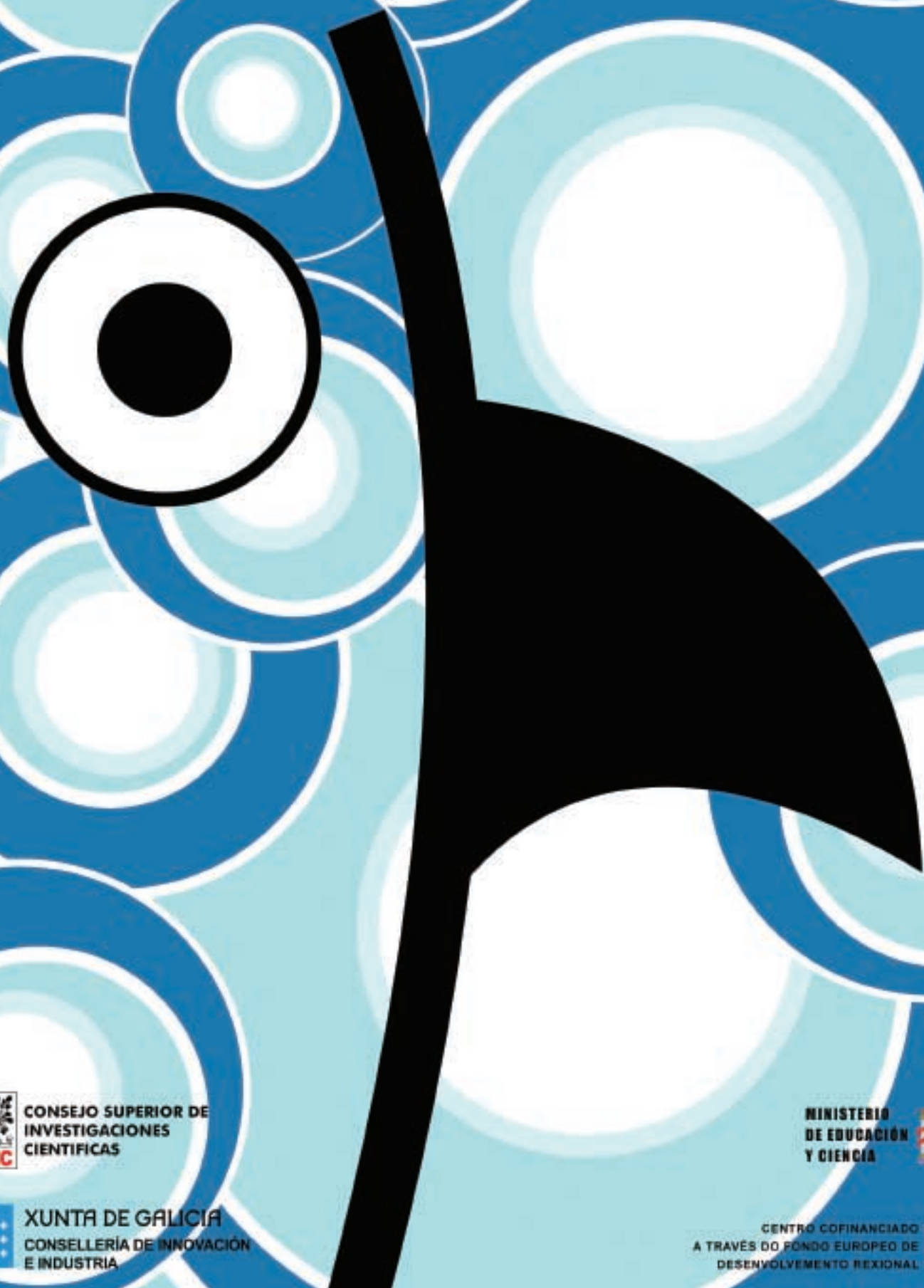


díxitos



NOVAS DO CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA - NOVEMBRO 2005



CONSEJO SUPERIOR DE
INVESTIGACIONES
CIENTÍFICAS



XUNTA DE GALICIA
CONSELLERÍA DE INNOVACIÓN
E INDUSTRIA

MINISTERIO
DE EDUCACIÓN
Y CIENCIA



CENTRO COFINANCIADO
A TRAVÉS DO FÓNDOS EUROPEO DE
DESENVOLVEMENTO REGIONAL



DIRECCIÓN	Javier García Tobío
COORDINACIÓN	Fernando Bouzas Sierra
REDACCIÓN	Andrés Gómez Tato M ^a José Rodríguez Malmierca Begoña Martínez-Cruz José A. Godoy Aurelio Rodríguez López Xana García Miguez Óscar Curros Moure
PORTADA E MAQUETACIÓN	Laura Gómez Fernández
FOTOMECÁNICA E IMPRESIÓN	Grafisant, s.l.

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

EDITA
FUNDACIÓN CESGA
Avenida de Vigo, s/n (Campus Sur)
15705 SANTIAGO DE COMPOSTELA
Teléfono 981 569810 Fax 981 594616
Correo electrónico: dixitos@cesga.es
Enderezo web: www.cesga.es/dixitos

CONTIDOS

- **SERVIZO DE SOPORTE A USUARIOS**
[03]
- **OBSERVATORIO GALEGO DE e-LEARNING**
[04-05]
- **ESTUDIO XENÉTICO DA POBOACIÓN DE AGUIA IMPERIAL IBÉRICA**
[06-07]
- **AVANCE DE PROXECTOS CESGA**
[08-09]
- **BUSCA DE NOVOS FÁRMACOS CONTRA A MALARIA**
[10]
- **SIMULACIÓN DE DISPOSITIVOS TRANSISTORES.**
- **RECERCAT: SERVIDOR DE DOCUMENTOS DE INVESTIGACIÓN**
[11]

A XUNTA E A CRTVG PRESENTAN NO CESGA A SERIE "OBXECTIVO INNOVAR" PARA DAR A COÑECER O I+D+i NAS EMPRESAS GALEGAS



O CESGA acolleu o pasado 27 de outubro a presentación de "Obxectivo: Innovar", unha serie documental composta por corenta microespazos que promove a Dirección Xeral de I+D+i co obxectivo de dar a coñecer o esforzo investigador das empresas galegas, e que emite a Televisión de Galicia durante os meses de novembro e decembro despois do Telexornal.

No acto estiveron presentes o conselleiro de Innovación e Industria, Fernando Blanco; o director xeral de I+D+i, Salustiano Mato de la Iglesia e o director xeral da Compañía de Radio Televisión de Galicia, Benigno Sánchez.

"Obxectivo: Innovar" realizouse no marco do Programa de Sensibilización Social do Plan Galego de I+D+i, e é froito dun proxecto de colaboración entre a Dirección Xeral de I+D+i da Xunta de Galicia e a Uni-

versidade de Vigo. A serie, composta por microespazos de dous minutos e medio de duración, foi elaborada polo equipo de investigación Canal-Campus da Universidade de Vigo.

En cada un dos capítulos recóllense as actividades dunha empresa galega que desenvolve proxectos de investigación e desenvolvemento apoiados pola Dirección Xeral de I+D+i. Estes espazos están compostos por unha sucesión de planos que ofrecen información sobre os proxectos cunha estética que se atopa máis perto da do spot publicitario ca do informativo tradicional: planos curtos, en movemento e con coidado especial no relativo á cor e á iluminación.

Con estes espazos preténdese facerlle chegar á sociedade e aos empresarios galegos a importancia do I+D+i e da cooperación entre os axentes que interveñen nel.

O CESGA PARTICIPA NA SEMANA DA CIENCIA

No marco da Semana da Ciencia en Galicia, o CESGA organiza, entre os días 7 e 15 de novembro, unha serie de actividades de divulgación nas instalacións deste centro. Como todos os anos, nesta acción toman parte alumnos de primaria e secundaria de centros públicos de Galicia e Portugal.

REFORZADO O SERVIZO DE SOPORTE A USUARIOS DE CÁLCULO

Andrés Gómez Tato

Administrador de Aplicacións e Proxectos CESGA
aplicacions@cesga.es

A computación converteuse nunha amiga inseparable e imprescindible para os investigadores de, cada vez, máis áreas científicas, dende a Física á Bioloxía, pasando polas Ciencias Sociais ou as Enxeñaría. A computación permítelles aos investigadores afrontar problemas cada vez máis complexos e analizar as enormes cantidades de información que, hoxe en día, se poden xerar incluso nos laboratorios máis pequenos.

Tamén os ordenadores evolucionan, sendo máis complexos internamente, existindo múltiples posibilidades tecnolóxicas (monoprocesador, multiprocesador de memoria compartida ou distribuída, hyperthreading, etc.). Isto fai que, para usalos eficientemente, se precise unha programación máis tecnificada a fin de poder sacarlle todo o rendemento posible.

Dados estes condicionantes, o CESGA apostou novamente por mellorar o seu servizo de soporte de cálculo aos investigadores galegos e do CSIC, ademais de ás pequenas e medianas empresas que precisen do cálculo nos seus proxectos de investigación, desenvolvemento e innovación. Así, grazas ao financiamento obtido do anterior Ministerio de Ciencia y Tec-

noloxía, a través das liñas de axudas para a contratación de personal técnico de apoio, incorporou dous novos técnicos que permiten incrementar os servizos de soporte á computación, en concreto:

a. Desenvolvemento de pequenas aplicacións de cálculo científico ou técnico e de tratamento de datos. Dirixido a aqueles grupos de investigación que precisan resolver os seus modelos ou realizar a análise dos seus datos, a través de novos programas ou da adaptación dos existentes.

b. Adaptación das aplicacións existentes ás plataformas do CESGA. Dada a variedade de arquitecturas existentes actualmente no CESGA enfocadas a abarcar todas as posibilidades, é ás veces preciso adaptar unha aplicación específica a algún destes sistemas, para que a súa execución sexa eficiente. Agora esa adaptación pode ser realizada polos técnicos do CESGA, liberando aos investigadores desta tarefa.

c. Compilación. Pensado para os usuarios que precisan executar aplicacións non soportadas polo CESGA. Frecuentemente, as novas aplicacións requiren a recompilación dos códigos fonte. Este proceso é, ás veces, longo e complexo. Para que a compilación sexa completamente exitosa, require unha metodoloxía esixente, para a que os técnicos do CESGA foron formados.

d. Soporte de programación científica, linguaxes e compilación. Dirixido a aqueles investigadores que están desenvolvendo as súas propias aplicacións e precisan resolver cuestións técnicas.

e. Soporte sobre técnicas de cálculo molecular. Unha fracción importante do consumo de CPU do CESGA está dirixido a resolver a ecuación de Schrödinger para agregados atómicos (moléculas, clusters ou sólidos). Agora é posible realizar consultas sobre os diferentes métodos de resolver a ecuación e cal é o algoritmo aconsellable para o problema.

Durante os primeiros meses deste ano, nos cales arrancou o servizo, xa se compilaron máis de 14 aplicacións solicitadas polos usuarios, adaptáronse ás plataformas do CESGA 7 aplicacións que doutro xeito non se poderían ter executado e resolvéronse máis de 15 consultas técnicas no ámbito das aplicacións. Tamén se desenvolveron para dous grupos de investigación solucións específicas para os seus problemas de cálculo, permitíndolles, ademais de resolver o seu problema inicial, abordar outros problemas que consideraban imposibles previamente polas súas limitacións de recursos. Actualmente estase a traballar cun terceiro para desenvolver un sistema de análise e publicación de datos.

Estes e outros servizos relacionados coa computación e o tratamento de datos están dispoñibles para toda a comunidade investigadora usuaria do CESGA. Para solicitar calquera destes servizos, simplemente é preciso enviar un correo electrónico describindo brevemente o problema que se debe resolver ao enderezo **aplicacions@cesga.es** ou chamando ao teléfono **981569810**.

J. CARLOS MOURIÑO GALLEGO E AURELIO RODRÍGUEZ LÓPEZ, TÉCNICOS DE SOPORTE DE APLICACIÓNS.





M^a José Rodríguez Malmierca

Administradora do Departamento de e-Learning
CESGA
mjrm@cesga.es

Manuel Gromaz Campos

Técnico de e-Learning
CESGA
gromaz@cesga.es

O Observatorio Galego de e-Learning é un proxecto subvencionado pola Dirección Xeral de I+D+i no que participa, baixo a coordinación do CESGA, unha mesa de expertos formada por profesores especialistas en tecnoloxía educativa dos departamentos de Pedagogía e Didáctica das tres universidades galegas, ademais da empresa EOSA Consultores.

A análise dos datos obtidos a través deste observatorio estase rematando de realizar. Porén, malia que o estudo non está aínda rematado, xa se poden dar a coñecer algúns resultados significativos.

No ámbito da universidade galega, a meirande parte dos profesores empregan as TIC na súa práctica docente (78%) dende hai varios anos.

As razóns que aducen para utilizar este tipo de tecnoloxías son, por esta orde, o aumento da calidade do ensino, a

flexibilidade, etc. , entre outras vantaxes.

No outro extremo, a maior parte dos profesores que declaran non empregar as Tecnoloxías da Información e das Comunicacions (TIC) na súa docencia, renuncian a facelo a causa de que non contan coa formación necesaria para a súa utilización (25%).

Outras razóns destacadas son a falla de tempo (15%) e a falla de incentivos por parte da propia universidade (11%).

Onde máis empregan os docentes as TIC é en Terceiro Ciclo e nos cursos de Posgrao, combinando a utilización destas tecnoloxías con diferentes modalidades de ensino, ben sexa presencial, semipresencial ou a distancia.

En canto aos recursos que máis utiliza o profesorado na súa práctica docente, deixando aparte o ordenador, son o correo electrónico (81%), a navegación web (77%), e a páxina web docente (52%).

Outras ferramentas, como a videoconferencia, ferramentas de traballo colaborativo ou os weblog a penas teñen representación.

No referente á investigación universitaria na área do e-Learning, atópanse 13 grupos nas tres universidades que traballan directa ou indirectamente neste ámbito.

As temáticas dos seus estudos van dende o desenvolvemento de materiais didácticos e software educativo ou o desenvolvemento de Sistemas de Xestión da Aprendizaxe até as TIC na educación (escolar, universitaria, non formal), entre outros.

Polo que se refire á análise do e-Learning na empresa galega (realizado naquelas empresas que contan cun mínimo de 25 empregados) concretamente no caso das empresas consumidoras, contan cun índice de penetración do e-Learning do 36%. É dicir, o 36% dos empregados destas empresas reciben formación a través desta modalidade.

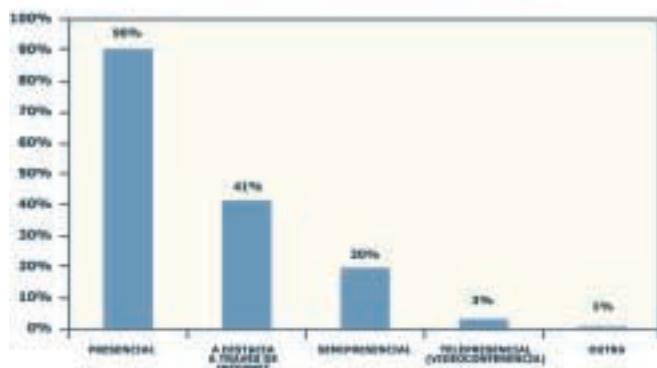
Profundizando un pouco máis na análise, apréciase que a maioría das empresas usuarias desta modalidade formativa teñen polo xeral, unha sede, e son empresas que xa levan varios anos constituídas (10 ou máis).

Entre as vantaxes destacadas por estes organismos con relación ao uso do e-Learning para formar aos seus empregados, destacan a promoción da utilización das TIC e a flexibilidade da formación en canto a tempo e oferta.

PROFESORADO QUE UTILIZA TIC NA DOCENCIA



MODALIDADES FORMATIVAS UTILIZADAS



PRINCIPAIS MODALIDADES FORMATIVAS UTILIZADAS POLAS EMPRESAS CONSUMIDORAS DE e-LEARNING

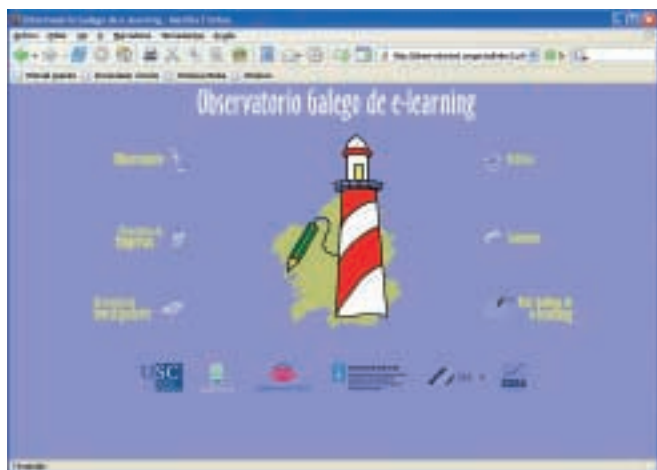
Por outra banda, entre as principais desvantaxes que citan as empresas destacan que se derivan da adaptación a este tipo de formación, a falla de costume no emprego do equipo informático, e a falla de tempo para a formación.

É interesante salientar a opinión das empresas que non son usuarias do e-Learning acerca das principais razóns polas que non o utilizan.

As que se citan con máis frecuencia son a consideración de que non é preciso/útil e a afirmación de que precisan máis información para empregar esta modalidade formativa.

Este último dato pódese considerar de grande interese para o futuro desenvolvemento do sector no ámbito empresarial.

A maior parte das empresas que empregan o e-Learning declaran facer uso da modalidade presencial (90%) e da modalidade totalmente a distancia (41%). Porén, só un 20% das empresas que recorren a este proceso de ensino/aprendizaxe usan a modalidade mixta (semipresencial).



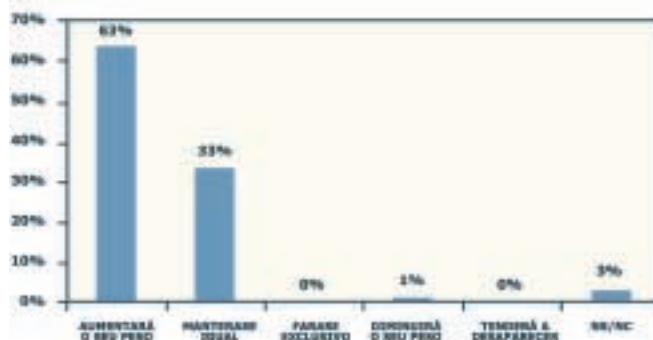
PÁXINA WEB DO OBSERVATORIO GALEGO DE e-LEARNING <http://observatorioel.cesga.es>

A temática dos cursos que empregan e-Learning é maioritariamente horizontal sobre temas relacionados coas TIC (informática, Internet) cun 44% do total, seguido da prevención de riscos laborais (29%), calidade (26%), e produtos propios da empresa (25%) entre outras.

En canto ás empresas provedoras da formación a través de e-Learning, atópanse principalmente en Galicia, sendo este un dato moi destacado nun mundo no que a globalización permite adquirir estes servizos en calquera lugar do mundo.

Non obstante, atopamos que as empresas galegas que fan uso do e-Learning adoitan contratar un só provedor que, ademais, se atopa habitualmente na mesma provincia ou comunidade.

Na web do Observatorio (<http://observael.cesga.es>) pódense consultar os datos de 40 empresas que ofertan servizos, tecnoloxías ou contidos e-Learning en Galicia.



PREVISIÓN DA EVOLUCIÓN DO e-LEARNING NA EMPRESA DEMANDANTE

Estas entidades están espalladas polas catro provincias galegas, aínda que o eixo A Coruña-Vigo concentra a maior parte das empresas.

A oferta deste tipo de empresas, en canto a e-Learning, é moi variada, pasando polo aluguer de tecnoloxía, contidos, titores, asesoramento, etc.

Os cursos impartidos facendo uso do e-Learning teñen unha tendencia a ser propostas formativas moi curtas. De feito, case desaparecen da oferta os cursos de máis de 100 horas, e son maioría os que duran menos de 50 horas.

Por último, a perspectiva de crecemento do sector é boa, tanto dende o punto de vista dos consumidores do e-Learning como dende o dos provedores. Sinal disto é que o 63% dos consumidores e o 76% dos provedores opinan que o mercado para esta modalidade de aprendizaxe aumentará para os vindeiros anos.

UN MODELO COALESCENTE SUXIRE UNHA RECENTE DIVERXENCIA DAS DUAS ESPECIES DE AGUIA IMPERIAL

Begoña Martínez-Cruz

Científico Asociado no Musée National d'Histoire Naturelle
CNRS
bemar@mnhn.fr

José A. Godoy

Científico Titular da Estación Biológica de Doñana
CSIC
godoy@ebd.csic.es

A xenética faise imprescindible nos nosos esforzos por conservar a biodiversidade. Entre outras cousas, dela espérase que sexa capaz de avaliar o grao de diverxencia xenética entre poboacións e delimitar así unidades evolutivas que merezan alta prioridade en conservación e que requiran unha xestión separada doutras unidades evolutivamente próximas. É por isto que a datación da separación entre grupos (poboacións, especies, ...) e a investigación dos procesos evolutivos implicados son da máxima importancia para o deseño dunha estratexia para a conservación de especies ameazadas.

Clasificada "En perigo" na lista vermella de especies ameazadas da UICN, a poboación de aguias imperial ibérica conta con menos de 200 parellas reprodutoras, confinadas no cua-

drante sur-occidental da Península Ibérica. Mentres tanto, o seu máis próximo parente, a aguias imperial do leste, supera os 5.000 individuos en Eurasia e non se atopa globalmente ameazada. Seibold e colaboradores estimaron o tempo de diverxencia en torno a un millón de anos, no Pleistoceno medio, baseándose no número de diferenzas achadas nun único xene, asumindo unha taxa de evolución mitocondrial do 2% My⁻¹. Estes métodos filoxenéticos teñen certas debilidades: a) dependen da validez da calibración utilizada, b) estiman o tempo da coalescencia dos xenes, e non o tempo real de diverxencia dos grupos; c) utilizan un só locus, o que pode dar estimacións moi pouco exactas debido á varianza interloci. Nas últimas décadas desenvóléronse métodos de análise bayesianos e de máxima verosimilitude que superan estas debilidades, coma o modelo coalescente de Illamento - Migración (Isolation-Migration model), implementado no software IM. Emprega un algoritmo de Metrópolis Hastings e Cadeas de Markov Monte Carlo, o que o fai computacionalmente moi demandante. O noso obxectivo era aplicar este modelo para datar a diverxencia das dúas especies de aguias imperial.

Mostras das dúas especies de aguias imperial foron analizadas para un fragmento de 345 pares de bases do ADN mitocondrial e oito loci de microsatélite no xenoma nuclear. Estes dous sets de datos, un por xenoma, foron analizados de xeito independente. O modelo completo de seis parámetros foi lanzado múltiples veces para ambos os dous sets, para determinar o número de pasos necesarios para conseguir a converxencia das cadeas de Markov, e usando un rango amplo de valores a priori para asegurar que se obtiña a distribución posterior completa. Valores baixos de autocorrelación (i.e. <0.03), taxas de actualización dos parámetros por riba do 2% e distribucións posteriores similares destes parámetros de diferentes análises foron os criterios empregados para asegurar unha mestura adecuada das cadeas. Tras estas análises preliminares, levamos a cabo tres análises finais independentes para cada set de datos de 5x10⁸ pasos cun período de burn-in de 2x10⁶ pasos para o set de oito microsatélites de 2x10⁷ pasos cun burn-in de 10⁶ pasos para o set mitocondrial, utilizando rangos de valores a priori estreitos, determinados nas análises preliminares.

CRIAS DE AGUIA IMPERIAL IBÉRICA DURANTE A TOMA DE MOSTRAS DE SANGUE: ESQUERDA, ENTRE TRINTA E TRINTA E CINCO DÍAS; DEREITA, CORENTA E CINCO DÍAS





A LAGOA DE CAÑUELAS, NO PARQUE NACIONAL DE DOÑANA, ALBERGA UN DOS ESCASOS NIÑOS DE AGUIA IMPERIAL QUE QUEDAN NA PENÍNSULA IBÉRICA.

As análises leváronse a cabo nos nodos DELL do CESGA. Empregáronse 138 horas para cada análise final do set de datos de 8 microsátélites e 27 horas no caso do set de datos mitocondriais, nun só procesador.

Os resultados obtidos foron sorprendentes, xa que indicaron que a diverxencia de ambas as dúas especies se tería producido en tempo moito máis recente que o que se estimara por métodos filoxenéticos, achegándose ata hai tan só un poucos milleiros de anos, en contraste co millón de anos de antigüidade proposto anteriormente. Isto situaría a diverxencia a finais do Pleistoceno ou incluso no Holoceno. Unha grande poboación ancestral teríase dividido en dúas poboacións moito máis pequenas, e esta redución de tamaño tería afectado en maior medida á poboación do oeste. Os nosos resultados indican tamén que se produciu fluxo xenético dende a poboación do leste e que isto tería sido debido tan só a machos, cunha taxa media de migración dun macho por xeración. Varias hipóteses poderían explicar os nosos

resultados. As glaciacións do Pleistoceno puideron producir episodios de vicarianza, producindo a división da poboación da especie ancestral e empuxando as subpoboacións resultantes a diferentes refuxios glaciais no leste e no oeste. Estes eventos de vicarianza terían sido abortados nos períodos interglaciares, ata que tras a última glaciación, as poboacións terían permanecido separadas e terían comezado a evolucionar de xeito independente. Noutro escenario posible, individuos provintes da poboación ancestral terían colonizado a Península Ibérica hai uns poucos milleiros de anos e terían fundado unha nova poboación, que tería evolucionado para dar lugar á aguiá imperial ibérica. Nunha terceira hipótese, o rango do ancestro tería sido un continuo ao longo do norte de África. A última glaciación do Pleistoceno tería provocado unha extensión do Sahara cara o norte partindo o rango de distribución da especie, que dende entón se tería visto dividida en dúas, dando lugar uns milleiros de anos despois á aguiá imperial ibérica e á aguiá imperial do leste. O fluxo xenético de machos provin-

tes da poboación do leste podería ter ocorrido por individuos que se terían desviado das súas rutas migratorias en dirección a África, quedándose a criar na Península.

Os nosos resultados suxiren un parentesco próximo entre as aguias imperiais ibéricas e orientais. Aínda cando os datos xenéticos suxiren unha diverxencia recente, é preciso considerar o nivel de diverxencia adaptativa entre ambas as dúas especies—é dicir, en que medida son distintas as dúas aguias nas súas características morfolóxicas, requirimentos ecolóxicos e nas súas historias de vida. Neste sentido, a distinción entre ambas as dúas especies baséase nunha grande parte na existencia de diferenzas na plumaxe; porén, a aparición de plumaxes con patrón heliaco na poboación ibérica suxire a necesidade dunha revisión destes criterios. Se a homoxeneidade ecolóxica e morfolóxica non pode ser descartada, e en caso de que a poboación ibérica vira seriamente ameazada a súa viabilidade, a introdución de individuos do leste na poboación ibérica debería ser considerada.

SISTEMAS DE INFORMACIÓN XEOGRÁFICA [GIS]

GIS PATRIMONIO IV

O proxecto GIS Patrimonio IV desenvolverase no marco do cuarto convenio anual coa Dirección Xeral de Patrimonio da Xunta de Galicia no que se continúa o desenvolvemento dunha aplicación GIS para a xestión do patrimonio arqueolóxico.

Entre outros obxectivos, para o ano 2005 está previsto o cálculo de variables topográficas de Galicia sobre o modelo dixital de elevacións, o desenvolvemento dunha base de datos espacial sobre as agrupacións de bens e a xeración de cartografía temática a nivel de comunidade, provincia, comarca e concello.

Ademais, achegarase asesoramento e asistencia en materia de sistemas de información xeográfica e se continuará coa creación dunha base de datos espacial de grande escala sobre bens inmo- bles.

Nela poderase atopar información sobre a localización dos xace- mentos, a protección legal da que gozan e a tipoloxía na que se encandran.

Tamén se inclúen fotos aéreas dos xacementos e datos sobre o estado de conservación no que se atopan.

EXEMPLO DE VISTA DE SITUACIÓN E DETALLE DUN BEN DE INTERESE CULTURAL



DESENVOLVEMENTO DUNHA FERRAMENTA GIS PARA ANÁ- LISE DE RISCOS AMBIENTAIS (GIS-RIESGOS M.A.)

O CESGA desenvolverá unha ferramenta de visualización e análise mediante un sistema de información xeográfica, que se integrará no Sistema de Avaliación de Riscos Ambientais Atmosféricos no Sector Industrial en Galicia.

Esta ferramenta permitirá visualizar os resultados achegados polo resto das entidades participantes no proxecto e predicir así o impacto dos contaminantes ambientais sobre núcleos nos que este tipo de substancias poden resultar especialmente perigosos, como é o caso dos asentamentos de poboación ou dos colexios.

Os froitos desta iniciativa, financiada pola Dirección Xeral de I+D+i da Xunta de Galicia, poderanse utilizar posteriormente en múlti- ples aplicacións de interese social, científico ou económico e resul- tarán de especial utilidade para os servizos de protección civil.

O proxecto estará integrado polos seguintes módulos, interrelacio- nados entre eles:

- 1▪ Inventario de emisións
- 2▪ Fontes de Riscos Atmosféricos
- 3▪ Estimación de Emisións de Axentes Nocivos
- 4▪ Dispersión de Axentes Nocivos na Atmosfera
- 5▪ Ferramenta de visualización e análise

No marco deste proxecto, o CESGA como prestador de soporte e servizo GIS á comunidade investigadora galega e do CSIC, porá á disposición dos seus usuarios unha información xeoreferenciada ata agora parcialmente inexistente e dispersa.

CONSOLIDA: Cooperación Transfronteiriza para a Consoli- dación de Empresas en Galicia e Norte de Portugal.

O Consorcio Zona Franca de Vigo presentou a aplicación de solos industriais desenvolvida polo CESGA -www.sueloempresarial.com- no marco da Conferencia ESRI 2005, celebrada o 29 de setembro do presente ano en Madrid.

O evento foi organizado polo distribuidor do software de Sistemas de Información Xeográfica co que se realizou o proxecto, promo- vido por Zona Franca.

A aplicación pretende converterse na ferramenta de referencia para a localización de solo industrial en Galicia e no Norte de Portugal.

O sistema recolle información para 160 variables de 30 polígonos industriais. Presenta referencias de parcelas dispoñibles en cada un deles. A Zona Franca pretende chegar a incluír a totalidade de polígonos existentes na Eurorrexión.

[SIMULACIÓN]

e-IMRT. SISTEMAS AVANZADOS DE PLANIFICACIÓN PARA RADIOTERAPIA MEDIANTE CONTORNOS DE COMPUTACIÓN

e - IMRT é un proxecto deseñado para desenvolver novos sistemas de planificación para o tratamento do cancro empregando cálculo distribuído e interfaces tipo WEB que melloren os sistemas convencionais. Contribuirá de xeito fundamental a avanzar na planificación en radioterapia e achegará contornos máis exactos, rápidos e escalables que as ferramentas existentes actualmente.

O principal avance radica na aplicación da radioterapia de intensidade modulada (IMRT), unha técnica na que ademais da forma do feixe de radiación se modifica tamén a súa intensidade. Grazas a estas melloras, será posible reducir a dose que reciben os órganos sans que rodean o cancro e unha deposición máis uniforme de dose no volume tumoral.

Con este proxecto preténdese acadar unha posición estratéxica de cara á nova xeración de planificadores que incluírán o método de Montecarlo para o cálculo de doses. Mediante este método conseguirase máis precisión nas rexións con fortes variacións de densidade e máis rapidez na obtención do resultado computacional. Ademais, crearase unha base de datos de tratamento, tanto para a súa consulta polos profesionais sanitarios como para a formación académica e docencia.

Os socios implicados na iniciativa son: o Grupo de Investigación en Radiofísica (GIR) da Universidade de Santiago de Compostela e do Hospital Clínico; o CESGA o Grupo de Tecnoloxías da Información (GTI) da Universidade de Vigo e Grupo de Optimización (GO) da Universidade de Wisconsin (USA), como colaborador externo. A duración é de 36 meses. O proxecto está financiado pola Dirección Xeral de I+D+i da Xunta de Galicia.

REUNIÓN DO COMITÉ DE DIRECCIÓN DO PROXECTO ICHNOS EN JIHLAVA (CHEQUIA)



[e-LEARNING]

ARTEPERU 2005

O obxectivo deste proxecto é mellorar a formación dos capacitadores en industrias lácteas da zona dos Andes, en Perú, e promover as boas prácticas entre os produtores artesáns de derivados lácteos da zona, co fin de mellorar as condicións sanitarias dos seus produtos e de incrementar os seus ingresos.

Ademais, como parte desta iniciativa, que coordina a Aula de Produtos Lácteos da USC e na que perticipan a a Universidad Nacional Agraria La Molina (UNALM), de Perú e o CESGA, asegurarase un sistema de comunicación entre Lima e Santiago mediante tecnoloxías de comunicación por terra, a Rede Gèant europea e a Rede Clara latinoamericana.

Arteperú contempla así mesmo a utilización e adaptación de instalacións xa existentes que permitan a realización de cursos telepresenciais e de actividades conxuntas de apoio a actividades de formación de formadores e artesáns.

Entre estas instalacións atópanse a Planta Piloto de Leite da Universidad de La Molina de Perú, o Simulador Virtual de Industrias Lácteas e tecnoloxías como a plataforma de xestión de formación on-line e as videoconferencias formativas.

Arteperú está financiado pola Xunta e toma como punto de partida un proxecto anterior, PIL-Perú, que rematou en decembro de 2004 acadando con éxito todos os obxectivos propostos.

No marco de PIL - Perú instalouse e aplicouse un Simulador de Industrias Lácteas desenvolvido pola APL da USC; estableceuse teleformación entre a USC e a Universidad Agraria La Molina e se creou unha rede de formadores. <http://arteperu.cesga.es>

[e-BUSINESS]

ICHNOS

O comité de dirección do proxecto ICHNOS celebrou o seu terceiro encontro o pasado 10 de outubro na cidade checa de Jihlava, na rexión de Vysocina. Durante esta reunión, que coincidiu co fin do primeiro semestre desta iniciativa, realizouse un balance do estado do proxecto, e traballouse na adaptación do estudo da situación da xanela única ás diversas realidades rexionais.

O proxecto ICHNOS, financiado pola Unión Europea dentro do programa Interreg, persigue a creación dunha rede de ventaniñas empresariais únicas en Galicia, na rexións de Vysocina (Chequia) e na illa de Cerdeña (Italia). Con esta iniciativa preténdese favorecer o desenvolvemento das economías locais facilitando a realización de procedementos administrativos e promover así o establecemento de empresas nestas áreas. www.ichnos-project.org

OS SUPERORDENADORES DO CESGA DAN SOPORTE DE CÁLCULO A UN PROXECTO PARA COMBATER A MALARIA

7LU0000



Atopar novos fármacos para loitar contra a malaria facendo uso dunha rede de computadores situados en 15 países é o obxectivo dun proxecto que lideran o Fraunhofer Institute for Algorithms and Scientific Computing de Alemania e o Corpuscular Physics Laboratory de Clairmont Ferrand, en Francia. Drug Discovery permite simular por ordenador como reaccionará unha determinada proteína ao unirse cunha molécula, así como determinar se esta reacción permitirá frenar a evolución dunha enfermidade.

A malaria causa actualmente a morte de preto dun millón de persoas ao ano, a inmensa maioría delas residentes nos países máis pobres. Esta doenza resulta cada vez máis difícil de curar debido a que o parásito que a provoca se está a volver resistente contra a cloroquina, o medicamento máis extendido para combater esta enfermidade, e tamén a que o mosquito que a transmite xa non responde aos insecticidas comúns.

Para facer fronte a estes problemas púxose en marcha un proxecto chamado WISDOM, que é acrónimo de

Wide In Silico Docking On Malaria, pero que tamén significa sabedoría en inglés. Esta iniciativa ten como obxectivo unir a potencia de milleiros de computadores distribuídos por todo o Planeta coma se fosen un único supercomputador virtual, e empregala para deseñar fármacos por ordenador.

O descubrimento de novos fármacos será posible grazas a unha aplicación informática denominada Drug Discovery, desenvolvida polo Fraunhofer Institute for Algorithms and Scientific Computing de Alemania e polo Corpuscular Physics Laboratory de Clairmont Ferrand, en Francia. Drug Discovery permite simular por ordenador como reaccionará unha determinada proteína ao unirse cunha molécula, así como determinar se esta reacción permitirá frenar a evolución dunha enfermidade.

No caso da malaria, esta investigación xerou unha cantidade de datos equivalente á capacidade duns 1500 CDs. Esta información debe ser procesada, clasificada e ordenada para poder seleccionar aquelas moléculas que se mostren máis eficaces, e que se empregarán para deseñar novos fármacos. Por este motivo, é necesaria a colaboración do Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) e doutras 37 institucións de todo o mundo, que aportan os seus recursos informáticos e de almacenamento.

Os científicos involucrados neste proxecto confían en que a incorporación desta aplicación informática no deseño de fármacos permitirá tanto acurtar os tempos destinados a producir novos medicamentos como abaratar os custos de deseño dos mesmos.

Aínda que inicialmente esta rede de ordenadores se destinou á investigación en fármacos contra a malaria, non se descarta empregar este mesmo sistema na procura de remedios contra outras enfermidades.

O proxecto EGEE: unha rede de ordenadores para a ciencia

Esta investigación desenvólvese no marco do proxecto EGEE (Enabling Grids for e-Science), unha iniciativa na que participa activamente o CESGA, e que ten por obxectivo facilitar o acceso a investigadores e empresas de todo o mundo a importantes recursos computacionais, independentemente da súa localización xeográfica. Isto lograrase mediante a creación da maior rede grid de ordenadores existente ata o momento.

En España, ademais do CESGA, aportan recursos computacionais para loitar contra a malaria as seguintes institucións: CIEMAT, CNB-UAM, IFCA (CSIC), IFIC (CSIC), INTA, PIC, UNIZAR e UVP-GryCAP

A BUSCA DE NOVOS FARMACOS

O **docking molecular computacional**, en ocasións chamado **apantallamento virtual**, **docking de ligandos** ou **binding de proteínas**, é unha técnica de investigación que permite predicir se unha pequena molécula, chamada **ligando**, poderá interaccionar cunha proteína involucrada en procesos metabólicos celulares causantes dunha enfermidade. Isto conséguese mediante o modelado da interacción proteína-ligando: se a xeometría deste par é complementaria e involucra interaccións biomecánicas favorables, o ligando potencialmente interaccionará coa proteína xa **in vitro** ou **in vivo**. Esta interacción proteína-ligando pode tanto inhibir a función da proteína (**ligando antagonista**) como favorecela (**agonista**). Estas técnicas permítenlles aos investigadores chequear rapidamente enormes bases de datos de potenciais fármacos fronte a unha proteína obxectivo como as pertencentes a parásitos causantes da malaria, obtendo posibles candidatos e permitindo reducir amplamente o traballo de laboratorio necesario.

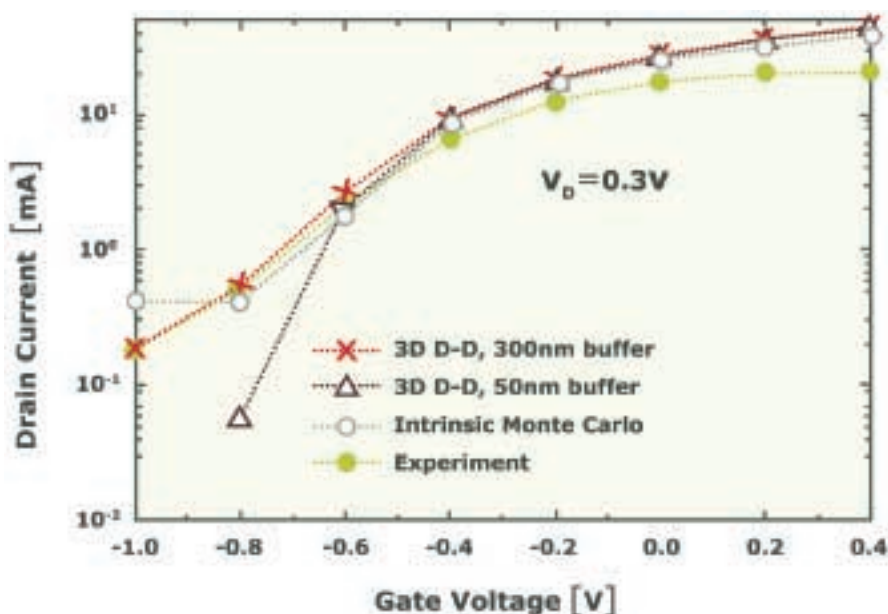


GRÁFICO COMPARATIVO DOS RESULTADOS OBTIDOS MEDIANTE EXPERIMENTOS CON MODELOS REAIS, SIMULACIÓN MONTE CARLO E SIMULACIÓN REALIZADAS POLO GRUPO DE ARQUITECTURA DE ORDENADORES (300nm E 50nm). PODE OBSERVARSE O ACHEGAMENTO DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS ÁS SIMULACIÓN REALIZADAS POLO GRUPO DA USC.

SIMULACIÓN DE DISPOSITIVOS SEMICONDUCTORES



O Grupo de Arquitectura de Computadores do Departamento de Electrónica e Computación da USC acolle unha liña de investigación centrada

na investigación de dispositivos HEMT (High Electron Mobility Transistors), un tipo de dispositivos novos moi velozes compostos por materiais como arseniuro de galio e aluminio ou arseniuro de galio e indio en lugar de silicio, o material que domina na tecnoloxía actual.

Idealmente, o composto co que se fabrican estes dispositivos debe estar formado por un 20% de indio e un

80% de galio. Non obstante, é pouco frecuente que se acaden estas proporcións exactamente, e o grao de impureza dos materiais co que o transistor está fabricado fai que varíe a corrente que circula por el.

Por este motivo, a simulación numérica é extremadamente importante para o desenvolvemento deste proxecto, que se está a levar a cabo en colaboración co Nanoelectronics Research Centre da Universidade de Glasgow, xa que esta técnica fai posible obter datos sobre a influencia destas impurezas na corrente e, por tanto, sobre a fiabilidade do dispositivo.

O profesor Antonio García Loureiro, director desta liña de traballo, explica así a importancia da investigación en simulación de dispositivos transistores:

“O uso de simuladores está cada vez máis extendido en todos os campos da enxeñaría e da investigación experimental en xeral. Lograr simuladores que reproduzan exactamente os mesmos resultados que os alcanzados no laboratorio é fundamental, xa que en xeral todos os procesos de laboratorio son moitísimo máis caros, complexos, lentos e en múltiples ocasións tamén contaminantes”.

CRÉASE RECERCAT, O SERVIDOR DE ACCESO ABERTO A DOCUMENTOS DE INVESTIGACIÓN INÉDITOS

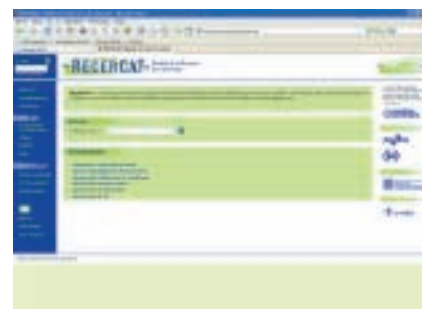


O Consorci de Biblioteques Universitaries de Catalunya (CBUC) e o Centre de Supercomputació de Catalunya (CESCA) puxeron en marcha RECERCAT (www.recercat.net), o primeiro servidor de acceso aberto do estado a documentos de investigación inéditos. Trátase dun depósito institucional cooperativo de documentos dixitais organizado en materias de investigación que inclúe o que se coñece como literatura gris (é dicir, artigos inéditos, comunicacións a congresos, informes de investiga-

ción, working papers, etc.).

Este servizo comezará ofrecendo documentos das universidades e centros de investigación cataláns, pero está aberto á participación de todas as universidades e centros de investigación. Os obxectivos do novo servizo son darlles máis visibilidade aos traballos dos investigadores e das institucións que os amparan, ofrecer acceso aberto a estes documentos e contribuír á súa mellor protección e conservación. En definitiva, contribuír de maneira decidida a facilitar o

acceso aberto a todos aqueles contidos que foron elaborados, en moitos casos, con fondos públicos.



<http://www.recercat.net>



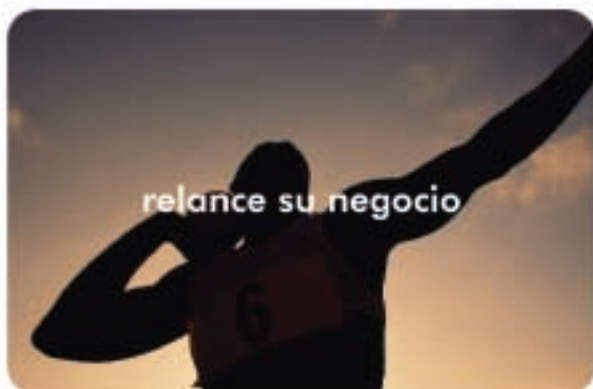
TURGALICIA
DIRECCIÓN XERAL DE TURISMO

www.turgalicia.es

TODOS LOS RECURSOS Y ALOJAMIENTOS TURÍSTICOS DE GALICIA



XUNTA DE GALICIA
CONSELLERÍA DE INNOVACIÓN
E INDUSTRIA



relance su negocio

actualizaciones
de sistemas
HP AlphaServer

Para usuarios de Tru64
UNIX/Open VMS

Para obtener más información

902 10 14 14

http://www.hp.es/innovacion/galicia_servicio



DELL™

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

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



PowerEdge™ SC1425

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

www.dell.es/hpcc

902 119066