

CESGA: 16 year activity in Research & Innovation Collaborations

Javier García Tobío
(Managing Director, Galicia Supercomputing Centre)

INDEX

- What is supercomputing
- **CESGA:**
 - Services and Facilities
 - FINIS TERRAE
 - C2SRC
- Main **HPC** Initiatives in Spain

- **A supercomputer** is a **computer** that leads the world in terms of processing capacity, particularly speed of calculation, at the time of its introduction (William C. Norris. CDC 1964).
- A supercomputer is a computer that is only one step behind the most demanding research necessities. (William C. Norris. CDC)

A **supercomputer** is a computer that is at the **frontline of current processing capacity**. (Wikipedia)

Now, mainly aggregate **off-the-shell** computers linked with high performance networks.

- **Capability computing:** solve a single large problem in the shortest amount of time.
- **Capacity computing:** solve large problems or many small problems.
- **Finis Terrae:** Designed as a mix capacity-capability

ESTABLISHED IN 1993 IN SANTIAGO DE COMPOSTELA (SPAIN)



CESGA



SANTIAGO DE COMPOSTELA



MISSION STATEMENT

To provide high performance computing and advanced communications resources and services to the scientific community of Galicia and to the Spanish National Research Council (CSIC), as well as, to institutions and enterprises with R&D activity.

To promote high quality research in Computational Science in close collaboration with the research community from Galicia as well as from other regions or countries all over the world; contributing in this way to the advancement of science, to transfer technology to industry and administrations , and as consequence, to the welfare of society as a whole.

LEGAL ENTITIES

- Public Company
- Public Foundation

PARTNERS

- Regional Government of Galicia
- National Research Council of Spain



STRATEGIC PLAN

TO SOLVE:

- Daily needs of researchers (not only large problems).
 - Heterogeneous programs.
 - Multiple O.S.
 - Running legacy and new codes.
- Based on Open Source Codes.
- Capability and Capacity.
- Complement offer with other centres.
- Development of Computational Science
- Reduction of “time-to-solution”

CURRENT CESGA's COMMUNITY OF USERS

- Galician Universities
- Galician Regional Government Research Centres
- Spanish National Research Council (CSIC) Centres
- Other public or private organizations worldwide
 - Hospital R&D Departments
 - Industries R&D Departments
 - Technological & Research Centres
 - Other Universities worldwide
 - Non-profit R&D organizations

CESGA's ACTIVITY AREAS

HPC, HTC AND GRID COMPUTING	
RESOURCES	SERVICES
HPC, HTC Servers, GRID Servers, Scientific Software Applications	Code Optimization, Problem Definition, Parallelisation, User Support...

DATA STORAGE	
RESOURCES	SERVICES
Storage Servers	Critical Storage Systems

COMMUNICATIONS	
RESOURCES	SERVICES
RECETGA Science and Technology Network of Galicia	DNS, Hosting, Mail Servers, Mailing List, FTP, News, Mirrors, Multicast, Video- conference, MCU / Gateway, Proxycache, Network Management, Security Systems, Statistics...

RTD PROJECTS

Viability Analysis,
Proposal Development,
Consortium Creation,
Project Negotiation,
Management...

TRAINING (EDUCATION)

Workshops and Training
Courses for Users

DISSEMINATION

Web, Publications,
Presentations, Seminars,
Scientific Conferences...

e-LEARNING & COLLABORATION TOOLS	
RESOURCES	SERVICES
e-Learning Room Network and e-Learning Platform, "AULA CESGA", Access Grid, Room Network	Analysis, Development, Implementation and Hosting of Solutions

TECHNOLOGY TRANSFER & e-BUSINESS	
RESOURCES	SERVICES
Galicia's e-Business Leveraging Centre	Viability Analysis, Project writing, Partnerships Formation...

GEOGRAPHIC INFORMATION SYSTEMS	
RESOURCES	SERVICES
Map Servers, Geographical Data Bases	Analysis, Development Implantation and Lodging Solutions

TECNOLOGY

CESGA'S TECHNOLOGICAL EVOLUTION: INSTALLED SERVERS

1993

VP 2400



2.5 GFLOPS

1998

VPP 300



14.1 GFLOPS

AP 3000



12 GFLOPS

1999

HPC 4500



9.6 GFLOPS

2001

SVG



9.9 GFLOPS

2002

HPC 320



64 GFLOPS

BEOWULF



16 GFLOPS

2003

SUPERDOME



768 GFLOPS

2004, 2005, 2006

SVG



4,142 GFLOPS

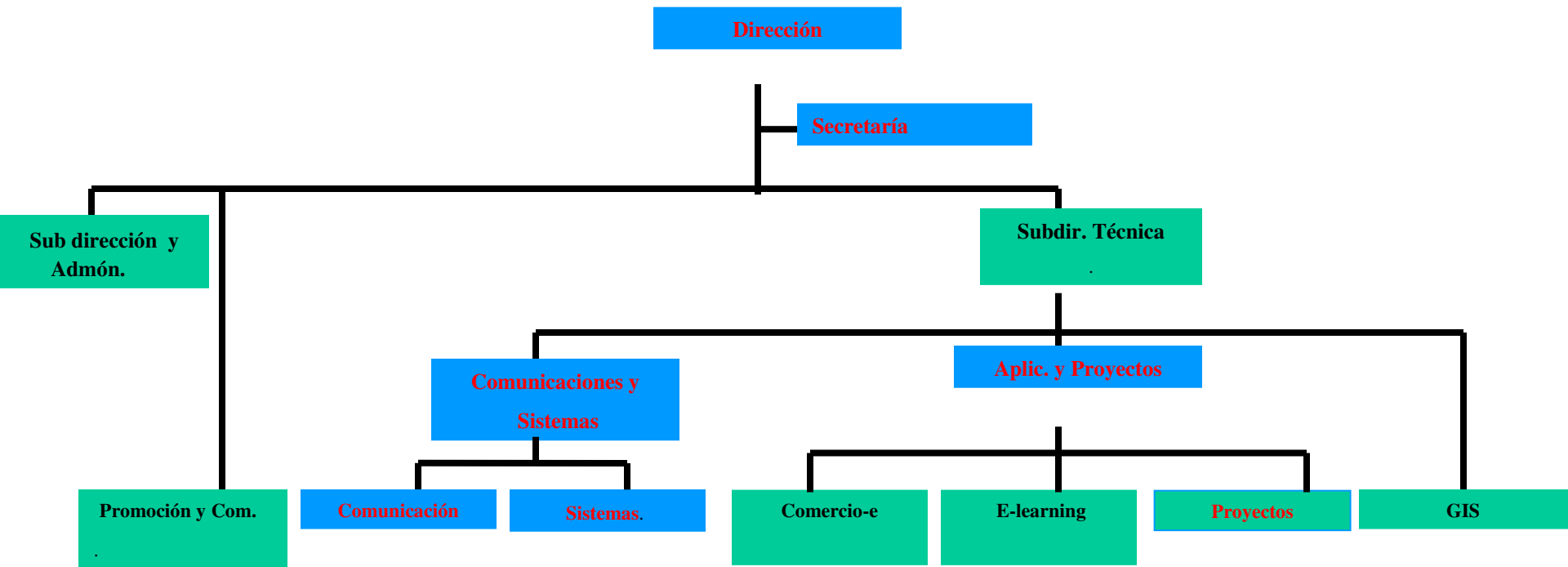
2007

FINISTERRAE



16,000 GFLOPS

Installation Year	1993	1998	1999	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007
Capacity				SVG			SVG	SVG	SVG	
Capability	VP2400	VPP300E AP3000	HPC4500		HPC320	SUPERDOME				FINIS TERRAE



Organization evolution

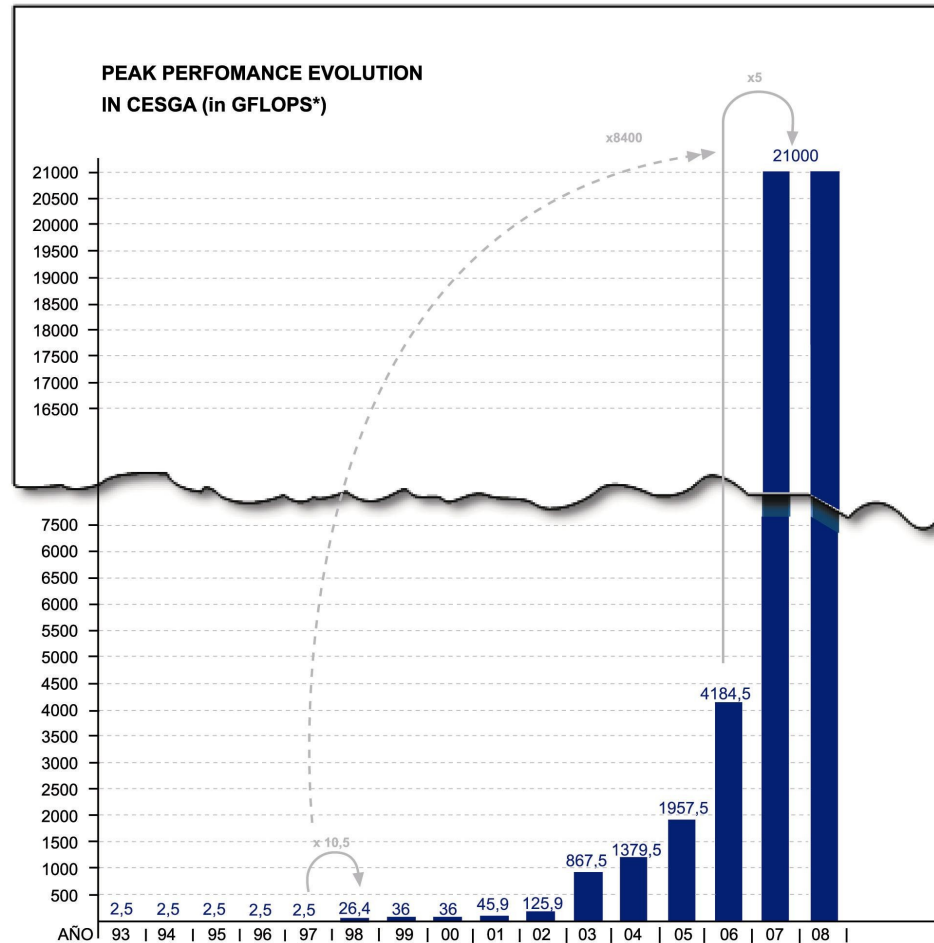
In "blue" until 1998

In "green" until 2004

STAFF CESGA 2008

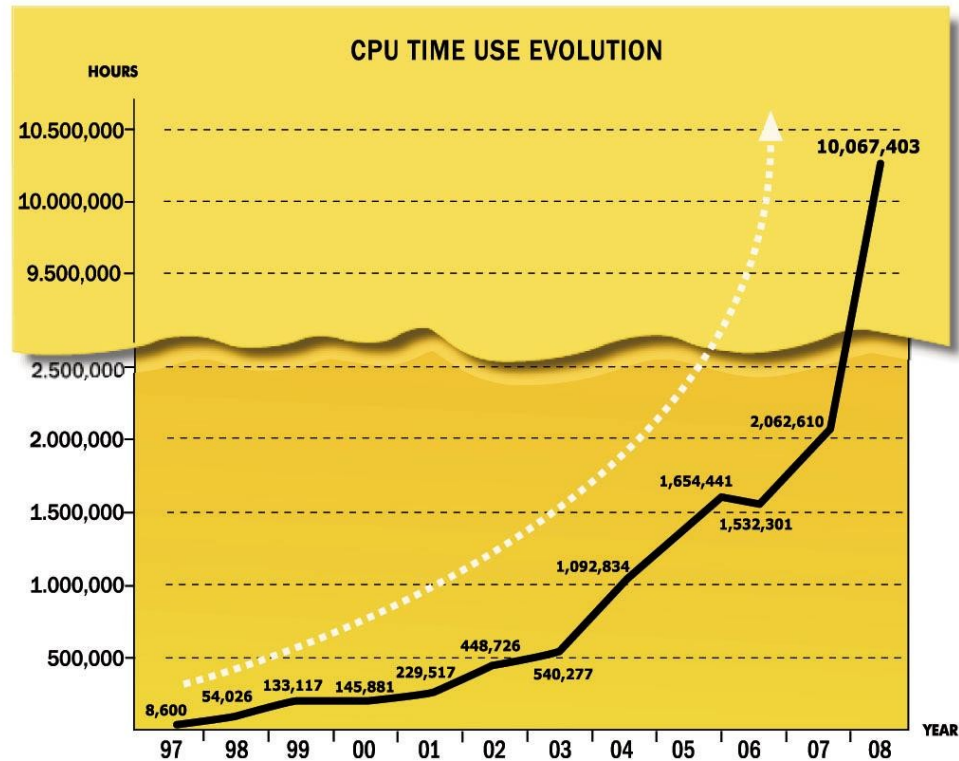


CESGA's PEAK PERFORMANCE EVOLUTION



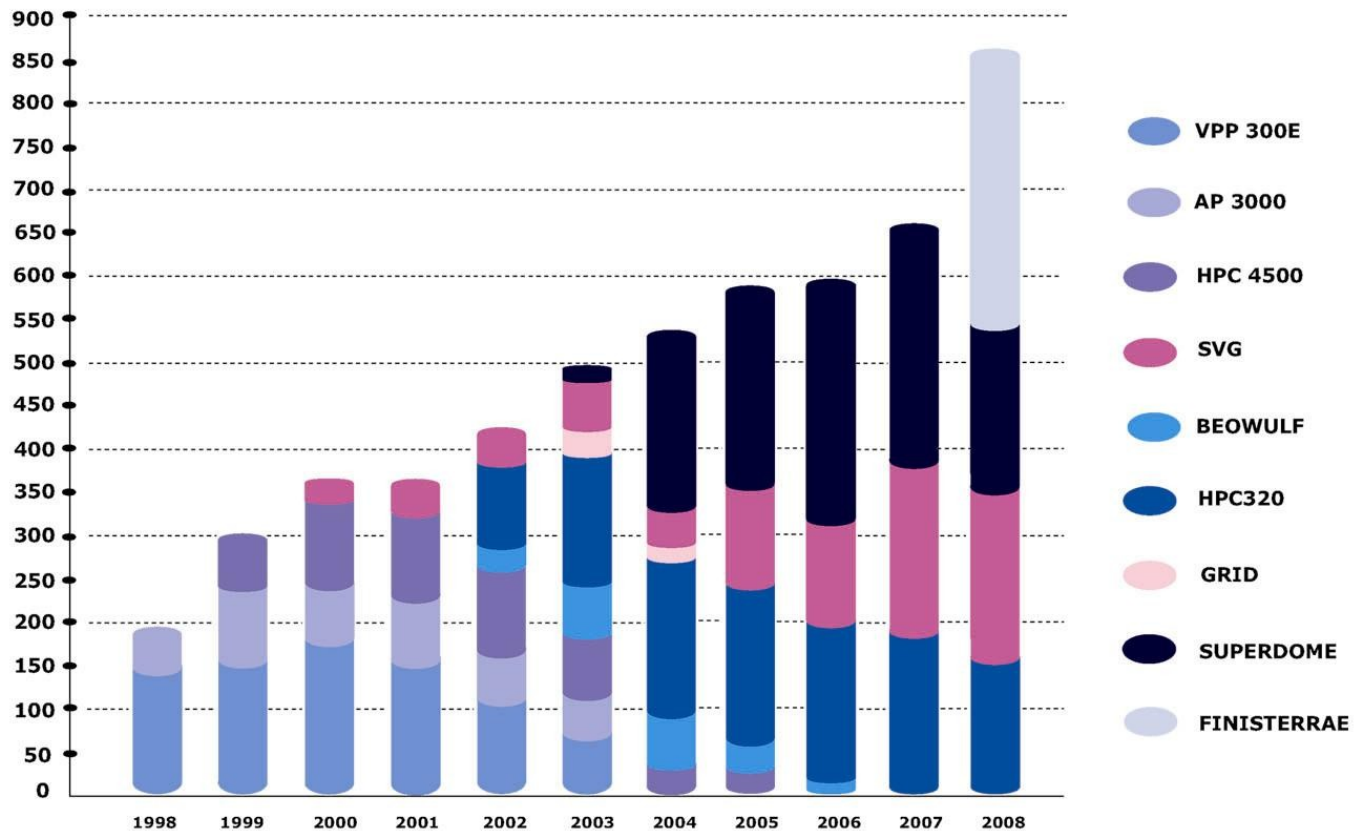
* 1GFLOPS= 1.073.741.824 (floating point operations per second)

CPU TIME USE EVOLUTION AT CESGA



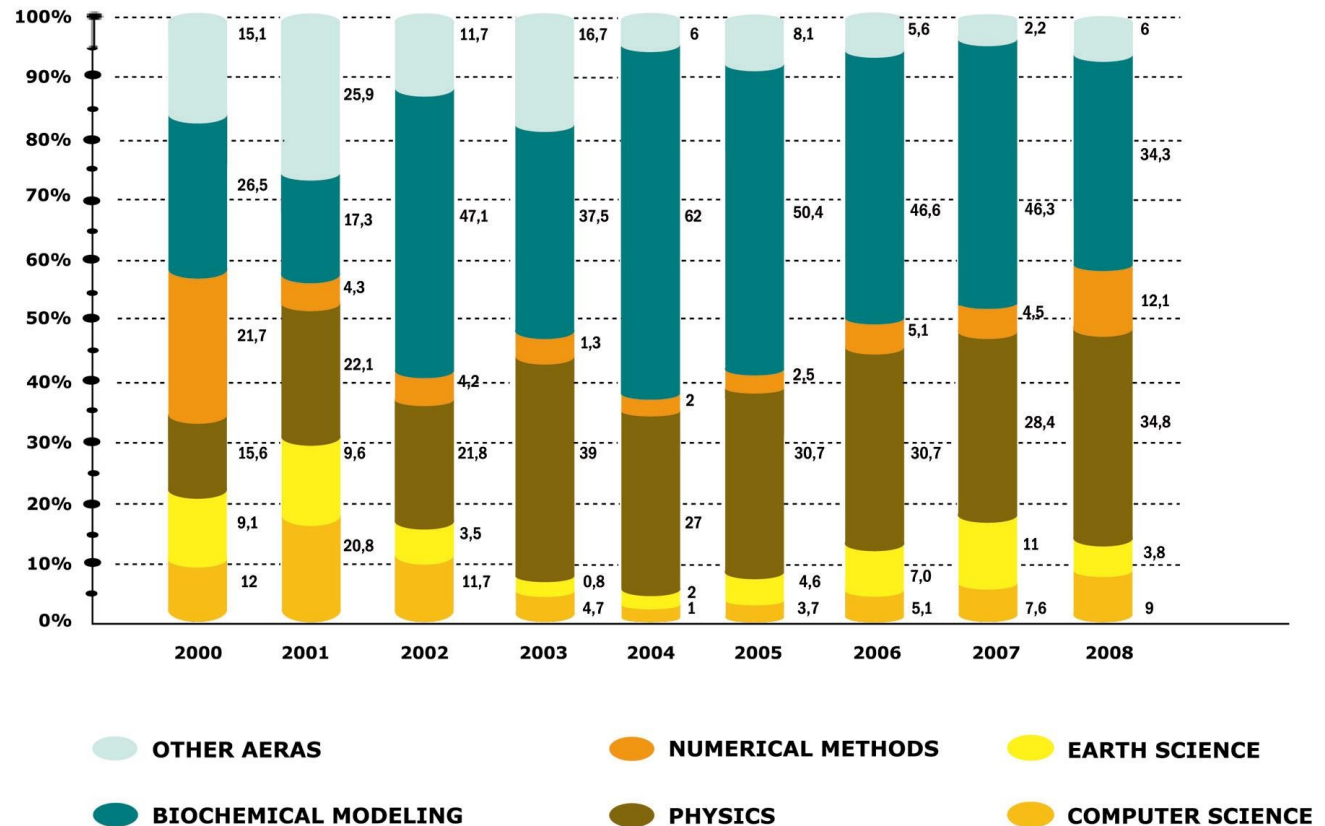
DEMAND OF COMPUTING RESOURCES AT CESGA

USER ACCOUNT EVOLUTION PER SYSTEM PER YEAR



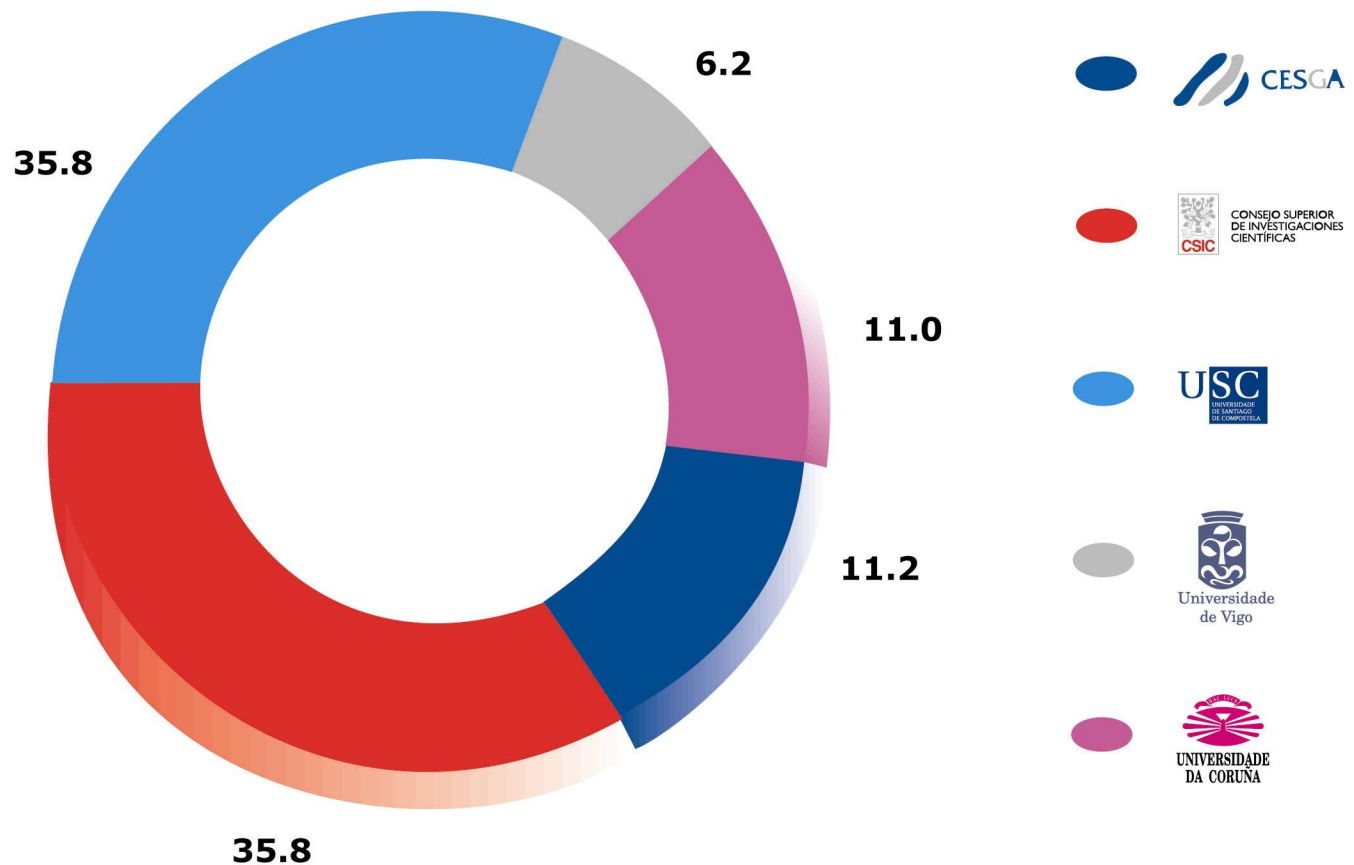
CPU USE DISTRIBUTION BY RESEARCH FIELD

CPU USE DISTRIBUTION BY RESEARCH AREA

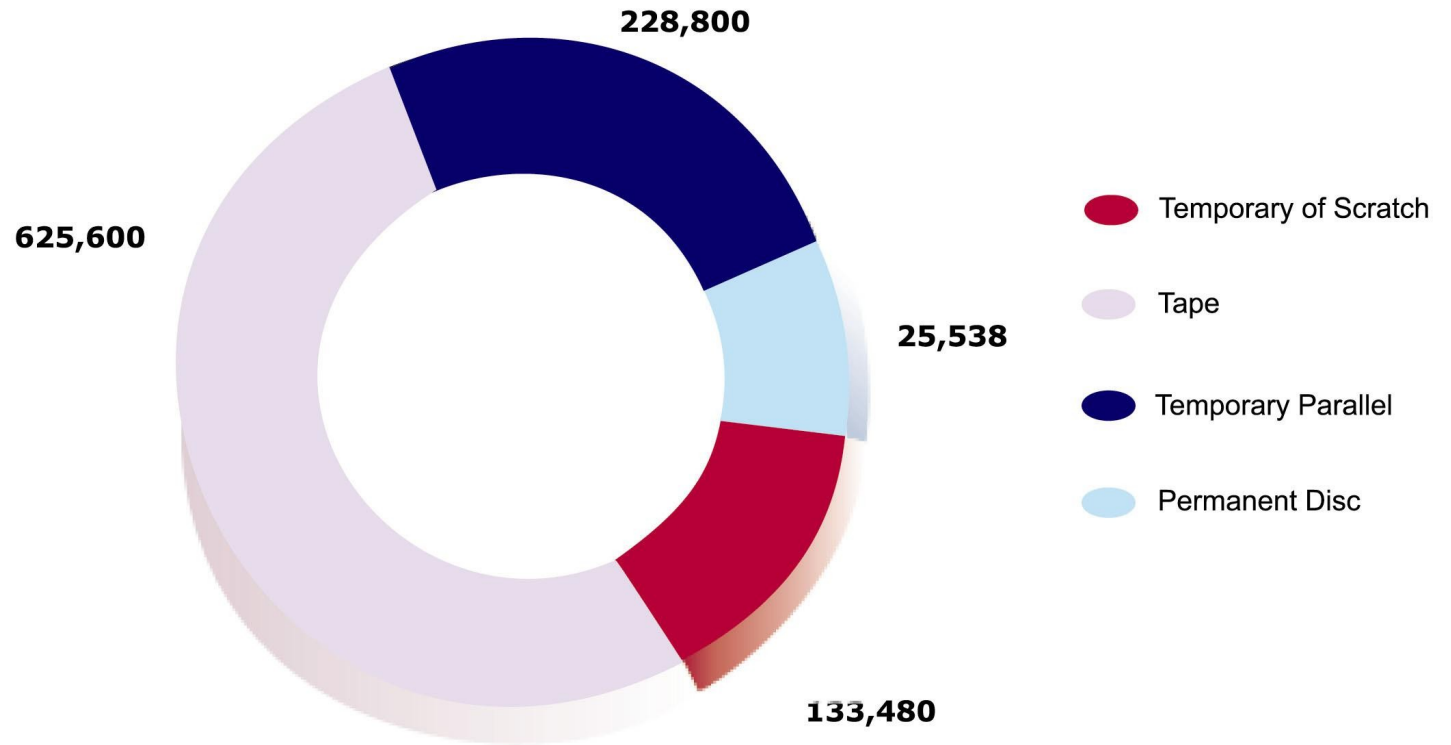


CPU USE DISTRIBUTION BY INSTITUTION IN 2008

CPU USE DISTRIBUTION BY INSTITUTION



DATA IN STORAGE SYSTEM IN 2008 (GB)



TOTAL

1,013,422

GRUPOS DE INVESTIGACIÓN USUARIOS



SOFÍA CALERO DÍAZ

Organización:

Universidad Pablo de Olavide

(colaboración co Instituto Nacional
del Carbón, INCAR-CSIC)

Departamento:

**Departamento de Sistemas Físicos,
Químicos y Naturales**

Creación: O Grupo RASPA de Simulación
en Materiais creouse en 2007.

Membros: O Grupo está formado por
8 membros, aínda que nesta colaboración
só participamos dous.

Colaboracións:

Colaboración co INCAR, CSIC Oviedo,
Universidade de Amsterdam, Universidade
de Delft, Universidade Católica de de Lovaina,
Universidade libre de Bruxelas, Universidade
de Berkeley, Universidade de Northwestern,
entre outras.

Páxina web:

[http://www.upo.es/depa/webdex/quimfis/
miembros/Web_Sofia/Sofia.htm](http://www.upo.es/depa/webdex/quimfis/miembros/Web_Sofia/Sofia.htm)

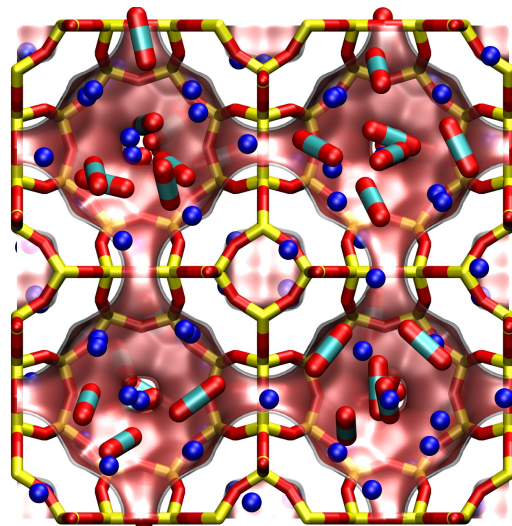
Simulación Molecular.

Líneas de investigación:

Simulación molecular en sistemas confinados. Estudo de procesos de adsorción e transporte molecular en materiais porosos. Estudo de procesos de separación. Estudo de procesos de captura e almacenamento. Estudos de separación de isómeros.

Relación co CESGA:

Iniciouse no **ano 2008** por medio dunha colaboración activa co grupo do Dr. Parra e a Dra. Ovin levando a cabo estudos de absorción en materiais porosos. Estudan estes procesos a nivel molecular e desenvolven mecanismos de campos de forza que permitan reproducir os resultados experimentais. Utilizan o código **RASPA** **Finis Terrae**, e usan os servizos do CESGA para correr parte das simulacións.



Imaxe extraída do noso propio traballo. Representa unha ceolita tipo A con catións sodio e con dióxido de carbono no seu interior. Foi realizada polos membros do grupo e unha imaxe igual, pero noutras cores, publicouse no artigo mencionado no apartado anterior.



BALBINA VIRGINIA CASAS MÉNDEZ

Organización:

**Universidade de Santiago de Compostela
USC**

Departamento:

Estadística e Investigación Operativa.

Grupo: GI-1914-Modelización Estadística e
Aplicacións.

Creación: Xuño de 2006

Membros: 28 membros da Universidade
de Santiago.

Colaboracións:

Universidade de A Coruña e Universidade
de Vigo, entre outras.

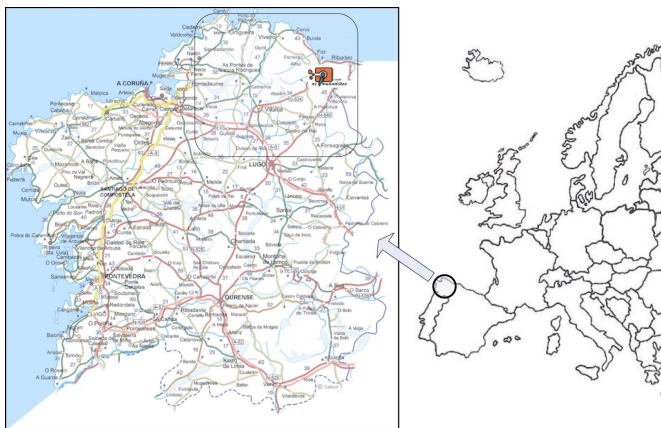
Páxina web: <http://eio.usc.es/>

Líneas de investigación:

Modelos de predición. Datos categóricos. Técnicas de montaxe Bioestadística. Técnicas de remostraxe. Series de tempo. Análise Multivariante. Modelos de regresión. Inferencia non paramétrica. Datos censurados. Xeoestatística. Equilibrio en xogos non cooperativos. Xogos cooperativos. Votación e índices de poder. Asignación de custos e deseño de tarifas. Aplicacións da teoría de xogos. Modelos interactivos da IO. Decisión e programación multicriterio e multinivel. Programación matemática.

Relación co CESGA:

No **ano 2007** comeza a utilizar o **SUPERDOME** do CESGA para executar problemas de optimización coa aplicación X-Press.



Area xeográfica da cooperativa na que se fixo o estudo de ordes de propietarios e rutas de parcelas a seguir por unha cultivadora de forraxe.



CARLOS M. HERRERA MALIANI

Organización:

Consejo Superior de Investigaciones Científicas, CSIC

Departamento:

Biológica de Doñana, Departamento de Ecología Evolutiva.

Creación: Hai aproximadamente 20 anos.

Membros: 12 membros (Consejo Superior Investigaciones Científicas, CSIC)

Páxina web: www.plant-animal.es

Líneas de investigación:

Ecoloxía e evolución das relacións planta-animal.

Estudos de variación xeográfica en gradientes de selección; estruturas xenéticas, filoxeografía molecular, evolución filoxenética e xenética de poboacións.

Relación co CESGA:

Dende 2008 usuario dos servizos de computación do CESGA; concretamente dos clusters [Finis Terrae](#) e [SVGD](#).

Utiliza diversas aplicacións para efectuar análises xenéticas de poboacións vexetais.



Interrelación entre plantas e insectos.



ANA BELÉN PORTO PAZOS

Organización:

Universidade da Coruña. Facultade de Informática

Area:

Tecnoloxías da Información e das Comunicacions/Ciencias da Computación e Intelixencia Artificial.

Creación: O grupo RNASA é de 1993. O noso subgrupo creouse en 2007 e fórmano 3 investigadores da Universidade da Coruña e 1 do European Center for SoftComputing.

Colaboracións: Instituto de Neurobioloxía Ramón e Cajal do CSIC(Madrid). European Center for SoftComputing (Mieres, Asturias).

Páxina web: <http://sabia.tic.udc.es>

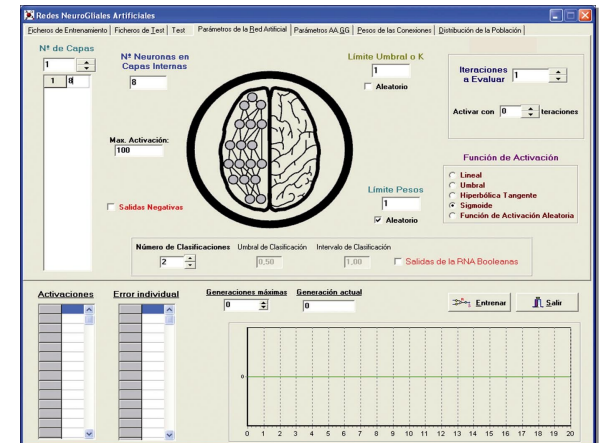
Líneas de investigación:

Redes de neuronas artificiais, computación evolutiva, modelos computacionais do sistema nervioso. Partimos de que as limitacións existentes nos Sistemas Conexionistas actuais poden deberse, ben a que non implementan certas capacidades das neuronas biolóxicas, ben á non inclusión nas redes artificiais doutros elementos diferentes ás neuronas que tamén participan no procesamento da información nos sistemas biolóxicos. Este último suposto viuse reforzado polos descubrimentos das últimas décadas no campo da neurociencia. Tratamos de incorporar novos elementos aos sistemas conexionistas que simulen máis fielmente o funcionamento do sistema nervioso e iso lles permita procesar mellor a información, axudando á resolución dos problemas de mozo máis eficiente.

Relación co CESGA:

Iníciase no ano 2007. Utilizamos **SVG** e **Finis Terrae**, cunha aplicación propia desenvolvida en linguaxe C.

Ferramenta de simulación desenvolvida polo propio grupo para a investigación en Sistemas Conexionistas





M. CARMEN SAN MARTÍN PASTRANA

Organización:

Centro Nacional de Biotecnología (CSIC)

Area:

**Departamento de Estructura de
Macromoléculas.**

Grupo: Biología Estructural (Procesamiento
de imaxe).

Creación: Xaneiro 2007. 4 membros do CSIC
e Universidade Autónoma de Madrid.

Colaboracións: Universidade de Alabama
en Birmingham; Princeton University;
Brookhaven National Laboratory;
Universidade Autónoma de Madrid.

Páxina web:

<http://www.cnb.uam.es/content/research/macromolecular/sanmartin>

Líneas de investigación:

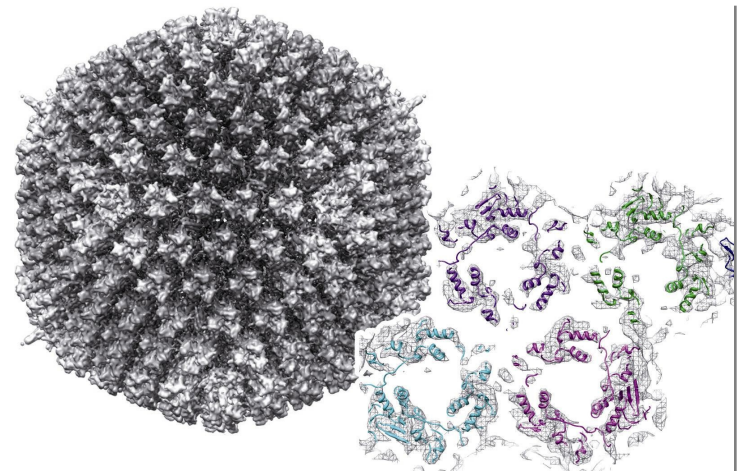
Procesamento de imaxe en bioloxía estrutural.

Análise estrutural detallada da ensamblaxe da cápsida de adenovirus.

Relación co CESGA:

Dende 2008 utilizan **Finis Terrae**, con software de desenvolvemento propio ou doutros laboratorios de investigación (non comercial).

*Mapa tridimensional dun
adenovirus.*





JUAN ANTONIO AÑEL CABANELAS

Organización:

EPhysLab, Facultade de Ciencias de Ourense, Universidade de Vigo.

Area:

Física de Atmosfera e de Océano.

Grupo: EPhysLab, Física da Atmosfera e do Océano.

Creación: 1998

Colaboracións: Universidade da Coruña, U. Complutense de Madrid, U. de Extremadura, U. Pablo de Olavide, U. de Barcelona, U. de Aveiro (Portugal), U. de Lisboa (Portugal), MétéoFrance (Francia), U. de Manchester (Reino Unido), U. of Heidelberg (Alemania), Centro Lídor de Camagüey (Cuba), U. de Costa Rica (Costa Rica), U. de Sao Paulo (Brasil), Russian Research Institute for Hydrometeorological Information-World Data Center (Rusia), Johns Hopkins University (EUA), National Center for Atmospheric Research (EUA)

Páxina web: <http://ephyslab.uvigo.es>

Líneas de investigación:

Meteoroloxía sinóptica, validación climática de modelos conceptuais, diagnóstico do clima e predición climática, índices de cambio climático, modelización climática, impactos do clima, extremos climáticos...

Relación co CESGA:

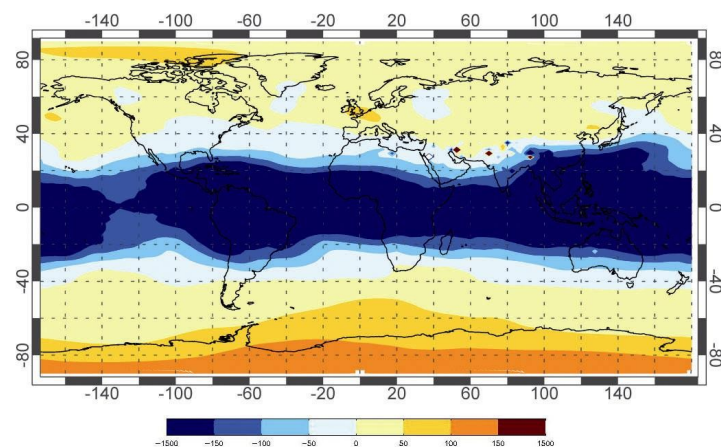
Utilizamos os servizos de HPC do CESGA.

Empregamos tanto códigos propios como de terceiros que adecuamos en cada caso.

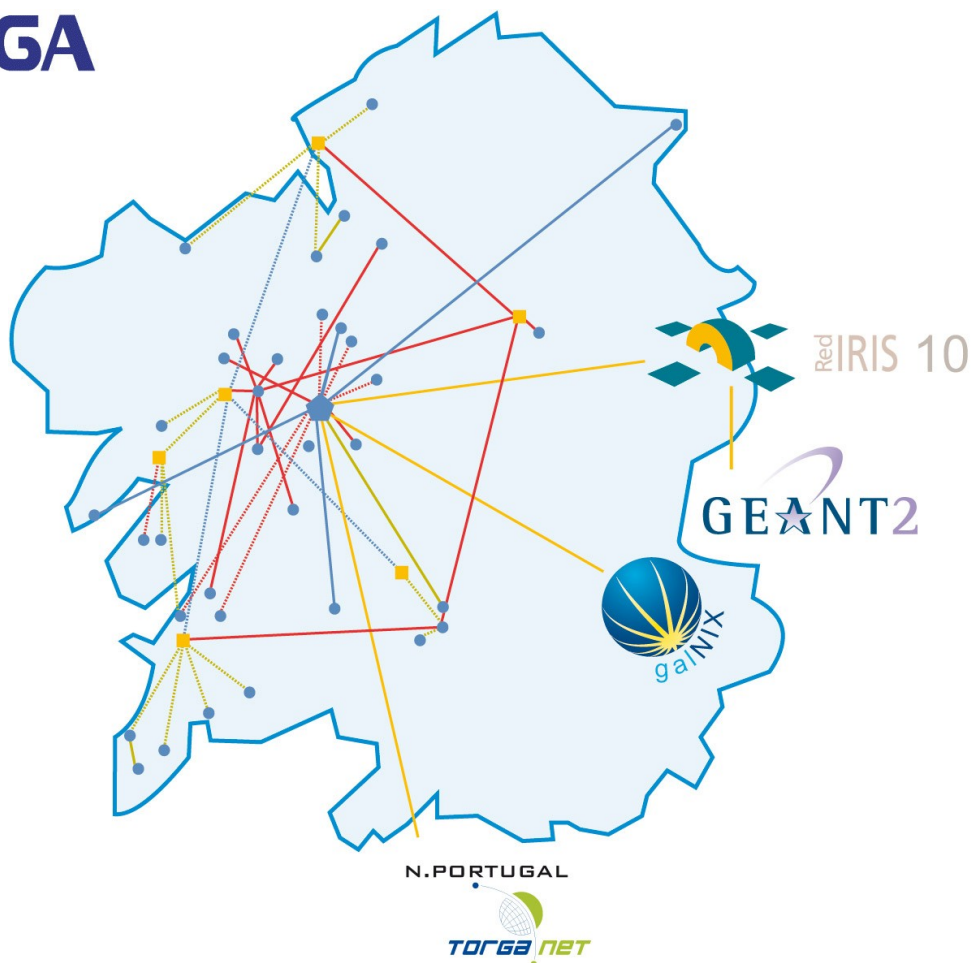
Recibimos asesoramento e axuda do persoal técnico do CESGA.

Levamos a cabo un Reto Computacional no **Finis Terrae**: “Modelización da Variación Climática da Tropopausa con Alta Resolución”.

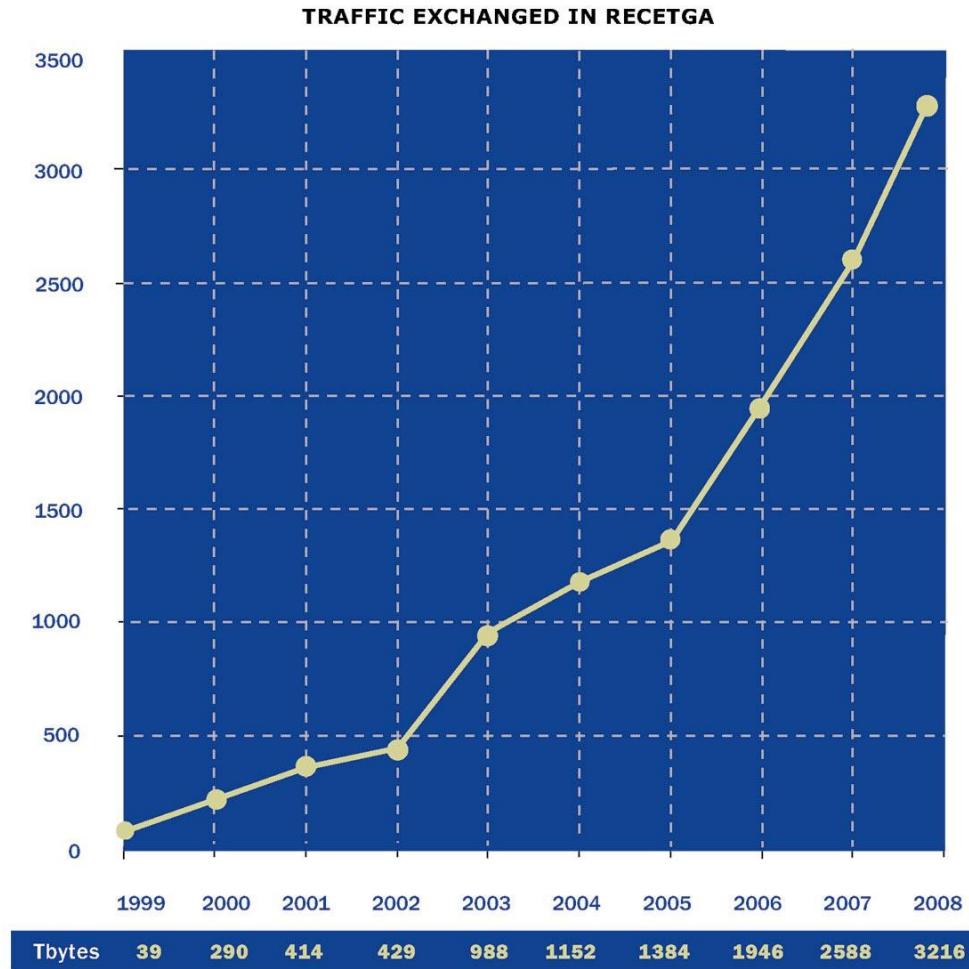
Figura calculada en Finis Terrae, na que se mostra a integración do fluído na corrente do golfo para o día 10 de decembro de 2002.



GALICIAN' SCIENCE & TECHNOLOGY NETWORK



TRÁFICO INTERCAMBIADO EN RECETGA 1999-2008

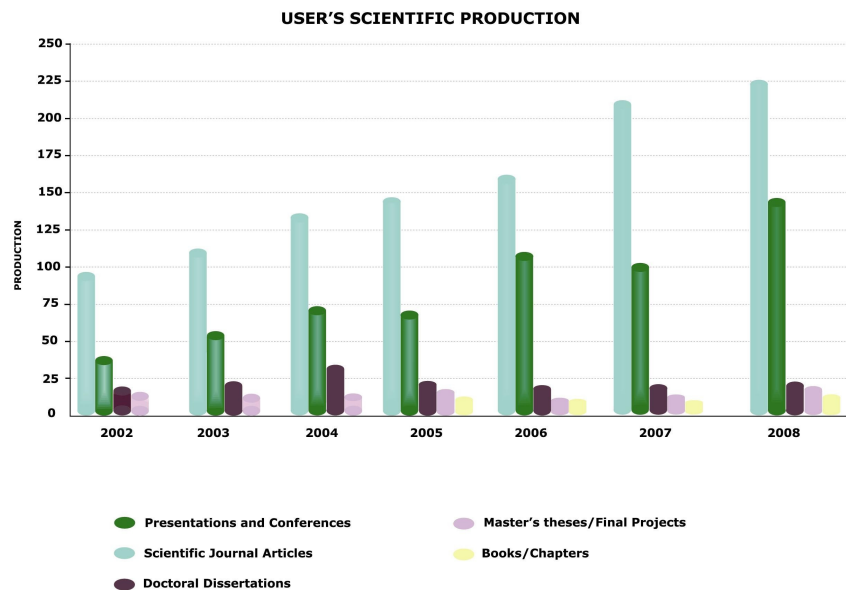


2008 RTD PROJECTS - FOUNDATION CESGA

In 2008, 27 proposals were presented to state, regional and European Calls. A **65% success rate** was achieved.

EU:	10
National Government:	7
Regional Government:	17
<u>Companies:</u>	<u>4</u>
TOTAL:	38
Thematic Net. and Tech. Platforms :	19

COMPARATIVA PRODUCCIÓN CIENTÍFICA DECLARADA POR LOS USUARIOS CESGA 2002-2008



DISTRIBUTION OF SCIENTIFIC PRODUCTION PER YEAR

	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008
SCIENTIFIC ARTICLES	93	107	134*	147	154	208	225
IN PRESS	4	8	20	16	26	19	21
SUBMITTED	16	29	26	27	23	24	31
PUBLISHED	73	70	91	104	105	165	173
PRESENTATIONS IN CONFERENCES	42	52	72*	65	105	101	148
PRESENTATIONS	33	40	53	37	53	46	60
POSTERS	9	12	35	28	52	47	88
DOCTORAL THESES	17	21	32	24	18	18	20
DEFENDED	9	4	5	9	10	11	10
PRESENTED	0	0	0	0	3	5	1
IN PROCESS	8	17	27	15	5	2	9
MASTERS THESES GRADUATE PROJECTS	12	9	12	14	5	10	14
DEFENDED	6	4	5	13	3	8	10
IN PROCESS	6	5	7	1	2	2	4
BOOKS / CHAPTERS	NA	NA	NA	5	4	3	9
ACCEPTED / IN PRESS	NA	NA	NA	4	1	1	1
SUBMITTED	NA	NA	NA	1	0	2	0
PUBLISHED	NA	NA	NA	0	3	0	8
TOTAL	169	194	256	260	301	351	416

* 8 PUBLICATIONS & 16 CONFERENCES WITH AUTHORS FROM MORE THAN ONE INSTITUTION

FINISTERRAE

EXPANDING
THE
FRONTIERS OF KNOWLEDGE

FINIS TERRAE (2007)



Spanish National Singular Scientific & Technological Infrastructure

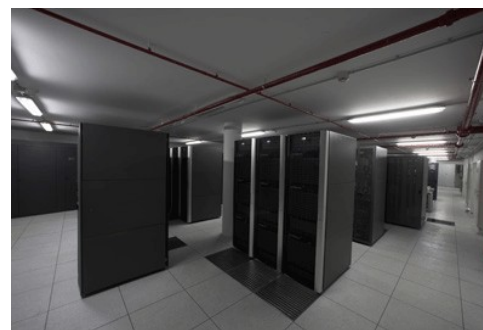
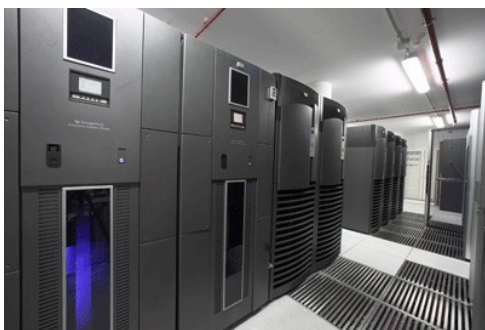
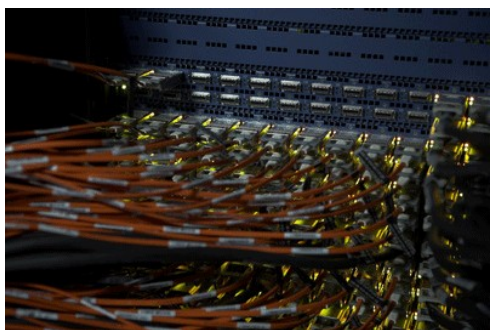
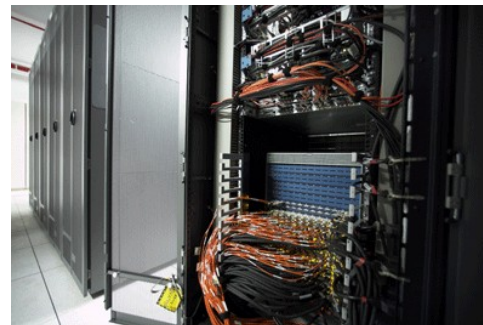
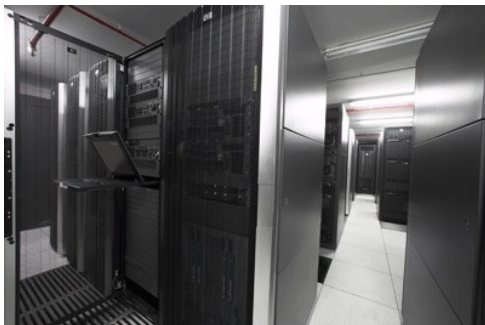
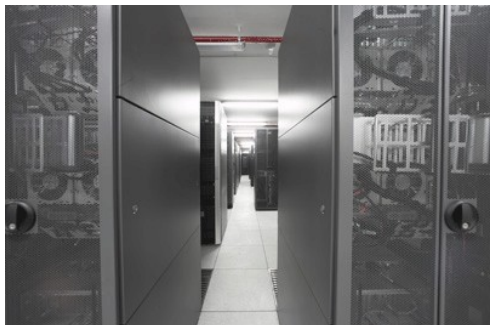
More than: **16,000 GFLOPS**

2,580 CPUs

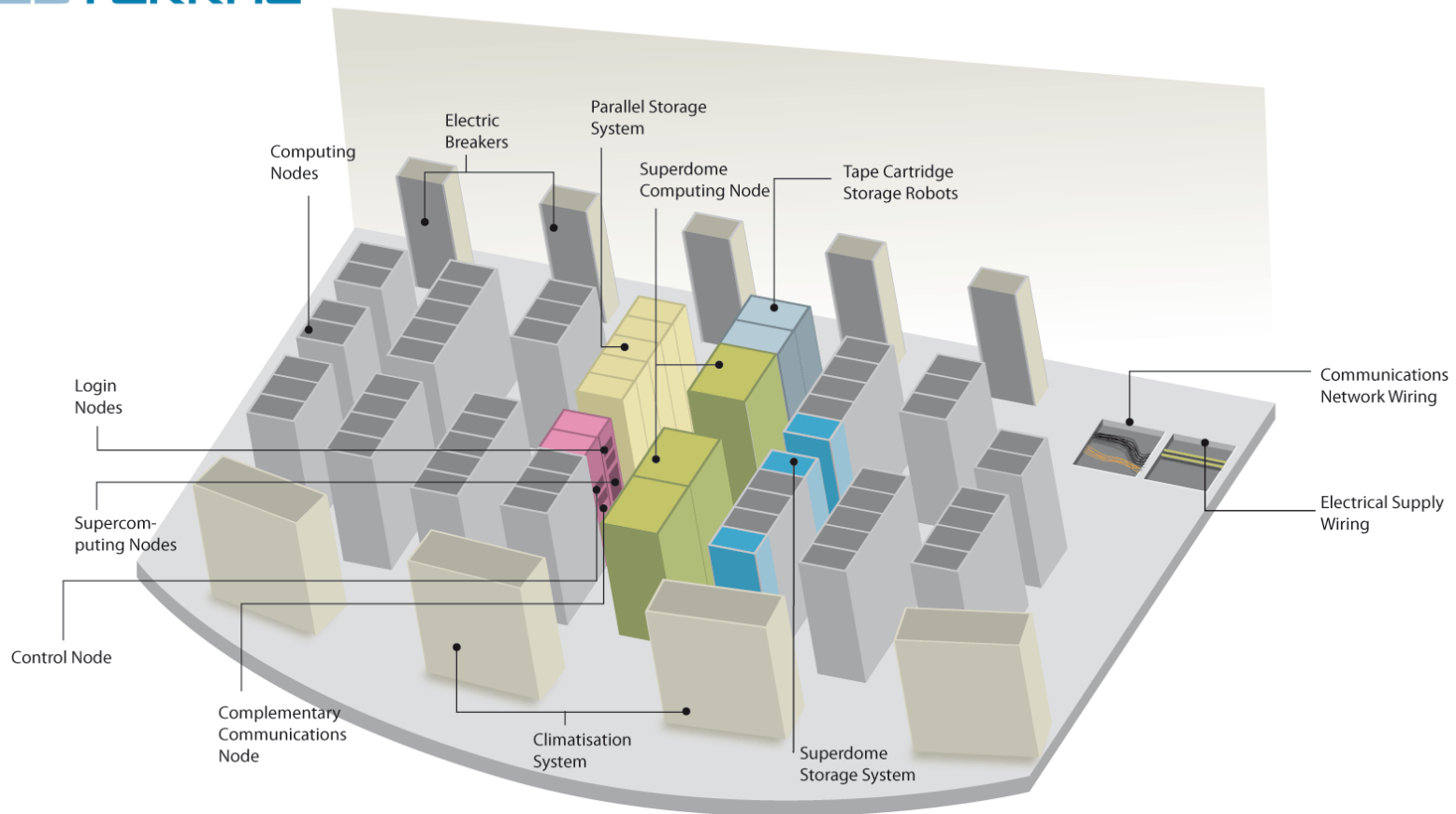
19,640 GB Memory

LINUX, UNIX, WINDOWS

TECHNICAL INFRASTRUCTURE

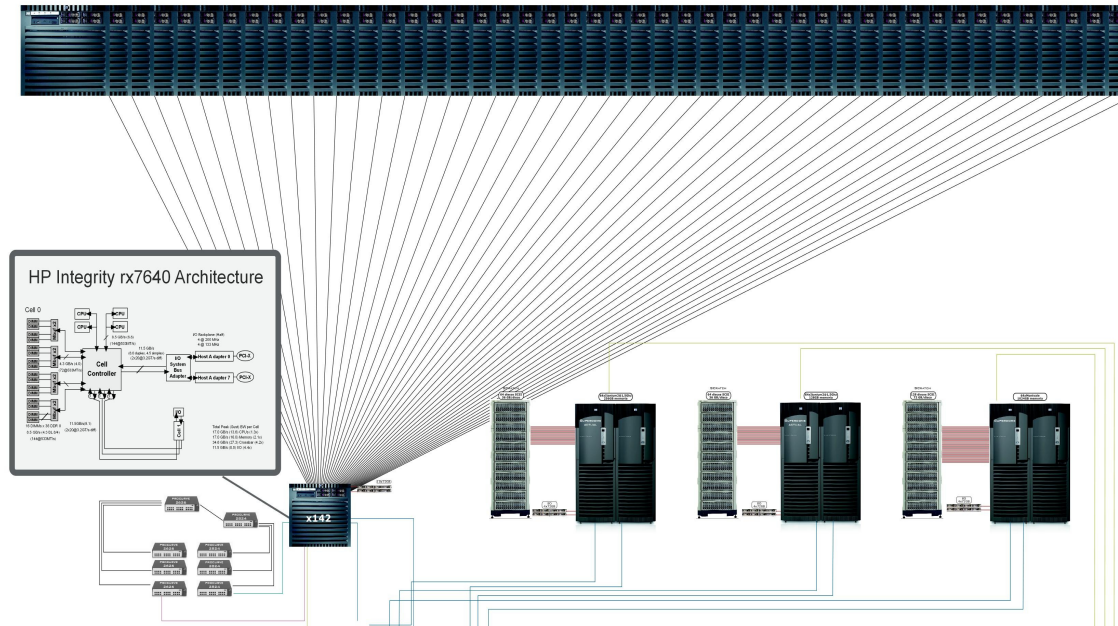


FINISTERRAE



FINIS TERRAE - COMPUTING NODES

 Fiber Chancel 2Gbits/s	 1 GbitEthernet
 Fiber Chancel 4Gbits/s	 FastEthernet
 Infiniband 10 Gbits/s	 USCSI 320 MB/S



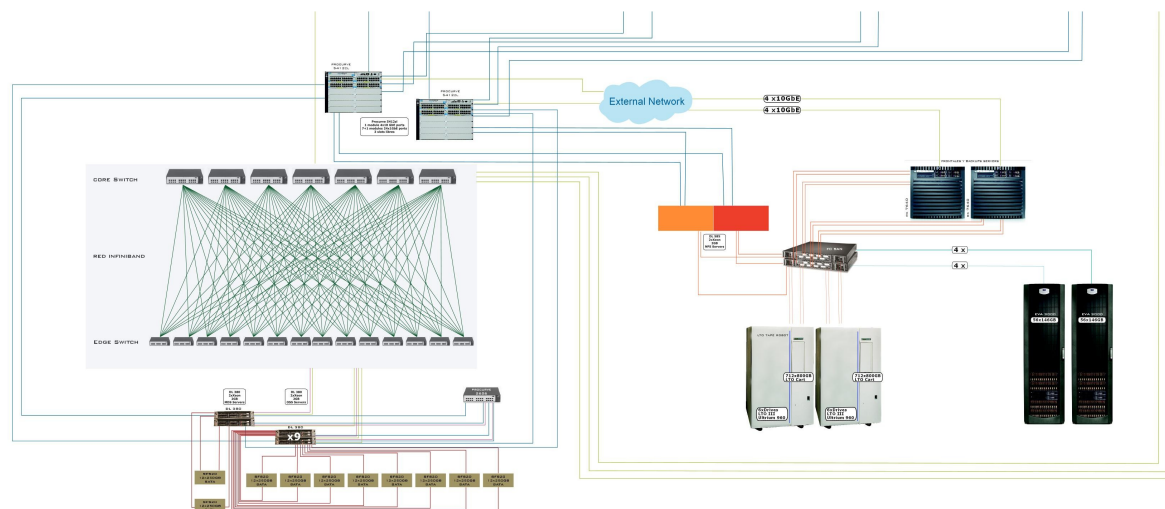
SUPERCOMPUTING NODES:

147 cc-NUMA Nodes with Itanium CPUs connected through a high efficiency **INFINIBAND** network

- 1 node: 128 cores, 1,024 GB memory
- 2 nodes: 64 CPUs, 128+256 GB memory
- 142 nodes: 16 cores, 128 GB memory
- 2 nodes: 4 cores, 4 GB memory for testing

FINIS TERRAE - DATA STORAGE RESOURCES

- Fiber Chancel 2Gbits/s
- Fiber Chancel 4Gbits/s
- Infiniband 10 Gbits/s
- 1 GbitEthernet
- FastEthernet
- USCSI 320 MB/S



DATA STORAGE:

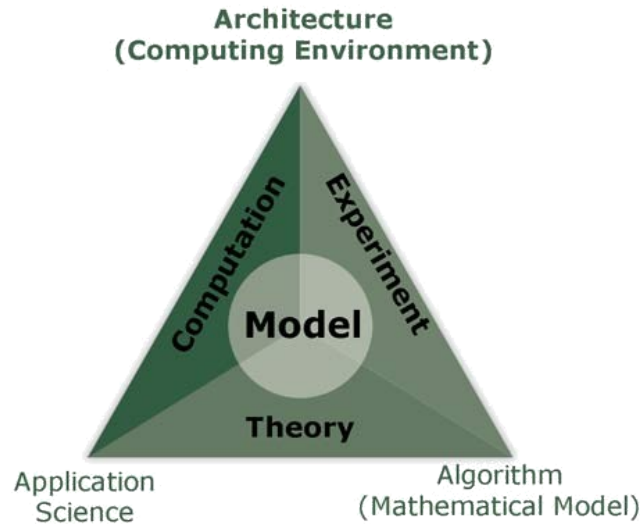
- 22 nodes with 44 cores for storage management.
- 390 TB on disk.
- 2,2 PB Robot Tape Library.

CESGA - C²SRC

CESGA COMPUTATIONAL SCIENCE RESEARCH CENTRE



COMPUTATIONAL SCIENCE



Computational Science is the field of study concerned with constructing **mathematical models** and numerical solution techniques **using computers** to analyze and **solve scientific, social scientific and engineering problems.**

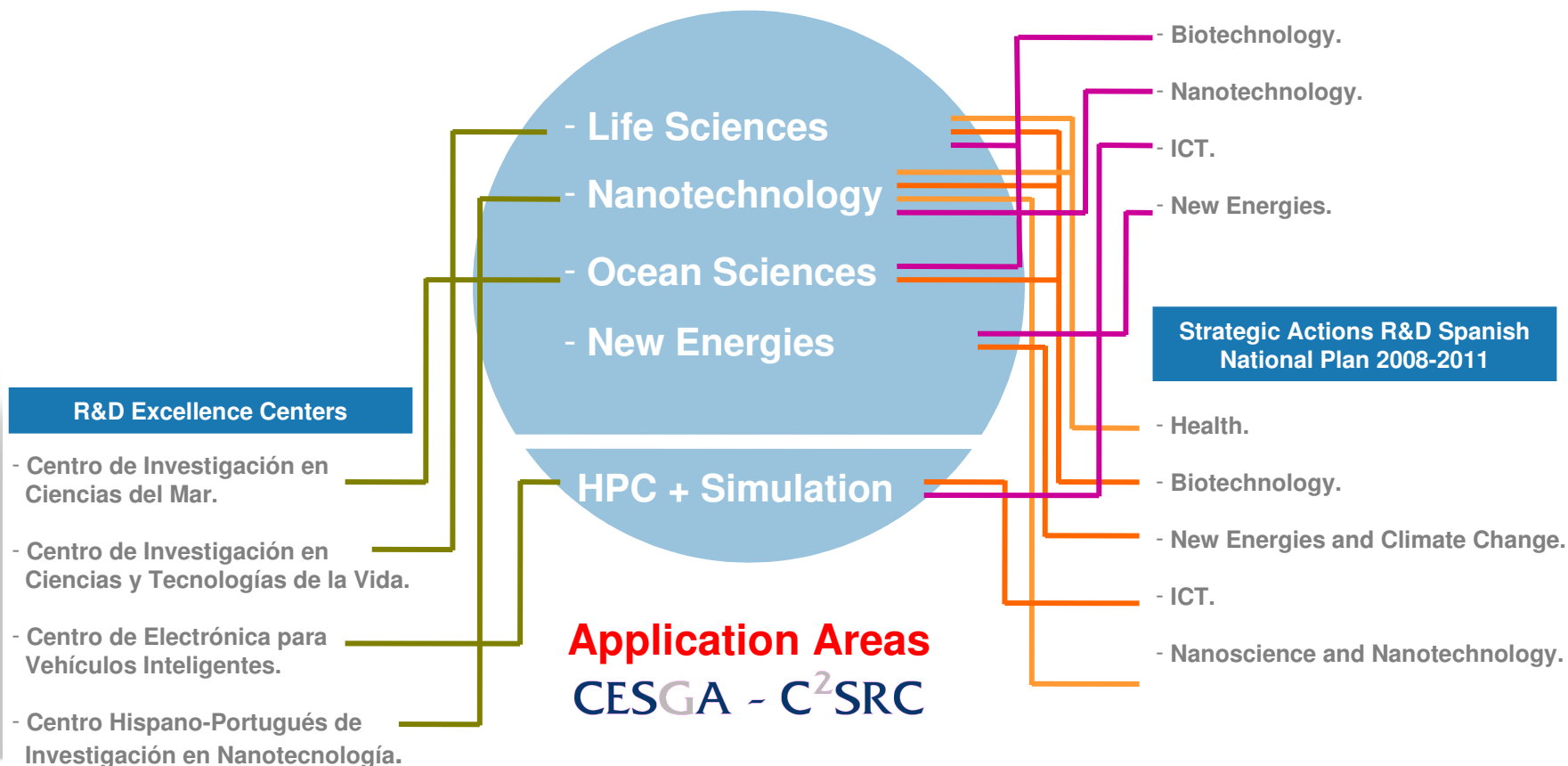
(Wikipedia)

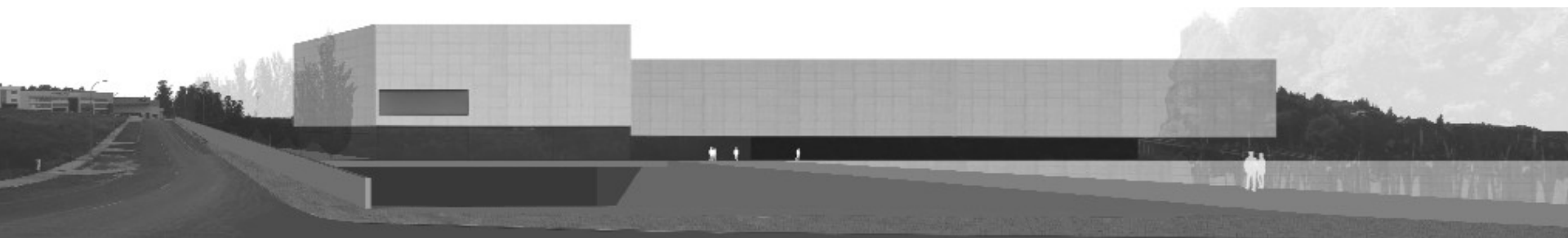
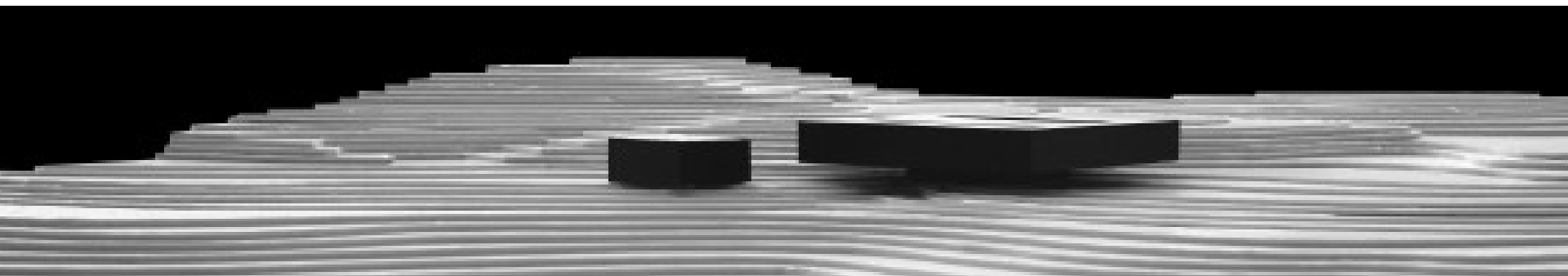
- **Application Areas:**

- Strategic for Galicia.
- High demand of HPC resources.
- Research experience in Galicia and CSIC.
- Singular in Galicia and CSIC.

CENTER STRUCTURE

R&D Galician Plan 2006-2010





MAIN HPC INITIATIVES IN SPAIN



Javier García Tobío
Managing Director at CESGA
Supercomputing Centre of Galicia



CONSEJO SUPERIOR DE
INVESTIGACIONES
CIENTÍFICAS



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN



XUNTA DE GALICIA
CONSELLERÍA DE ECONOMÍA
E INDUSTRIA



FEDER
FONDO EUROPEO DE
DESENVOLVEMENTO REGIONAL



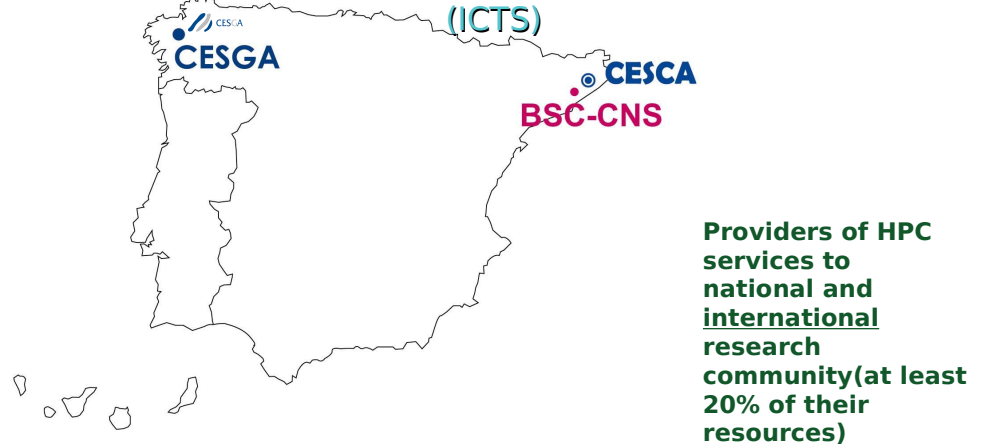
Main HPC Initiatives in Spain

• e-Science Initiatives in Spain

REGIONAL SUPERCOMPUTING CENTRES



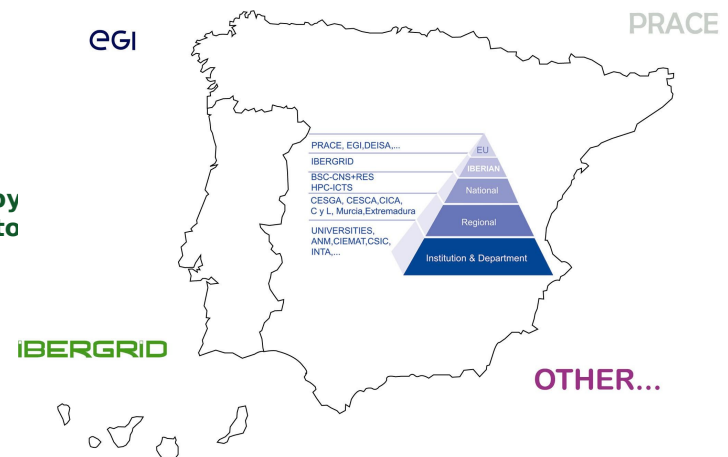
SPANISH SINGULAR HPC INFRASTRUCTURES (ICTS)



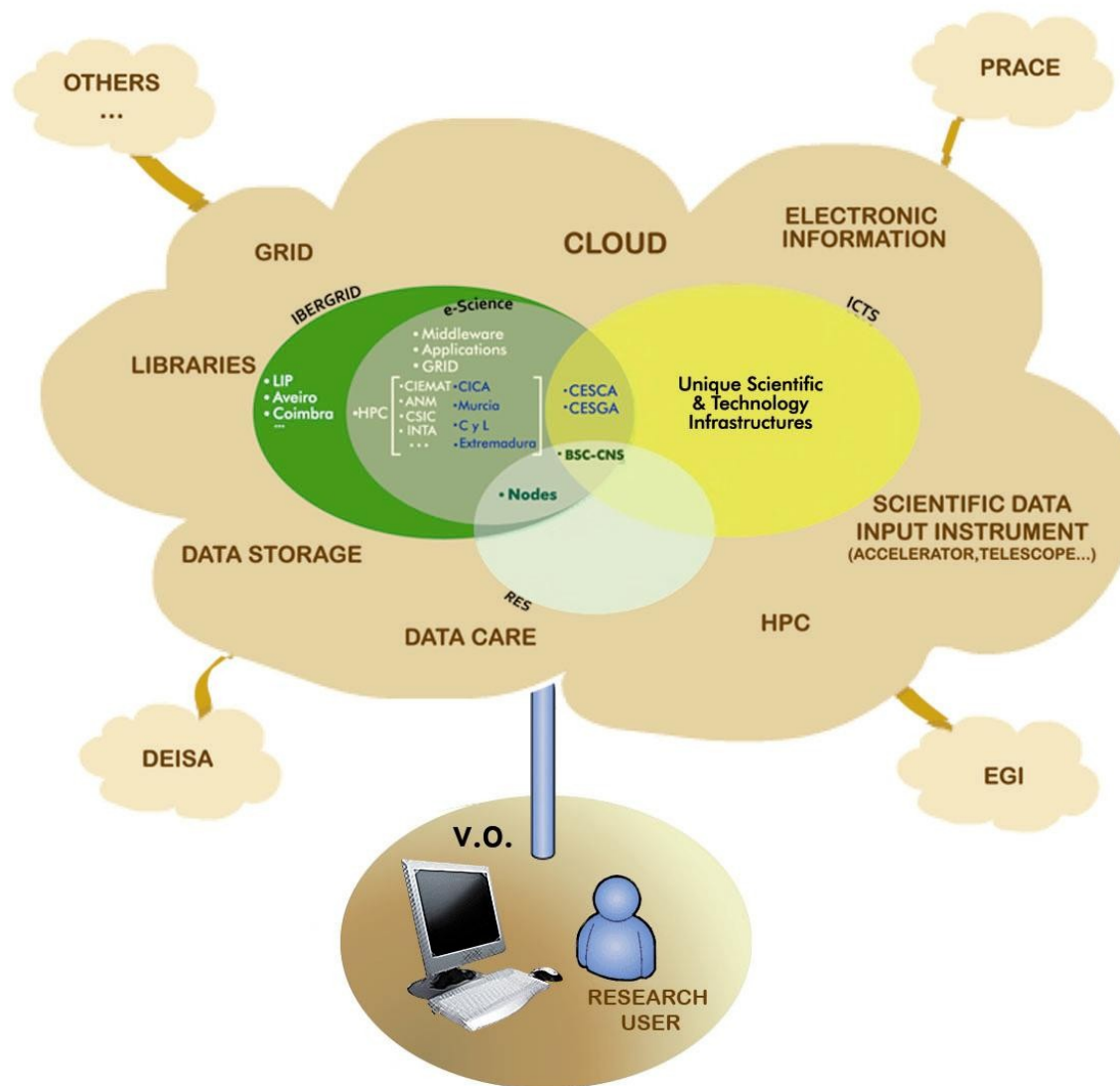
(RES) SUPERCOMPUTING SPANISH NETWORK



SPANISH e-SCIENCE INITIATIVE



Main HPC Initiatives: Target



THANK YOU

FOR YOUR ATTENTION

Javier García Tobío

info@cesga.es

www.cesga.es

FINISTERRAE

Ratio Memoria por CPU = Memoria total / procesadores totales

	Nº de trabajos		Nº de horas	
Memoria/CPU	<i>FT</i>	<i>SVGD</i>	<i>FT</i>	<i>SVGD</i>
1 Gb	59.730	225.853	4.033.670,0	906.364,5
2 Gb	11.264	16.792	504.964,1	193.992,5
4 Gb	13.764	1.843	1.491.286,6	41.685,7
8 Gb	17.885	201	2.494.552,7	1.570,9
16 Gb	9.122	0	1.049.112,7	0,0
64 Gb	2.765	0	385.244,3	0,0
128 Gb	245	0	2.739,0	0,0
256 Gb	1	0	0,0	0,0
1 Tb	2	0	0,0	0,0
> 1 Tb	4	0	4,0	0,0
	114.782	244.689	9.961.573,3	1.143.613,6

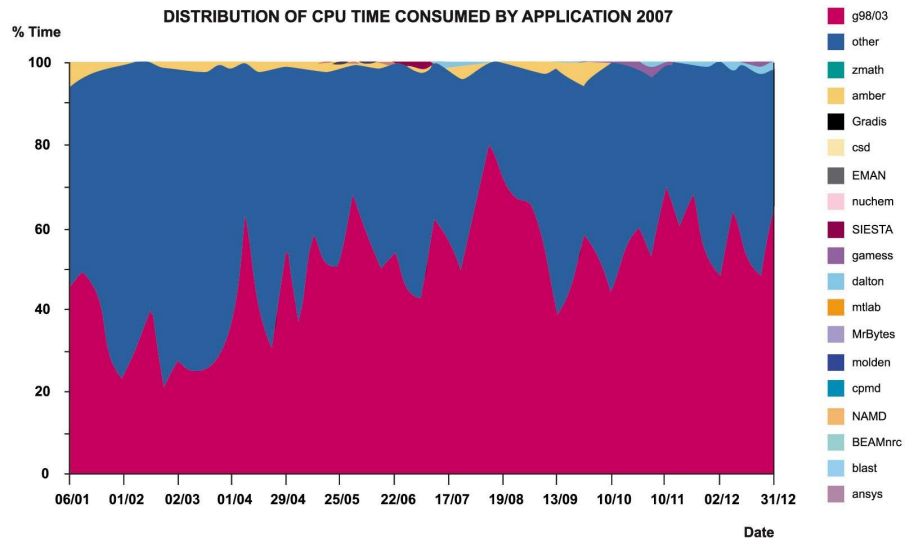
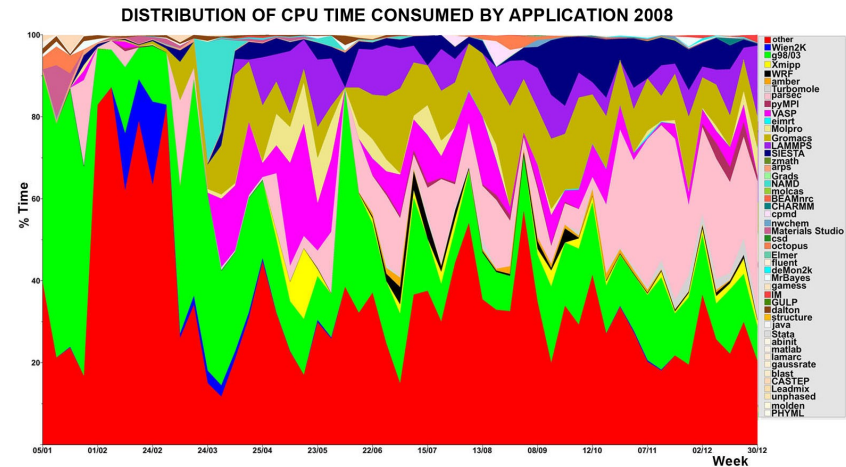
52,04%	92,30%	40,49%	79,25%
9,81%	6,86%	5,07%	16,96%
11,99%	0,75%	14,97%	3,65%
15,58%	0,08%	25,04%	0,14%
7,95%	0,00%	10,53%	0,00%
2,41%	0,00%	3,87%	0,00%
0,21%	0,00%	0,03%	0,00%
0,00%	0,00%	0,00%	0,00%
0,00%	0,00%	0,00%	0,00%
0,00%	0,00%	0,00%	0,00%

- **HPC:** High Performance Computing is the use of parallel processing for running advanced application programs efficiently, reliably and quickly.
- **HPC:** High Productivity Computing. The goal is to decrease the time-to-solution, which means decreasing both the execution time and development time of an application on a particular system.

HTC: High Throughput Computing. The use many computing resources over long periods of time to accomplish a computational task.

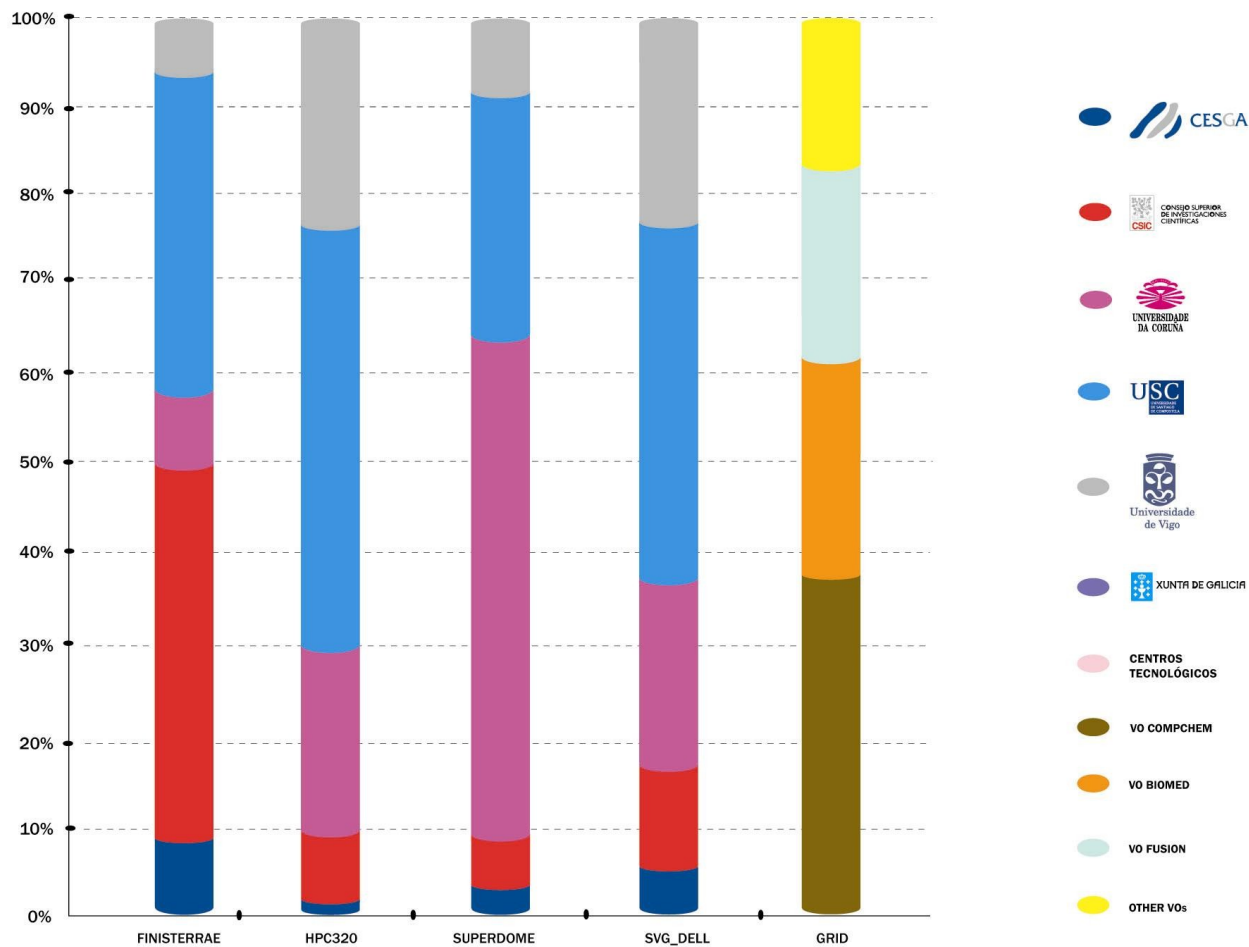
CPU TIME USE DISTRIBUTION BY SCIENTIFIC APPLICATION IN 2008

In 2008, the newly installed Finis Terrae architecture allowed users to approach new problems through a varied range of scientific applications.



CPU DISTRIBUTION BY SERVER AND INSTITUTION IN 2008

CPU DISTRIBUTION BY MACHINE AND INSTITUTION 2008



Most active users in 2008 by institution

USER	DEPT./CENTRE	HOURS USED
SANTIAGO DE COMPOSTELA UNIVERSITY (USC)		
Manuel María González Alemany	Applied Physics	574649.4
Luis Tortajada Iaviu	Condensed Matter Physics	409140.1
Lucas Vázquez Besteiro	Condensed Matter Physics	329355.0
Ángel Piñeiro Guillen	Applied Physics	291328.7
Paola Mendoza Espinosa	Applied Physics	232715.5
María Pilar Brocos Fernández	Applied Physics	169876.0
■ ■ ■ ■ ■	■ ■ ■ ■ ■	■ ■ ■ ■ ■
A CORUÑA UNIVERSITY (UDC)		
Daniel Rivero Cebrián	Communications & Information Technologies	152969.9
Oscar Ibáñez Panizo	Communications & Information Technologies	145231.7
Daniel Rodríguez Ramos	Chemistry, Physics and Chemical Engineering I	85894.1
María Isabel Fernández Pérez	Chemistry, Physics and Chemical Engineering I	65092.3
Sonia Vilariño Patiño	Fundamental Chemistry	62876.1
María Fernández González	Fundamental Chemistry	54704.7
■ ■ ■ ■ ■	■ ■ ■ ■ ■	■ ■ ■ ■ ■
VIGO UNIVERSITY (UVIGO)		
Fernando Obelleiro Basteiro	Signal Theory and Communications	155254.4
Olalla Nieto Faza	Organic Chemistry	121971.8
Rosana Álvarez Rodríguez	Organic Chemistry	56304.0
Laura Estévez Guiance	Analytical Chemistry and Nutrition	34376.8
Adán Borja González Pérez	Organic Chemistry	32359.0
José Antonio Souto Salgado	Organic Chemistry	23786.0
■ ■ ■ ■ ■	■ ■ ■ ■ ■	■ ■ ■ ■ ■
SPANISH NATIONAL RESEARCH COUNCIL (CSIC)		
José Carlos Conesa Cegarra	Group of Fundamental and Applied Catalysis	541568.4
Víctor Cruz Cañas	Department of Molecular Physics	540875.7
Manuel Cobian González	Department of Atomic & Molecular Physics Theoretical	434634.2
Octavio Roncero Villa	Department of Atomic & Molecular Physics Theoretical	265822.2
Jorge Sánchez Dolado	Unit Nanostructured Materials	253737.6
Delia Fernández Torre	Department of Molecular Physics	200353.8



HUGO GUTIÉRREZ TERÁN

Organización:

**Fundación Pública Galega de
Medicina Xenómica**

Departamento:

Medicina Molecular (Sección de
modelado e simulación de moléculas
biolóxicas)

Creación: FPGMX creada en 2004.
Incorporado como IP á Fundación
en Xaneiro de 2008

Membros: 3 membros na miña sección,
15 membros na FPGMX.

Colaboracións:

USC. Universidade de Uppsala.
Universidade Pompeu Fabra.
Universidade de Florida.
Universidade Autónoma de
Barcelona.

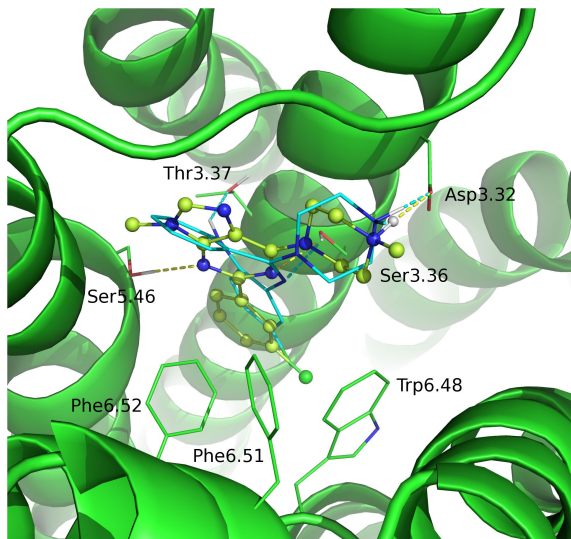
Páxina web: <http://web.usc.es/hugogdt>

Líneas de investigación:

Modelización e simulación de Macromoléculas biolóxicas e a súas interaccións con ligandos. Deseño de fármacos asistido por ordenador. En liñas xerais, metodoloxías de modelización molecular, simulación molecular e cribado virtual na busca de novos fármacos.

Relación co CESGA:

Comecei a utilizar os servidores do CESGA en setembro de 2006. Utilicei principalmente os ordenadores **SVGD** e **Finis Terrae**, programas de **dinámica molecular** e a suite de **modelación molecular** Schrödinger. Formo parte do comité xestor da Rede Galega de Bioinformática.



A imaxe corresponde a un proxecto de descubrimento de novas estruturas químicas como potenciais antipsicóticos. Móstrase un dos compostos da nosa quimioteca (bolas e paus) superposto co antipsicótico de referencia.



CAROLINA MENDOZA PARRA

Organización:

**Instituto de Ciencias Matemáticas
(CSIC)**

Area:

**Análise Matemática, Ecuacións
Diferenciais e Aplicacións.**

Grupo: Mecánica de Fluidos e Ecuacións
Diferenciais

Creación: 2003. 2 membros do CSIC

Colaboracións: IFISC (CSIC), Instituto de
Ciencias do Mar (CSIC), Department of
Atmosphere and Ocean Sciences, UCLA,
Department of Applied Mathematics and
Theoretical Physics, OU. Cambridge.

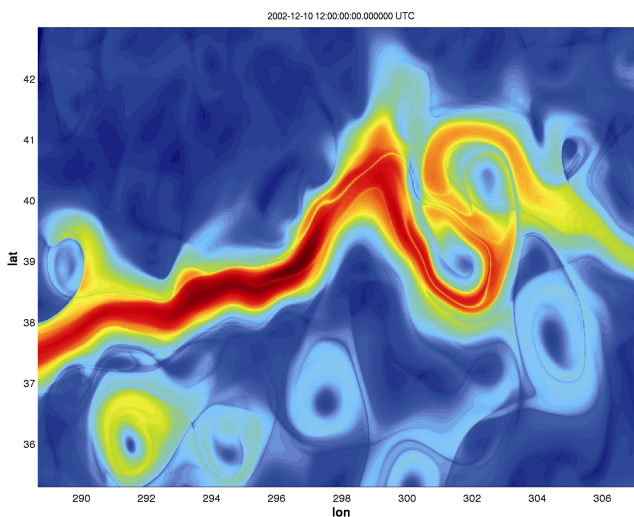
Líneas de investigación:

Mecánica de fluidos computacional, sistemas dinámicos, aplicacións oceanográficas e inestabilidades en fluídos.

Relación co CESGA:

Como grupo desde 2003. Utilizamos o *Finis Terrae* cunha aplicación propia.

Participamos en Proxectos conxuntos co CESGA na Plataforma Computing de CONSOLIDER IMATH.



*Figura calculada en Finis
Terra, na que se mostra a
integración do fluído na
corrente do golfo para o día
10 de decembro de 2002.*