelos cun tempo medio de 15 minutos por modelo. O método é altamente paralelizable e escala case-linearmente co número de procesadores dispoñibles. As probas realizáronse até cun máximo de 80 cores.

Até a data tampouco foi publicado ningún resultado derivado destes cálculos pero se está traballando niso.

Ana Mancho:

A investigadora Ana Mancho do Instituto de Ciencias Matemáticas do CSIC utilizou o Finis Terrae para executar dous pequenos retos en lugar dun máis grande. O primeiro deles é un proxecto de cálculo paralelo de seguimento de colapso na ecuación cuasigeostrófica e o segundo trata sobre o cálculo de inestabilidade en fluídos en convección.

Os recursos utilizados non son tan altos como noutros retos, pois se utilizou un

máximo de 20 CPUs pero se require gran cantidade de memoria. En total empregáronse unhas 5000 horas de cálculo.

Publicáronse os seguintes artigos cos resultados científicos obtidos destas simulacións:

- J. A. Jiménez Madrid, Ana M. Mancho. Distinguished trajectories in time dependent vector fields. Aceptado. Aparecera en "Chaos" en marzo de 2009.
- A. M. Mancho. Numerical studies on the self-similar collapse of the α -patches problem. En preparación.

Ademais presentouse en dous congresos, pero ningún deles ten referencia bibliográfica, máis que un breve resumo no libro de abstracts .

LAMMPS:

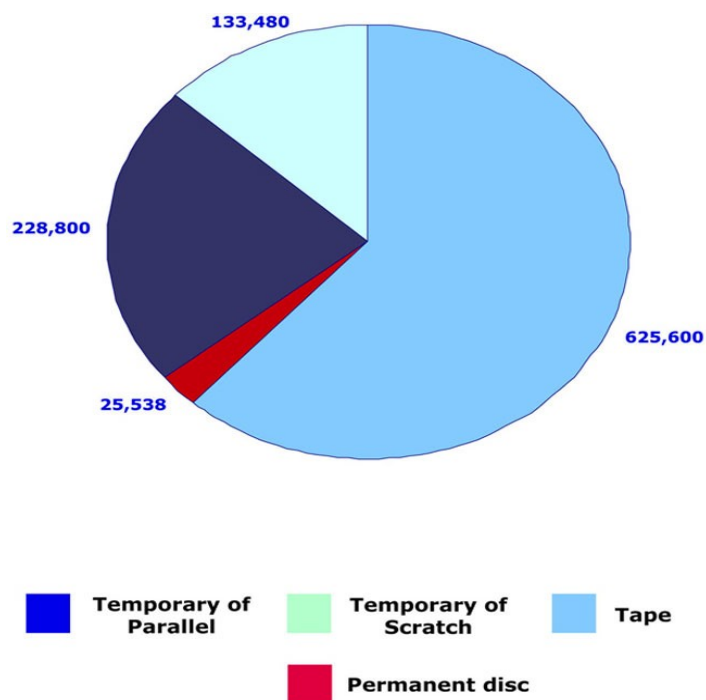
O investigador Victor Cruz, do instituto de Estrutura da Materia do CSIC, expuxo un problema de dinámica molecular de poliolefinas, para ser resolto co programa masivamente paralelo e de dominio público LAMMPS. Completou inicialmente o proceso de equilibrado, estando nas últimas fases de execución. Para os cálculos utilizou até 256 procesadores.

1.3.- Subsistema de Almacenamento

A capacidade total de almacenamento dispoñible para os usuarios do CESGA non aumentou considerablemente no ano 2008, xa que as principais incorporacións de Finis Terrae xa se produciron e contabilizado no ano anterior. Únicamente aumentou a capacidade do almacenamento en cinta en 465.6 TB coa adquisición de 291 novas cintas LTO-4 para a librería robotizada, chegando até os 625.6TB. En total o almacenamento dispoñible para os usuarios chega agora até os 1013 Terabytes, o que supón un incremento do 57% respecto ao almacenamento do ano anterior. A seguinte táboa mostra a distribución do almacenamento:

Tipo de almacenamento	Capacidade (Gigabytes)
Temporal ou Scrath	133,480
Temporal Paralelo	228,800
Permanente en disco	25,538
Cinta	625,600
Total	1,013,422

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 solicitudes do servizo de almacenamento foi de 77, dos cales 40 contan co un aumento da súa cota de usuario nos servidores de cálculo, 27 con almacenamento masivo de datos e 10 con copias de seguridade a disco (algúns usuarios están subscritos a máis dun servizo).



2.- Comunicaci3n

2.1 Actividades mais significativas do ano

Aas acci3ns mais relevantes correspondentes a RECETGA, durante o ano 2008, resúmense nas seguintes:

Monitorizaci3n e xesti3n de rede:

A Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia prestou o seu servizo cun nivel de dispoñibilidade do 99,743 %. Esta porcentaxe de dispoñibilidade vese afectado nalgúns centros por non dispor devanditos centros de persoal en fins de semana, polo que incidencias, como corte de subministraci3n eléctrica, non ven emendadas até a seguinte xornada laboral.

Novas conexi3ns a Centros: Para a evoluci3n e mellora da rede, realizáronse as seguintes acci3ns:

- Estudo do coste de diferentes alternativas de mantemento de rede.
- Migraci3n a tecnoloxía gigabit de centros: FEUGA e DXID
- Estudo de migraci3n a tecnoloxía gigabit de SERGAS e H.Clinico
- Habilitouse un enlace de backup para a conexi3n do Instituto de Investigacións Mariñas de Vigo.
- Migrouse a conexi3n de CEIDA a FastEthernet

Actividades de difusi3n e congresos:

- Contribuíuse á difusi3n das tecnoloxías multimedia un relatorio no congreso de TelePresencia de IIR España.

Adaptaci3n das infraestruturas do CESGA para aloxamento do Supercomputador Finis Terrae:

Debido á chegada do sistema Finis Terrae, o CESGA tivo que adoptar diversas medidas para a adecuaci3n da infraestrutura ao mesmo. Estas operaci3ns afectaron na área de comunicaci3ns, tendo que recollese os equipamentos en novas localizaci3ns e realizando cambios na subministraci3n eléctrica.

2.2.- Tráfico transferido

CENTRO	Tráfico Entrada (MB)	Tráfico Saida (MB)	Dispoñib. (%)
Centro de Control de Calidade do Medio Mariño (CCCMM - Vilaxoan)	209.211,268	461.079,907	99,977
Centro de Cultivos Mariños (CCM-Ribadeo)	637,465	4.349,680	100,000
Centro de Investigacións Mariñas (CIMA-Coron)	128.694,439	612.101,244	99,985
Centro de Investigacións Agrarias de Mabegondo (CIAM)	15.045,057	87.085,974	99,973
Centro de Investigacións Forestais e Ambientais de Lourizan	1.359.551,889	1.540.308,453	98,833
Centro Superior Bibliográfico de Galicia	635.710,630	421.733,615	99,985
Dirección Xeral de I+D+i	80.909,223	109.368,575	99,999
Total Grupo	2.429.759,970	3.236.027,448	99,822
Instituto de Estudios Galegos Padre Sarmiento	2.459.490,022	2.708.876,822	99,982
Instituto de Investigacións Agrobiolóxicas	1.593.527,280	1.430.964,577	99,999
Instituto de Investigacións Marinas	1.641.001,681	2.904.877,493	99,413
Misión Biolóxica de Galicia	843.255,098	659.745,447	98,392
Total Grupo	6.537.274,081	7.704.464,340	99,447
AIMEN	963.185,007	514.427,536	99,400
ANFACO	330.148,082	668.682,097	99,859
CETMAR	148.431,459	57.651,077	99,394
CIS FERROL	1.033.646,910	244.934,461	97,430
CTAG	236.053,697	486.745,629	99,984
Parque Tecnolóxico de Galicia	2.035.024,920	940.233,401	99,723
Total Grupo	4.746.490,075	2.912.674,202	99,298
Centro Oncológico Galicia	42.382,381	243.466,961	99,734
Hospital Cies	344.345,193	182.063,695	99,605
Hospital Clínico Universitario	17.191,620	99.564,981	99,996
Hospital Juan Canalejo	7.428.439,228	19.948.010,680	99,999
Hospital Meixoeiro	767.357,587	739.182,775	99,841
Total Grupo	8.599.716,009	21.212.289,091	99,835
I.E.O. Delegación de Coruña	1.687.609,606	3.535.573,113	99,889
I.E.O. Delegación de Vigo	1.869.586,375	2.410.308,440	99,844
I.E.O. Delegación de Vigo sede Bouzas	179.897,657	36.737,008	99,868
Total Grupo	3.737.093,638	5.982.618,560	99,867

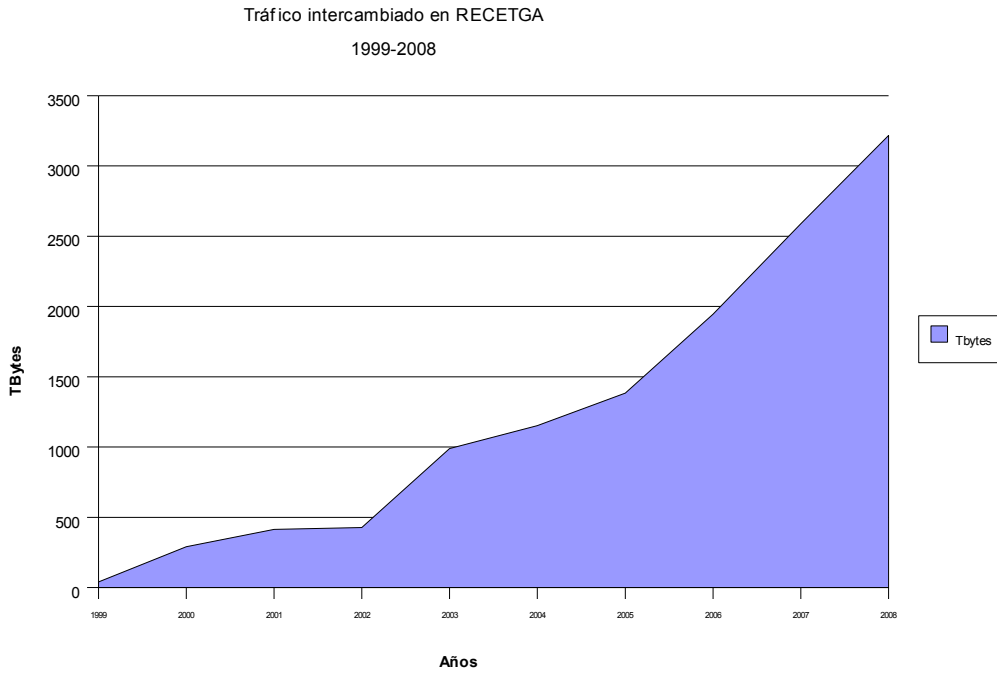
CENTRO	Tráfico Entrada (MB)	Tráfico Saida (MB)	Dispoñib. (%)
GALNIX	16.910.075,121	84.426.989,431	99,985
REDIRIS	587.364.561,079	838.765.486,523	99,998
RETEGAL	2.356.787,661	6.059.259,766	99,984
SERGAS	3.331.655,638	7.933.955,413	99,993
Total Grupo	609.963.079,500	937.185.691,133	99,990
Aula Productos Lacteos	391.390,375	1.335.714,456	99,810
CEIDA	165.766,051	192.014,529	99,725
Centro Multimedia de Galicia	6.642.119,220	3.701.749,133	99,996
FEUGA Santiago	315.138,185	1.343.838,897	99,628
Instituto Ramón Piñeiro	447.233,704	671.204,762	99,999
Total Grupo	7.961.647,536	7.244.521,776	99,832
UDC Coruña	558.761.095,296	157.626.281,676	99,999
UDC Ferrol	9.823.986,962	10.065.099,932	99,972
Universidade de Minho	322.157,551	57.198,644	99,109
USC	62.749.444,788	185.229.771,699	99,999
USC Lugo	20.189.446,456	41.837.282,233	99,943
USC Santiago	49.017,695	20.068,266	99,904
UVIGO Ourense	69.095.778,063	64.786.317,166	99,946
UVIGO Pontevedra	37.108.429,645	23.148.625,998	99,940
UVIGO Vigo	227.638.052,701	195.654.977,801	99,925
Total Grupo	985.737.409,158	678.425.623,415	99,860
Total	1.629.712.469,965	1.663.903.909,965	99,743

Nas páxinas seguintes recóllese gráficas onde se detalla información estatística significativa relativa á actividade do 2008:

- I. Tráfico interno
- II. Tráfico con RedIRIS
- III. Detección de Virus
- IV. Servicios Centrales

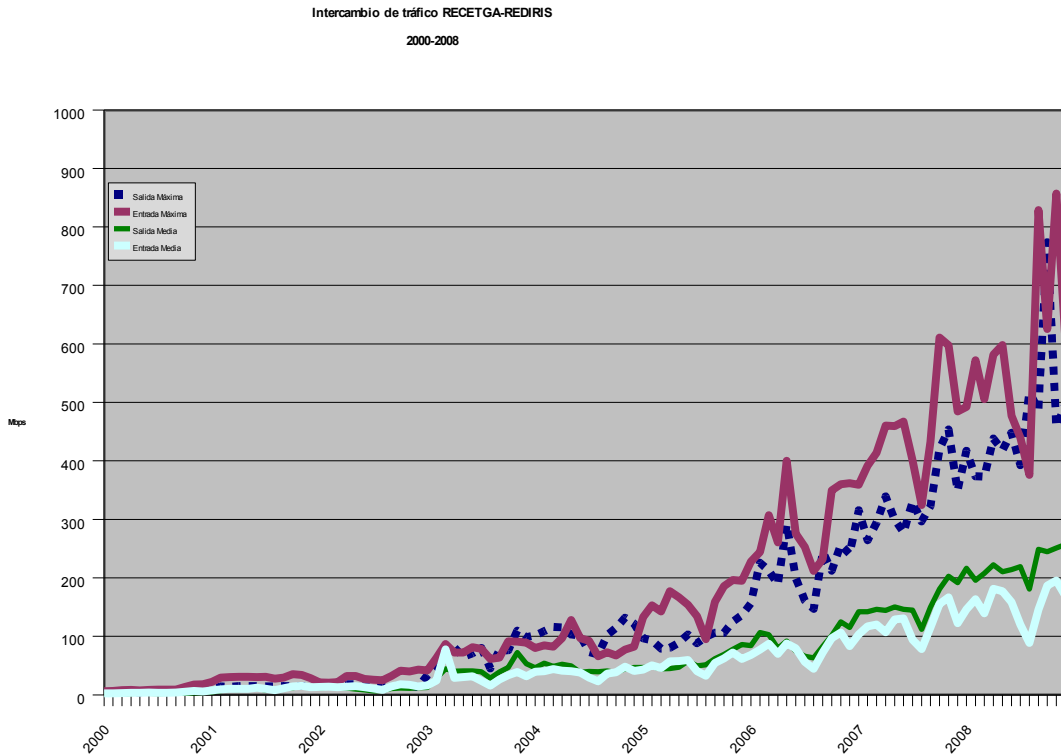
I.- TRAFICO INTERNO INTERCAMBIADO:

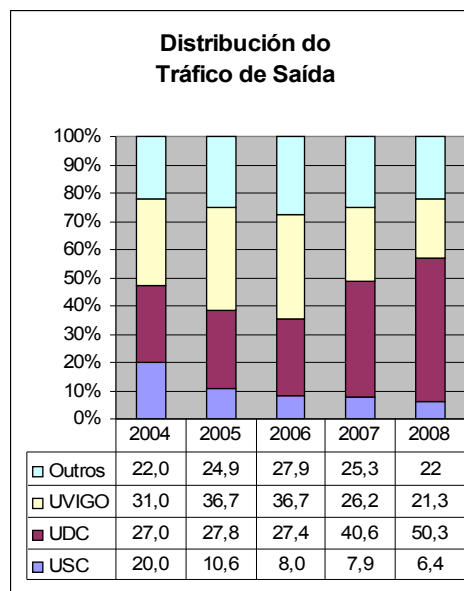
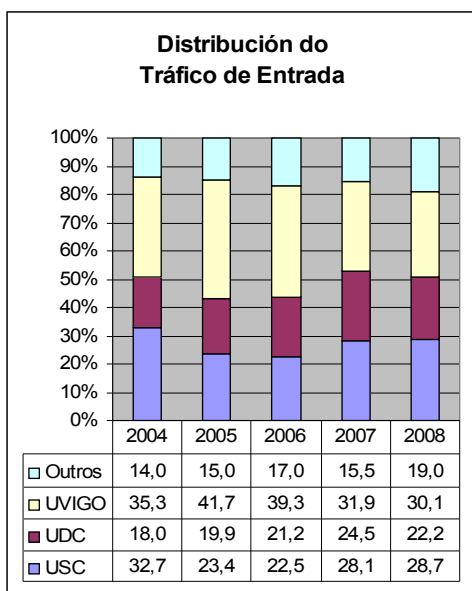
No 2008, o volume de tráfico intercambiado ascendió a 3.216 Terabytes, o que supón un incremento do 24,27 % con respecto ao ano anterior.



II.- TRÁFICO CON RedIRIS:

Durante o ano se alcanzaron picos de intercambio de tráfico con RedIRIS de 774 Mbps en salida e 857 Mbps en entrada.





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

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

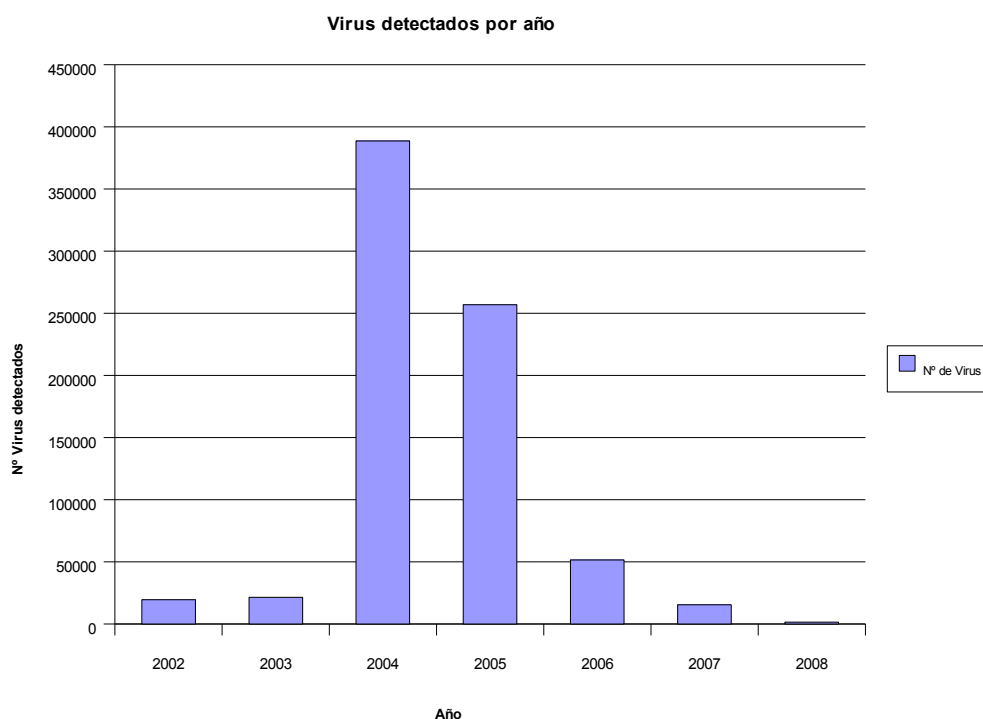
III. - DETECCIÓN DE VIRUS E SPAM

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

Desde 1 de Xaneiro de 2008 até 31 de decembro de 2008 temos as seguintes estatísticas de virus, observándose un enorme avance 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:

2008	Virus/mes	Spam/mes
Xaneiro	194	51049
Febreiro	76	82580
Marzo	118	101313
Abril	103	441997
Maio	92	271995
Xuño	235	532665
Xullo	85	956503

2008	Virus/mes	Spam/mes
Agosto	105	705466
Setembro	171	845251
Outubro	86	595214
Novembro	97	112124
Decembro	39	33878
ANUAL	1409	4773495



IV. SERVICIOS CENTRAIS

A actividade destes servicios ao longo do ano 2008, concrétase coa seguinte estatística:

Servizo de correo:

CORREO								
	Mensaxes/Min. (Media)		Mensaxes (Total)		Bytes/Min (Media)		Bytes (Total)	
	Rx	Tx	Rx.	Tx.	Rx.	Tx.	Rx.	Tx.
ns1	13	29	6.640.704	15.231.456	3.369	1.262	1.775.334.184	665.177.163
ns2	53	33	27.722.303	17.392.319	5.587	713	2.944.572.387	375.568.692

Servizo comunicacións multimedia:

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

	Videoconf.	Grabacións	AccessGrid	Streaming
2006	33	5	45	1
2007	40	24	18	15
2008	39	46	39	12

A razón da diminución 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 servizos web, maioritariamente facendo uso da nova plataforma de hosting mediante máquinas virtualizadas, proporcionar servizo aos seguintes aloxamentos web de I+D+i:

	Dominios internos	Dominios externos	Hosting de máquinas
2006	97	15	5
2007	117	25	11
2008	117	25	12

Seguridade

No ámbito dos servizos, tamén se atenderon os incidentes relativos á seguridade no ámbito de RECETGA, resolvendo, entre outros, até 11 tickets emitidos polo CERT de RedIris.

3.- Área de Tele-ensino

Obxetivos:

- Investigación na área de e-learning en distintas contornas.
- Promoción e difusión das Tecnoloxías da Información e das Comunicacións (TIC) aplicadas a procesos de ensino aprendizaxe.
- Promover a integración das institucións educativas na Sociedade da Información.

Recursos tecnolóxicos do CESGA en e-learning:

- Suite online de e-learning, asíncrona e colaborativa (Aula Cesga).
- Audio e video streaming para sesións de formación.
- Equipos de videoconferencia profesionais e de alta calidade para sesións de formación ou reunións en tempo real.
- Listas de distribución sobre e-learning.
- Ferramenta Webminar.
- Equipamento Hardware para mobile learning e T-learning.
- Sistema de Xestión de Contidos para portais de e-learning.

Con data 1 de agosto de 2008, estos recursos foron transferidos á Fundación.

Actividades do área mais destacadas no exercicio 2008 (ata o 31 de xullo de 2008):

- Colaboración na planificación, desenvolvemento e avaliación das actividades de formación do persoal do CESGA e usuarios HPC.
- Participación no grupo de traballo de e-learning na plataforma INES (Spanish Software and Services Technological Platform).
- Colaboración co portal web da Unión Europea: elearningeuropa.info.
- Participación no grupo de traballo rexional PTAG de e-learning (Plataforma Tecnológica Gallega del Sector Audiovisual).
- Participación no grupo de traballo de alto nivel de ética e TIC, organizado pola Comisión Europea.
- Membros da Rede Temática de Obxectos de Aprendizaxe (REDAOPA) xunto con outras 18 institucións e universidades nacionais.
- Colaboración coa Conxexería de Educación nas actividades de formación para docentes como é a produción de varios cursos de e-learning sobre a base de datos de Didáctica Matemática (MATHDI-, MathEdu) e Open Office e a súa utilización didáctica. Ademais, facemos actividades de consultoría no ámbito das novas tecnoloxías aplicadas ao ensino e o aprendizaxe para a formación de profesores en centros de formación, nas universidades galegas e nos colexios de Primaria e Institutos de Secundaria.
- Publicación de dous libros e sete artigos en revistas científicas. Tamén participamos como membros do comité organizador do congreso EDUTEC'08. Así mesmo, fomos membros do comité científico do V Simposio interdisciplinar sobre Deseño e Avaliación de Contidos Educativos Reutilizables (SPEDECE 08). Tamén realizamos Presentacións en 10 conferencias no sector do TIC e a educación.
- Análise e implementación dunha ferramenta online open source que permite levar a cabo reunións virtuais e seminarios virtuais para ofrecelo como un servizo para os investigadores.
- Deseño e desenvolvemento dunha nova Intranet para o Área de e-learning.
- Participamos en 9 proxectos de e-learning durante o ano 2008:

1. **E-Intervención:** Estudio da análise e do impacto da utilización do TIC na atención ás persoas con discapacidade e as súas familias: Calidade de vida e a autogestión. Este proxecto está financiado pola Dirección Xeral de I D i da Xunta de Galicia.
2. **SUMA:** Integración de servizos de e-learning a través de estándares. Trátase dun proxecto nacional financiado polo Plan Avanza en colaboración con outras institucións privadas e públicas.
3. **E-Hospital:** Aprender mentres se está no hospital. E-Hospital é un proxecto financiado pola Comisión Europea no marco do programa Sócrates / Grundtvig 1.
4. **Efelcren:** Contornas Educativas Flexibles e Creativos. EFELCREN é un proxecto financiado pola Comisión Europea no marco do programa Sócrates / Comenius 2.1.
5. **Parents:** Os pais como orientadores profesionais e vocacionais dos seus fillos. Este proxecto foi financiado pola Comisión Europea.
6. **Yes:** Apoio ao Emprego Xuvenil. Este proxecto foi financiado pola Comisión Europea.
7. **ICTeacher: Competencias TIC para profesores.** ICTeacher é un proxecto financiado pola Comisión Europea no marco do programa Lifelong Learning
8. **T-Maestro:** Television e e-learning. Iste proxecto está financiado pola Dirección Xeral de I + D+i da Xunta de Galicia.
9. **E-Procura:** Búsquedas de cursos personalizadas utilizando tecnoloxías semánticas. Iste proxecto está financiado pola Dirección Xeral de I + D+i da Xunta de Galicia.

Cursos Aula CESGA 2008

É un sistema de xestión de cursos do Cesga baseada na plataforma de software libre Dokeos e dirixida a investigadores e docentes do sistema educativo galego en aras de formentar a innovación e a investigación no campo do e-learning e as Tecnoloxías da Información e as comunicacións.

A continuación resúmese a actividade na plataforma Aula CESGA en 2008.

Nº Usuarios 2008	6748
Nº Cursos 2008	461
Nº accesos 2008	158.497

4.- Área de Comercio Electrónico

O Área de e-Business ten como obxectivos a promoción do uso das tecnoloxías da información nas empresas galegas, así como a sensibilización, innovación e difusión das mesmas. Para iso encárgase do deseño e realización de proxectos de innovación no ámbito do TIC e da empresa, identificando liñas de traballo e investigación nesta materia. Busca ademais a cooperación con outras organizacións para realizar actividades e proxectos que promovan o desenvolvemento rexional mediante o uso do TIC na empresa.

A estas liñas de traballo hai que engadir as actividades desenvolvidas no proxecto Mancomún, en colaboración coa Dirección Xeral de Promoción Industrial e Sociedade da Información.

A partir do 31 de xullo de 2008, as liñas de actividade que o Departamento de e-Business mantiña na SAX CESGA pasaron a realizarse dentro da Fundación Centro Tecnolóxico de Supercomputación de Galicia, xa que os seus recursos integráronse en devandita institución. Paralelamente, iniciáronse os preparativos para a asunción polo Departamento das funcións de Área de Transferencia de Coñecemento da Fundación CESGA.

Actividades mais destacadas en 2008:

Durante o ano 2008 a área de e-Business continuou desenvolvendo proxectos de innovación e tecnoloxía centrados no campo empresarial, seguiu co seu labor de apoio a proxectos de empresas, e continuou co mantemento das súas actividades no relativo ao TIC, innovación e empresa, mediante o acceso a fontes de información, asistencia a eventos, etc.

Dentro do Programa CAPITA (Centro de Apoio a Proxectos Innovadores Tecnolóxicamente Avanzados) de INCITE, o departamento realizou as actividades seguintes:

- Deseño e posta en marcha do sistema CAPITA para apoio á innovación nas empresas galegas.
- Desenvolvemento das aplicacións web da Rede de Operación de CAPITA: Rexistro de Axentes Privados de Innovación www.redecapita.eu
- Deseño e desenvolvemento das aplicacións de xestión interna da Rede Operativa do sistema CAPITA (LDAP, correo electrónico, groupware, CMS, CRM)
- Creación da Rede de Axentes Privados de Innovación, con 84 empresas verificadas. Captación, avaliación e verificación de capacidades en servizos de innovación de 84 empresas de consultoría e enxeñaría en innovación, 9 organismos intermedios e 9 empresas interesadas. Dentro da actividade de soporte atendéronse máis de 220 consultas durante o ano 2008.

Executáronse os proxectos contratados Vindeira CMMi&SPICE, CoopTIC, XesveTIC, e presentáronse e contrataron novos proxectos como o IPlus e EVITA. Ademais realizáronse reunións de apoio específicas con organizacións e empresas galegas para avaliar posibles proxectos de carácter innovador, xunto con diversas consultas.

O departamento participou en varias reunións e paneis técnicos internacionais e nacionais como:

- EVITA Kick-Off presentation, Athens, December.
- IPlus Project Kick-Off presentation 18-19 September, Cagliari.
- Opening Conference ICHNOS+ 11-12 December, Cagliari.
- Seminar "How to implement the model of Regional Centre of Competence for OSS", December 11th, Cagliari.
- Participación en eventos no marco do proxecto Vindeira CMMi&SPICE.
- Planificación Workshops CMMi, 27 febreiro 2008, Santiago de Compostela.
- Congreso SEPG 2008, 10-13 de xuño de 2008, Munich.
- Living CMMi, 23 de Maio de 2008, Madrid.

Dentro das súas actividades de cooperación, o departamento colaborou con outras organizacións para actividades de operación, apoio e soporte, asesoramento e divulgación: Fundación para o Fomento da Calidade Industrial e o Desenvolvemento tecnolóxico de Galicia, Parque Tecnolóxico de Galicia Tecnópole, Unidades Unite, Neurona, IMAN, SEGAPI, OPIDI e Emprendemento da DXIDI, Unidade de Muller e Ciencia, Empresa Concepto, CITT USC, Dirección Xeral de Produción, Industrias e Calidade Agroalimentaria da Consellaría de Medio Rural, Concello de Santiago de Compostela, EGANET, AGASOL, DXIPISI. Tamén se atenderon consultas, e proporcionouse asesoramento e apoio a propostas de empresas e asociacións empresariais.

Cabe sinalar que as actividades desenvolvidas polo Departamento de e-Business con anterioridade foron seleccionadas como "best practice" e modelo para outras rexións no ámbito dos proxectos de capitalización de Interreg IV C polas súas contribucións ao desenvolvemento rexional en materia de innovación e emprendimento, así como no desenvolvemento do e-Business nas empresas.

4.1.- Proxecto "mancomun.org"

As actividades relacionadas co software libre xestiónanse de acordo ao convenio de colaboración asinado coa Dirección Xeral de Promoción Industrial e da Sociedade da Información a través de Mancomún - Centro de Referencia e Servizos de Software Libre de Galicia. Este centro ten 3 obxectivos estratéxicos:

1. Fomentar a consolidación dun tecido TIC endógeno capaz de dar resposta ás demandas tecnolóxicas da cidadanía, das institucións e dos distintos sectores produtivos de Galicia.
2. Impulsar a implantación efectiva dos recursos e servizos característicos da Sociedade da Información e do Coñecemento mediante a integración dos elementos identitarios da cultura galega con especial atención á propia lingua.
3. Fortalecer a comunidade galega e internacional do software libre mediante a difusión, o patrocinio e a participación nas iniciativas, eventos e organizacións de maior relevancia.

A continuación se inclúen as actuacións máis destacadas levadas a cabo no 2008.

Actuacións para a localización ao galego

- Mantenemento da tradución das aplicacións de escritorio: OpenOffice.org, Firefox, thunderbird, pidgin, sunbird, gimp, Gnome
- Mantenemento do corrector ortográfico de galego para o OOO: corrección de erros, actualización e integración na versión oficial de OOO 3.0
- Hito importante: Integración en la comunidad de Mozilla consiguiendo versión oficial de Firefox 3.0.5 en galego.
- Mantenemento e actualización da ferraminta de traducción on line, Entrans.
- Melloras na aplicación "Motor de búsqueda para corpus lingüísticos".
- Mantenemento do DVD - Ferramentas informáticas para a PYME e traducción dos programas incluídos. Distribución de aproximadamente 6000 DVD entre a PYME e a sociedade galega.

- Elaboración dunha **distribución GNU/Linux en galego** para facilitar a introducción das TIC na sociedade a través da distribución de software libre instalable e en galego.
- Desenvolvemento dun metapaquete que modifica o aspecto gráfico da distribución basee Ubuntu e configura o idioma galego das aplicacións do escritorio multimedia.
- Creación de doas distribucións GNU/Linux empregando o metapaquete: araOS e Galinux
- Presentación a medios de Galinux.

Actuacións para o desenvolvemento

- Promoción e dinamización do uso da Forxa.
- Liberación en Forxa de proxectos desenvolvidos por Mancomún:
- Buscador para corpus lingüístico.
- Modificacións realizadas por Mancomún sobre o proxecto Entrans.

Actuacións para a implantación

- Mantenemento e melloras no directorio da PYME que inclúe 73 empresas.
- Mantenemento de diferentes servizos para facilitar o traballo colaborativo en rede: wiki, listas de correo, foros...

Actuacións para a formación

- Elaboración do **Plan de capacitación TIC** dirixido á empresa TIC galega para que poidan abordar proxectos de implantación e soporte de servizos en Software Libre. Iste curso acontece como complemento ao DVD - Ferramentas informáticas para a PYME e como resposta á demanda das empresas TIC galegas.
- Primeira edición piloto do plan de capacitación e elaboración da **Guía de capacitación TIC** como documentación para a formación.
- Planificación da segunda edición do Plan de Capacitación TIC.
- Colaboración co área de e-learning para o desenvolvemento de contidos e a impartición dun **curso de OpenOffice.org** para profesorado de secundaria na aula Cesga. Curso coorganizado pola DG de Ordenación e Innovación Educativa.
- Organización dun curso de **Introducción aos sistemas de Información Xeográfica a través do programa libre gvSIG.**
- Organización dun **Curso avanzado de eBOX** orientado a formar implantadores / desenvolvedores sobre esta plataforma.

- Elaboración de documentación e Cds de axuda sobre a instalación de Software Libre en galego en Ubuntu para a PYME distribuidora de hardware.

Actuacións de observación estatística

- Elaboración dos informes do estudio do uso do SwL nas entidades de Galicia no ano 2007.
- Coordinación có Observatorio Galego da Sociedade da Información para a publicación dos resultados.
- Colaboración có OGSÍ para a preparación do estudio correspondente ao ano 2008.

Actuacións para a difusión

Publicación de noticias diariamente no portal <http://www.mancomun.org>

Publicación de boletins semanais de noticias de Mancomún en PDF.

Cobertura do evento de presentación do SEMIC e do OSOR o 17-18 de Xuño.

<http://www.mancomun.org/novas/politicas-e-iniciativas/a-ue-situa-a-mancomun-como-centro-pioneiro-de-interoperabilidade-semantic-no-ambito-es.html>

Realización de entrevistas de casos de éxito de SwL en Galicia.

<http://www.mancomun.org/novas/entrevistas/index.php>

Mantenemento dunha axenda de eventos relacionados có Software Libre de ámbito nacional e estatal.

http://www.mancomun.org/index.php?option=com_extcalendar&Itemid=37

Participación en eventos de interese de temática de software libre:

- **Xuventude Galicia Net 2008**
- Participación no FESTIGAL 2008 en coordinación cos GULS.
- Planificación e coordinación da participación galega na **Conferencia Internacional de Software Libre** celebrada en Málaga.
- Organización da retransmisión e participación no **III Encuentro del BrOffice**. <http://encontro.broffice.org/2008/gl>

Organización de eventos para a promoción de actividades e iniciativas de Mancomún

- Có obxectivo de elaborar unha metodoloxía de tradución na que se integren os distintos axentes involucrados nas comunidades de desenvolvemento organizouse a "**I Xornada G11n: Eu traduzo o teu software**". A esta xornada convidouse á comunidade de tradución de software libre ao galego. Convidáronse tamén a personalidades de recoñecido prestixio no mundo da tradución de software libre de Galicia así como do resto do estado para que nos achegasen a súa experiencia. Ademais, estas xornadas coincidiron co segundo aniversario de Mancomún polo que se contou coa presenza da Directora Xeral quen presentou a nova imaxe corporativa de Mancomún, facendo mención especial á noticia denominación como Centro de Referencia e Servizos de Software Libre de Galicia.
- No último trimestre do ano realizouse o **II encontro do G11n** de carácter interno coa propia comunidade de tradución galega, onde se presentou a primeira versión do Manual de Localización que recolle os criterios lingüísticos aplicados ás traducións coordinadas desde Mancomún, como resposta á petición da comunidade recollida nos consensos do encontro anterior.

- Coordinación e organización do acto **“Xornadas de software libre de interese para a PEME”** co obxectivo de conseguir que o DVD - Ferramentas Informáticas para a PEME sexa unha ferramenta verdadeiramente útil e eficaz para a implantación do Software Libre na PEME galega.
- Coordinación e organización do acto de presentación de GALINUX.

Actuacións de soporte técnico

- Soporte técnico aos usuarios de Mancomún, PYME, concellos, órganos da administración, etc
- Soporte técnico a proxectos relacionados co software libre da Dirección Xeral de Promoción Industrial e da Sociedade da Información .
- Asesoramento e soporte á Rede de Dinamización para a instalación de aulas con software libre.
- Formación sobre o DVD da PYME ao persoal dinamizador da Rede de Dinamización
- Soporte á migración da Oficiña da Sociedade da Información.
- Coordinación coa DGPIISI e os GGULs para a firma dun convenio de colaboración.
- Reunión de posta en marcha das Oficiñas de Software Libre das universidades.
- Coordinación coas OSL das 3 universidades.
- Coordinación coa plataforma GaliciaXa.tv

5.- Área de Sistemas de Información Xeográfica (XIS)

Obxetivos:

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

Actividades mais destacada no exercicio 2008:

Proxectos:

Ferramenta GIS para análise de Riscos Ambientais nos sectores agrícola e industrial.- Durante 2008 finalizou o desenvolvemento da ferramenta para a análise de contaminación atmosférica no sector industrial, integrando os modelos de contaminación atmosférica e a súa geoprocesamento para representar os elementos afectados por un incidente, podendo realizar simulacións para plans de emerxencias, concluíndo o proxecto con iso.

Sistema de Información Forestal-Industrial SIFI Galicia.- Conclúese a programación dunha aplicación para xestión da base de datos do sector industrial madeireiro de Galicia e desenvolveuse e publicou un servidor de mapas en internet.

Patrimonio Arqueolóxico 2008 Xunta.- Realizáronse as tarefas de explotación de información correspondente ao inventario de bens arqueolóxicos da provincia da Coruña, análise de información proveniente do sistema documental do servizo de arqueoloxía e creación de información derivada mediante análise de datos existentes.

TERRA.- Desenvolvemento dun servidor cartográfico de Galicia para o proxecto educativo TERRA como ferramenta, instrumento e recurso didáctico nos centros educativos de primaria e secundaria de Galicia.

Participación na Rede de Información Xeográfica de Investigación de Galicia REDIX.- Elaborouse unha enquisa sobre a utilización dos GIS na administración local. Elaboráronse propostas para participación en varias convocatorias de proxectos de investigación, tanto nacionais como Europeos.

Actividades de difusión:

Mapa de Apelidos de Galicia.- Mantívose operativo o mapa de Apelidos desenvolvido para o ILGA en internet.

Sueloempresarial.com.- Mantívose operativo a web de polígonos industriais desenvolvido para o Consorcio Zona Franca de Vigo.

Colaboración na realización de xornadas tecnolóxicas para a difusión da tecnoloxía GIS.

Formación:

Curso de Formación de Profesorado dá Consellería de Educación e Ordenación Universitaria dá Xunta de Galicia, As posibilidades didácticas dous sistemas de información xeográfica en rede, 2008.

I Curso de Sistemas de Información Xeográfica, celebrado do 7 ao 11 de xullo de 2008, para a Delegación Galega do Colexio de Geógrafos.

II Curso de Sistemas de Información Xeográfica, celebrado do 22 ao 26 de setembro de 2008, para a Delegación Galega do Colexio de Geógrafos.

6.- Área de Comunicación e Difusión.

Obxetivos

- Organización da loxística do Plan de Formación Anual do Persoal do CESGA e usuarios.
- Planificación, coordinación e execución da actividade de difusión da SAX CESGA e da Fundación CESGA.
- Desenvolvemento e mantemento das ferramentas de difusión (webs, revista Díxitos, workshop anual etc.).
- Elaboración das publicacións do CESGA.

Formación dirixida a Usuarios.

Detalle das accións de formación organizadas ou participadas polo CESGA no ano 2008:

Título da Actividade Formativa	Tipo	Coa colaboración	Data Realizada	Duración (h)
HP CMU+ General Cluster Overview +Management Tricks	curso	HP	1º Trimestre	18
HP SFS	curso	HP	1º Trimestre	18
Herramientas de Desarrollo de Intel	curso	Intel	1º Trimestre	25
Mantenimiento del Finis Terrae	curso	CESGA	1º Trimestre	4
Voltaire Technical training class	curso	CESGA	1º Trimestre	14
Visión General de Hardware Superdome	curso	HP Invent	2º Trimestre	6
Curso de Django	curso	CESGA-GIS	2º Trimestre	12
Curso de Fortran	curso	CESGA	2º Trimestre	12
Introducción a la Computación	curso	USC/UDC	3º Trimestre	20
Introducción a la Programación en MPI	curso	USC/UDC	3º Trimestre	15
2ª Edición Curso de Fortran	curso	CESGA	4º Trimestre	12
Programación Paralela mediante directivas OPENMP	curso	CESGA	4º Trimestre	15
Optimización de Aplicaciones Científicas sobre Sistemas Multi-Núcleo	curso	CESGA	4º Trimestre	15
Herramientas de Software libre para DEBUGGING y análisis del rendimiento de aplicaciones	curso	CESGA	4º Trimestre	20
Acceso y utilización del Superordenador Finis Terrae	curso	CESGA	4º Trimestre	5
Introducción a códigos de química computacional en el CESGA (Gaussian, GAMESS, NWChem)	curso	CESGA	4º Trimestre	5

Formación dirixida ao Persoal do CESGA.

Detalle das accións de formación realizadas polo persoal do CESGA no ano 2008:

Título da Actividade Formativa	Tipo	Imparte	Data Realizada	Duración en Horas
Curso de Inglés	Curso	Picadilly	Anual	Anual
Manejo de Gestor de Contenidos Web CESGA	Curso	CESGA	Todo el año	Tutorías
La nueva ley de contratación pública: novedades de implicaciones para las empresas	Curso	APD	1º Trimestre	8
Redes de interconexión de altas prestaciones	Curso	Voltaire	1º Trimestre	8
Software Libre en GIS	Curso	SIGTE	1º Trimestre	24
Como implantar un sistema de gestión de I+D+i en la empresa	Curso	FEUGA	1º Trimestre	21
Como hacer presentaciones ganadoras	Curso	APD	1º Trimestre	8
Xornada Lei de Contratos do Sector Público	Jornada	Xunta	1º Trimestre	4
Voltaire technical training class	Curso	Voltaire HP	1º Trimestre	14
Mantenimiento FinisTerra	Curso	HP	1º Trimestre	4
Visual Basic.NET	Curso	Pcarrier	2º Trimestre	60
Clima Laboral y Rendimiento	Curso	APD	2º Trimestre	2
"A nova Lei 30/2007 de contratos do sector público"	Curso	Xunta de Galicia	2º Trimestre	13
Phyton y Django	Curso	SCA Informática	2º Trimestre	12
Ontoloxías, SOA e servizos WEB	Curso	USC	2º Trimestre	9
Designing Cisco Network Service Architecture	Curso	Globalknowledge spain	2º Trimestre	40
Como afecta el clima laboral al rendimiento de la empresa	Curso	APD	2º Trimestre	2
Visión general de Hardware Superdome	Curso	HP	2º Trimestre	6
Novo Plan Xeral Contable	Curso	Xunta	2º Trimestre	15
Implantación efectiva de los planes de igualdad en la empresa	Curso	APD	2º Trimestre	5
BeinGRID Portal Training	Curso	Beingrid	3º Trimestre	15
Metodologías y herramientas de investigación cualitativas en proyectos de investigación	Curso	USC Tecnología educativa	3º Trimestre	15
Sixth International Summer School non Grid Computing	Curso	Varios	3º Trimestre	80

Título da Actividade Formativa	Tipo	Imparte	Data Realizada	Duración en Horas
BEinGRID Components Training	Curso	Beingrid	3º Trimestre	15
BEinGRID Business and Dissemination Training	Curso	Beingrid	3º Trimestre	15
Como comunicar la ciencia, la tecnología y la innovación	Curso	Feuga	4º Trimestre	4
Programación LAMP	Curso	Prof. Training	4º Trimestre	20
Desarrollo de aplicaciones paralelas	Curso	USC/UDC	4º Trimestre	25
Fundamentos de ITIL V3	Curso	CNTG	4º Trimestre	20
Dirección de Proyectos Informáticos	Curso	CNTG	4º Trimestre	36

Detalle das xornadas, seminarios e conferencias organizadas ou participadas polo CESGA no ano 2008:

Título de: Xornadas, Seminarios e Conferencias	Tipo	Coa colaboración	Data Realizada
CESGA FINIS TERRAE Computational Science Conference	Conferencia Científica	CSIC. Ministerio de Ciencia e Innovación. Xunta de Galicia/ Consellería de Innovación e Industria	12-06-08
Curso de Bioinformática Estructural: MODELIZACIÓN Y SIMULACIÓN DE MOLÉCULAS BIOLÓGICAS	Seminario	Rede Galega de Bioinformática. USC Fundación Pública Galega de Medicina Genómica CESGA	05-11-08
Curso de Xestión de Proxectos do VII Programa Cadro de I+D	Seminario	Oficina de Programas Internacionais de I+D+i (OPIDI) Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación	26/28-11-08
Curso XIS do Colexio Xeógrafos	Jornada	Colegio de Geógrafos USC	11-9-08
"Diez razones para diseñar una web accesible"	Conferencia	Ciclo de Conferencias ISOC Internet Society. Capítulo español.	12-02-08

Mathematica.nodo.cesga.es Outreach Activities in 2008

Activity	Type	Responsible Organisation	Date
Course on Nanotechnology and Mathematics	Course	USC	05/06-08/08
i-MATH Free/Libre Software for Science and Engineering Intensive Course	Course	UDC, UCA, UC, USC, UVigo, CESGA	06/30-09/26/08
Computational Math: Compiling, Execution and Program Optimization	Course	CESGA	06/30-07/04/08
Introduction to Programming with MPI	Course	CESGA	07/28-30/08
Statistics in Quality Control Methods	Forum	UDC	02/01/2008
Applied Math and Industry Interaction Day	Forum	UDC	04/25/08
Statistics for the Sports Industry	Forum	UVigo	10/08/08
Math Consulting for Industry and Public Administration	Industrial Days	USC	02/11-13/08

Actividades mais destacadas do ano 2008.

- Edición da publicación trimestral ?Díxitos?. En 2008 o número de páxinas e a distribución permaneceron igual que en 2007, é dicir, 16 páxinas e 1.350 exemplares, para os números de Febreiro e Decembro. O número de Xullo foi unha edición especial de 48 páxinas que incluíu o primeiro monográfico ? Papers on Computational Science?, contendo traballos de investigación dos usuarios do CESGA.
- Edición do Anuario 2008 de actividade do Centro, cunha tirada especial de 1.600 exemplares, incrementando o número de páxinas até 138.
- Organización da CESGA Finis Terrae Computational Science Conference, coincidindo cos actos de inauguración do Finis Terrae.
- Mantemento da aplicación de xestión de contidos para www.cesga.es Implicación de persoal de todos os departamentos do Centro no mantemento de contidos da web.
- Participación en 14 cursos, talleres e seminarios para persoal e usuarios.
- Aplicación das directrices do Plan de Comunicación do CESGA.
- Producción do vídeo corporativo do CESGA para HP e de Case Studies para as HP e Intel.
- Preparación de presentacións, dossiers e informes para a Dirección e persoal do Centro, incluíndo: presentación FINIS TERRAE, proposta de creación dunha sede do Instituto Español de Matemáticas en Galicia

(IEMath), Anuario do CSIC, Intel Innovation Awards, proposta para a implantación do "CESGA Computational Science Research Center" (C2SRC), centro de Excelencia, Case Study Intel, Case Study HP, Estudio da Producción Científica de Bugalicia, e a planificación do Segundo volumen do Monográfico "Papers on Computational Science".

- Soporte a proxectos: NextCESGA, IEMath, EGEE, e-HOSPITAL, T-MAESTRO, MANCOMUN, ISOC, Programa ConCiencia, eIMRT, RECETGA, i-Math e FINIS TERRAE.
- Redacción e distribución de 18 notas e convocatorias de prensa relacionadas con proxectos e iniciativas do Centro a medios de comunicación técnicos e xeneralistas.
- Atención a solicitudes de entrevistas de radio, televisión e publicacións ao longo do ano e colaboración con representantes de medios e autores convidados en publicacións divulgativas na preparación e redacción de reportaxes sobre proxectos do Centro.
- Participación na Semana da Ciencia, en colaboración coa DXIDI.
- Soporte a redes temáticas: participación en la organización de sus acciones formativas. Mantenimiento del sitio web y la lista de distribución de RedeBioinfo, Rede Galega de Bioinformática, así como a la Rede Galega de High Performance Computing, Rede GHPC.
- Soporte de comunicación á Rede de Centros Tecnolóxicos, RETGALIA e á Plataforma Tecnolóxica das TIC en Galicia, VINDEIRA.
- Creación por primeira vez de contidos sobre CESGA para a súa inclusión no Anuario do CSIC en Galicia.
- Colaboración na creación de contidos para materiais de difusión sobre recursos de cómputo para servicios centrais do CSIC e para a Delegación en Galicia.
- Planificación e execución xunto á Consultora Cidadanía de enquisas de satisfacción entre os usuarios de computación, almacenamento e comunicacións do Centro, promovendo a adopción de medidas acordes cos resultados das enquisas.
- Recollida de datos de produción científica de usuarios 2007 e preparación para a campaña de recollida dos mesmos de 2008 .
- Planificación do Estudo Bibliométrico da Producción Científica dos usuarios 2002-2007 co Consorcio de Bibliotecas Universitarias de Galicia, BUGALICIA.
- Colaboración co Dpto. de Aplicacións e Proxectos no proxecto de definición dun indicador de produción científica da Infraestrutura CESGA.
- Adopción das accións necesarias para o cumprimento da norma ISO 9001:2000.
- Soporte e asesoría ao Gabinete de Prensa da Consellería de Innovación e Industria.
- Soporte á Real Sociedade Matemática Española (RSME), á Olimpiada Matemática, á Sociedade de Estatística e Investigación Operativa (SEIO) e á European Courses in Advanced Statistics (ECAS) para o aloxamento dos seus sitios web nos servidores do CESGA.
- Convenio de prácticas coa Universidade da Coruña para tutorización de estudante de Filoloxía Inglesa.
- Edición do primeiro Monográfico "Papers on Computational Science", e preparación do segundo, que se editará en 2009.
- Colaboración na posta en marcha de repositorio de vídeo baixo demanda de actividades formativas e de divulgación CESGA tv.cesga.es
- Soporte á edición da proposta do nodo galego IEMath.
- Organización de viaxes nacionais e internacionais do persoal do CESGA.
- Apoio de comunicación aos proxectos do Centro.

- Organización de visitas ao CESGA. Os actos de inauguración do Finis Terrae implicaron un maior número de visitas que en anos anteriores.

Visitas institucionais:

- Vicepresidencia da Xunta de Galicia
- Visitas Institucionais durante a Xornada de Inauguración do Finis Terrae:
 1. Presidencia da Xunta de Galicia, o Secretario de Estado de Investigación, os conselleiros de Innovación e Industria e de Educación da Xunta de Galicia, o secretario xeral de Política Científica e Tecnoloxía do Ministerio de Ciencia e Innovación, o presidente do Consello Superior de Investigacións Científicas (CSIC), o presidente do CESGA, e Director Xeral de I+D+i da Xunta, o Director Xeral de Planificación e Coordinación do Ministerio de Ciencia e Innovación, o presidente de HP España, e o director do Área Sector Público de Intel.
 2. Visita guiada para Prensa. Medios locais, nacionais e internacionais .
 3. Visitas para Usuarios que participaron na Cesga-Finis Terrae Computational Science Conference, en 4 grupos.
- Durante o día 13 de xuño e con motivo da presentación dúas plans estratéxicos do CESGA xunto cos seus socios tecnolóxicos non Finis Terrae, medio centenar de representantes empresas, centros tecnolóxicos, universidades e administracións de toda España que asistiron á xornada, visitaron tamén as instalacións do novo supercomputador.
- *Outras visitas:*
 - Rede de Bioinformática de Galicia
 - Observatorio Ramón María Ayer, da Universidade de Santiago de Compostela.
 - Astronomical Institute, St.-Petersburg State University, Russia
 - Empresa de Monitorización e Control de Parques Eólicos
 - I-maxin S.L.
 - Rede Galega de HPC: dúos visitas durante el Workshop GHPC (asistentes e ponentes)
- *Outras visitas organizadas en colaboración con HP*
 - Sergas
 - Parque Científico de Murcia
 - HP Corporation BU Manager
 - Fundación Centro de Supercomputación de Castilla e León
 - Universidade e Junta de Extremadura
 - Televisión de Galicia
 - Sociedade Informática do Gobierno Vasco: EJE
 - Axencia de Innovación do Gobierno de Canarias

7.- Contratos e Proxectos.

7.1.- Contratos e convenios executados.

Durante o ano 2008 realizáronse tarefas de investigación e soporte á investigación e desenvolvemento a través de proxectos, convenios e contratos, relacionando a continuación os ingresos habidos no exercicio:

Proxecto e-IMRT (7/05) Xunta de Galicia - CX I+D+I	6.000,00
EGEE II - int.eu.grid Xunta (4/06) Xunta de Galicia - DX I+D+I	53.650,00
EGEE II (6/06) Unión Europea	37.635,04
INTEUGRID (5/06) Unión Europea	45.622,74
GIS - SIFI Forestal (8/06) Xunta de Galicia	5.742,00
e-intervención Discapacitados (9/06) Xunta de Galicia - DX I+D+I	12.676,45
RETELAB (3/07) Ministerio de Educación y Ciencia	51.102,42
COTESA (4/07) Centro de Observación y Teledetección Espacial S.A.U.	1.608,00
MATHEMATICA (5/07) A B Universidad de Cantabria	112.799,74
ISEC (8/07) Xunta de Galicia	54.523,00
G-Fluxo (9/07) Xunta de Galicia	18.684,00
MATHEMATICA (13/07) Xunta de Galicia Universidad de Santiago	62.572,00
Formiga (14/07) Xunta de Galicia	84.087,00
Fomento FT (15/07) Ministerio de Educación y Ciencia	14.941,00
Impacto FT (16/07) Ministerio de Educación y Ciencia	68.000,00
Partículas IV (01/08) Universidad de Santiago de Compostela	4.600,00
SmartLM (03/08) Unión Europea	39.900,22
Técnicos Apoyo Ministerio (04/08) Ministerio de Educación y Ciencia	16.176,71
Next CESGA (08/08) Unión Europea	73.660,72
GIS TERRA (09/08) Xunta de Galicia	10.237,08
BeinGrid (10/08) Unión Europea	18.785,38
EELA II (11/08) Unión Europea	8.928,59
C. Proxectos HP (14/08) HP	8.298,75
Meteogalicia (15/08) Xunta de Galicia	79.245,00

GIS Patrimonio (17/08) Xunta de Galicia	4.058,62
EGEE III (18/08) Unión Europea	63.169,45
E-procura (19/08) Xunta de Galicia	63.849,02
Unidades de Investigación (20/08) Xunta de Galicia	65.215,38
CTAG Servicios de Cálculo CTAG	1.095,38
Capita (22/08) Xunta de Galicia	25.095,08
Outros cursos, congresos, díxitos etc:	36.919,83
Outras suvenções á Explotación: <ul style="list-style-type: none"> • PIEG (12/07) Xunta de Galicia: 40.750,22 € • Parga Pondal (6/08) Xunta de Galicia: 5.889,17 € • Isabel Barreto (7/08) Xunta de Galicia: 36.356,75 € • PIEG (13/08) Xunta de Galicia: 3.287,58 € 	86.283,72
Convenio Finisterrae (13/06) Xunta de Galicia	313.347,50
Convenio Finisterrae (13/06) CSIC	313.347,50
Ingresos Colaboración F.I.G.: Convenio con SA	200.000,00
S.A. Xestión CESGA / CSIC:	179.645,34

TOTAL FACTURADO
2.241.502,66

7.2.- Descrición de Proxectos.

Durante o ano 2008 procedeuse á integración das actividades da Fundación e a Sociedade, polo que os proxectos movéronse na súa maioría á Fundación, quedando exclusivamente na Sociedade aqueles proxectos que polas súas características de financiamento non se poden reasignar de entidade.

Título	Financiación	Estado 2008	Descrición
XERAIS			
NextCESGA	Financia: Unión Europea (VI Programa Marco)	Inicio	Desenvolvemento dun Plan de Acción para a transformación do CESGA nun centro de excelencia investigadora en HPC, baseado nunha análise DAFO e coa colaboración cun comité de expertos externos.
Consolidación unidades de investigación	Financia: Dirección Xeral de I+D+I	Rematado	Consolidación e estruturación de unidades de investigación competitivas do sistema galego de I+D+I
ICTS-Impacto	Financia: Ministerio de Educación e Ciencia	Rematado	Estudio del Impacto SocioEconómico do Finis Terrae

Título	Financiación	Estado 2008	Descripción
RIGA	<u>Financia:</u> Dirección Xeral de I+D	Execución	Mantenemento da Base de Datos para a xestión do Rexistro de Investigadores de Galicia.
COMPUTACIÓN			
Modelo de Predición 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 el desarrollo de simuladores da prevención meteorolóxica en Galicia.
RETELAB	<u>Financia:</u> Ministerio de Educación e Ciencia <u>Participan:</u> Universidade de Santiago de Compostela, AZTI, ICCM e 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 – i-MATH	<u>Financia:</u> Ministerio de Educación e Ciencia <u>Participan:</u> Mais de 200 grupos de investigación en Matemáticas de todo o estado	Execución	Proxecto ENXEÑO CONSOLIDER para incrementar tanto cualitativa como cuantitativamente a presenza das Matemáticas en ciencia, tecnoloxía e innovación.
SmartLM	<u>Financia:</u> Unión Europea Programa STREP Coordinador: ATOS Origin	Inicio	Servidor de licenzas software para execución de aplicacións independentemente da súa localización nunha contorna GRID amigable.
FORMIGA2007	<u>Financia:</u> Dirección Xeral de I+D+I (Xunta de Galicia) <u>Colabora:</u>	Execución	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.

Título	Financiación	Estado 2008	Descripción
	USC,		
g-Fluxo: Ferramenta de WorkFlow en contornos distribuidos Aplicación á Química Computacional	<u>Financia:</u> Dirección Xeral de I+D+I (Xunta de Galicia) <u>Participa:</u> CESGA	Execución	Relación dunha utilidade de desenvolvemento de fluxos de traballo para a computación distribuída que permita o uso de diferentes aplicacións e dos recursos computacións existentes no CESGA ou accesibles a través de GRID como unha única contorna.
IFEC. Infraestructura de Firma Electrónica Cualificada	<u>Financia:</u> CDTI e Dirección Xeral de I+D+I (Xunta de Galicia) <u>Participan:</u> Aldaba Servicios Profesionales, Aldaba Solucións e Proxectos S.L., Universidade de Vigo e CESGA	Execución	O obxectivo do proxecto é o estudo, deseño e desenvolvemento dunha Infraestructura de Firma Electrónica Cualificada baseada sobre a tecnoloxía de Infraestructura 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.
ISEC	<u>Financia:</u> Dirección Xeral de I+D+I (Xunta de Galicia)	Execución	Infraestructura de firma electrónica cualificada
EGEE II: Enabling Grids for EsciencE II	<u>Financia:</u> Unión Europea (VI Programa Marco) e a Dirección Xeral de I+D+I	Rematado	Segunda fase da implantación dunha infraestructura GRID a nivel mundial.
EGEE III: Enabling Grids for EsciencE III	<u>Financia:</u> Unión Europea (VII Programa Marco)	Inicio	Tercera fase da implantación dunha infraestructura GRID a nivel mundial.
Int.eu.grid	<u>Financia:</u> Unión Europea (VI Programa Marco)	Rematado	Despliegue e operación dunha e-infraestructura para aplicacións que demandan interactividade para uso polos investigadores.
Study of the phase separation in magnetic oxides combining	<u>Financia:</u> Ministerio de Educación e Cienca	Execución	Estudo dos fenómenos de coexistencia de fases magnéticas nalgúns óxidos de cobalto a través de medidas experimentais, modelos analíticos e técnicas ab initio.

Título	Financiación	Estado 2008	Descripción
theory and experiment			
e-IMRT	<u>Financia:</u> Dirección Xeral de I+D+I <u>Colabora:</u> USC, UVIGO, U. Wisconsin	Rematado	Desenvolvemento dunha plataforma de computación distribuída e acceso a través de servizos web para o cálculo optimizado de tratamentos en radioterapia con aceleradores e a súa verificación a través de simulación.
Folstein	<u>Financia:</u> Dirección Xeral de I+D+I <u>Colabora:</u> UDC, UVIGO, Televes	Rematado	Desenvolvemento dunha plataforma para a atención gerontolóxica a domicilio.
Partículas IV	<u>Financia:</u> Ministerio de Educación e Ciencia <u>Colabora:</u> USC	Execución	Despliegue dunha infraestrutura GRID para el experimento LHCb del CERN.
BEinEIMRT	<u>Financia:</u> Unión Europea (VI Programa Marco)	Inicio	Experimento de negocio en planificación IMRT realizada, usando servicios Grid baixo demanda con SLAs.
HPC Contadores	<u>Financia:</u> HP <u>Colabora:</u> UDC,USC	Inicio	Uso de contadores hardware para mellorar o rendimento de acceso á memoria.
HP UPC	<u>Financia:</u> HP <u>Colabora:</u> UDC,USC	Inicio	Mejora de la usabilidad y performance de UPC (Unified Parallel C)
EELA2	<u>Financia:</u> Unión Europea SSA <u>Colabora:</u> 75 Centros de investigación e Universidades de Europa e Latioamérica	Inicio	Construir sobre a actual Infraestructura EELA servizos que proporcionen acceso universal a recursos distribuídos de computación, almacenamento e ampliacións para as comunidades científicas europeas e latinoamericanas
TELE-ENSINO			
ICTeachers	<u>Financia:</u> Europeo Socrates	Inicio	Reducir o gap existente na integración de tecnoloxía ICT nas clases de escolas de primaria e secundaria.
E-intervencion	<u>Financia:</u> Dirección Xeral de I+D+I	Execución	Avaliar a influencia na calidade de vida das persoas con discapacidade mediante a aplicación dun programa de intervención

Título	Financiación	Estado 2008	Descripción
			familiar por parte de terapeutas profesionais utilizando unha contorna virtual de comunicación e de traballo colaborativo
EProcura	Financia: Dirección Xeral de I+D+I Colabora: UVIGO, U. Católica Lovaina, U. Oslo	Inicio	Neste proxecto abórdase o deseño, desenvolvemento e despregamento dunha plataforma de intermediación para a procura de cursos, contemplando mecanismos que axuden a buscar, seleccionar e atopar aquela oferta que mellor se adapte ás necesidades e preferencias particulares .
XIS			
GIS-PATRIM08	Financia: Dirección Xeral de patrimonio	Inicio	Contrato traballos GIS co servizo de Arqueoloxía da Dirección Xeral de Patrimonio da Consellería de Cultura
GIS-RIESGOSM.A.	Financia: Dirección Xeral de I+D+I	Rematado	Proxecto con CIS e USC para análise de riscos ambientais en zonas industriais de Galicia
GIS-TERRA	Financia: IDEGA	Rematado	Xeración contidos GIS para os contidos de educación do Proxecto Terra do COAG
GIS_SIFI	Financia: Dirección Xeral de I+D+I	Execución	Análise da industria da transformación da madeira e do sector forestal en Galicia. Posta en valor das súas potencialidades mediante un sistema de información forestal-industrial.
COMERCIO ELECTRÓNICO			
EVITA	Financia: Europeo Interreg	Inicio	Intercambio, valorización e Transferencia de políticas de boas practicas rexionais para empresas PEMES, soporte IT e e-negocio
IPlus	Financia: Europeo Interreg IVC	Inicio	Mellorar as políticas rexionais relacionadas coa innovación e as prioridades da economía do coñecemento.
VG-CMMI-SPICE	Ministerio de <u>Industria, Turismo e Comercio</u>	Execución	Acción asociativa estratéxica de orientación á excelencia tecnolóxica no desenvolvemento software mediante a implantación de modelos de certificación de calidade (CMMI, SPICE)
Capita	<u>Dirección Xeral de</u>	Inicio	Centros de Apoio a Proxectos Innovadores e Tecnolóxicamente

Título	Financiación	Estado 2008	Descripción
	<u>Investigación, Desenvolvemento e Innovación</u>		avanzados. Creación dun sistema de apoio á innovación para empresas de Galicia baseado nun enfoque de proximidade e distribución territorial, que aproveite e poña en valor recursos existentes e que facilite a intercomunicación e coñecemento entre as empresas e os diferentes axentes de relevancia no campo da innovación.
COMUNICACIÓNS			
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)	Rematado	Mantenemento do Punto Neutro de Internet en Galicia, GALNIX.
Sistema Distribuido para a Síntese Masiva de Canales 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 de las tarxetas gráficas para codificar múltiples streams de video para transmitirse pola rede.
PASITO	<u>Financia:</u> Ministerio de Industria	Inicio	Despliegue dunha rede de comunicacións de ámbito nacional para probas de novos servicios

7.3.-Redes e Plataformas Tecnolóxicas internacionais, nacionais e rexionais.

Nome	Financia	Estado 2008	Membros
e-Ciencia de España	Financia: Ministerio de Educación e Ciencia	Execución	68 grupos e casi 700 investigadores nos ámbitos de aplicacións, middleware e infraestrutura Grid e de Supercomputación de España
CytedGrid	CYTED	Rematada	21 Universidades de Argentina, España, Venezuela, Portugal, Colombia, Chile, Paraguay, Uruguay, Brasil, Perú e Méjico.
Rede de Computación de Altas Prestacións sobre Arquitecturas Paralelas Heterogéneas (CAPAP-H)	Ministerio de Educación e Ciencia	Execución	16 Grupos de Investigación de diversas universidades Españolas e o CESGA.
Rede Galega de Computación de Altas Prestacións	Dirección Xeral de Promoción Científica e Tecnolóxica do Sistema Universitario de Galicia (Xunta de Galicia)	Execución	<ul style="list-style-type: none"> • Arquitectura de Computadores (GAC-UDC) • Arquitectura de Computadores (GAC-USC) • Laboratorio de Sistemas (LDS-USC) • Resolución numérica de ecuacións en derivadas parciais e simulación numérica na inxeniería (MAP-USC) • Modelos e Métodos Numéricos en Ingeniería e Ciencias Aplicadas (MAP-UDC) • Centro de Investigación e Información Ambiental (CINAM) • Integrado de Inxeñería (ING-UDC) • Química Teórica e Computacional (QTC-USC) • Antenas (ANT-UVI) • Física No Lineal (FNL-USC) • High Performance Computing Group-Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA)
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"> • Modelización estatística e aplicacións (código USC: GI-1914) • Resolución numérica de ecuacións en derivadas parciais e simulación numérica na inxeñería (código USC: GI-1563) • Modelos Matemáticos e Simulación Numérica en Mecánica de Sólidos (código USC: GI-1564) • Modelización en Fluxos Hidrodinámicos (código USC: GI-1566) • Arquitectura de Computadores (código USC: GI-1638)

Nome	Financia	Estado 2008	Membros
			<ul style="list-style-type: none"> • Grupo de Ecuacións Diferenciais e Simulación Numérica (código UVIGO: MA1) • Optimización, Control e Modelado Numérico (código UVIGO: MA8) • Inferencia Estatística (código UVIGO: IO1) • Modelos e Métodos Numéricos en Inxeñería e Ciencias Aplicadas (código UDC: G000272) • Modelización e Inferencia Estatística. MODES • Arquitectura de Computadores (código UDC: G000265) • Fundación Centro de Supercomputación de Galicia (Fundación CESGA)
Rede 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"> • Biofarma-USC • Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) • Complex Systems Research Group-USC • Xenética de poboacións e citoxenética-UVI • Imedir-RNAsa- UDC • Mathbioinfo- USC • Medicina Xenómica-USC
Grid Computing in Chemistry: GRIDCHEM	COST	Execución	Entidades de 18 países europeos
INES- Iniciativa Española de Software e Servicios	Ministerio de Industria, Turismo e Comercio	Execución	136 empresas e institucións Españolas.
eMOV – Plataforma Tecnolóxica de Comunicacións Inalámbricas	Ministerio de Industria, Turismo e Comercio	Execución	136 organizacións españolas.
GIS-REDIX	Dirección Xeral de Promoción Científica e Tecnolóxica	Execución	Rede galega de investigación en Sistemas de información Xeográfica
REDOAPA, Red Temática para o Deseño e Obxectos de Aprendizaxe	Ministerio de Educación	Execución	Mais de 20 universidades españolas
EBSN	EU Comission, DG Enterprise and Industry	Execución	Austria, Bélxica, Bulgaria, Chipre, Dinamarca, Estonia, Finlandia, Francia, Alemaña, Grecia, Hungría, Irlanda, Italia, Letonia, Lituania, Luxemburgo, Malta, Holanda, Noruega, Polonia,

Nome	Financia	Estado 2008	Membros
			Portugal, Rumanía, Eslovaquia, Eslovenia, España, Suecia e Gran Bretaña
INSME	OECD & United Nations Industrial Development Organization	Execución	77 membros de 29 países en 5 continentes
Vindeira	Dirección Xeral de I+D+I (Xunta de Galicia)	Execución	Empresas Centros tecnolóxicos Grupos de investigación de universidade Institutos tecnolóxicos Organismos públicos de investigación Organismos de apoio á innovación Entidades financieras
NESSI Networked European Software and Services Initiative	Comisión Europea	Execución	366 membros, dos que 81 son compañías TIC, 91 Pymes, 180 organismos académicos e 14 usuarios. 22 socios, dos que 18 son da industria, 3 do mundo académico e 1 da comunidade de código aberto.

Resume 2008

O traballo na área de proxectos foi moi intenso. Presentáronse entre todas as unidades máis de 27 propostas nacionais, rexionais e europeas, cun índice de aceptación do 65%. Destacan dous feitos fundamentalmente: a firma dun contrato de investigación con HP Ibérica para o desenvolvemento de dous proxectos de investigación sobre tecnoloxías de HPC en colaboración coa Universidade de Santiago de Compostela e a Universidade da Coruña, co control por parte de HP Labs e as primeiras propostas internacionais da área de GIS (aínda que, neste caso, desafortunadamente sen éxito). Tamén creceu a participación en redes nacionais e internacionais así como un importante crecemento na produción científica resultado dos proxectos.

8.- Producción Científica.

8.1.- Producción Científica de usuarios de computación do CESGA.

Producción Científica Declarada polos Usuarios do CESGA por institución de procedencia e tipo.

CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS (CSIC).

Artigos Científicos Publicados

REHMMAN H, ARIAS-PALOMO E, HADDERS MA, SCHWEDE F, LLORCA O, BOL JL. 2008. Structure of Epac2 in complex with a cyclic AMP analogue and RAP1B. Nature. 455:124-127.

TORREIRA E, JHA S, LÓPEZ-BLANCO JR, ARIAS-PALOMO E, CHACÓN P, CAÑAS C, AYORA S, DUTTA, LLORCA O. 2008. Architecture of the pontin/reptin complex, essential in the assembly of several macromolecular complexes. Structure. 16(10): 1511-1520.

A. FERNÁNDEZ, F. CORZANA, J. H. BUSTO, J. M. PEREGRINA, A. AVENOZA. 2008. Non-natural Amino Acids as Modulating Agents of the Conformational Space of Model Glycopeptides. Chemistry-A European Journal, 14, 23: 7042-7058.

A. GARCÍA-VELA. 2008. Highly delocalized orbiting resonances. J. Chem. Phys. 129, 094307.

B. BUSSERY-HONVAULTt, F.DAYOU, A. ZANCHET. 2008. Long-range multipolar potentials of the 18 spin-orbit states arising from the C(P-3)+OH(X (2)Pi) interaction. J.Chem.Phys., 129: 234302.

C. IUGA, A. HERNÁNDEZ-LAGUNA, C.I. SAINZ-DÍAZ, A. VIVIER-BUNGE. 2008. Theoretical Study of the Reaction between OH Radicals and Formaldehyde adsorbed on Small Silica Clusters. Journal of Physical Chemistry C, 112, 4590 – 4600.

CAMPOS-MARTÍNEZ J, HERNÁNDEZ M.I, BARTOLOMEI M. 2008. Interactions and Collision Dynamics in O-2 + O-2. Theoretical Chemistry and Physics, 18, 387-401 (2008)

CÉDRIC TASSEL, JOSÉ MIGUEL PRUNEDA, NAOAKI HAYASHI, TAKASHI WATANABE, ATSUSHI KITADA, YOSHIHIRO TSUJIMOTO, HIROSHI KAGEYAMA, KAZUYOSHI YOSHIMURA, MIKIO TAKANO, MASAKAZU NISHI, KENJKI OHYAMA, MASAICHIRO MIZUMAKIi, NAOMI KAWAMURA, JORGE IÑIGUEZ, ENRIC CANADELL. 2009. "CaFeO2: A New Type of Layered Structure with Iron in a Distorted Square Planar Coordination". Journal of the American Chemical Society 2009 131 (1), 221-229.

D. BEN ABDALLAH, K .HAMMAMI, F. NAJAR, N. JAIDANE, Z. BEN LAKHDAR, M. L. SENENT. 2008. Low temperature rate constants for rotational excitations and de-excitations of C3 (1S) by collisions with He (1S). C. Chambaud and M.Hochlaf, ApJ, 686: 379-383.

- D. QUIÑONERO, A. FRONTERA, P. M. DEYÁ, I. ALKORTA, J. ELGUERO. 2008. "Interaction of positively and negatively charged aromatic hydrocarbons with benzene and triphenylene: Towards a model of pure organic insulators". *Chem.Phys. Lett.* 460, 406-410.
- D. R. OLGUÍN, M. VILLA, M. L. SENENT, M. A. MORA-DELGADO. 2008. Ethane internal rotation vibrational Hamiltonian. *Journal of Mexican Chemical Society*, 52(1):98-102.
- E, MOLINA-MONTES, D. DONAIO, A. HERNÁNDEZ-LAGUNA, C.I. SAINZ-DÍAZ, M. PARINELLO. 2008. DFT research on the dehydroxylation reaction of Pyrophyllite 1. Ab initio Molecular Dynamics Simulations. *Journal of Physical Chemistry B*, 112: 7051 - 7060.
- E, MOLINA-MONTES, D. DONAIO, A. HERNÁNDEZ-LAGUNA, C.I. SAINZ-DÍAZ. 2008. DFT research on the dehydroxylation reaction of Pyrophyllite II. Characterization of reactants, intermediates and transition states along the reaction paths. *Journal of Physical Chemistry A*, 112: 6373 - 6383.
- E. MOLINA-MONTES, V. TIMÓN, A. HERNÁNDEZ-LAGUNA, C. I. SAINZ-DÍAZ. 2008. The Fe³⁺-substitution effects on the dehydroxylation mechanisms in phyllosilicates by quantum mechanical methods. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 72: 3929 - 3938.
- ENRIQUE MARCOS, RAMÓN CREHUET, JOSEP M. ANGLADA. 2008. "Inductive and External Electric Field Effects in Pentacoordinated Phosphorus Compounds". *J. Chem. Theory Comput.*, 4 (1):49-63.
- ENRIQUE MARCOS, RAMÓN CREHUET, JOSEP M. ANGLADA. 2008. Inductive and External Electric Field Effects in Pentacoordinated Phosphorus Compounds. *J. Chem. Theory Comput.*, 4 (1), 49-63• DOI: 10.1021/ct700220z.
- F. BLANCO, I. ALKORTA, J. ELGUERO, V. CRUZ, B. ABARCA, R. BALLESTEROS. 2008. "[1,2,3]Triazololo[1,5-a]pyridines. A theoretical (DFT) study of the ring-chain isomerization". *Tetrahedron*, 64, 11150-11158.
- F. BLANCO, I. ALKORTA, J. ELGUERO. 2008. "The Structure of Alkali Metal Derivatives of Azoles: N?? versus ? Structures". *J. Phys. Chem. A*, 112, 7682-7688.
- F. BLANCO, M. SOLIMANNEJAD, I. ALKORTA, J. ELGUERO. 2008. "Inverse hydrogen bonds between XeH₂ and hydride and fluoride derivatives of Li, Be, Na and Mg". *Theor. Chem. Acc.* 121, 181-186.
- F. DANIEL, J. CERNICHARO. 2008. Solving radiative transfer with line overlaps using Gauss-Seidel algorithms. *A&A* 488, 1237-1247.
- F. DAYOU, P. LARREGARAY, L. BONNET. 2008. A comparative study of the Si+O⁻² -> SiO+O reaction dynamics from quasiclassical trajectory and statistical based methods. *J.Chem.Phys.*, 128: 174307.
- FERNANDEZ-TEJADA, A; CORZANA, F; BUSTO, JH. 2008. Non-natural amino acids as modulating agents of the conformational space of model glycopeptides. *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL* 14, 23: 7042-7058.

FERNANDO BLANCO, IBON ALKORTA, JOSÉ ELGUERO, VÍCTOR CRUZ, BELÉN ABARCA, RAFAEL BALLESTEROS. 2008. [1,2,3]Triazolo[1,5-a]pyridines. A theoretical (DFT) study of the ring-chain isomerization. *Tetrahedron* 64, 11150-11158.

FRAILE, JM; GARCÍA, JI; JIMENEZ-OSES, G. 2008. Surface confinement effects on enantioselective cyclopropanation. Reactions with supported chiral 8-oxazolinyquinoline-copper complexes. *ORGANOMETALLICS* 27, 10: 2246-2251.

FRANKE, KJ; SCHULZE, G; HENNINGSEN, N. 2008. Reducing the molecule-substrate coupling in C-60-based nanostructures by molecular interactions. *PHYSICAL REVIEW LETTERS*. Volume: 100 Issue: 3 Article Number: 036807.

HERRERA, C. M., P. BAZAGA. 2008. Population-genomic approach reveals adaptive floral divergence in discrete populations of a hawk moth-pollinated violet. *Molecular Ecology* 17, 5378-5390.

I. ALKORTA, F. BLANCO, J. ELGUERO. 2008. "Theoretical study of racemization in chiral alkenylidene truxenes". *J. Phys. Org. Chem.* 21, 381-386.

I. ALKORTA, J. ELGUERO, M. SOLIMANNEJAD. 2008. "Dihydrogen bond cooperativity in (HCCBeH)_n clusters". *J. Chem. Phys.* 129, 064115.

J. M. MARTÍN-GARCÍA, D. YLLANES, R. PORTUGAL. 2008. The Invar tensor package: differential invariants of Riemann. *Computer Physics Communications* 179 586-590, arXiv:0802.1274.

J. M. MARTÍN-GARCÍA. 2008. xPerm: fast index canonicalization for tensor computer algebra. *Computer Physics Communications* 179, 597-603, arXiv:0803.0862.

J. M. PRUNEDA, JORGE IÑIGUEZ, ENRIC CANADELL, HIROSHI KAGEYAMA, MIKIO TAKANO. "Structural and electronic properties of SrFeO₂ from first principles". *Phys. Rev. B* 78. 115101 (2008)

J. ORTEGA-CASTRO, N. HERNÁNDEZ-HARO, A. HERNÁNDEZ-LAGUNA, C.I. SAINZ-DÍAZ. 2008. DFT calculation of crystallographic properties of dioctahedral 2:1 phyllosilicates. *Clay minerals*, 43: 351 - 361.

J. REVUELTA, T. VACAS, M. TORRADO, F. CORZANA, M. MENENDEZ, C. GONZÁLEZ, J. JIMÉNEZ-BARBERO, A. BASTIDA, J. L. ASENSIO. 2008. NMR-Based Analysis of Aminoglycoside Recognition by the Resistance Enzyme ANT(4'): The Pattern of OH/NH₃⁺ Substitution Determines the Preferred Antibiotic Binding Mode and is Critical for Drug Inactivation. *Journal of the American Chemical Society*, 130, 15: 5086-5103.

J. SACRISTÁN, C.MIJANGOS. 2008. Influence of water content on Structure and Dynamics of Polyvinyl alcohol by means of Molecular dynamics simulations. *Journal of Chemical Physics* 129, 154907.

J. SACRISTÁN, C.MIJANGOS. 2008. A molecular dynamics Study of the Influence of Swelling Degree on the Structure and Dynamics of Polyvinyl alcohol Hydrogels. *Virtual Journal of Biological Physics Research*, 16, 9.

- JIMENEZ-OSSES, G; GARCÍA, JI; SILVA, AMG. 2008. Mechanistic insights on the site selectivity in successive 1,3-dipolar cycloadditions to meso-tetraarylporphyrins. *TETRAHEDRON* 64, 34: 7937-7943.
- JOSEP M. ANGLADA. 2008. The Gas Phase HO-Initiated Oxidation of Furan: A Theoretical Investigation on the Reaction Mechanism. *The Open Chemical Physics Journal*, 1, 80-93.
- M .L. SENENT, R. RUIZ, R. DOMINGUEZ-GÓMEZ, M. VILLA. 2009. Ab initio study of the far-infrared spectrum of ethyl methyl ether. *J.Chem.Phys.* 130 (6), 064101.
- M. AGÚNDEZ, J. P. FONFRÍA, J. CERNICHARO, J. R. PARDO, M. GUÉLIN. 2008. Detection of circumstellar CH₂CHCN, CH₂CN, CH₃CCH, and H₂CS. *A&A*, 479: 493-501.
- M. DOLORES DÍAZ, MARÍA DEL CARMEN FERNÁNDEZ-ALONSO, GABRIEL CUEVAS, F. JAVIER CAÑADA, JESÚS JIMÉNEZ-.BARBERO. 2008. On the role of aromatic-sugar interactions in the molecular recognition of carbohydrates: A 3D view by using NMR. *Pure and Applied Chemistry*, 80, 1827-1835
- M. NSANGOU, M. L. SENENT, M. HOCHLAF. 2009. Theoretical investigations of the cyanogen anion. *Chem.Phys.*, 355: 164-168.
- MANZANO, H; DOLADO, JS, GRIEBEL, M. 2008. A molecular dynamics study of the aluminosilicate chains structure in Al-rich calcium silicate hydrated (C-S-H) gels. *Physica status solidi A-applications and materials science*, 205 - 6: 1324-1329.
- MARTINEZ J., CRUZ V., RAMOS J., GUTIERREZ-OLIVA S., MARTINEZ-SALAZAR J., TORO-LABBE A. 2008. On the nature of the active site in bis(imino)pyridyl iron, a catalyst for olefin polymerization. *Journal of Physical Chemistry C*, 112, 5023-5028.
- N. INOSTROZA, J. R. LETELIER, P. FUENTEALBA, M.L.SENENT. 2008. Theoretical rovibrational spectrum of CF⁺. *Spectrochim. Acta A*, 71: 798-802.
- N. INOSTROZA, M. HOCHLAF, M.L. SENENT, R. LETELIER. 2008. Ab initio characterization of the linear SiC₃ isomers". *Astronomy & Astrophysics*, 486 (3), 1047-1052.
- O.YAZIDI, A. BEN HOURIA, Z. BEN LAKHDAR, M .L. SENENT, M. HOCHLAF. 2008. Electronic structure and spectroscopy of MgO₂⁺ cation. *Chemical Physics*, 348: 215-226.
- R. DE NALDA, J. DURÁ, A. GARCÍA-VELA, J.G. IZQUIERDO, J. GONZÁLEZ-VÁZQUEZ, L. BAÑARES. 2008. A detailed experimental and theoretical study of the femtosecond A-band photodissociation of CH₃I. *J. Chem. Phys.* 128, 244309.
- R. RURALI, E. WACHOWICZ, P. HYLDGAARD, P. ORDEJÓN. 2008. Band bending and quasi-2DEG in the metallized beta-SiC(001) surface *Physica Status Solidi - Rapid Research Letters* 2, 218.
- REHMANN H, ARIAS-PALOMO E, HADDERS MA, SCHWEDE F, LLORCA O, BOS JL. 2008 Sep 4. Structure of Epac2 in complex with a cyclic AMP analogue and RAP1B. *Nature*;455(7209):124-7.

S. LÓPEZ-LÓPEZ, R. PROSMITI and A. GARCÍA-VELA. 2008. Effect of the Excitation Energy on the (HI)₂ Nonadiabatic Photodissociation Dynamics. *J. Phys. Chem. A*, 112, 2762-2772.

S. LÓPEZ-LÓPEZ, R. PROSMITI, A. GARCÍA-VELA. 2008. Effect of the Excitation Energy on the (HI)₂ Nonadiabatic Photodissociation Dynamics. *J. Phys. Chem. A*, 112, 2762 (2008).

SOPHIE VANDENBUSSCHE, DOLORES DÍAZ, MARÍA CARMEN FERNÁNDEZ-ALONSO, WEIDONG PAN, STÉPHANE P. VINCENT, GABRIEL CUEVAS, FRANCISCO JAVIER CAÑADA, JESÚS JIMÉNEZ-BARBERO, KRISTIN BARTIK. 2008. Aromatic-Carbohydrate interactions: An NMR and Computational study of model systems. *Chemistry: an European Journal*, 14, 7570-7578

TORREIRA E, JHA S, LÓPEZ BLANCO JR, ARIAS-PALOMO E, CHACÓN P, CAÑAS C, AYORA S, DUTTA A, LLORCA O. 2008 Oct 8. Architecture of the pontin/reptin complex, essential in the assembly of several macromolecular complexes. *Structure*.16(10):1511-20.

Z. ZHANG, S. A. McCALLUM, J. XIE, L. NIETO, F. CORZANA, J. JIMÉNEZ-BARBERO, M. CHEN, J. LIU, R. J. LINHARDT. 2008. Solution structures of chemoenzymatically synthesized heparin and its precursors. *Journal of the American Chemical Society*, 130, 39: 12998-13007.

ZHENQING ZHANG, SCOTT A. McCALLUM, JIN XIE, LIDIA NIETO, FRANCISCO CORZANA, JESÚS JIMÉNEZ-BARBERO, MIAO CHEN, JIAN LIU, ROBERT J. LINHARDT. 2008. Solution Structures of Chemoenzymatically Synthesized Heparin and Its Precursors. *Journal of the American Chemical Society*, 130, 12998-13007.

Artigos Científicos In Press

S. GARCÍA-GIL, A. GARCÍA, N. LORENTE, P. ORDEJÓN. "Optimal strictly-localized basis sets for noble metal surfaces. *Physical Review B*.

REGLA AYALAA, ELIZABETH C. BERET, JOSÉ MANUEL MARTÍNEZ, RAFAEL R. PAPPALARDO, ADELA MUÑOZ-PÁEZA, ENRIQUE SANCHES MARCOS. The proceedings of Actinide XAS workshop 2008. Nuclear Science Committee of the OECD/NEA. 2008.

J. C. CONESA. 2008. "Surface anion vacancies on ceria: quantum modelling of mutual interactions and oxygen adsorption". *Catal. Today*.

GONZÁLEZ PÉREZ, ADAN; SILVA LÓPEZ, CARLOS; MARCO-CONTELLES, JOSÉ; FAZA, OLALLA; SORIANO, ELENA; DE LERA, ANGEL. "Mechanism of the Gold-Catalyzed Rearrangement of (3-Acyloxyprop-1-ynyl)oxiranes: a dual role of the catalyst". *Journal of Organic Chemistry*.

HEGOI MANZANO, JORGE S. DOLADO, ANDRÉS AYUELA. Aluminum incorporation to silicate chains of C-S-H gel. *Journal of Physical Chemistry*.

HEGOI MANZANO, JORGE S. DOLADO, ANDRÉS AYUELA. Elastic properties of the main species present in Portland cement pastes. *Acta Materialia*

HEGOI MANZANO, JORGE S. DOLADO, ANDRÉS AYUELA. Structural, Mechanical and Reactivity Properties of Tricalcium Aluminate Using First-principles Calculations. Journal of the American Ceramic Society.

J. A. JIMÉNEZ MADRID, A. M. MANCHO. 2009. "Distinguished trajectories in time dependent vector fields". CHAOS 19.

J. A. JIMÉNEZ MADRID, ANA M. MANCHO. 2009. Distinguished trajectories in time dependent vector fields. Chaos CHAOS 19, 013111. Published online.

J. SACRISTÁN, C MIJANGOS. 2009. Chemical crosslinking of Poly Vinyl Alcohol and prediction of material properties by means of fully Atomistic Molecular dynamics Simulation. Macromol. Theory Simul.

M.P. DE LARA-CASTELLS, A. O. Mitrushchenkov, G. Delgado-Barrio y P. Villarreal. 2008. Using a Jacobi-Davidson "nuclear orbital" method for small doped 3He clusters. Few Body Systems.

N. INOSTROZA, J. R. LETELIER, M.L.SENENT. 2008. On the Variational Solution of the Coupled Breathing Rotation-Vibration of a Spherical Top Molecule. J.Math.Chem. A2596.

Presentaciones en Congresos/Conferencias

2008 ECOLOGICAL SOCIETY OF AMERICA ANNUAL MEETING. Milwaukee, Wisconsin, (USA) 4 Agosto 2008. DANIEL B. STOUFFER. "Is food-web stability greater than the sum of its parts?". Presentación.

37th INORGANIC REACTION MECHANISMS GROUP MEETING. Barcelona (España), 01-08. JOSÉ I. GARCÍA, GONZALO JIMENEZ-OSÉS, JOSÉ A. MAYORAL. Performance of different functional in a difficult case reaction: Cu-catalyzed cyclopropanation of alkenes. Comunicación Oral.

4th INTERNATIONAL MEETING ON MOLECULAR ELECTRONICS. Grenoble, Francia. 2008. Manuel Cobián, F.D. Novaes, A. García, H. Ueba, P. Ordejón, N. Lorente. Electron transport simulations through organic adlayer on metal surfaces. Presentación.

ARENA EORKSHOP ON SPECTROSCOPY ON DOME C: "FROM UV TO SUB-MILLIMETRIC WAVELENGTHS". Granada, (España) 16-18 Abril 2008. M. L. SENENT. "Ab initio calculations of spectroscopic parameters". Presentación.

BULLETIN OF THE 61st ANNUAL MEETING OF THE APS DIVISION OF FLUID DYNAMICS. San Antonio TX November 2008. A.M. MANCHO, J. A. JIMENEZ MADRID. Generalized fixed points and the Lagrangian structure of time dependent geophysical flows. Presentación.

CONGRESO MEXICANO DE ECOLOGIA. Mérida. Yucatán. Noviembre.2008. MEDRANO MARTÍNEZ MÓNICA, GARRIDO SÁNCHEZ JOSÉ LUÍS, CASTELLANOS MARÍA CLARA, HERRERA MALIANI CARLOS M. Diferenciación local en rasgos vegetativos y florales en dos especies europeas del género Aquilegia (Ranunculaceae): una aproximación basada en técnicas genómicas. Presentación.

ESPA-2008. Mallorca(Spain) 2008. R. PROSMITI, A. VALDÉS, L. GARCÍA-GUTIERREZ, L. DELGADO-TELLEZ, P. VILLARREAL, G. DELGADO-BARRIO. Ab initio ground and electronic excited states of vdW HeI₂ cluster. Presentación.

ESPA-2008. Mallorca(Spain) 2008. R. PROSMITI. Ab initio Intermolecular Potentials and vibrational dynamics of Rg₂-dihalogen clusters Presentación.

EUROICE2008 AN EXPLORATORY WORKSHOP DE LA EUROPEAN SCIENCE FOUNDATION. Granada , 1-4 de Octubre 2008. N. HERNÁNDEZ HARO, V. TIMÓN, J. ORTEGA CASTRO, C.I. SAINZ DÍAZ, A. HERNÁNDEZ-LAGUNA. Theoretical study of ice films adsorbed on muscovite surface models. Presentación.

IBER 2008, IX IBERIAN JOINT MEETING ON ATOMIC AND MOLECULAR PHYSICS. 7-9 de Septiembre, 2008 Capuchos (Portugal). ALBERTO GARCÍA-VELA. Nonadiabatic photodissociation dynamics in (HI)₂ induced by intracluster collisions. Presentación.

IBER-2008. Capuchos (Portugal) 2008. G. DELGADO, R. PROSMITI, P. VILLARREAL, J.V. ALEMÁN, G. WINTER, J.S. MEDINA, B. GONZÁLEZ. Equilibrium molecular dynamics simulations of liquid water viscosities. Comunicación y póster.

ICCMSE-2008:COMPUTATIONAL QUANTUM CHEMISTRY: FROM ATOMS AND MOLECULES TO CLUSTERS AND NANO-OBJECTS. Crete(Greece). 2008. R. PROSMITI. HeI₂ vdW complex: ground and electronic excited surfaces for studying dynamics. Presentación.

II ENCUESTRO HPC - CSIC. Madrid (España) 3 de Junio de 2008. M. L. SENENT. "Cadenas carbonadas de interés astrofísico". Presentación.

MaCoMuFi 2nd Yearly meeting. Groningen (The Netherlands), 17-19 Noviembre 2008. JACEK C. WOJDEL. "Magnetoelectric response of compounds of the BiMO₃ family". Presentación.

MOLEC XVII, EUROPEAN CONFERENCE ON DYNAMICS OF MOLECULAR COLLISIONS. 23-28 de Agosto, 2008 San Petersburgo (Rusia). ALBERTO GARCÍA-VELA. Nonadiabatic Photodissociation Dynamics in Small Molecules and Clusters. Presentación.

MOLECULAR SPECTROSCOPY CONFERENCE. Ohio State University, (E.E.U.U) 2008. M .L. SENENT, M.HOCHLAF, H. MASSÓS. "Spectroscopy and structure of chains Type C_n, C_nH and C_nSi". Presentación.

MOLECULAR SPECTROSCOPY CONFERENCE. Ohio State University, (E.E.U.U) 2008. O.YAZIDI, A. BEN HOURIA, Z. BEN LAKHDAR, M. HOCHLAF, M. L. SENENT. . "Electronic structure and spectroscopy of the MgO₂⁺ cation". Presentación.

MOLECULAR SPECTROSCOPY CONFERENCE. Ohio State University, (E.E.U.U) 2008. R. RUIZ, M. L. SENENT, R. DOMÍNGUEZ-GÓMEZ, M. VILLA. "CCSD(T) Study of the Far-Infrared spectrum of dimethyl-ether", . Presentación.

STRUCTURAL, ELECTRONIC AND TRANSPORT PROPERTIES OF QUANTUM WIRES. Lyon - France 2008. FREDERICO D. NOVAES, S. GARCÍA, E. MACHADO, M. BRANDGYBE, A.J.R. DA SILVA, A. FAZZIO, E.Z. DA SILVA, P. ORDEJÓN. Impurities in metallic nanowires. Presentación.

WORKSHOP DE PHYSIQUE MOLÉCULAIRE: COLLISIONS RÉACTIVE ET NON RÉACTIVE. Túnez, Abril 2008. M .L. SENENT. "Ab initio calculations for spectroscopy and astrophysics". Presentación.

Posters en Congresos/Conferencias

7th EUROPEAN CONFERENCE ON COMPUTATIONAL CHEMISTRY. Venecia, 11-15 Sept. 2008. J.C. CONESA. "Quantum modelling of adsorbing sites and adsorbed O₂ species on ceria ". Poster.

WORKSHOP ON NONLINEAR PROCESSES IN OCEANIC AND ATMOSPHERIC FLOWS. Castro Urdiales del 2 al 4 de julio de 2008. JOSÉ ANTONIO JIMÉNEZ MADRID, ANA M. MANCHO. "Generalizing fixed points to aperiodic dynamical systems". Poster.

14th INTERNATIONAL WORKSHOP ON COMPUTATIONAL PHYSICS AND MATERIALS SCIENCE: TOTAL ENERGY AND FORCE METHODS. Trieste, 8-10 Enero 2009. LAURA ZOPPI, KIM BALDRIDGE, ALBERTO GARCÍA. Corannulene on Cu(111) surface: structure and properties using a first-principles theoretical approach. Poster.

14th INTERNATIONAL WORKSHOP ON COMPUTATIONAL PHYSICS AND MATERIALS SCIENCE: TOTAL ENERGY AND FORCE METHODS. Trieste, Italia.M. COBIÁN, F.D. NOVAESA, H. UEBAB, A. GARCÍA, P. ORDEJONC, N. LORENTEC. Electron transport simulations through organic adlayer on metal surfaces. Poster.

14th INTERNATIONAL WORKSHOP ON COMPUTATIONAL PHYSICS AND MATERIAL SCIENCE: TOTAL ENERGY AND FORCE METHODS. Trieste (Italy) 8-10/01/2009. OTTO E. GONZÁLEZ, JORGE ÍÑIGUEZ. Pressure induced structural, electronic and magnetic effects in BiFeO₃. Poster.

3ª JORNADA DE JOVENES INVESTIGADORES DE ARAGÓN. Zaragoza, 10 de diciembre de 2008. ISAURA OSPINO, OLGA CRESPO, CÉSAR DÍEZ, MARÍA, CONCEPCIÓN GIMENO, ANTONIO LAGUNA, MIGUEL MONGE. Estudio Fotofísico y Teórico de Complejos de Oro con el Anión [7,8-PPh₂-(7,8-C₂B₉H₁₉)]- como Ligando. Poster.

ESPA2008. Palma de Mallorca , 2-5 de Septiembre 2008. D. MUÑOZ-SANTIBURCIO, C.I. SAINZ DÍAZ, A. HERNÁNDEZ-LAGUNA. Theoretical study of adsorption of nitroorganic compounds on smectite models. Poster.

ESPA2008. Palma de Mallorca , 2-5 de Septiembre 2008. J. ORTEGA CASTRO, N. HERNÁNDEZ HARO, V. TIMÓN, C.I. SAINZ DÍAZ, A. HERNÁNDEZ-LAGUNA. DFT study of strains and elastic properties of muscovite. Poster.

ESPA2008. Palma de Mallorca , 2-5 de Septiembre 2008. N. HERNÁNDEZ HARO, V. TIMÓN, J. ORTEGA CASTRO, C.I. SAINZ DÍAZ, A. HERNÁNDEZ-LAGUNA. DFT study of the adsorption of films of partially ordered water on muscovite surface models. Poster.

ESPA2008. Palma de Mallorca , 2-5 de Septiembre 2008. VICENTE TIMÓN, NOEMÍ HERNÁNDEZ-HARO, JOAQUÍN ORTEGA-CASTRO, CLARO I. SÁINZ-DÍAZ, ALFONSO HERNÁNDEZ-LAGUNA. DFT band-gap study of Fe³⁺, Ga³⁺ and Ge⁴⁺ substitutions in 2:1 dioctahedral phyllosilicates. Poster.

IBER 2008, IX IBERIAN JOINT MEETING ON ATOMIC AND MOLECULAR PHYSICS. 7-9 de Septiembre, 2008 Capuchos (Portugal). A. GARCÍA-VELA. Highly Delocalized Orbiting Resonances in Ne-Br₂. Poster.

IBER 2008: 9th IBERIAN JOINT MEETING ON ATOMIC AND MOLECULAR PHYSICS. Capuchos (Portugal) 7-9 septiembre 2008. M. BARTOLOMEI, E. CARMONA-NOVILLO, J. PÉREZ RÍOS, M. I. HERNÁNDEZ, J. CAMPOS-MARTÍNEZ, R. HERNÁNDEZ-LAMONEDA. A theoretical study of the O₂-O₂ dimer: ab initio interaction potentials, bound states and scattering calculations. Poster y Comunicación oral.

MOLEC XVII, EUROPEAN CONFERENCE ON DYNAMICS OF MOLECULAR COLLISIONS. 23-28 de Agosto, 2008 San Petersburgo (Rusia). ALBERTO GARCÍA-VELA. Highly Delocalized Orbiting Resonances in Ne-Br₂. Poster.

THE 14th TOTAL ENERGY WORKSHOP. Trieste - Italy 2009. FREDERICO D. NOVAES, D. BILC, J. INIGUEZ, P. ORDEJÓN, P. GHOSEZ. Tunneling across a ferroelectric barrier: a first-principles study. Poster.

THE 15th INTERNATIONAL WORKSHOP ON OXIDE ELECTRONICS. Estes Park - U.S.A. 2008. FREDERICO D. NOVAES, D. BILC, J. INIGUEZ, P. ORDEJÓN, P. GHOSEZ. Tunneling across a ferroelectric barrier: a first-principles study. Poster.

WORKSHOP NONLINEAR PROCESSES IN OCEANIC AND ATMOSPHERIC FLOWS. Castro Urdiales, (Cantabria) Julio 2008. J. A JIMENEZ-MADRID, A.M. MANCHO. Generalizing fixed points to aperiodic dynamical systems Book of Abstracts. Poster.

ANNUAL MEETING & WORKSHOP OF THE COST NETWORK D41 "INORGANIC OXIDES: SURFACES AND INTERFACES". Barcelona, October 16-18, 2008. J.C. CONESA: "Electron localization effects and dioxygen activation on defective CeO₂(111) surfaces". Poster.

GOSPEL WORKSHOP ON SURFACE/ADSORBED OXYGEN ON METAL OXIDES - ROLE IN GAS SENSING AND CATALYSIS. Tübingen (Alemania), 9-10 June 2008. J.C. CONESA. "Quantum modelling of adsorbing sites and adsorbed dioxygen species on ceria". Poster.

ACTINIDE XAS WORKSHOP 2008. París 2008. R. AYALA, J.M. MARTÍNEZ, R.R. PAPPALARDO, A. MUÑOZ PÁEZ, E. SÁNCHEZ MARCOS. "Po (IV) Hydration: a Computational Study". Poster.

GORDON RESEARCH CONFERENCE ON THREE DIMENSIONAL ELECTRON MICROSCOPY. Barga (Lucca, Italia) Junio 2008. E. ARIAS-PALOMO, H. REHMANN, BOS, JL, O. LLORCA. EM structure of the Epac2-Rap-cAMP complex. Poster.

Tesis Dotorais Defendidas

ÁNGEL RIVERA CALZADA . Biología estructural de la reparación de roturas de doble cadena en el ADN. Madrid 2008. Director de tesis: Dr. Óscar Llorca Blanco. Calificación: Sobresaliente Cum Laude.

ERNESTO ARIAS PALOMO. Análisis estructural de proteínas reguladoras de GTPasas de la superfamilia Ras mediante microscopía electrónica. Madrid 2008. Director: Dr. Óscar Llorca Blanco. Calificación: Sobresaliente Cum Laude.

ESTHER MOLINA MONTE. Investigación mecano-cuántica de las reacciones de deshidratación y deshidroxilación en filosilicatos 2:1 dioctaédricos. Facultad de Ciencias de la Universidad de Granada. 15 de Mayo de 2008. Directores: Alfonso Hernández Laguna, Claro Ignacio Sainz Díaz. Sobresaliente "Cum Laude"

H. MASSÓ GONZALEZ. "Estudio espectroscópico ab initio de moléculas carbonadas. Cadenas C4, C5 y C6.". Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid, 14 de Marzo del 2008. Director: M.L.Senent. Calificación: Sobresaliente Cum Laude.

Tesis Doctoral de Ernesto Arias Palomo (Bioquímica y Biología Molecular) Título: Análisis estructural de proteínas reguladoras de GTPasas de la superfamilia Ras mediante microscopía electrónica. Fecha de defensa: 21 de Noviembre del 2008. Departamento de Bioquímica y Biología Molecular I. Universidad Complutense de Madrid.

Libros e Capítulos de Libro Publicados

J. CAMPOS-MARTÍNEZ, M. BARTOLOMEI, E. CARMONA-NOVILLO, MARTA I. HERNÁNDEZ, R. HERNÁNDEZ-LAMONEDA, F. DAYOU. 2008. Interactions and collision dynamics in O₂ + O₂ REF. *Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics*, Series: "Progress in Theoretical Chemistry and Physics", 18. Wilson, S.; Grout, P.J.; Maruani, J.; Delgado-Barrio, G.; Piecuch, P. (Eds.), Springer Netherland, 387-401. ISBN: 978-1-4020- 8706-6, DOI. 10.1007/978-1-4020-8707-3-18.

G. DELGADO-BARRIO, R. PROSMITI, P. VILLARREAL, G. WINTER, J.S. MEDINA, B. GONZÁLEZ, J.V. ALEMÁN, J.L. GOMEZ, P. SANGRÁ, J.J. SANTANA, M.E. TORRES. 2008. Viscosity of liquid water via equilibrium molecular dynamics simulations. *Progress in Theoretical Chemistry and Physics:Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics*, Springer (The Netherlands), 18, 351-362 ISBN 978-1-4020-8706-6.

R. PROSMITI, A. VALDES, L. GARCIA-GUTIERREZ, L. DELGADO-TELLEZ, P. VILLARREAL, G. DELGADO-BARRIO. 2008. HeI₂ vdW complex: {em Ab initio} potential energy surfaces for studying dynamics. *AIP Conference Proceedings*, in press.

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA (USC)

Artigos Científicos Publicados

A. MUÑOZ, C. DE LA CALLE, J. A. ALONSO, P. M. BOTTA, V. PARDO, D. BALDOMIR, J. RIVAS. 2008. Crystallographic and magnetic structure of SrCo₂O₇ brownmillerite: Neutron study coupled with bandstructure calculations. *Physical Review B*, A 78: 054404-1, 054404-8. ISBN: 1098.

A. ZHUKOV, C. GARCÍA, J.J. DEL VAL, J. GONZÁLEZ, M. KNOBEL, D. SERANTES, D. BALDOMIR, V. ZHUKOVA. 2008. Studies of Fe-Cu microwires with nanogranular structure. *Journal of Physics:Condensed Matter*, A 21: 035301- 035306. ISBN: 10.1088/0953-8984/21.

ALONSO MEIJIDE, J. M., CASAS MÉNDEZ, B., HOLLER, M. J., LORENZO FREIRE, S. 2008. Computing Power Indices: Multilinear extensions and new characterization. *European Journal of Operational Research* 188, 540-554.

ÁNGEL PIÑEIRO, GERARDO PRIETO, JÚAN M. RUSO. 2009. Surface films of short fluorocarbon-hydrocarbon diblocks studied by molecular dynamics simulations: Spontaneous formation of elongated hemimicelles. *Journal of Colloid and Interface Science* 329, 2: 351-356.

ANTONIO FERNÁNDEZ-RAMOS, RUBEN MEANA-PAÑEDA. 2008. Mechanisms of Double Proton Transfer. *Theory and Applications Zorka Smedarchina, Willem Siebrand, . Zeitschrift für Physikalische Chemie* 222, 8-9:1291

B. HERNANDO, J. L. SÁNCHEZ LLAMAZARES, J. D. SANTOS, LL. ESCODA, J.J. SUÑOL, R. VARGA, D. BALDOMIR, D. SERANTES. 2008. Thermal and magnetic field-induced martensite-austenite transition in Ni_{50.3}Mn_{35.3}Sn_{14.4} ribbons. *Applied Physics Letters*, A 92: 042504-1, 042504-4. ISBN: 0003-6951.

B. HERNANDO, J.L. SÁNCHEZ LLAMAZARES, J.D. SANTOS, LL. ESCODA, J.J. SUÑOL, R.VARGA, D. BALDOMIR, D.SERANTES. 2008. Magnetocaloric effect in melt spun Ni_{50.3}Mn_{35.5}Sn_{14.4}. *Applied Physics Letters*, A 92: 132507-1, 132507-3. ISBN: 0003-6951.

C. MATEO-MATEO, C. VÁZQUEZ-VÁZQUEZ, M.C. BUJÁN-NUÑEZ, M.A. LÓPEZ-QUINTELA, D. SERANTES, D. BALDOMIR, J. RIVAS. 2008. Synthesis and characterization of CoFe₂O₄-PVP nanocomposites. *Journal of non-crystalline solids A*, 354: 5236-5237. ISBN: 0022-3093.

C. VÁZQUEZ-VÁZQUEZ, M. LOVELLE, C. MATEO, M.A. LÓPEZ-QUINTELA, M.C. BUJÁN-NUÑEZ, D. SERANTES, D. BALDOMIR, J. RIVAS. 2008. Magnetocaloric effect and size dependence study of the magnetic properties of cobalt ferrite nanoparticles prepared by solthermal synthesis. *Physica Status Solidi(a)-Applications and Material Science*, A 205: 1358-1362. ISBN: ISSN:1862-6300.

CABALEIRO-LAGO, E. M.; PENA-GALLEGO, A.; RODRÍGUEZ-OTERO. 2008. Study of the interaction in clusters formed by phenol and CH₃X (X=CN,F,Cl) molecules. *J. Journal of Chemical Physics* 128, 194311/1.

CABALEIRO-LAGO, E. M.; RODRIGUEZ-OTERO, J.; PENA-GALLEGO. 2008. Characteristics of the interaction of azulene with water and hydrogen sulfide: A computational study A. *Journal of Chemical Physics* 129, 084305/1.

CABALEIRO-LAGO, E. M.; RODRÍGUEZ-OTERO, J.; PENA-GALLEGO. 2008. Computational Study on the Characteristics of the Interaction in Naphthalene ··· (H₂X)_n_{1,2} (X) O, S) Clusters A. *Journal of Physical Chemistry A*, 112, 6344.

CARPENTE RODRÍGUEZ, L., CASAS MÉNDEZ, B., GARCÍA JURADO, I. VAN DEN NOUWELAND, A. 2008. Coalitional interval games for strategic games in which players cooperate. *Theory and Decision* Vol. 65, 3:253-269.

CRISTINA NÚÑEZ, RUFINA BASTIDA, ALEJANDRO MACÍAS, MARTA MATO-IGLESIAS, CARLOS PLATAS-IGLESIAS, LAURA VALENCIA. 2008. A hexaaza macrocyclic ligand containing acetohydrazide pendants for Ln(III) complexation in aqueous solution. Solid-state and solution structures and DFT calculations. *Dalton Transactions* (29), 3841-3850

D. BALDOMIR, D. SERANTES, M. PEREIRO, J. RIVAS, C. VÁZQUEZ-VÁZQUEZ, M.C. BUJÁN-NÚÑEZ, J.E. ARIAS. 2008. Role of magnetic anisotropy in the magnetocaloric effect for a superparamagnetic nanoparticle system: a Monte Carlo study. *Physica Status Solidi(a)-Applications and Material Science A*, 205: 1343-1348. ISBN: ISSN:1862-6300.

D. BALDOMIR, V. PARDO, S. BLANCO-CANOSA, F. RIVADULLA, J. RIVAS, A. PIÑEIRO, J.E. ARIAS. 2008. Pressure-induced metal-insulator transition in MgV₂O₄. *Physica B*, A, 403: 1639-1641. ISBN: 0921-4526.

D. SERANTES, D. BALDOMIR, M. PEREIRO, J. RIVAS, C. VÁZQUEZ-VÁZQUEZ, M.C. BUJÁN-NÚÑEZ, J. E. ARIAS. 2008. Magnetic field-dependence study of the magnetocaloric properties of a superparamagnetic nanoparticle system: a Monte Carlo simulation. *Physica Status Solidi(a)-Applications and Material Science*, A 205: 1349-1353. ISBN: ISSN:1862-6300.

D. SERANTES, D. BALDOMIR, M. PEREIRO, J.E. ARIAS, C. MATEO-MATEO, M.C. BUJÁN-NÚÑEZ, C. VÁZQUEZ-VÁZQUEZ, J. RIVAS. 2008. Interplay between the magnetic field and dipolar interaction on a magnetic nanoparticle system: a Monte Carlo study. *Journal of non-crystalline solids A*, 354: 5224-5226. ISBN: 0022-3093.

EDUARDO JARDÓN-VALADEZ, ALFREDO ULLOA-AGUIRRE, ÁNGEL PIÑEIRO. 2008. Modeling and molecular dynamics simulation of the human gonadotropin-releasing hormone receptor in a lipid bilayer. *Journal of Physical Chemistry* 112, 34: 10704-10713 Published: 2008

G. FERNÁNDEZ-GARCÍA, PÉREZ-MUÑUZURI. 2008. Superdiffusive wave front propagation in a chemical active flow. *Eur. Phys. J. Special Topics* 165, 169-174.

G. FERNÁNDEZ-GARCÍA, D. I. RONCAGLIA, V. PÉREZ-VILLAR, A. P. MUÑUZURI, V. PÉREZ-MUÑUZURI. 2008. Chemical-wave dynamics in a vertically oscillating fluid layer. *Physical Review E* 77, 026204.

HOPPE, C. E.; RIVADULLA, F.; LÓPEZ-QUINTELA, M. A.; CARMEN BUJÁN, M.; RIVAS, J.; SERANTES, D.; BALDOMIR, D. 2008. Effect of Submicrometer Clustering on the Magnetic Properties of Free-Standing Superparamagnetic Nanocomposites. *Journal of Physical Chemistry C*, A 34: 13099-13104. ISBN: 1932- 7447.

J. BOTANA, M. PEREIRO, D. BALDOMIR, H. KOBAYASHI, J. E. ARIAS. 2008. Magnetic and electronic structure of nFe/3Cr/nFe slabs (n=1-6). *Thin Solid Films A*, 516: 5144-5149. ISBN: 0040-6090.

JAVIER LÓPEZ CACHEIRO, BERTA FERNÁNDEZ, ANTONIO RIZZO, BRANISLAV JANSÍK, THOMAS BONDO PEDERSEN. 2008. Theoretical pressure and dielectric second virial coefficients of CO-Ar. *Molecular Physics An International Journal in the Field of Chemical Physics*, 106, 881.

JESÚS A. VARELA, SILVIA G. RUBÍN, LUIS CASTEDO, CARLOS SAÁ. 2008. "Formal" and Standard Ruthenium-Catalyzed [2 + 2 + 2] Cycloaddition Reaction of 1,6-Diynes to Alkenes: A Mechanistic Density Functional Study. *Journal of Organic Chemistry* 73, 1320-1332.

JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO, ENRIQUE M. CABALEIRO-LAGO, ANGELES PEÑA-GALLEGO. 2008. Cation- π and anion- π interactions: Changes in aromaticity upon complexation. *Chemical Physics Letters* 452, 49-53.

JORGE BOTANA, MANUEL PEREIRO, DANIEL BALDOMIR, JUAN ENRIQUE ARIAS, KRZYSZTOF WARDA, LESZEK WOJTCZAK. 2008. Magnetic-dependent structure in eight-atom gold clusters. *Journal of Applied Physics*, A 103: 07B716-1, 07B716-3. ISBN: 0021-8978.

JORGE CARBALLIDO-LANDEIRA, IGAL BERENSTEIN, PABLO TABOADA, VICTOR MOSQUERA, VLADIMIR K. VANAG, IRVING R. EPSTEIN, VICENTE PÉREZ-VILLAR, ALBERTO P. MUÑUZURI. 2008. Long-lasting dashed waves in a reactive microemulsion. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 10, 1094-1096.

JOSÉ C. CLEMENTE, ARTHUR ROBBINS, PAULA GRAÑA, M. RITA PALEO, JUAN F. CORREA, M. CARMEN VILLAVARDE, F. JAVIER SARDINA, LAKSHMANAN GOVINDASAMY, MAVIS AGBANDJE-MCKENNA, ROBER MCKENNA, BEN DUNN, FREDY SUSSMAN. 2008. Design, synthesis, evaluation and crystallographic based structural studies of HIV-1 protease inhibitors with reduced response to the V82A mutation. *J. Med. Chem.*, 51, 852-860.

M. ALDEGUNDE, A.J. GARCÍA LOUREIRO, K.KALNA. 2008. "Development of a 3D Parallel Finite Element Monte Carlo Simulator for Nano-MOSFETs". *Lect. Notes Comput. Sc.* vol. 4818, pp. 115-122.

M. M. G. ALEMANY, LUIS TORTAJADA, XIANGYANG HUANG, MURILO L. TIAGO, L. J. GALLEGO, JAMES R. CHELIKOWSY. 2008. "Role of dimensionality and quantum confinement in p-type semiconductor indium phosphide quantum dots". *Physical Review B* 78, 233101.

M. MERCED MONTERO-CAMPILLO, JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO, ENRIQUE CABAILEIRO-LAGO. 2008. Theoretical Study of the [2+2+2+1] Cycloaddition Mechanism of Eneidyne and Carbon Monoxide Catalyzed by Rhodium *Journal of Physical Chemistry A*, 112, 2423-2427

M. OTERO-LEAL, F. RIVADULLA, M.GARCÍA-HÉRNANDEZ, A. PIÑEIRO, V. PARDO, D. BALDOMIR, J.RIVAS. 2008. Effect of spin fluctuation on the thermodynamic and transport properties of the itinerant ferromagnet CoS₂. *Physical Review B*, A 78: 180415-1, 180415-4. ISBN: 1098.

M. PEREIRO, D. BALDOMIR, J. BOTANA, J.E. ARIAS, K.WARDA, L.WOJTCZAK. 2008. Biomedical applications of small silver clusters. *Journal of Applied Physics A*, 103: 07A315-1, 07A315-3. ISBN: 0021-8978.

M. ALDEGUNDE, A.J. GARCÍA LOUREIRO, A. MARTINEZ, K.KALNA. 2008. "Tetrahedral elements in self-consistent parallel 3D Monte Carlo simulations of MOSFETs". *Journal of Computational Electronics*. vol. 7, issue 3, pp. 201-204.

M. ALDEGUNDE, N. SEOANE, A.J. GARCÍA LOUREIRO, P.V. SUSHKO, A.L. SHLUGER, J.L. GAVARTIN, K.KALNA, A. ASENOV. 2008. "Atomistic mesh generation for the simulation of nanoscale metal-oxide-semiconductor field-effect transistors". *Physical Review E*. Vol. 77, issue 5, pp. 056702.

M.C. BUJÁN-NÚÑEZ, N. FONTAÍÑA-TROTIÑO, C. VÁZQUEZ-VÁZQUEZ, M.A. LÓPEZ-QUINTELA, Y. PIÑEIRO, D. SERANTES, D. BALDOMIR J.RIVAS. 2008. Influence of the nanoparticle size on the blocking temperature of interacting systems: Monte Carlo simulations. *Journal of non-crystalline solids A*, 354:5222-5223. ISBN: 0022-3093.

M.M.G. ALEMANY, XIANGYANG HUANG, MURILO L. TIAGO, L. J. GALLEGU, JAMES R. CHELIKOWSKY. 2008. "Ab initio calculations for p-type doped bulk indium phosphide". *Solid State Communications* 146, 245.

MOLINA-RUIZ, R., SAIZ-URRA, L., RODRÍGUEZ-BORGES, J.E., PÉREZ-CASTILLO, Y., PÉREZ-GONZÁLEZ, M., GARCÍA-MERA, X. CORDEIRO, M.N.D.S. 2009. Toward the Rational Design of New Potent Cytotoxic Compounds: A TOPological Sub-Structural Molecular Design (TOPS-MODE)-QSAR Model Approach for Predicting the Antiproliferative Activity against Murine Leukemia Tumour Cell Line (L1210). *Bioorganic Medicinal Chemistry*, 17, 537-547.

MONTERO-CAMPILLO, M. M.; CABALEIRO-LAGO, E. M.; RODRIGUEZ-OTERO. 2008. A Density Functional Theory Study of Rhodium-Catalyzed Hetero-[5+2]-cycloaddition of Cyclopropyl Imine Derivatives and Alkynes. *J. Journal of Physical Chemistry A*, 112, 9068.

MONTERO-CAMPILLO, M. M.; CABALEIRO-LAGO, E. M.; RODRÍGUEZ-OTERO. 2008. A Theoretical Study of Pericyclic Rearrangements Catalyzed by Lithium. *J. Journal of Physical Chemistry A*, 112, 5218.

MONTERO-CAMPILLO, M. M.; RODRÍGUEZ-OTERO, J.; CABALEIRO-LAGO, E. M. 2008. On the mechanism of rhodium-catalyzed [6+2] cycloaddition of 2-vinylcyclobutanones and alkenes. *Tetrahedron*, 64, 6215.

MORALES-HELGUERA, A., RODRÍGUEZ-BORGES, J.E., FERNÁNDEZ, F., GARCÍA-MERA, X. CORDEIRO, M.N.D.S. 2007. Probing the Anticancer Activity of Nucleoside Analogues: A QSAR Model Approach Using an Internally Consistent Training Set. *Journal of Medicinal Chemistry*, 50, 1537-1545.

N. SEOANE, A.J. GARCÍA LOUREIRO, M. ALDEGUNDE. 2008. "Optimization of linear systems for 3D parallel simulation of semiconductor devices: Application to statistical studies ". *International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields*. On line.

PATRICIA MARTÍNEZ-BESCOS, FERNANDO CAGIDE-FAGÍN, LUIS F. ROA, JUAN CARLOS ORTIZ-LARA, KRZYSZTOF KIERUS, LIDIA OZORES-VITURRO, MARTA FERNÁNDEZ-GONZALEZ, RICARDO ALONSO. April 23, 2008. Synthesis, Structure, and E/Z Isomerization of α -(Hetero)aryl- β -nitro- γ,δ -enals. *J. Org. Chem.* 73 (10), pp 3745-3753.

R. C. LONGO, A. VEGA, S. BOUARAB, J. FERRER, M. M. G. ALEMANY, L. J. GALLEGU. 2008. "Possibility of collinear magnetic order in frustrated free-standing Fe₂Cr₄ clusters". *Physical Review B* 77, 212406.

R. C. LONGO, A. VEGA, S. BOUARAB, J. FERRER, M. M. G. ALEMANY, L. J. GALLEGU. 2008. Possibility of collinear magnetic order in frustrated free-standing Fe-Cr clusters. *Physical Review B*, 77: 212406-ss.

R. C. LONGO, M. M. G. ALEMANY, A. VEGA, J. FERRER. L. J. GALLEGU. 2008. "Engineering the magnetic structure of Fe clusters by Mn alloying", *Nanotechnology* 19, 245701.

R. C. LONGO, M. M. G. ALEMANY, J. FERRER, A. VEGA, L. J. GALLEGU. 2008. "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* 128, 114315.

R. C. LONGO, M. M. G. ALEMANY, J. FERRER, A. VEGA, L. J. GALLEGO. 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*, 128: 114315-ss.

R. VALÍN, A.J. GARCÍA LOUREIRO, N. SEOANE, M. ALDEGUNDE, C. SAMPEDRO, A.GODOY, F. GÁMIZ. 12/11/2008. "Parallel Implementation of a 2D DGSOI Monte Carlo Simulator Using OpenMP". DCIS 2008.

R. VALÍN, N. SEOANE, M. ALDEGUNDE, A. J. GARCÍA LOUREIRO. 17/09/2008 "Simulación Monte Carlo de dispositivos semiconductores en entornos HPC y HTC". *Jornadas de Paralelismo, Castellón*. pp. 139-144.

R.C. LONGO ,M.M.G. ALEMANY, A. VEGA, J. FERRER, L. J. GALLEGO. 2008. Engineering the magnetic structure of Fe clusters by Mn alloying. *Nanotechnology*, 19: 245701-ss.

RODRÍGUEZ-OTERO, J.; CABALEIRO-LAGO, E. M.; PENA-GALLEGO. 2008. Comment on "A Theoretical Investigation of the Interactions between Water molecules and Ionic Liquids". *A. Journal of Physical Chemistry B*, 112, 13465.

RODRÍGUEZ-OTERO, J.; MONTERO-CAMPILLO, M. M.; CABALEIRO-LAGO, E. M. 2008. Density Functional Theory Study of Ruthenium (II)-Catalyzed [2+2+2] Cycloaddition of 1,6-Diynes with Tricarbonyl Compounds *Journal of Physical Chemistry A*, 112, 8116.

S. BLANCO-CANOSA, F. RIVADULLA, A. PIÑEIRO, V. PARDO, D. BALDOMIR, D. I. KHOMSKII, M. M. ABD-ELMEGUID, M. A. LÓPEZ-QUINTELA, J. RIVAS. 2009. Enhanced Dimerization of TiOCl under Pressure: Spin-Peierls to Peierls Transition. *Physical Review Letters*, A 102: 056406-1, 056406-4. ISBN: 0031-9007.

SAÍZ-URRA, L., PÉREZ-CASTILLO, Y., PÉREZ-GONZÁLEZ, M., MOLINA-RUIZ, R., CORDEIRO, M.N.D.S., RODRÍGUEZ-BORGES, J.E. GARCÍA-MERA, X. 2009. Theoretical Prediction of Antiproliferative Activity against Murine Leukemia Tumor Cell Line (L1210). 3D-Morse Descriptor and its Application in Computational Chemistry. *QSAR & Combinatorial Science*, 28 (1), 98-110.

SILVIA PORTO, JOSÉ MANUEL SECO, JUÁN FÉLIX ESPINOS, EMILIO QUIÑOÁ, RICARDO RIGUERA. 2008. Resin-bound Chiral Derivatizing Agents for Assignment of Configuration by NMR Spectroscopy. *Journal of Organic Chemistry*, 73, 5714-572.

V. PARDO, P.M. Botta, D. BALDOMIR, J. RIVAS, A. PIÑEIRO, C. DE LA CALLE, J.A. ALONSO, J.E. ARIAS. 2008. Electronic structure of the antiferromagnetic phase of Sr₂Co₂O₅. *Physica B*, A 403: 1636-1638. ISBN: 0921-4526.

V. PARDO, S. BLANCO-CANOSA, F. RIVADULLA, D.I. KHOMSKII, D. BALDOMIR, HUA WU, J. RIVAS. 2008. Homopolar Bond Formation in ZnV₂O₄ Close to a Metal-Insulator Transition. *Physical Review Letters*. A, 101: 256403-1, 256403-4. ISBN: 0031-9007.

VÁZQUEZ LÓPEZ, M.; VÁZQUEZ, M.E.; GÓMEZ-REINO, C.; PEDRIDO, R.; BERMEJO, M.R. 2008. A metallo-supramolecular approach to a half-subtractor. *New Journal of Chemistry*. 32, 1473–1477.

VICTORIA LEIRO, JOSÉ MANUEL SECO , EMILIO QUIÑOÁ, RICARDO RIGUERA. 2008. Assigning the Configuration os Amino Alcohols by NMR: A Single Derivatization Method. *Organic Letters*, 10, 2733-2736.

VICTORIA LEIRO, JOSÉ MANUEL SECO , EMILIO QUIÑOÁ, RICARDO RIGUERA. 2008. Cross Interaction Between Auxiliaries: The Chirality of Amino Alcohols by NMR. *Organic Letters*, 10, 2729-2732

Artigos Científicos In Press

CRISTINA NÚÑEZ, MARTA MATO-IGLESIAS, RUFINA BASTIDA, ALEJANDRO MACÍAS, PAULO PÉREZ-LOURIDO, CARLOS PLATAS-IGLESIAS, LAURA VALENCIA. 2008. Solid-State and Solution Structure of Lanthanide(III) Complexes with a Flexible Py-N6 Macrocyclic Ligand. *European Journal of Inorganic Chemistry*. In press.

HUBERT CYBULSKI, PIORT S. ZUCHOWSKI, BERTA FERNÁNDEZ, JOANNA SADLEJ. 2008. The water-nitric oxide intermolecular potential-energy surface revisited. *Journal of Chemical Physics*, accepted.

JOSÉ MARÍA ALONSO MEIJIDE, JESÚS MARIO BILBAO, BALBINA CASAS MÉNDEZ, JULIO R. FERNÁNDEZ. 2008. Weighted multiple majority games with unions: generating functions and applications to the European Union. *European Journal of Operational Research*.

LORENZO FREIRE, S.; CASAS MÉNDEZ, B.; HENDRICKX, R. 2009 The two-stage constrained equal awards and losses rules for multi-issue allocation situations. Aceptado en TOP, An Official Journal of the Spanish Society of Statistics and Operations Research.

SÁNCHEZ-PEDREGAL, V.; SANTAMARÍA-FERNÁNDEZ, R.; NAVARRO-VÁZQUEZ, A ; Residual Dipolar Coupling of Freely Rotating Groups in Small molecules. Stereochemical Assignment and Side-Chain Conformation of 8-Phenylmenthol. *Organic Letters*. In Press

Presentacións en Congresos/Conferencias

FISES2008. Salamanca. GUILLERMO FÉRNANDEZ GARCÍA, VICENTE PÉREZ MUÑUZURI, V. PÉREZ-VILLAR. Experimento de Faraday en medio activo. Difusión anómala. Presentación.

12th INTERNATIONAL ELECTRONIC CONFERENCE ON SYNTHETIC ORGANIC CHEMISTRY (ECSOC-11). 1-30 de novembro de 2008. SAÍZ-URRA, L., PÉREZ-CASTILLO, Y., PÉREZ-GONZÁLEZ, M., MOLINA Ruíz, R., CORDEIRO, M.N.D.S., RODRÍGUEZ-BORGES, J.E, GARCÍA-MERA, X. Theoretical Prediction of Antiproliferative Activity against Murine Leukemia Tumor Cell Line (L1210). 3D-Morse Descriptors and its Application in Computational Chemistry. Presentación.

19th IUPAC INTERNATIONAL CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY (ICPOC-19). Santiago de Compostela 2008. BEGOÑA PAMPÍN, FERNANDO FERNÁNDEZ, AMALIA ESTÉVEZ, RAQUEL G. SOENGAS, FREDY SUSSMAN, JUÁN C. ESTÉVEZ, RAMÓN J. ESTÉVEZ. Synthetic and "in silico" approaches for the study of stereocontrolled generation of five member carbocycles and heterocycles from carbohydrates through chiral templates. Póster Congreso.

AGU 2008 FALL MEETING. San Francisco, 15-19 December 2008. ALEXANDRE RÍOS ENTENZA, GONZALO MIGUEZ MACHO. Regional Climate Simulations of the Hydrological Cycle in the Iberian Peninsula with WRF model. Presentación.

EGU (EUROPEAN GEOSCIENCES UNION) GENERAL ASSEMBLY. Viena, (Austria) 2008. LUCÍA GESTAL SOUTO, GONZALO MÍGUEZ MACHO. "A high resolution calculation of the climatology water table depth and the climatology soil moisture profile for Europe: does the water table matter?". Presentación.

ESPA 2008. Palma de Mallorca, (Spain). ANGELIKA BARANOWSKA, BERTA FERNÁNDEZ RODRÍGUEZ, ANTONIO RIZZO, BRANISLAV JANSIK. The CO-Ne van der Waals complex intermolecular potential energy surface, polarizability and virial coefficients. Silvia Bouzon, Berta Fernandez Rodriguez, Henrik Koch, Peter Felker, Ground state benzene-argon intermolecular potential energy surface. Presentación.

I XORNADA GALEGA DE BIOINFORMÁTICA. A Coruña, 4 Abril 2008. P. BROCCOS, N. DÍAZ-VERGARA, A. VILLA, A. E. MARK, A. PIÑEIRO. Potential of mean force calculations for the formation of native cyclodextrins-based complexes. Presentación.

IV BIENAL DEL GERMN/ I REUNIÓN IBÉRICA DE RMN. Sevilla, 2008. ARMANDO NAVARRO-VÁZQUEZ. A general toolkit for computation of NMR properties: development and applications. Presentación.

MARCH MEETING (OF THE AMERICAN PHYSICAL SOCIETY). New Orleans, (EE.UU) Marzo 2008. M.M.G. ALEMANY, XIANGYANG HUANG, MURILO L. TIAGO, L. J. GALLEGO, JAMES R. CHELIKOWSKY. "Ab initio calculations for the electronic properties of zinc-doped indium phosphide nanowires". Presentación.

XI ENCUENTRO PEPTÍDICO IBÉRICO. Santiago de Compostela 2008. FREDY SUSSMAN, M. CARMEN VILLAVERDE, JUÁN C. ESTÉVEZ, RAMÓN J. ESTÉVEZ. Predicting the folding properties of homooligomers of cyclopentane beta-amino acids. Comunicación oral.

XIX Jornadas de Paralelismo. 2008. A.J.García Loureiro, M.Aldegunde, N. Seoane. "Paralelización de un simulador de arrastre-difusión con correcciones cuánticas aplicado al estudio de transistores MOSFET". pp. 127-132. Presentación.

Posters en Congresos/Conferencias

"22nd GENERAL CONFERENCE OF THE CONDENSED MATTER DIVISION OF THE EUROPEAN PHYSICAL SOCIETY". Roma del 25 al 29 de agosto de 2008. JESÚS CARRETE, JUÁN CARLOS REBOREDO, LUIS MIGUEL VARELA. "Transition Between Non-Gaussian and Gaussian Stock Market Behaviour After Informational Shocks: Complex Network Analysis". Poster.

"8th ANNUAL MEETING OF THE EUROPEAN METEOROLOGICAL SOCIETY". Amsterdam octubre de 2008. MARTINEZ, A.; MIGUEZ-MACHO, G. "Regional Model climatic simulation of Western Europe and the Iberian Peninsula for th Ensembles Project emissions scenario". Poster.

13th INTERNATIONAL CONFERENCE AND SURFACE AND COLLOID SCIENCE. Columbia University in New York City, NY June 14 – 19, 2009. FÉLIX SARMIENTO, ÁNGEL PIÑEIRO, GERARDO PRIETO, JUÁN M. RUSO, PEDRO V. VERDES, ELENA BLANCO, PAULA TOIMIL, PAULA MESSINA. Short (Perfluoroalkyl)Alkyl Diblocks Studied by Axisymmetric Drop Shape Analysis-Based Surface Balance and Molecular Dynamics Simulations. Poster.

17th INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON SURFACTANTS IN SOLUTION. Berlin, 18-22 Agosto 2008. P. BROCCOS, A. PIÑEIRO, A. AMIGO, J. GRACIA-FADRIQUE. Revisiting positive aneotropy. Poster.

19th IUPAC CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. Santiago de Compostela (España) 13-18/07/2008. ENRIQUE M. CABALEIRO-LAGO, JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO, ANGELES PEÑA-GALLEGO. A computational study of the interaction of indole analogs with h₂o and h₂s. Poster.

19th IUPAC CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. Santiago de Compostela (España) 13-18/07/2008. JORGE A. CARRAZANA-GARCÍA, ENRIQUE M. CABALEIRO-LAGO, JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO. Computational study of the interaction of water and hydrogen sulfide with fused benzene rings. Poster.

19th IUPAC CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. Santiago de Compostela (España) 13-18/07/2008. JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO, ENRIQUE M. CABALEIRO-LAGO, ANGELES PEÑA-GALLEGO, M. M. MONTERO-CAMPILLO. A DFT Study of the interaction of Ferrocene with Lithium cation. Poster.

19th IUPAC CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. Santiago de Compostela (España) 13-18/07/2008. M. MERCED MONTERO-CAMPILLO, JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO, ENRIQUE M. CABALEIRO-LAGO. On the mechanism of Ru(II)-catalyzed [2+2+2] cycloaddition of 1,6-diynes and tricarbonyl compounds: A DFT study. Poster.

22nd GENERAL CONFERENCE OF THE CONDENSED MATTER DIVISION OF THE EUROPEAN PHYSICAL SOCIETY (CMD22). Roma, Italia, (2008). ROBERTO LONGO, MANUEL ALEMANY, ANDRES VEGA JAIME FERRER, LUIS GALLEGO. Engineering the magnetic structure of Fe clusters by Mn alloying. Poster.

6th CONGRESS ON ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS (ESPA 2008). Palma de Mallorca (España) 2-5 Septiembre 2008. J.J NOGUEIRA, E. MARTÍNEZ NÚÑEZ, J.M.C. MARQUES, A. VÁZQUEZ. Chemical dynamics simulations of silylions scattering off a fluorinated self-assembled monolayer surface. Poster.

ECSOC 2008. Lugo 01-30/11/2008. ENRIQUE M. CABALEIRO-LAGO, JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO, ANGELES PEÑA-GALLEGO, M. MERCED MONTERO-CAMPILLO. Study of the interaction between aniline and CH₃CN, CH₃Cl and CH₃F. Poster.

ECSOC 2008. Lugo 01-30/11/2008. JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO, ENRIQUE M. CABALEIRO-LAGO, ANGELES PEÑA-GALLEGO, M. MERCED MONTERO-CAMPILLO. Study Of The Lithium Cation-Ferrocene Interaction By DFT Calculations: An In-Depth Analysis Of The Existence Of A Planetary System. Poster.

ECSOC 2008. Lugo 01-30/11/2008. M. MERCED MONTERO-CAMPILLO, JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO, ENRIQUE M. CABALEIRO-LAGO. Selectivity of the Ru(II)-Catalyzed [2+2+2] Cycloaddition of 1,6-Diynes and Tricarbonyl Compounds. Poster.

ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS (ESPA) 2008. Palma de Mallorca (España) 02-05/09/2008. ANGELES PEÑA-GALLEGO, DANIELA JOSA, ENRIQUE CABALEIRO-LAGO, JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO. Study of the effects of cations on the inversion barrier and aromaticity of phosphole. Poster.

ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS (ESPA) 2008. Palma de Mallorca (España) 02-05/09/2008. CEILA FONG-PADRÓN, JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO, ENRIQUE M. CABALEIRO-LAGO, AMÉRICA GARCÍA. A theoretical study of the mechanism of imidazole formation catalyzed by the ionic liquid [Hbim]BF₄. Poster.

ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS (ESPA) 2008. Palma de Mallorca (España) 02-05/09/2008. DANIELA JOSA, ANGELES PEÑA-GALLEGO, JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO, ENRIQUE M. CABALEIRO-LAGO. Theoretical study of the aromaticity of phospholes. Poster.

ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS (ESPA) 2008. Palma de Mallorca (España) 02-05/09/2008. VALENTINA ERASTOVA, JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO, ENRIQUE M. CABALEIRO-LAGO, ANGELES PEÑA-GALLEGO. An ab initio and dft study of the mechanism of the unimolecular elimination of α,β -unsaturated aldehydes in the gas phase. Poster.

ESPA 2008, THE 6TH CONGRESS ON ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS (ESPA). Palma de Mallorca (Balearic Islands - Spain) September 2 to 5, 2008. CEILA FONG PADRÓN, JESÚS RODRÍGUEZ OTERO, ENRIQUE M. CABALEIRO LAGO, AMERICA GARCÍA. "A Theoretical study of the mechanism of Imidazole formation catalyzed by the Ionic liquid [HBIM]BF₄". Poster.

ESPA 2008. Palma de Mallorca (España) Sept 2008. SILVIA BOUZÓN, BERTA FERNÁNDEZ, HENRIK KOCH, PETER FELKER. Ground State Benzene-Argon Intermolecular Potential Energy Surface. Poster.

I XORNADA GALEGA DE BIOINFORMÁTICA. A Coruña, 4 Abril 2008. P. BROCOS, N. DÍAZ-VERGARA, A. VILLA, A. E. MARK, A. PIÑEIRO. Potential of mean force calculations for the formation of native cyclodextrins-based complexes. Poster.

INTERNATIONAL CONFERENCE ON SIMULATION OF SEMICONDUCTOR PROCESSES AND DEVICES (SISPAD 2008). Hakone (Japan) 2008. M. ALDEGUNDE, A.J. GARCÍA LOUREIRO, A. MARTINEZ, K.KALNA. "3D Monte Carlo Simulation of Tri-Gate MOSFETs Using Tetrahedral Finite Elements". pp. 153-156. Poster.

INTERNATIONAL WORKSHOP ON OPERATIONS RESEARCH. Madrid, junio 2008. LUISA CARPENTE, BALBINA CASAS, JAVIER GOZÁLVEZ, NATIVIDAD LLORCA, MANUEL PULIDO, JOAQUÍN SÁNCHEZ-SORIANO. Bankruptcy problems with non linear utilities of the agents. Poster.

IV BIENAL DEL GERMN/ I REUNIÓN IBÉRICA DE RMN. Sevilla, 2008. R. SANTAMARIA-FERNÁNDEZ, V. SÁNCHEZ-PEDREGAL, A. NAVARRO-VÁZQUEZ. May external alignment be described by a single tensor. Quinine as a test study. Poster.

IV BIENAL DEL GERMN/ I REUNIÓN IBÉRICA DE RMN. Sevilla, 2008. V. SÁNCHEZ-PEDREGAL, R. SANTAMARÍA-FERNÁNDEZ, A. NAVARRO-VÁZQUEZ. Using Free Rotating Groups in RDC analysis of Small Molecules. Poster.

MARCH MEETING (OF THE AMERICAN PHYSICAL SOCIETY). New Orleans, (EE.UU) Marzo 2008. L. J. GALLEGO, M. M. G. ALEMANY, R.C. LONGO, D.J. GONZÁLEZ, L. E. GONZÁLEZ MURILO, L. TIAGO, JAMES R. CHELIKOWSKY. "Ab initio molecular dynamics simulations of the static, dynamic and electronic properties of liquid lead". Poster.

MARCH MEETING (OF THE AMERICAN PHYSICAL SOCIETY). New Orleans, (EE.UU) Marzo 2008. R. C. LONGO, M. M. G. ALEMANY, J. FERRER, A. VEGA, L. J. GALLEGO. "Ab initio study of the possibility of noncollinear magnetism in small Mn clusters". Poster.

MARCH MEETING OF THE AMERICAN PHYSICAL SOCIETY. New Orleans, (USA) 2008. ROBERTO C. LONGO, MANUEL ALEMANY, JAIME FERRER, ANDRES. VEGA, LUIS J. GALLEGO. Ab initio study of the possibility of noncollinear magnetism in small Mn clusters. Poster.

MARCH MEETING OF THE AMERICAN PHYSICAL SOCIETY. New Orleans, (USA) 2008. ROBERTO C. LONGO, MANUEL ALEMANY, LUIS J. GALLEGO, D. J GONZÁLEZ, L.E. GONZÁLEZ, MURILO L. TIAGO, JAMES R. CHELIKOWSKY. Ab initio molecular dynamics simulations of the static, dynamic and electronic properties of liquid Pb. Poster.

THE 22nd GENERAL CONFERENCE OF THE CONDENSED MATTER DIVISION OF THE EUROPEAN PHYSICAL SOCIETY. Roma, (Italia) 2008. R.C. LONGO, M. M. G. ALEMANY, A. VEGA, J. FERRER, L. J. GALLEGO. "Engineering the magnetic structure of Fe clusters by Mn alloying". Poster.

THE XIV INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON SMALL PARTICLES AND INORGANIC CLUSTERS. Valladolid, (España), 2008. M.M.G. ALEMANY, LUIS TORTAJADA, XIANGYANG HUANG, MURILO L. TIAGO, L. J. GALLEGO, JAMES R. CHELIKOWSKY. "The role of dimensionality and quantum confinement in p-type semiconductor nanomaterials: a first-principles study based on a real-space implementation of DFT". Poster.

WATOC 2008. Sydney (Australia) 14-19/09/2008. ENRIQUE M. CABALEIRO-LAGO, JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO, ANGELES PEÑA-GALLEGO. Computational study of the solvent effect upon the interaction between guanidinium cation and aromatic systems. Poster.

WATOC 2008. Sydney (Australia) 14-19/09/2008. JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO, ENRIQUE M. CABALEIRO-LAGO, ANGELES PEÑA-GALLEGO. Theoretical Study of the Solvent Effect on the Interaction between Pyridinium Cation and Benzene. Poster.

XXXIV CONGRESSO DEI CHIMICI TEORICI DI ESPRESSIONE LATINA. Cetraro (Italia) 03-08/07/2008. M. MERCED MONTERO-CAMPILLO, JESÚS RODRÍGUEZ-OTERO, ENRIQUE M. CABALEIRO-LAGO. Estudio teórico de la cicloadición [2+2+2] de 1,6-dienes y compuestos tricarbonílicos catalizada por rutenio. Poster.

Tesis Doutorais Defendidas

GUILLERMO FERNÁNDEZ GARCÍA. Estructura espacio-temporal en sistemas de reacción-difusión-advección. Universidad de Santiago de Compostela Octubre 2008. Directores V. Pérez Villar y V. Pérez Muñuzuri.

M. MERCED CAMPILLO. Estudio teórico de reacciones pericíclicas catalizadas por litio y cicloadiciones multicomponente catalizadas por rodio y rutenio. Universidad de Santiago de Compostela Facultad/Escuela: Química Física. Fecha: Diciembre 2008. Directores: Jesús Rodríguez Otero, Enrique M. Cabaleiro Lago. Calificación: Sobresaliente Cum Laude.

Proxectos Fin de Carreira e Tesinas

CRISTINA JÁCOME RÓDRIGUEZ. Implementación de algoritmos para la optimización de turnos y rutas de cosechadoras en una cooperativa agraria. Ingeniería Técnica en Informática de Sistemas. Diciembre, 2008. Director: María Luisa Carpena Rodríguez. Calificación: Sobresaliente (952).

LUIS TORTAJADA LAVIN. Estudio del confinamiento cuántico tridimensional de los estados electrónicos en nanocristales de InP puros y dopados con Zn utilizando técnicas de simulación ab initio. Facultad de Fisicas de la Universidad de Santiago de Compostela 12/09/2008. Calificación: Sobresaliente

RAÚL VALÍN FERREIRO. Paralelización con OpenMP de un simulador Monte Carlo de dispositivos DGSOI. Universidad de Santiago de Compostela, Mayo 2008. Directores: Antonio Jesús García Loureiro, Natalia Seoane Iglesias. Calificación: Sobresaliente.

Libros e Capítulos de Libro Publicados

SAAVEDRA, S.; MÉNDEZ, M.R.; SOUTO, J.A.; BERMÚDEZ, J.L.; VELLÓN, M.; COSTOYA, M. 2008. Regional transport of tropospheric ozone: a case study in the northwest coast of Iberian Peninsula. Air Pollution Modeling and its Application XIX, Ed. Springer, ISBN 978-1-4020-8451-5, pp. 667-668, 2008.

UNIVERSIDADE DA CORUÑA (UDC)

Artigos Científicos Publicados

ANA ARDÁ, RAQUEL GONZÁLEZ-SOENGAS, M. ISABEL NIETO, CARLOS JIMÉNEZ, JAIME RODRÍGUEZ. 2008. Total Synthesis of (-)-Dysithiazolamide. Organic Letters, 11, 2175-78.

CARLOS TEIJEIRO BARJAS, GUILLERMO LÓPEZ TABOADA, JUAN TOURIÑO DOMÍNGUEZ, BASILIO B. FRAGUELA RODRÍGUEZ, RAMÓN DOALLO BIEMPICA, JOSÉ CARLOS MOURIÑO GALLEGRO, ANDRÉS GÓMEZ TATO, IGNACIO LÓPEZ CABIDO. 2008. "Evaluación del Rendimiento de las Comunicaciones Colectivas en UPC". XIX Jornadas de Paralelismo (JP08) - Castellón (España).

CRISTINA NÚÑEZ, RUFINA BASTIDA, ALEJANDRO MACÍAS, MARTA MATO-IGLESIAS, CARLOS PLATAS-IGLESIAS, LAURA VALENCIA. 2008. "A hexaaza

macrocyclic ligand containing acetohydrazide pendants for Ln(III) complexation in aqueous solution. Solid state and solution structures and DFT calculations". Dalton Transactions, 3841-3850.

D. R. RAMOS, M. V. GARCÍA, M. CANLE L., J. A. SANTABALLA, P. G. FURTMÜLLER, C. OBINGER. 2008. Myeloperoxidase-catalyzed chlorination: the quest for the active species. Journal of Inorganic Biochemistry doi:10.1016/j.jinorgbio.

DAVID ESTEBAN-GÓMEZ, CARLOS PLATAS-IGLESIAS, ANDRÉS DE BLAS, LUIGI FABBRIZZI, TERESA RODRÍGUEZ-BLAS. 2008. "Protonated Macrobicyclic Hosts Containing Pyridine Head Units for Anion Recognition". Chemistry European Journal, 14, 5829-5838.

DOLORES ABELLA, VÍCTOR BLANCO, ELENA PÍA, MARCOS CHAS, CARLOS PLATAS-IGLESIAS, CARLOS PEINADOR, JOSÉ M. QUINTELA. "Steroselective Self-Assembly of Atropisomeric Pd(II) Metallocycles with Quinoline Moieties Induced by an Aromatic Guest". Chemical Communications, 2879-2881.

GUILLERMO L. TABOADA, JUAN TOURIÑO, RAMÓN DOALLO. November 2008. "Java Fast Sockets: Enabling High-speed Java Communications on High Performance Clusters". Computer Communications, Vol. 31, No. 17, pp. 4049-4059,

JAVIER JESÚS POZA, CARLOS JIMÉNEZ, JAIME RODRÍGUEZ. 2008. J-Based Analysis and DFT-NMR Assignments of Natural Complex Molecules: Application to 3beta, 7-Hydroxy-5,6-epoxycholestanes. European Journal of Organic Chemistry, 3960-69.

JAVIER JESUS POZA, ROGELIO FERNANDEZ, FERNANDO REYES, JAIME RODRIGUEZ, CARLOS JIMENEZ. 2008. Isolation, Biological Significance, Synthesis, and Cytotoxic Evaluation of New Natural Parathiosteroids A-C and Analogues from the Soft Coral Paragorgia sp. Journal of Organic Chemistry, 73, 7978-84.

KRISTINA DJANASHVILI, CARLOS PLATAS-IGLESIAS, JOOP A. PETERS. 2008. "The structure of the lanthanide aquo ions in solution as studied by 170 NMR spectroscopy and DFT calculations". Dalton Transactions, 602-607.

LOIČ CHARBONNIÈRE, SAMIR MAMERI, PASCAL KADJANE, CARLOS PLATAS-IGLESIAS, RAYMOND ZIESSEL. 2008. "Tuning the Coordination Sphere around Luminescent Lanthanide Complexes for Anion Sensing". Inorganic Chemistry, 47, 3748-3762.

MARINA GONZÁLEZ-LORENZO, CARLOS PLATAS-IGLESIAS, MARTA MATO-IGLESIAS, DAVID ESTEBAN-GÓMEZ, ANDRÉS DE BLAS, TERESA RODRÍGUEZ-BLAS. 2008. Conformation Study of Lanthanide(III) complexes of N-(2-salicylaldiminatobenzyl)-1-aza-18-crown-6 by using X-ray and ab Initio Methods. Polyhedron., 27, 1415-1422.

MARTA MATO-IGLESIAS, ADRIÁN ROCA-SABIO, ZOLTÁN PÁLINKÁS, DAVID ESTEBAN-GÓMEZ, CARLOS PLATAS-IGLESIAS, ÉVA TÓTH, ANDRÉS DE BLAS, TERESA RODRÍGUEZ BLAS. 2008. "A New Structural Entry for the Design of MRI Contrast Agents Based on a 1,7-Diaza-12-crown-4 Platform Containing Picolinate Pendants". Inorganic Chemistry, 47, 7840-7851.

OLGA BLANCO, CRISTINA PATO, MARÍA RUIZ, VICENTE OJEA. 2008. Access to pyrrolidine imino sugars via tin(II)-mediated aldol reactions of bislactim ethers:

synthesis of 2,5-dideoxy-2,5-imino-D-glucitol. *Organic & Biomolecular Chemistry* L 6: 3967-3969.

R. G. SOENGAS, M. LARROSA, M. BALADO, J. RODRÍGUEZ, M. L. LEMOS, CARLOS JIMÉNEZ. 2008. Synthesis and Biological Activity of Analogues of Vancomycin, a Siderophore from *Vibrio anguillarum* serotype O2. *Organic Biomolecular Chemistry*, 6, 1278-87.

RAQUEL FERREIRÓS-MARTÍNEZ, DAVID ESTEBAN-GÓMEZ, CARLOS PLATAS-IGLESIAS, ANDRÉS DE BLAS, TERESA RODRÍGUEZ-BLAS. 2008. "Zn(II), Cd(II) and Pb(II) complexation with pyridinecarboxylate containing ligands". *Dalton Transactions*, 5754-5765 (2008).

RUIZ, MARÍA; RUANOVA, TANIA M.; BLANCO, OLGA; NUNEZ, FÁTIMA; PATO, CRISTINA; OJEA, VICENTE. 2008. Diastereoselective Synthesis of Piperidine Imino Sugars Using Aldol Additions of Metalated Bislactim Ethers to Threose and Erythrose Acetonides. *Journal of Organic Chemistry*, 73(6), 2240-2255.

DANIEL RIVERO, DAVID PERISCAL. 2008. *Evolving Graphs for ANN Development and Simplification* Ref. ISBN: 978-1-59904-849-9 0 Libro: *Encyclopedia of Artificial Intelligence* (Hershey, New York). CL Volumen: II Págs, inicial: 618 final: 624.

E. FERNÁNDEZ-BLANCO, J. DORADO, N. PEDREIRA. July 2008. Artificial cell systems based in Gene Expression Protein effects. *Advancing Artificial Intelligence through Biological Process Applications*. A. Porto, W. Buño, A. Pazos. Pp 146-164. Information Science Reference .

Artigos Científicos In Press

DANIEL R. RAMOS, RAQUEL CASTILLO, MOISÉS CANLE L., M. VICTORIA GARCÍA, JUÁN ANDRÉS, J. ARTURO SANTABALLA. 2008. A Theoretical Study on the Mechanism of the Base-promoted Decomposition of (N-Cl)_N-methylethanolamine. *Organic & Biomolecular Chemistry* DOI: 10.1039/paperno.

Presentacións en Congresos/Conferencias

XIX JORNADAS DE PARALELISMO. Castellón, Septiembre 2008. C. TEJEIRO, G. LÓPEZ, J. TOURIÑO, B. B. FRAGUELA, R. DOALLO, J. C. MOURIÑO, A. GÓMEZ, I. LÓPEZ. Evaluación del Rendimiento de las Comunicaciones Colectivas en UPC. Presentación.

17th EUROMICRO INTERNATIONAL CONFERENCE ON PARALLEL, DISTRIBUTED AND NETWORK-BASED PROCESSING (PDP'09). 18-20 February, 2009. Weimar (Germany). DAMIÁN A. MALLÓN, GUILLERMO L. TABOADA, JUAN TOURIÑO, RAMÓN DOALLO. NPB-MPJ: NAS Parallel Benchmarks Implementation for Message Passing in Java. Presentación.

18th EUROPEAN CONFERENCE ON ARTIFICIAL INTELLIGENCE ECAI 2008. Patras, Grecia Fecha: 21-25 de julio de 2008. DANIEL RIVERO, JULIAN DORADO, JUÁN RABUÑAL, ALEJANDRO PAZOS. Automatic Recurrent ANN development for signal classification: detection of seizures in EEGs. ISBN: 978-1-58603-891-5 Páginas: 142-146.

NINTH TETRAHEDRON SYMPOSIUM. Berkeley, CA, (USA) 22/07/2008 al 25/07/2008. MARTA LARROSA, RAQUEL G. SOENGAS, JAIME RODRÍGUEZ, CARLOS JIMÉNEZ. "Synthesis of vanchrobactin analogue-antibiotic quinolone conjugates used as Trojan horse against vibriosis" . Presentación.

PROCEEDINGS OF THE INTERNATIONAL WORKSHOP ON SCALABLE TOOLS FOR HIGH-END COMPUTING (STHEC 2008), HELD IN CONJUNCTION WITH THE 22nd INTERNATIONAL CONFERENCE ON SUPERCOMPUTING (ICS08), pp. 1-12. Kos (Greece), June 2008. GABRIEL RODRÍGUEZ, MARÍA J. MARTÍN, PATRICIA GONZÁLEZ, JUAN TOURIÑO, RAMÓN DOALLO, A compiler-assisted tool for portable checkpointing of message-passing applications Poster.

XIX JORNADAS DE PARALELISMO. Castellón Septiembre 2008. MARTA LOUREIRO, GABRIEL RODRÍGUEZ, PATRICIA GONZÁLEZ, MARÍA J. MARTÍN, JOSÉ C. MOURIÑO, TERESA SÁNCHEZ. "Tolerancia a fallos en aplicaciones reales utilizando CPPC". pp. 323-328. ISBN 978-84-8021-676-0. Presentación.

Posters en Congresos/Conferencias

19 INTERNATIONAL CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. Santiago de Compostela (España) 13-18/07/2008. D. R. RAMOS, M. CANLE L., M. V. GARCÍA, J. ANDRÉS, J. A. SANTABALLA. A Joint Experimental-Computational Approach To Concurrent Reaction Mechanisms. Poster.

19 INTERNATIONAL CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. Santiago de Compostela (España) 13-18/07/2008. E. CARRO, M. CANLE L., J. A. SANTABALLA. In vitro Study of the Mechanism of Intracellular Oxidation of Uracil by Hypochlorous Acid. Poster.

19th IUPAC CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. 13-18 July 2008, Santiago de Compostela, (Spain). LUIS F. R VÁZQUEZ. Theoretical Study on the Glycine Synthesis Reaction in Cometary and Interstellar Ices Analogues. A Novel Mechanistic Model to Understand the Abiotic Synthesis of Amino Acids. Poster.

19th IUPAC CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. 13-18 July 2008, Santiago de Compostela, (Spain). LUIS F. R VÁZQUEZ. Theoretical Study on the Imine Synthesis Reaction in Cometary and Interstellar Ices Analogues. A Mechanistic Model to Understand the Abiotic Synthesis of Amino Acids Precursor. Poster.

19th IUPAC CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. 13-18 July 2008, Santiago de Compostela, (Spain). LUIS F. R VÁZQUEZ. Theoretical Study on the Sulphide Oxidation by Hypochlorous Acid in Aqueous Media: A Novel Mechanism. Poster.

19th IUPAC CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. Santiago de Compostela (España) 2008-07-13. VICENTE OJEA, MARÍA RUIZ, OLGA BLANCO, CRISTINA PATO. Diastereoselective Aldol Additions of Tin(II) Azaenolates to Matched 2,4-Ethylidene-D-Erythroses. Poster.

2nd EUCHEMS CHEMISTRY CONGRESS. Turín (Italia) 2008-09-16. MARÍA RUIZ, OLGA BLANCO, CRISTINA PATO, VICENTE OJEA. Diastereoselective Synthesis of 2,5-Dideoxy-2,5-imino-D-glucitol. Poster.

8th INTERNATIONAL PEROXIDASE SYMPOSIUM. Tampere (Finlandia) 20-24/08/2008. DANIEL R. RAMOS, PAUL G. FURTMÜLLER, CHRISTIAN OBINGER, M. CANLE L., M. V. GARCÍA, J.A. SANTABALLA. Compound II Revisited. Poster.

EUROMAR 2008: MAGNETIC RESONANCE FOR THE FUTURE. San Petesburg, (Rusia). 6/07/2008 al 11/07/2008. M. ISABEL NIETO, J. RODRIGUEZ, C. JIMÉNEZ. J-Based Analysis in 1,2 and 1,3 Acyclic Nitrogen Containing Chiral Systems. Poster.

IV IBERIAN CARBOHYDRATE MEETING. IX JORNADAS DE CARBOHIDRATOS. Santiago de Compostela (España) 2008-09-01. OLGA BLANCO, CRISTINA PATO, MARÍA RUIZ, VICENTE OJEA. Diastereoselective Synthesis of 2,5-Dideoxy-2,5-iminogalactitol. Poster.

NINTH TETRAHEDRON SYMPOSIUM. Berkeley, CA, (USA) 22/07/2008 al 25/07/2008. MARTA LARROSA, RAQUEL G. SOENGAS, JAIME RODRÍGUEZ, CARLOS JIMÉNEZ. "Synthesis of vanchrobactin analogue-antibiotic quinolone conjugates used as Trojan horse against vibriosis" . Poster.

Tesis Doutorais Defendidas

GABRIEL RODRÍGUEZ. "Compiler-assisted checkpointing of message-passing applications in heterogeneous environments". Decembro 2008. Directoras: María J. Martín, Patricia González.

JAVIER JESÚS POZA. Síntesis de 6-Hidroximino esteroides con diferentes posiciones oxigenadas en los anillos A y/o B y fluoradas en C-5 como potentes agentes antitumorales. Universidade da Coruña, Junio 2008. Directores: Carlos Jiménez, Jaime Rodríguez. Calificación: Sobresaliente.

Tesis Doutorais Presentadas

Doutorando: Manuel A. Peiteado Peiteado, aprobada a súa presentación Título: "Estudios fotofísicos y fotoquímicos sobre el aminoácido aromático N-fenilglicina"

Proxectos Fin de Carreira

DAMIÁN ÁLVAREZ MALLÓN. Análisis Técnico de Rendimiento de Sistemas HPC. Grupo de Arquitectura de Computadores, Departamento de Electrónica y Sistemas, Universidad de A Coruña. 24 de Septiembre de 2008. Director: Andrés Gómez Tato. Tutor: Guillermo López Taboada. Calificación: Matrícula de Honor.

EDUARDO MARTÍNEZ PARDEIRO. Implementación da Técnica de Partición en Bloques no Compilador GCC. Enxeñería Técnica en Informática de Sistemas. Manuel Carlos Arenaz Silva e Basilio B. Fraguela Rodríguez Calificación: Sobresaliente.

JOSÉ MANUEL ANDIÓN FERNÁNDEZ. Diseño e Implementación de nuevas Operaciones Colectivas para el Lenguaje de Programación Paralela UPC. Departamento de Electrónica y Sistemas de la Universidad de A Coruña. Septiembre, 2008. Directores: Guillermo López Taboada, Juan Touriño Dominguez. Calificación: Matrícula de Honor.

JORGE GONZÁLEZ DOMÍNGUEZ. Grupo de Arquitectura de Computadores, Departamento de Electrónica y Sistemas, Universidad de A Coruña. Septiembre de 2008. Diseño en Implementación de una Biblioteca de Computación Matricial Densa y Dispersa para el Lenguaje de Programación Paralela UPC. Tutores: Juan Touriño Domínguez, María José Martín Santamaría.

NOHA VEIGUELA BLANCO. Optimización de Redes Neurogliales Artificiales. Universidad de A Coruña - Facultad de Informática 2008. Trabajo tutelado (DEA). Calificación: Sobresaliente

OSCAR IBÁÑEZ PANIZO. Aplicación de Redes Neurogliales Artificiales a Clasificación y Predicción. Universidad de A Coruña - Facultad de Informática 2008. Trabajo tutelado (DEA). Calificación: Sobresaliente.

ÓSCAR IBÁÑEZ PANIZO. Sistemas Conexionistas y Modelos Computacionales Neurobiológicos. Diploma de Estudios Avanzados. Universidad de La Coruña. Tutor: Juan Ramón Rabuñal Dopico.

Libros e Capítulos de Libro Publicados

M. GESTAL, J. DORADO, E. FERNÁNDEZ-BLANCO. Diciembre 2008. Redes de Neuronas Artificiales y Computación Evolutiva. Tecnologías de la Información y las Comunicaciones en Ingeniería Civil. Pp 41-64. Fundación Alfredo Brañas.

UNIVERSIDADE DE VIGO (UVIGO)

Artigos Científicos Publicados

KEN S. FELDMAN, D. KEITH HESTER II, CARLOS SILVA LÓPEZ, OLALLA NIETO FAZA. 2008. Allenyl Azide Cycloaddition Chemistry. Photochemical Initiation and CuI Mediation Leads to Improved Regioselectivity. Org. Lett. 10 (8), pp 1665-1668.

ALVAREZ, ROSANA; PEREZ, MARTIN; NIETO FAZA, OLALLA; DE LERA, ANGEL R. 2008. "Associative Transmetalation in the Stille Cross-Coupling Reaction to Form Dienes: Theoretical Insights into the Open Pathway". Organometallics, 27(14), 3378-3389. CODEN: ORGND7 ISSN:0276-7333. CAN 149:128960 AN 2008:662319

Alvarez, Rosana; Perez, Martin; Nieto Faza, Olalla; de Lera, Angel R.. Associative Transmetalation in the Stille Cross-Coupling Reaction to Form Dienes: Theoretical Insights into the Open Pathway. Organometallics (2008), 27(14), 3378-3389. CODEN: ORGND7 ISSN:0276-7333. CAN 149:128960 AN 2008:662319

BELÉN VAZ, RAQUEL PEREIRA, MARTÍN PÉREZ, ROSANA ÁLVAREZ, ÁNGEL R. DE LERA. 2008. Stereoselective Stille Coupling of Enantiopure Haloallenes and Alkenylstannanes for the Synthesis of Allenyl Carotenoids. Experimental and Computational Studies. Journal of Organic Chemistry, 73 (17) 6541.

CARLOS SILVA LÓPEZ, CARLOS PÉREZ-BALADO, PAULA RODRÍGUEZ-GRAÑA, ÁNGEL R. DE LERA. 2008. Mechanistic insights into the stereocontrolled synthesis of hexahydropyrrolo[2,3-b]indoles by electrophilic activation of tryptophan derivatives. Organic Letters 10 (1), pp. 77-80.

CARLOS SILVA LÓPEZ, OLALLA NIETO FAZA, ANGEL R. DE LERA. 2008. Characterization of the switch in the mechanism of an intramolecular Diels-Alder reaction. *Journal of Organic Chemistry* 73 (2), pp. 467-473.

CARLOS SILVA LÓPEZ, ROSANA ÁLVAREZ, MARTA DOMÍNGUEZ, OLALLA NIETO FAZA, ANGEL R. DE LERA. 2009. Complex Thermal Behavior of 11-cis-Retinal, the Ligand of the Visual Pigments *J. Org. Chem.*, 74 (3), pp 1007-1013

J.R. FLORES, A.B. GONZÁLEZ. 2008. The role of the excited electronic status on the $C++H_2O$ reaction. *Journal of Chemical Physics*, 128, 144310.

J.R. FLORES. 2008. New benchmarks of the second-order correlation energies of Ne and Ar through the finite element method. *International Journal of Quantum Chemistry*, 108, 2172.

KEN S. FELDMAN, D. KEITH HESTER II, CARLOS SILVA LÓPEZ, OLALLA NIETO FAZA. 2008. Allenyl azide cycloaddition chemistry. Photochemical initiation and CuI mediation leads to improved regioselectivity. *Organic Letters* 10 (8), pp. 1665-1668.

KEN S. FELDMAN, MALLIGA R. IYER, CARLOS SILVA LÓPEZ, OLALLA NIETO FAZA. 2008. Allenyl azide cycloaddition chemistry: Exploration of the scope and mechanism of cyclopentannulated dihydropyrrole synthesis through azatrimethylenemethane intermediates. *Journal of Organic Chemistry* 73 (13), pp. 5090-5099.

KEN S. FELDMAN, MALLIGA R. IYER, CARLOS SILVA LÓPEZ, OLALLA NIETO FAZA. 2008. Allenyl Azide Cycloaddition Chemistry: Exploration of the Scope and Mechanism of Cyclopentannulated Dihydropyrrole Synthesis through Azatrimethylenemethane Intermediates. *Journal Org. Chem.* 73 (13), pp 5090-5099

L. ESTÉVEZ, R.A. MOSQUERA. 2008. "Where is the positive charge of flavylum cations?". *Chemical Physics Letters*, 451 (1-3), pp. 121-126

L. ESTÉVEZ, R.A. MOSQUERA. 2008. Molecular structure and antioxidant properties of delphinidin. *The Journal of Physical Chemistry A* 112 (42), pp. 10614-10623

L.Landesa, J.M.Taboada, F. Obelleiro, J.L.Rodríguez, C. Mouriño, A. Gomez. "Solution of very large integral-equation problems with single level FMM". *Microwave and Optical Technology Letters*.

M. M. PIÑEIRO, C. A. CERDEIRINA, M. MEDEIROS. 2008. Thermodynamic response functions of fluids: A microscopic approach based on NpT Monte Carlo. *Journal of Chemical Physics*. 129 (1), 014511/1, 014511/10.

M. N. LORENZO, J.J. TABOADA, I. IGLESIAS, I. ÁLVAREZ. 2008. The role of stochastic forcing on the behavior of Thermohaline circulation. *Annals of the New York Academy of Sciences*. ISBN: 1-57331-732-2 doi: 10.1196/annals.1446.002. VOLUMEN: 1146 Páginas, inicial: 60 final: 86.

MARCOS MANDADO, ANA M. GRAÑA, IGNACIO PÉREZ-JUSTE. 2008. Aromaticity in spin-polarized systems: Can rings be simultaneously alpha aromatic and beta antiaromatic?. *The Journal of Chemical Physics*. 129 164114.

MARCOS MANDADO, JOSE M. HERMIDA-RAMÓN, CARLOS M. ESTÉVEZ. 2008. Molecular tweezers as receptors for anions: An energetic and topological study. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 854, 1–9.

MIGUEL ARENAS, DAVID POSADA. 2007. Recodon: Coalescent simulation of coding DNA sequences with recombination, migration and demography. *BMC Bioinformatics*. 8:458

NAHOUM, VIRGINIE; LIPSKI, ALEXANDRA; QUILLARD, FABIEN; GUICHOU, JEAN-FRANCOIS; BOUBKIK, YVAN; PÉREZ, EFRÉN; GERMAIN, PIERRE; DE LERA, ANGEL R.; BOURGUET, WILLIAM. 2008. "Nuclear receptor ligand-binding domains: reduction of helix H12 dynamics to favor crystallization". *Acta Crystallographica, Section F: Structural Biology and Crystallization Communications*, F64(7), 614-616. CODEN: ACSFCL ISSN:1744-3091. AN 2008:821065

NAHOUM, VIRGINIE; PÉREZ, EFRÉN; GERMAIN, PIERRE; RODRIGUEZ-BARRIOS, FATIMA; MANZO, FABIO; KAMMERER, SABRINA; LEMAIRE, GERALDINE; HIRSCH, OLIVER; ROYER, CATHERINE A.; Gronemeyer, Hinrich; de Lera, Angel R.; Bourguet, William. 2007. "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. CODEN: PNASA6 ISSN:0027-8424. CAN 148:161787 AN 2007:1285460

OLALLA NIETO FAZA, CARLOS SILVA LÓPEZ, ADÁN B. GONZÁLEZ PÉREZ, MARTÍN PÉREZ RODRÍGUEZ, ÁNGEL RODRÍGUEZ DE LERA. 27 Oct 2008. Torquoselectivity in the electrocyclic ring-opening of cyclopropyl anions. *Journal of Physical Organic Chemistry* Published Online.

OLALLA NIETO FAZA, CARLOS SILVA LÓPEZ, ADÁN B. GONZALEZ PÉREZ, MARTÍN PÉREZ RODRÍGUEZ, ÁNGEL RODRÍGUEZ DE LERA. 2008. Torquoselectivity in the electrocyclic ring-opening of cyclopropyl anions. *Journal of Physical Organic Chemistry* 9999. 1099-1395 PN: 0894-3230

OLALLA NIETO FAZA, CARLOS SILVA LÓPEZ, ADÁN B. GÓNZALEZ PÉREZ, MARTÍN PÉREZ RODRÍGUEZ, ANGEL RODRÍGUEZ DE LERA. 2008. Torquoselectivity in the electrocyclic ring-opening of cyclopropyl anions. *Journal of Physical Organic Chemistry* (DOI 10.1002/poc.1455)

OLALLA NIETO FAZA, Dr., CARLOS SILVA LÓPEZ, Dr., ROSANA ÁLVAREZ, Dr., ÁNGEL DE LERA. 2009. Regio-, Peri-, and Torquoselectivity in Hydroxy Heptatrienyl Cation Electrocyclizations: The Iso/Homo-Nazarov Reaction. *Prof. Dr. Chemistry, a European Journal*, 2009. Volume 15, Issue 8, Pages 1944-1956.

P. BULTINCK, M. MANDADO, R.A. MOSQUERA. 2008. "The pseudo- π method examined for the computation of multicenter aromaticity indices". *Journal of Mathematical Chemistry*. 43 (1), pp. 111-118

P. LENAIN, M. MANDADO, R.A MOSQUERA, P. BULTINCK. 2008. "Interplay between hydrogen bond formation and multicenter n-electron derealization: Intermodular hydrogen bonds". *The Journal of Physical Chemistry A* 112 (34), pp. 7898-7904

P. LENAIN, M. MANDADO, R.A MOSQUERA, P. BULTINCK. 2008. "Interplay between hydrogen-bond formation and multicenter n-electron delocalization: Intramolecular hydrogen bonds". *The Journal of Physical Chemistry A* 112, (42), pp. 10689-10696.

ROSANA ÁLVAREZ, MARTÍN PÉREZ, OLALLA NIETO FAZA, ANGEL R. DE LERA. 2008. Associative Transmetalation in the Stille Cross-Coupling Reaction to Form Dienes: Theoretical Insights into the Open Pathway. *Organometallics*, 27 (14), pp 3378-3389

ROSANA ALVAREZ, MARTÍN PÉREZ, OLALLA NIETO FAZA, ANGEL R. DE LERA. 2008. Associative Transmetalation in the Stille Cross-Coupling Reaction Form Dienes: Theoretical Insights into the Open Pathway. *Organometallics*, 27, 3378.

Vaz, Belen; Pereira, Raquel; Perez, Martin; Alvarez, Rosana; de Lera, Angel R. 2008. "Stereoselective Stille Coupling of Enantiopure Haloallenes and Alkenylstannanes for the Synthesis of Allenyl Carotenoids. Experimental and Computational Studies". *Journal of Organic Chemistry*, 73(17), 6534-6541. CODEN: JOCEAH ISSN:0022-3263. CAN 149:332487 AN 2008:939256

VAZ, BELÉN; PEREIRA, RAQUEL; PÉREZ, MARTÍN; ÁLVAREZ, ROSANA; DE LERA, ANGEL R. 2008. Stereoselective Stille Coupling of Enantiopure Haloallenes and Alkenylstannanes for the Synthesis of Allenyl Carotenoids. *Experimental and Computational Studies. Journal of Organic Chemistry*, 73(17), 6534-6541. CODEN: JOCEAH ISSN:0022-3263. CAN 149:332487 AN 2008:939256 CAPLUS

YAN XUGUANG; PEREZ, EFREN; LEID, MARK; SCHIMERLIK, MICHAEL I.; DE LERA, ANGEL R.; Deinzer, Max L. 2007. "Deuterium exchange and mass spectrometry reveal the interaction differences of two synthetic modulators of RXR.alpha. LBD". *Protein Science*, 16(11), 2491-2501. CODEN: PRCIEI ISSN:0961-8368. CAN 148:92225 AN 2007:1283971

M.N. LORENZO, J.J. TABOADA, I. IGLESIAS, I. ÁLVAREZ. 2008. "The role of stochastic forcing on the behaviour of the Thermohaline circulation". *Annals of the New York Academy of Sciences*. Volume 1146, Issue 1, 60-86, Trends and Directions in Climate Research.

EFFECTS OF CLIMATE CHANGE ON THE WORLDS OCEANS INTERNATIONAL SYMPOSIUM. M.N. Gijón May 2008. LORENZO I. IGLESIAS, J.J. TABOADA. Influence of colored noise in the ocean coupling on the thermohaline circulation. Presentación.

Artigos Científicos In Press

MARTÍN PÉREZ-RODRIGUEZ, ATAUALPA A. C. BRAGA, MAX GARCÍA-MELCHOR, MÓNICA H. PÉREZ-TEMPRANO, JUAN A. CASARES, GREGORI UJAQUE, ANGEL R. DE LERA, ROSANA ALVAREZ, FELIU MASERAS, PABLO ESPINET. 2008. C-C Reductive Elimination in Palladium Complexes, and the Role of Coupling Additives. A DFT Study Supported by Experiment. *Journal of the American Chemical Society*.

Presentacións en Congresos/Conferencias

18th European Conference on Thermophysical Properties, ECTP. Pau, Francia 31 de agosto al 4 de Septiembre de 2008. Autores: Auriane Knorst-Fouran, Thomas Lafitte, Bruno Mendoboure, Christelle Miqueu, D. Bessièrès, J. M. Míguez, Manuel M. Piñeiro. Interfacial properties of methane confined in a slit pore: comparison of

Monte Carlo simulation and a Gradient Theory - SAFT VR approach. Presentación Oral.

19th IUPAC CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. 13-18 July 2008 Santiago de Compostela, (Spain). OLALLA NIETO FAZA, ADÁN GONZÁLEZ PÉREZ, MARTÍN PÉREZ RODRÍGUEZ, CARLOS SILVA LÓPEZ, ANGEL R. DE LERA. Torquoselectivity in the electrocyclic ring-opening of cyclopropyl anions. Comunicación Oral.

INTERNATIONAL CONFERENCE ON ELECTROMAGNETICS IN ADVANCE APPLICATIONS. Torino, (ITALIA) 2007. A. BERMÚDEZ, C. LOPEZ, R. RODRIGUEZ, P. SALGADO. "A finite element method for the eddy current problem in terms of the current density. Application to nondestructive testing" ICEAA'07. pp. 277-280, ISBN 1-4244-0767-2. Presentación.

PROCEEDINGS OF IBERGRID 2008. Oporto (Portugal), 12-14 mayo de 2008. J.C. MOURIÑO, A. GÓMEZ, L. LANDESA, J. M. TABOADA, F. OBELLEIRO, J. L. RODRÍGUEZ. "High Performance Computing Electromagnetics Challenge: solving tens of millions of unknowns.". Presentación.

VI ENCUENTRO IBÉRICO DE ELECTROMAGNETISMO COMPUTACIONAL. Chiclana de la Frontera, Cádiz, 21 octubre de 2008. L. LANDESA, J.M. TABOADA, F. OBELLEIRO, J.L. RODRÍGUEZ, J.C. MOURIÑO, A. GÓMEZ. "Fast Multipole Method in Supercomputers". Presentación.

XIX IUPAC CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. Santiago de Compostela (España), 2008. R. A. MOSQUERA, A. VILA, A.M. GRAÑA. On the Shortcomings of the Stereoelectronic Interpretation of the Anomeric Effect. Comunicación Oral.

XXIII SIMPOSIUM NACIONAL DE LA UNIÓN CIENTÍFICA INTERNACIONAL DE RADIO (URSI 2008), Madrid, 22-24 septiembre de 2008. L. LANDESA, J.M. TABOADA, F. OBELLEIRO, J.L. RODRÍGUEZ, J.C. MOURIÑO, A. GÓMEZ. "FMM en problemas electromagnéticos con decenas de millones de incógnitas". Presentación.

Posters en Congresos/Conferencias

7th LIQUID MATTER CONFERENCE. Lund, Suecia Fecha: 27 de Junio al 1 de Junio de 2008. MANUEL M. PIÑEIRO, AMPARO GALINDO, ANDREW PARRY. Surface ordering and capillary phenomena of confined hard cut sphere particles. Poster.

XV CONGRESO DE FÍSICA ESTADÍSTICA, FISES. Salamanca 27 al 29 de marzo de 2008. MANUEL M. PIÑEIRO, G. S. DE FERRÓN, J. M. MÍGUEZ, D. BESSIÉRES, F. PLANTIERr, J. L. LEGIDO. Determinación de propiedades derivadas segundas de alcanos de cadena larga mediante Monte Carlo NPT. Poster.

"XV CONGRESO DE FÍSICA ESTADÍSTICA FISES". Salamanca 27-29 Marzo 2008. A. DOPAZO-PAZ, P. GÓMEZ-ÁLVAREZ, L. ROMANÍ, D. GONZÁLEZ-SALGADO. "Simulación de Montecarlo del sistema {Metanol + Agua}: Propiedades Termodinámicas". Poster.

"XV CONGRESO DE FÍSICA ESTADÍSTICA FISES". Salamanca 27-29 Marzo 2008. P. GÓMEZ-ÁLVAREZ, A. DOPAZO-PAZ, L. ROMANÍ, D. GONZÁLEZ-SALGADO. "Simulación de Montecarlo del Sistema {METANOL + AGUA}: Estructura". Poster.

6th CONGRESS ON ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS - ESPA 2008. Palma de Mallorca (España) 2008. A.M. GRAÑA, A. VILA, R.A. MOSQUERA. QTAIM analysis on the genesis of the anomeric effect involving sulfur and phosphorus. Poster.

6th CONGRESS ON ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS - ESPA 2008. Palma de Mallorca (España) 2008. L. ESTÉVEZ, N. OTERO, A.M. GRAÑA, R.A. MOSQUERA. Structural Trends in Anthocyanidins. Poster.

6th CONGRESS ON ELECTRONIC STRUCTURE: PRINCIPLES AND APPLICATIONS - ESPA 2008. Palma de Mallorca (España) 2008. N. OTERO, L. ESTÉVEZ, M. MANDADO, R.A. MOSQUERA. An electron density study on porphin and its series of hydrogenated derivatives. Poster.

7th LIQUID MATTER CONFERENCE. Lund, Suecia 27 de Junio al 1 de Junio de 2008. AURIANE KNORST-FOURAN, THOMAS LAFITTE, BRUNO MENDOBOURE, CHRISTELLE MIQUEU, D. BESSIÉRES, J. M. MÍGUEZ, MANUEL M. PIÑEIRO. Determinación de on interfacial properties of confined methane: Comparison of Monte carlo simulation and the gradient theory coupled with SAFT VR results. Poster.

EGU. Viena 2008. M. N. LORENZO, J. J. TABOADA, I .IGLESIAS. Influence of the stochastic sources in climate models. Poster. ISSN 1029-7006

EUROPEAN METEOROLOGICAL SOCIETY 7TH EMS. El Escorial, España 2007. M. N. LORENZO, J. J. TABOADA, I .IGLESIAS. Thermohaline circulation as an example of nonlinear-processes in the climate system. Poster. ISSN 1812-7053

WATOC 2008. CARLOS SILVA LOPEZ, ROSANA ALVAREZ RODRÍGUEZ, MARTA DOMÍNGUEZ SEOANE, OLALLA NIETO FAZA, ANGEL R. DE LERA Thermal Isomerization of 11-cis-Retinal. An Unexpected Manifold. Poster presentation.

WATOC 2008. Sydney, September 14-19 2008. OLALLA NIETO FAZA, ADÁN GONZÁLEZ PÉREZ, CARLOS SILVA LÓPEZ, ANGEL R. DE LERA. Complexity under Control: A Theoretical Mechanistic Study of Gold and Platinum Catalyzed Rearrangements. Poster presentation.

XIX IUPAC CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. Santiago de Compostela (España) 2008. J.L. LÓPEZ, R. A. MOSQUERA, A.M. GRAÑA. Electron density analysis on the protonation of nitriles. Poster.

XIX IUPAC CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. Santiago de Compostela (España) 2008. L. ESTÉVEZ, N. OTERO, R. A. MOSQUERA. Which is the Most Powerful Form of Anthocyanidins to Scavenge DPPH-Radical? . Poster.

XIX IUPAC CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. Santiago de Compostela (España) 2008. L. PITA, A.M. GRAÑA, R.A. MOSQUERA. Topological electron density analysis on activating and deactivating effects in pyridine rings. Poster.

XIX IUPAC CONFERENCE ON PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. Santiago de Compostela (España) 2008. N. OTERO, L. ESTÉVEZ, M. MANDADO, R. A. MOSQUERA. An Electron Density Based Study on the Chemistry of 1,3-Azoles. Poster.

XV CONGRESO DE FÍSICA ESTADÍSTICA. Universidad de Salamanca 2008. A. DOPAZO-PAZ, P. GÓMEZ-ÁLVAREZ, L. ROMANÍ, D. GONZÁLEZ-SALGADO. Simulación de Monte Carlo del sistema {metanol+agua}: Propiedades termodinámicas. Poster.

XV CONGRESO DE FÍSICA ESTADÍSTICA. Universidad de Salamanca 2008. P. GÓMEZ-ÁLVAREZ, A. DOPAZO-PAZ, L. ROMANÍ, D. GONZÁLEZ-SALGADO. Simulación de Monte Carlo del sistema {metanol+agua}: Estructura. Poster.

XXIV INTERNATIONAL CONFERENCE ON POLYPHENOLS. Salamanca (España) 2008. L. ESTÉVEZ, N. OTERO, R. A. MOSQUERA. A Computational Study on the Molecular Structure of Delphinidin. Poster.

EGU GENERAL ASSEMBLY. Viena 2008. M.N. LORENZO, J.J. TABOADA, I. IGLESIAS. Influence of the stochastic sources in climate models. Poster.

Proyectos Fin de Carreira e Tesinas

ANA MARÍA DOPAZO PAZ. Análisis de un Potencial Intermolecular para el sistema {agua + metanol}. Universidad de Vigo 22-12-08. Director: Diego González Salgado, Universidad de Vigo.

Libros e Capítulos de Libro Publicados

J.R. FLORES. 2008. Further quasi-classical trajectory studies on the C++ H₂O reaction. Molecular Simulation. DOI. 10.1080/08927020802430760.

K. KANKOWSKI, R. SLUPSKI, J.R. FLORES. 2008. Asymptotic behaviour of MP2 correlation energies for closed-shell atoms. Advances in Quantum Chemistry, 53, 151-175 (Capítulo 9).

SERVICIO GALEGO DE SAÚDE (SERGAS)

Artigos Científicos Publicados

MARTINEZ, A; GUTIÉRREZ-DE-TERÁN, H; BREA, J. 2008. Synthesis, adenosine receptor binding and 3D-QSAR of 4-substituted 2-(2-furyl)-1,2,4-triazolo[1,5-a]quinoxalines. Bioorganic & Medicinal Chemistry, 16: 2103-2113.

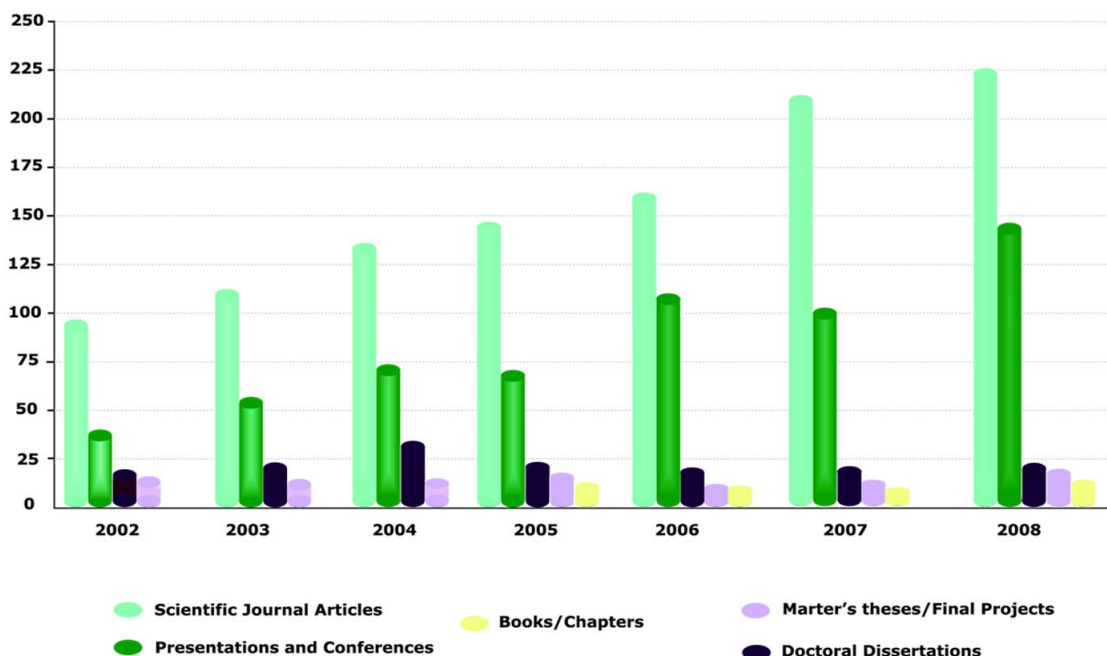
Presentaciones en Congresos/Conferencias

VIII JORNADAS NACIONALES DE BIOINFORMÁTICA. Valencia, 13-15 February 2008. GUTIÉRREZ-DE-TERÁN, H.; ORRLING, K.; DUNN, B.M.; AQUIST J. Investigating Promiscuous Inhibition of Proteases by Computational Methods. Oral presentation.

Posters en Congresos/Conferencias

EURO QSAR 2008. Uppsala, 21-26 September 2008. GUTIÉRREZ-DE-TERÁN, H; AREIAS, F; RODRÍGUEZ, D.; BREA, J.; PROENCA, M.F.; LOZA, M.I.: Identification of novel scaffolds from an original chemical library as potential antipsychotics. Poster.

MEMORIAL ÁNGEL R. ORTIZ ASSOCIATED TO JORNADAS DE BIOINFORMÁTICA. DAVID RODRÍGUEZ, HUGO GUTIÉRREZ-DE-TERÁN. ADENOSINE RECEPTORS: A SYSTEMATIC STUDY OF LIGAND BINDING BASED ON THE CRYSTAL STRUCTURE OF hA2A RECEPTOR. Poster.

USER'S SCIENTIFIC PRODUCTION

DISTRIBUTION OF SCIENTIFIC PRODUCTION DECLARED

	CSIC	UDC	USC	UVIGO	TOTAL
SCIENTIFIC ARTICLES	79	24	77	37	217
ACCEPTED/IN PRESS	12	1	5	1	19
SUBMITTED	12	6	9	1	28
PUBLISHED	55	17	63	35	170
PRESENTATIONS IN CONFERENCES	40	17	44	28	129
PRESENTATIONS	21	6	11	8	46
POSTERS	19	11	33	20	83
IN PREPARATION	—	—	—	—	—
DOCTORAL THESES	7	6	5	—	18
DEFENDED	5	2	2	—	9
PRESENTED	—	1	3	—	4
IN PROCESS	2	3	—	—	5
MASTERS THESES / GRADUATE PROJECTS	—	7	2	1	10
DEFENDED	—	5	2	1	8
IN PROCESS	—	2	—	—	2
BOOKS / CHAPTERS	3	3	—	2	8
ACCEPTED/ IN PRESS	1	—	—	—	1
PUBLISHED	2	3	—	2	7
OTHERS	—	—	—	—	—
SUBMITTED	—	—	—	—	—
PUBLISHED	—	—	—	—	—
IN PROCESS	—	—	—	—	—
	129	57	128	68	382

*** CESGA AND SERGAS NOT INCLUDED

8.2.- Producción científica do CESGA.

Publicacións en revistas

- ❑ J. Marco et. al: "The Interactive European Grid: Project objectives and achievements". Computing and informatics, 2 (27) 161-171. 2008.
- ❑ J. Gomes et al: "A grid infrastructure for parallel and interactive applications". Computing and informatics, 2 (27) 173-185. 2008
- ❑ E. Bendito, A. Carmona, A.M. Encinas, J.M. Gesto, A. Gómez, C. Mouriño, T. Sánchez, Computational cost of the Fekete problem I: the Forces Method on the 2-sphere, accepted in Journal of Computational Physics.

Libros

- ❑ AAVV. "E-Learning for Adult Patients in Hospitals. Experiences-Challenges-Recommendations.", Viena, die Berater 48
- ❑ AAVV. "E-Learning para pacientes adultos hospitalizados. Experiencias - Retos - Recomendaciones", Viena, die Berater 48
- ❑ AAVV. "eHospital: Experiences with E-Learning Activities for Patients.", Viena, die Berater 152
- ❑ AAVV. "e-hospital: E-Learning para pacientes hospitalizados", Viena, die Berater 156

Capítulo de libros

- ❑ Ignacio López Cabido, "A computación do século XXI" en "Dos ábacos aos computadores", Ed. Manuel Bermejo Patiño, Universidad de Santiago, pag. 119-134

Informes técnicos

- ❑ Aurelio Rodríguez, Mario Valle, Ugo Varetto , "Quantum Chemistry common data format Q5COST and OpenBabel: A first answer to interoperability in Quantum Chemistry."
- ❑ Sergio Bernardi (CINECA), Claudio Cacciari (CINECA), Francesco D'Andria (ATOS), Roberto d'Ippolito (LMS), Henning Eickenbusch (ANSYS), Naji El Masri (LMS), Andrés Gómez (CESGA), Björn Hagemeyer (FZJ), Jiadao Li (FZJ), Daniel Mallmann (FZJ), Josep Matrat Sotil (ATOS), Jose Carlos Mouriño Gallego (CESGA), Angela Rumpl (SCAI), Eberhard Sekler (INTES), Christian Simmendinger (T-Systems), Devarajan Subramanian (Gridcore), Wolfgang Ziegler (SCAI), Csilla Zsigri (451 GROUP), "Functional requirements of the new licensing architecture for Grids"

Presentaciones en congresos

- ❑ Sánchez M.T., Cao R., Fernández J., García-Magariños M., García-Torre F., Gesto J.M., Gómez A., González-Manteiga W., Gutiérrez J.M., "imath.cesga.es, the VO for the European mathematicians", 2ND IBERIAN GRID INFRASTRUCTURE CONFERENCE, Porto (Portugal), 12-14 may 2008.
- ❑ Cotelos Queijo, Carmen; Gómez Tato, Andrés; López Cabido, Ignacio; Cotos Yañez, José Manuel. "Adapting ROMS to Execute on GRID Using a Hybrid Parallelization Model", Second International Conference on Mobile Ubiquitous Computing, Systems, Services and Technologies, Valencia (Spain), 29 Sep. - 4 Oct. 2008.
- ❑ David Mera, José M. Cotos, Pedro Saco, Andrés Gómez., "An integrated Solution to the Security User Access in the RETELAB Grid Project, using a Web System based on Portlets and a RBAC Model by means of User

- Attribute Certificates and PKI", 2ND IBERIAN GRID INFRASTRUCTURE CONFERENCE, Porto (Portugal), 12-14 may 2008.
- ❑ Aurelio Rodríguez, "CESGA e FINISTERRAE, una infraestructura para la bioinformática computacional.", I JORNADA GALLEGA DE BIOINFORMÁTICA., A Coruña (España), 4-Apr-2008.
 - ❑ Aurelio Rodríguez, "Servicios del CESGA a la Comunidad Científica del CSIC", II ENCUENTRO EN COMPUTACIÓN DE ALTO RENDIMIENTO EN SIMULACIONES MOLECULARES, Madrid (España), 17-Jul-2008.
 - ❑ Lino García Tarrés, César Veiga, David Cordero Placer, Carlos Fernández Sánchez, Pablo Rey Mayo, Javier Lopez Cacheiro, Ignacio López, "Accounting and Monitoring of Parallel and Interactive jobs in the Grid", IBERGRID 2008 2nd Iberian Grid Infrastructure Conference, Porto (Portugal), 12-14 may 2008.
 - ❑ C. Teijeiro, G.L. Taboada, J. Touriño, B.B. Fraguera, R. Doallo, J.C. Mouriño, A. Gómez-Tato, I.L. Cabido, "Evaluación del Rendimiento de las Comunicaciones Colectivas en UPC", XIX Jornadas de Paralelismo, Castellón (España), 17-19 may 2008.
 - ❑ Marta Loureiro, Gabriel Rodríguez, Patricia González, María J. Martín, J. Carlos Mouriño y María Teresa Sánchez, "Tolerancia a fallos en aplicaciones reales utilizando CPPC", XIX Jornadas de Paralelismo, Castellón (España), 17-19 may 2008.
 - ❑ Luis Landesa Porras, José Manuel Taboada Varela, Fernando Obelleiro Basteiro, José Luis Rodríguez, José Carlos Mouriño, Andrés Gómez Tato, "High Performance Computing Electromagnetics Challenge: Solving tens of millions of unknowns", 2ND IBERIAN GRID INFRASTRUCTURE CONFERENCE, Porto (Portugal), 12-14 may 2008.
 - ❑ L. Landesa, J.M. Taboada, F. Obelleiro, J.L. Rodríguez, J. Mouriño. A. Gómez, "FMM en problemas electromagnéticos con decenas de millones de incógnitas", XXIII Simposium Nacional de la Unión Científica de Radio, Madrid (España), 22-24 sep 2008.
 - ❑ L. Landesa, J.M. Taboada, F. Obelleiro, J.L. Rodríguez, J. Mouriño. A. Gómez, "Fast Multipole Methods in Supercomputers", VI IBERIAN MEETING ON COMPUTATIONAL ELECTROMAGNETICS, Chiclana (España), 22-24 oct 2008.
 - ❑ G.Borges, M.David, J.Gomes, J.P.Martins, M.Montecelo, N.Dias, J.López, A.Simón, E.García, "Resource integration in gLite based grid infrastructures", 2nd Iberian Grid Infrastructure Conference, Oporto (Portugal).
 - ❑ E.Freire, A.Simon, J.López, C.Fernández, A.Retico, and N.Thackray, "EGEE Pre-Production service: A distributed testing cluster", 2nd Iberian Grid Infrastructure Conference, Oporto (Portugal).
 - ❑ C.Veiga, C.Fernández, L.García, D.Cordero, J.López, "Accounting and Monitoring of Parallel and Interactive Jobs in the Grid", 2nd Iberian Grid Infrastructure Conference, Oporto (Portugal).
 - ❑ J.López, E.Freire, A.Simón and A.Retico, "The deployment test: How it is and how it should be", EGEE'08 Conference, Estambul (Turquía), 24 sep 2008.
 - ❑ P.Kunszt, J.López, E.Freire, A.Simón, S.Díaz, C.Fernández, et al., "Production sites best practices", EGEE'08 Conference, Estambul (Turquía), 25 sep 2008.
 - ❑ C.F. Iglesias, "Proyecto Formiga, Reaprovechando recursos para la investigación.", Jornadas Técnicas de RedIRIS, Madrid (España), 2008.
 - ❑ Pablo Rey, John Gordon, "Accounting & Accounting Portal developments", ARM 11, Lyon (France), 05-06 Feb. 2008.

- ❑ Carlos Fernández, "Finis Terrae" (End of Earth) Experiences with a Very Large Itanium Site in Production", HP-CAST 10, Singapur, 19-22 May 2008.
- ❑ Lino García, "e-IMRT", GRID OPEN DAY, Poznan (Poland), 2008.
- ❑ E.Freire, A. Simon, J.López, C.Fernández, A.Retico, and N.Thackray, "Advantages of Pre-Production WLCG/EGEE services for Vos and Users", EGEE'08 User Forum 3, Clermont Ferrand (France), 2008.
- ❑ S.Diaz, S.Reyes, A.Niño and C. Muñoz-Caro, "A General Approach to the Analysis and Design of Grid Portals for Scientific Virtual Organizations", 2nd Iberian Grid Infrastructure Conference, Oporto (Portugal), 2008.
- ❑ S.Diaz, P.Rey, J.Lopez, C.Fernández, J. Gordon, C. del-Cano, "Intra-VO and individual user accounting in EGEE", EGEE'08 Conference, Estambul (Turquía), sep. 2008.
- ❑ L. García, E. Guardia, J. Casurellas, "The Impact of Virtualization on Grid Parallel Molecular Dynamics Simulations", VECPAR'08, Toulouse (Francia), 24-27 Jun 2008.
- ❑ María José Rodríguez Malmierca y Manuel Gromaz Campos. "T-Learning: e-learning al alcance de todos", EDUTEC 08, Santiago de Compostela (Spain), Sep-2008
- ❑ María José Rodríguez Malmierca y Manuel Gromaz Campos "Formación, adultos hospitalizados y tecnologías: el e-learning necesario", EDUTEC 08, Santiago de Compostela (Spain), Sep-2008
- ❑ María José Rodríguez Malmierca y Manuel Gromaz Campos. "Proyecto EFELCREN: Ejemplos de buenas prácticas de materiales de e-learning", EDUTEC 08, Santiago de Compostela (Spain), Sep-2008
- ❑ María José Rodríguez Malmierca y Manuel Gromaz Campos. "Proyecto EFELCREN: ejemplos de buenas prácticas de materiales de e-learning", EDUTEC 08, Santiago de Compostela (Spain), Sep-2008
- ❑ María José Rodríguez Malmierca y Manuel Gromaz Campos. "Proyecto e-Hospital: formación de pacientes adultos hospitalizados", EDUTEC 08, Santiago de Compostela (Spain), Sep-2008
- ❑ María José Rodríguez Malmierca y Manuel Gromaz Campos. "Las TIC como apoyo para la intervención indirecta en la calidad de vida familiar de las personas con diversidad funcional". , EDUTEC 08, Santiago de Compostela (Spain), Sep-2008
- ❑ María José Rodríguez Malmierca y Manuel Gromaz Campos, "La atención familiar en la búsqueda de apoyos y calidad de vida a través de las TIC en las personas con diversidad funcional", V Congreso Internacional de Psicología y Educación: Los restos del futuro. Oviedo (Spain). Apr. 2008.
- ❑ María José Rodríguez Malmierca y Manuel Gromaz Campos, "Software libre al servicio de las personas con diversidad funcional", V Congreso Internacional de Psicología y Educación: Los restos del futuro. Oviedo (Spain). Apr. 2008
- ❑ María José Rodríguez Malmierca y Manuel Gromaz Campos Diversidad Funcional y Tecnologías de la Información y Comunicación", Congreso Nacional Internet en el Aula. La Importancia de las TIC en las aulas. Virtual. 2008

Tesis, PFC ou traballos de master

- ❑ José Antonio López López, "ASPECTOS MÉDICO-BIOLÓGICOS Y FÍSICOS DE LA RADIOTERAPIA COMO TRATAMIENTO DEL CÁNCER. MODELO DETERMINISTA PARA EL CÁLCULO DE LA DOSIS ABSORBIDA", Universidad de Santiago de Compostela
- ❑ Damián Álvarez Mallón, "Análisis Técnica de Rendimiento de Sistemas HPC", Universidad da Coruña

- S.Díaz, "MASTER OFICIAL: TECNOLOGIAS INFORMATICAS AVANZADAS", UCLM

Retos computacionais

Durante o primeiro ano de funcionamento do Finisterrae executáronse 6 retos computacionais, grandes problemas computacionais que ou ben non foran expostos até o momento, ou ben que se puideron completar grazas á excelente potencia de cálculo que este equipo nos ofrece. Expuxéronse primeiro 3 problemas durante o período de probas, cun enfoque bilateral, tanto para beneficiarse do feito de que a máquina estivese libre de carga, como para medir a capacidade da propia máquina e detectar posibles erros, pescozos de botellas ou erros de configuración. Tras o éxito cultivado con estes 3 primeiros retos computacionais, seleccionáronse 3 máis procedentes de investigadores do CSIC. Vos retos executados foron os seguintes:

Estimación dos puntos de Fekete:

Investigadores do grupo VARIDIS do Departamento de Matemática Aplicada III da Universidade Politécnica de Cataluña, encabezados por Enrique Bendito, xunto co persoal do CESGA, estiveron probando un novo algoritmo robusto, versátil e eficaz para a resolución do problema dos puntos de Fekete. Denominamos problema de Fekete ao consistente en minimizar baixo restricións xerais calquera funcional de enerxía potencial que dependa das distancias relativas entre N puntos iguais, e chamamos puntos de Fekete ás configuracións que dan as enerxías mínimas nese tipo de problemas. Este problema ten estreita relación co problema de atopar un algoritmo capaz de obter en tempo polinómico en N unha boa estimación do mínimo global da enerxía logarítmica na 2-esfera (constitúe o sétimo "Problema matemático para o século XXI" de S. Smale)

Este algoritmo non presenta ningunha complexidade computacional en se mesmo, pero se pretendía extraer estatística suficiente para obter resultados concluíntes, polo que se realizaron millóns de execucións con distinto número de puntos, concretamente uns 70 millóns. Para iso empregáronse unhas 350.000 horas de cálculo utilizando o 50% da capacidade do FT (O que equivalería a uns 40 anos sobre unha soa CPU).

Los resultados obtenidos corroboraron todas las previsiones que se habían hecho previamente en cuanto al comportamiento del Método de las Fuerzas, lo que confirma que con este método se consigue superar la incertidumbre inherente a otros algoritmos de optimización, tanto por lo que se refiere a condiciones suficientes de convergencia como a predicción de tiempos de cálculo.

Como resultado destas execucións conseguiuase reunir máis de cincuenta millóns de mínimos locais para a enerxía logarítmica na 2-esfera. Esta é, con moito, a maior mostra xamais obtida en relación ao problema de Fekete e ao sétimo problema de Smale. Da análise estatística de toda a información muestral obtida inférese que moi probablemente sexa posible formular unha resposta positiva á versión probabilística do sétimo problema de Smale. Ademais, a análise realizada ha permitida identificar as liñas mestras dunha posible demostración.

Por mor destes cálculos publicáronse os seguintes resultados científicos:

- E. Bendito, A. Carmona, A.M. Encinas, J.M. Gesto, A. Gómez, C. Mouriño, T. Sánchez, Computational cost of the Fekete problem I: the Forces Method on the 2-sphere, aceptado en la revista Journal of Computational Physics.
- TESIS DOCTORAL. Título: Estimation of Fekete points. Autor: Jose Manuel Gesto Beiroa. Directores: Enrique Bendito Pérez y Andrés Marcos Encinas Bachiller. Fecha de lectura: 23 de julio de 2008.

Programa de Doutorado: Matemática Aplicada, Universidade Politécnica de Cataluña.

Simulación electromagnética a gran escala.

Un grupo mixto de investigadores en electromagnetismo computacional das Universidades de Vigo e Estremadura, xunto con persoal do CESGA, están implementando un código para realizar cálculos electromagnéticos. Devandito código está en desenvolvemento constante e parte dunha aproximación xa antiga de abordar o problema, moi superada por algoritmos máis recentes, pero que ten a particularidade de escalar moito mellor. Algoritmos multinivel actuais son moi eficientes sobre poucos procesadores pero presentan problemas de escalado. Esta aproximación mononivel, en principio moito máis custosa, escala case linealmente mesmo sobre máis de 100 CPUS, e por tanto permite, a base de utilizar recursos, abordar problemas moito máis grandes.

Inicialmente o reto expúxose cun problema de 35 millóns de incógnitas, a pouca distancia do record mundial de entón situado en 42 millóns. Este reto conseguiuase finalmente tras facer múltiples adaptacións da aplicación á plataforma, sobre 512 CPUs, utilizando 64 nodos do FT e 8Tb de memoria RAM. Pero esta primeira execución deixou abertas moitas portas de posibles melloras para abordar problemas máis grandes nun futuro próximo, xa que os problemas se magnifican cando a utilización de recursos leva ao máximo.

Nunha mellora continua do código, durante o verán executouse un problema de 150 millóns de incógnitas utilizando 1024 CPUs e 5,4 Tb de memoria, esta vez si superando a marca do mundo. Pode apreciarse que un problema 5 veces máis grande consome menos memoria que o anterior, o que dá a entender onde se centraron os reforzos de optimización de código. Prevese ter unha nova versión máis refinada do código para tentar executar durante Xaneiro de 2009 un problema con máis de 500 millóns! de incógnitas.

Cabe resaltar que para executar este reto levouse ao extremo a capacidade de cálculo de medio Finisterrae, utilizando unha paralelización MPI para comunicacións entre nodos, e unha paralelización OpenMP sobre memoria distribuída dentro dos nodos. Demostrando que esta máquina é perfecta para este tipo de problemas dada a gran cantidade de memoria por CPU que nos ofrece.

Os aplicabilidade deste proxecto é a resolución de problemas electromagnéticos en grandes estruturas dotadas de sistemas de radio, como barcos, avións e vehículos terrestres. Así, conséguese dunha maneira máis eficiente, simular o comportamento electromagnético das estruturas na etapa do deseño para poder verificar e garantir o cumprimento dos requisitos electromagnéticos impostos, minimizando así os problemas posteriores ao proceso de fabricación.

Este reto deu lugar ás seguintes publicacións científicas:

- ❑ L. Landesa, J.M. Taboada, F. Obelleiro, J.L. Rodríguez, J.C. Mouriño, A. Gómez, "FMM en problemas electromagnéticos con decenas de millones de incógnitas", XXIII Simposium Nacional de la Unión Científica Internacional de Radio (URSI 2008), Madrid, 22-24 septiembre de 2008.
- ❑ L. Landesa, J.M. Taboada, F. Obelleiro, J.L. Rodríguez, J.C. Mouriño, A. Gómez, "Fast Multipole Method in Supercomputers", VI Encuentro Ibérico de Electromagnetismo Computacional, Chiclana de la Frontera, Cádiz, 21 octubre de 2008.
- ❑ J.C. Mouriño, A. Gómez, L. Landesa, J. M. Taboada, F. Obelleiro, J. L. Rodríguez, "High Performance Computing Electromagnetics Challenge: solving tens of millions of unknowns." Proceedings of IBERGRID 2008, Oporto (Portugal), 12-14 mayo de 2008.

Outras dúas foron enviadas, pero todavía no se publicaron nin están totalmente aceptadas

Cálculo de transicións de fase

Un grupo de investigadores do Departamento de Física Aplicada da Universidade de Santiago de Compostela, coordinado polo profesor Daniel Baldomir, xunto con perosonal do CESGA expuxéronse resolver o 3º/4º problema físico máis importante da década segundo o American Institute of Physics. O problema consiste en descubrir como se produce exactamente o fenómeno denominado transición de fase. Trátase dun punto crítico no que un material adquire propiedades magnéticas efectivas a partir da intervención humana, concretamente engadindo outros compostos ou variando a súa temperatura. Até agora, a manipulación das características magnéticas dun composto foi común, sen que se puidese coñecer a súa dinámica máis que de forma aproximada. Con este descubrimento, poderase controlar a través do seu coñecemento exhaustivo e, en consecuencia, afinar as súas aplicacións.

Cos resultados deste reto, para o que se utilizaron 384 CPUs do FT durante varios centos de horas, iníciáanse liñas de investigación para optimizar a tecnoloxía das baterías dos teléfonos móbiles, para dar un salto cualitativo nas memorias dos computadores portátiles, que tamén son magnéticas, ou para optimizar os sensores magnéticos, empregados para detectar campos magnéticos moi pequenos, e outras múltiples aplicacións.

Isto mesmo terá aplicacións moito máis pegadas á vida diaria: o sensor medirá o magnetismo e ¿escaneará? así os produtos dunha vez, o que suporía un aforro de tempo ao facer a compra, cobrando todos os elementos dun carro da compra dunha vez, sen sacalos, en lugar de pasalos polo código de barras un por un. Tamén permitirá afinar as medicións das radiacións, por exemplo para controlar as emisións en hospitais e zonas determinadas de poboación, afinando neste caso o modelo exacto para reducir os límites de erro establecidos neste caso por razóns de saúde.

Até o momento non se publicou ningún dos resultados obtidos aínda que se espera facelo en breve.

Estudo cuantitativo de estrelas masivas a partir de observacións no infrarroxo:

Este reto foi exposto por Francisco Najarro, investigador do Departamento de Astrofísica Molecular Infraroja (DAMIR) do Instituto de Estructura da Materia (IEM) do CSIC.

Os algoritmos xenéticos propuxéronse como un método alternativo na obtención de parámetros estelares que reproduzan as observacións en modelos astrofísicos de atmosfera para estrelas masivas. A precisión e eficiencia dos algoritmos xenéticos depende en gran maneira do axuste fino dos parámetros xenéticos ao problema de optimización. O labor, por tanto, consistiu na adecuación dos diagnósticos necesarios, as liñas espectrales, e os parámetros xenéticos, codificación e número de parámetros, para abordar o problema astrofísico dunha forma realista.

Neste reto, iniciouse o estudo cuantitativo de estrelas masivas a partir de observacións no infravermello. Até a data, só utilizáronse estes métodos nos espectros ópticos estelares. O infravermello é importante xa que permite o estudo de rexións, como o centro da nosa galaxia, que están obscurecidas no óptico e non se poden observar.

Os estudos, aínda en curso, están a revelar o enorme potencial deste método. Na actualidade están a adaptar as súas observacións para a posterior análise automática co algoritmo xenético implantado no Finisterrae.

Os recursos típicos usados no método corresponden ao cálculo duns 20000 a 40000 modelos cun tempo medio de 15 minutos por modelo. O método é altamente paralelizable e escala case-linearmente co número de procesadores dispoñibles. As probas realizáronse até cun máximo de 80 cores.

Até a data tampouco foi publicado ningún resultado derivado destes cálculos.

Solucións numéricas de problemas complexos.

A investigadora Ana Mancho do Instituto de Ciencias Matemáticas do CSIC utilizou o Finis Terrae para executar dous pequenos retos en lugar dun máis grande.

O primeiro deles é un proxecto de cálculo paralelo de seguimento de colapso na ecuación cuasigeostrófica e o segundo tratou sobre o cálculo de inestabilidade en fluídos en convección.

Os recursos utilizados non son tan altos como noutros retos, pois se utilizou un máximo de 20 CPUs pero se require gran cantidade de memoria. En total empregáronse unhas 5000 horas de cálculo.

Publicáronse os seguintes artigos cos resultados científicos obtidos destas simulacións:

- J. A. Jiménez Madrid, Ana M. Mancho. Distinguished trajectories in time dependent vector fields. Aceptado. Aparecera en "Chaos" en marzo de 2009.
- M. Mancho. Numerical studies on the self-similar collapse of the α -patches problem. En preparación.

Ademais se presentouse en dous congresos, pero ningún deles ten referencia bibliográfica, mais que un breve resume no libro de abstracts.

Dinámica molecular de poliolefinas

O investigador Victor Cruz, do instituto de Estrutura da Materia do CSIC, expuxo un problema de dinámica molecular de poliolefinas, para ser resolto co programa masivamente paralelo e de dominio público LAMMPS. Completou inicialmente o proceso de equilibrado, polo que aínda está en execución. Para os cálculos utilizou da orde de 256 procesadores.