

III. OTRAS DISPOSICIONES

MINISTERIO DE ECONOMÍA Y COMPETITIVIDAD

- 1406** *Resolución de 23 de enero de 2015, de la Secretaría de Estado de Investigación, Desarrollo e Innovación, por la que se publica el Convenio de colaboración con la Comunidad Autónoma de Galicia y la Fundación Pública Gallega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia, en la selección y ejecución del proyecto de infraestructuras científicas «Instalación del Superordenador FINIS TERRAE II» cofinanciado por el FEDER.*

Con fecha 15 de diciembre de 2014 se ha suscrito un Convenio de colaboración entre el Ministerio de Economía y Competitividad, la Comunidad Autónoma de Galicia y la Fundación Pública Gallega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia, en la selección y ejecución del proyecto de infraestructuras científicas «Instalación del Superordenador FINIS TERRAE II» cofinanciado por el FEDER.

En cumplimiento de lo dispuesto en el artículo 8.2 de la Ley 30/1992, de 26 de noviembre, de Régimen Jurídico de las Administraciones Públicas y del Procedimiento Administrativo Común, esta Secretaría de Estado dispone su publicación en el «Boletín Oficial del Estado».

Madrid, 23 de enero de 2015.—La Secretaria de Estado de Investigación, Desarrollo e Innovación, Carmen Vela Olmo.

Convenio de colaboración entre el Ministerio de Economía y Competitividad, la Comunidad Autónoma de Galicia y la Fundación Pública Gallega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia, en la selección y ejecución del proyecto de infraestructuras científicas «Instalación del Superordenador FINIS TERRAE II» cofinanciado por el FEDER

En Madrid, a 15 de diciembre de 2014.

REUNIDOS

De una parte, el Sr. don Luis de Guindos Jurado, Ministro de Economía y Competitividad, nombrado por Real Decreto 1826/2011, de 21 de diciembre, actuando en virtud del artículo 13.3 de la Ley 6/1997, de 14 de abril, de Organización y Funcionamiento de la Administración General del Estado, y la disposición adicional decimotercera de la Ley 30/1992, de Régimen Jurídico de las Administraciones Públicas y del Procedimiento Administrativo Común.

De otra parte, el Sr. don Francisco José Conde López, Conselleiro de Economía e Industria de la Xunta de Galicia, nombrado para dicho cargo por el Presidente de la Xunta de Galicia, en fecha 2 de diciembre de 2012, según Decreto 229/2012, y Presidente de la Agencia Gallega de Innovación, cuyo cargo ostenta en virtud del Decreto 50/2012, por el que se crea la Agencia Gallega de Innovación y se aprueban sus estatutos.

De otra, el Sr. don Manuel Antonio Varela Rey, en su condición de Presidente de la Fundación Pública Gallega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia (en adelante, CESGA), actuando en nombre y representación de esta Entidad, en virtud de lo establecido en el artículo 12 de la Modificación de Estatutos de la Fundación, según consta en escritura otorgada ante el Notario del Ilustre Colegio de Galicia don Manuel Remuñán López, el día 11 de julio de 2013 con el número 1263 de su protocolo e inscrita en el Registro de Fundaciones de Interés Gallego el 6 de agosto de 2013.

Reconociéndose mutuamente plena capacidad para celebrar este Convenio,

EXPONEN

1. Que de acuerdo al Reglamento (CE) n.º 1083/2006 del Consejo de 11 de julio de 2006, por el que se establecen las disposiciones generales relativas al Fondo Europeo de Desarrollo Regional, al Fondo Social Europeo y al Fondo de Cohesión y al Reglamento (CE) n.º 1828/2006 de la Comisión de 8 de diciembre de 2006 por el que se fijan normas de desarrollo para el Reglamento (CE) n.º 1083/2006 del Consejo, los criterios de selección de las operaciones cofinanciadas por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional, se establecen en los correspondientes Comités de Seguimiento de los Programas Operativos aprobados por Decisión de la Comisión Europea.

2. Que según se establece en los criterios de selección aprobados por el Comité de Seguimiento del Programa Operativo FEDER 2007-2013 de Economía basada en el Conocimiento, aprobado por Decisión de la Comisión Europea C/2007/5927, de 28 de noviembre, la selección de proyectos de infraestructuras científicas se realizará a través de convenios de colaboración entre el Ministerio de Economía y Competitividad y las Comunidades Autónomas, las Entidades Locales, sus respectivos organismos autónomos y las restantes entidades públicas con competencias en I+DT. A través de este procedimiento se seleccionarán proyectos identificados como prioritarios por parte de las Comunidades Autónomas y que permitan evitar duplicidades y carencias a escala estatal.

3. Que la Ley 38/2003, de 17 de noviembre, General de Subvenciones, establece que las subvenciones financiadas con cargo a fondos de la Unión Europea se regirán por las normas comunitarias aplicables en cada caso.

4. Que corresponde al Estado el «fomento y coordinación general de la investigación científica y técnica», de acuerdo con el artículo 149.1.15 de la Constitución. De forma específica, según el Real Decreto 1823/2011, de 21 de diciembre, por el que se reestructuran los departamentos ministeriales, corresponde al Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO) la propuesta y ejecución de la política del Gobierno en materia económica y de reformas para la mejora de la competitividad, de investigación científica, desarrollo tecnológico e innovación en todos los sectores, la política comercial y de apoyo a la empresa, así como el resto de competencias y atribuciones que le confiere el ordenamiento jurídico. Todo ello de acuerdo con los objetivos que se concretan en el vigente Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2013-2016 junto con las orientaciones de la Comisión Europea sobre construcción del Espacio Europeo de Investigación y las directrices estratégicas comunitarias en materia de cohesión.

5. Que corresponde a la Comunidad Autónoma de Galicia el fomento de la investigación, en virtud de las competencias que en dicha materia le confiere el artículo 27.19.º del Estatuto de Autonomía. En concreto, la Consellería de Economía e Industria de la Xunta de Galicia, a través de la Agencia Gallega de Innovación, creada según el Decreto 50/2012, de 12 de enero, es responsable de la ordenación, planificación, coordinación, ejecución y seguimiento de las competencias en materia de fomento de la investigación.

6. Que el CESGA tiene entre sus fines, según queda establecido en sus Estatutos, la contribución al avance de la Ciencia y la Técnica, mediante la investigación y aplicación de computación y comunicaciones de altas prestaciones, así como otros recursos de las tecnologías de la información, en colaboración con otras instituciones, para el beneficio de la Sociedad.

7. Que el CESGA, en la ejecución de este proyecto, se someterá a las disposiciones establecidas para los poderes adjudicadores en los que no concurre la condición de Administración Pública en el texto refundido de la Ley de Contratos del Sector Público, aprobado por Real Decreto Legislativo 3/2011 de 14 de noviembre.

8. Que el Ministerio de Economía y Competitividad, a través de la Dirección General de Investigación Científica y Técnica, gestiona fondos del Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) destinados a financiar actuaciones dirigidas a favorecer el desarrollo regional a través de la investigación.

9. Que el Ministerio de Economía y Competitividad y la Xunta de Galicia han analizado los proyectos de infraestructuras científicas que responden a las necesidades de desarrollo económico de la región y consideran que deben ser objeto de cofinanciación por el FEDER aquellos con mayor capacidad de transformar los resultados de la investigación en productos y servicios de alto valor añadido.

Por todo ello, las partes acuerdan celebrar el presente convenio que se regirá por las siguientes, cláusulas:

Primera. Objeto del Convenio.

El objeto del presente Convenio es la selección de proyectos de infraestructuras científicas que deben ser objeto de cofinanciación por el FEDER por responder a las necesidades de desarrollo económico de la región y tener capacidad de transformar los resultados de la investigación en productos y servicios de alto valor añadido.

También es objeto del presente convenio el establecimiento de las obligaciones y derechos del organismo beneficiario de los fondos FEDER aplicados para la ejecución de los proyectos seleccionados.

Segunda. Proyectos seleccionados.

El proyecto de infraestructuras que se llevará a cabo es el señalado en el Anexo: «Instalación del superordenador Finis Terrae II».

Tercera. Presupuesto, Financiación y compromisos de las partes.

1. El Ministerio de Economía y Competitividad se obliga a que los proyectos seleccionados sean cofinanciados por FEDER con fondos asignados a la Dirección General de Investigación Científica y Técnica, en concreto con cargo a la categoría de gasto 02, del Programa Operativo FEDER 2007-2013 de Economía basada en el Conocimiento, en una cuantía del 80 % del importe del gasto total elegible de las actuaciones presupuestadas en el Cuadro Resumen del Plan de Actuaciones y Aportaciones que ascienden a 3.573.300,00 euros; por tanto, la aportación del FEDER será de 2.858.640,00 euros.

2. Con el fin de garantizar la ejecución de los proyectos y evitar la posible pérdida de recursos comunitarios asignados al Estado Español por aplicación del artículo 93 del Reglamento (CE) n.º 1083/2006 del Consejo de 11 de julio de 2006, el Ministerio de Economía y Competitividad anticipará al CESGA (CIF G15852981), el importe correspondiente a la cofinanciación de FEDER (2.858.640,00 euros).

El anticipo se realizará en dos pagos, el primero por importe de 1.429.320,00 euros, se realizará en 2014 con cargo a la partida presupuestaria 27.13.463B.82300 de los presupuestos de gastos de la Dirección General de Investigación Científica y Técnica para el año 2014 y el segundo, por importe de 1.429.320,00 se realizará en 2015 con cargo a la partida presupuestaria equivalente a la 27.13.463B.82300 de los presupuestos de gastos de la Dirección General de Investigación Científica y Técnica para el año 2015.

El pago del anticipo correspondiente al año 2015 se realizará después de la acreditación, por parte del CESGA, de haber efectuado la inversión correspondiente al coste total elegible equivalente al primero de los pagos (1.786.650,00 euros), siempre y cuando no concurran las circunstancias previstas en la cláusula Octava de este Convenio.

Para ello, el CESGA deberá presentar, antes del 31 de octubre de 2015 ante la Dirección General de Investigación Científica y Técnica, un informe que dé cuenta de las actividades realizadas y de los gastos y pagos ya efectuados. A esta Dirección General, que podrá requerir al CESGA la información y documentación complementaria que estime conveniente a tal fin, le corresponderá certificar la ejecución necesaria para la liberación del segundo pago del anticipo.

3. La Xunta de Galicia aportará la cofinanciación nacional (20% del importe del gasto total elegible de las actuaciones presupuestadas en el Cuadro Resumen del Plan de Actuaciones y Aportaciones), es decir, 714.660,00 euros, con cargo a la aplicación presupuestaria 08.A3.561A.743.05 de los presupuestos de la Comunidad Autónoma de Galicia, correspondientes a la Agencia Gallega de Innovación para los años 2014 y 2015 a través de los mecanismos previstos en el ordenamiento jurídico, que incluyen el cumplimiento por parte del CESGA de los requisitos legales para ser beneficiaria.

El pago de la citada financiación al beneficiario se efectuará conforme a la siguiente distribución: 1.715,18 euros en la anualidad 2014 y 712.944,82 euros en la anualidad 2015, previa acreditación del cumplimiento de lo dispuesto en el artículo 31.7 de la Ley 9/2007, de 13 de junio, de subvenciones de Galicia, y justificación de los gastos y pagos realizados por la totalidad del gasto elegible para cada anualidad, según lo establecido en el artículo 48 del Decreto 11/2009, de 8 de enero, por el que se aprueba el reglamento de dicha ley y conforme a lo indicado en el calendario de aportaciones.

Asimismo, el CESGA se obliga a facilitar toda la información que le sea requerida por la Intervención General de la Comunidad Autónoma de Galicia, por el Tribunal de Cuentas y por el Consejo de Cuentas de Galicia en el ejercicio de sus funciones de fiscalización y control de destino de subvenciones así como por cualquier otro organismo competente en materia de control de Fondos Estructurales.

4. El CESGA, que será el beneficiario de las ayudas FEDER, se compromete a realizar las actuaciones y a efectuar los gastos elegibles comprometidos para la finalidad con que aparecen en el Cuadro Resumen del Plan de Actuaciones y Aportaciones y en el Anexo al convenio, por un importe de 3.573.300,00 euros, y a justificar los mismos ante la Dirección General de Investigación Científica y Técnica y ante la Xunta de Galicia en los distintos períodos de certificación que tiene establecidos, de acuerdo con la normativa nacional y comunitaria sobre fondos FEDER.

Además, sin perjuicio de lo establecido en la cláusula Cuarta con relación a la compatibilidad con otras ayudas, el CESGA asume la cantidad que representa el IVA que grava las operaciones en el porcentaje que es recuperable por el organismo según la prorrata establecida y justificada, así como cualquier otro gasto no incluido en el presupuesto.

5. El CESGA, en su condición de beneficiario, tendrá la obligación de justificar a la Dirección General de Investigación Científica y Técnica y a la Xunta de Galicia los gastos elegibles realizados en la ejecución de los proyectos, cumpliendo la normativa comunitaria que regula los Fondos Estructurales y, en particular el FEDER y las instrucciones que, en aplicación de dicha normativa, establezcan la Comisión Europea, la propia Dirección General de Investigación Científica y Técnica así como la Autoridad de Gestión y el Comité de Seguimiento del Programa Operativo.

Las justificaciones serán presentadas a lo largo del plazo de ejecución del proyecto establecido en la cláusula novena.

En lo que respecta a la Dirección General de Investigación Científica y Técnica, la justificación de gastos por el beneficiario se realizará a través de la aplicación informática habilitada al efecto. La Dirección General de Investigación Científica y Técnica comunicará al beneficiario, con la suficiente antelación, la apertura de los periodos de justificación de gastos y los plazos correspondientes a cada periodo. Se establecerá, al menos, un periodo de justificación anual en el que se declararán los gastos elegibles realizados hasta ese momento. No obstante, se podrán habilitar periodos de justificación complementarios a lo largo del año. Una vez finalizado el plazo de ejecución del proyecto, el beneficiario deberá declarar en el primer periodo de justificación que se habilite, el total de los gastos ejecutados que no hubieran sido justificados con anterioridad.

En lo que respecta a la Xunta de Galicia la justificación del gasto elegible por el beneficiario se efectuará conforme a la siguiente distribución (de acuerdo con lo establecido en el calendario de aportaciones):

- 8.575,92 euros en la anualidad 2014 (pagos y gastos efectuados desde el 1/01/2014 hasta el 15/12/2014; la fecha límite de presentación de dicha justificación será el 22/12/2014).
- 3.564.724,08 euros en la anualidad 2015 (pagos y gastos efectuados desde el 16/12/2014 hasta el 15/12/2015; la fecha límite de presentación de dicha justificación será el 15/12/2015).

Resumen del Plan de Actuaciones y de las aportaciones del FEDER:

Actuación	Presupuesto total elegible (euros)	Aportación FEDER (euros)	Aportación nacional (euros) (Xunta de Galicia)
Instalación del Superordenador FINIS TERRAE II.	3.573.300,00	80% a través de la categoría 02 del Programa Operativo FEDER 2007-2013 de I+D+i de Economía basada en el Conocimiento.	20% Xunta de Galicia.
TOTAL	3.573.300,00	2.858.640,00	714.660,00

Calendario previsto de aportaciones:

	Año 2014 — Euros	Año 2015 — Euros	Total — Euros
Aportación ANTICIPO FEDER (Capítulo 8 MINECO).	1.429.320,00	1.429.320,00	2.858.640,00
Aportación nacional (Xunta de Galicia).	1.715,18	712.944,82	714.660,00
Presupuesto total elegible.	1.431.035,18	2.142.264,82	3.573.300,00
Periodo realización gastos y pagos (Xunta de Galicia).	1/01/2014 15/12/2014	16/12/2014 15/12/2015	
Fecha límite presentación justificación (Xunta de Galicia).	22/12/2014	15/12/2015	

Cuarta. *Sujeción a la normativa FEDER.*

Los gastos que se justifiquen a la Dirección General de Investigación Científica y Técnica estarán incluidos entre los considerados elegibles por la normativa europea para los fondos FEDER. Asimismo, tendrán que responder por la totalidad del gasto elegible y atenerse a todo lo dispuesto en dicha normativa.

El apoyo a esta actuación será compatible con los de otras ayudas o subvenciones, cualquiera que sea su naturaleza y la entidad que las conceda, siempre que conjuntamente no superen el coste total de la actuación subvencionada, ni la cofinanciación FEDER supere el 80 % del total y se respete la normativa comunitaria en esta materia.

Se deberá comunicar a la Dirección General de Investigación Científica y Técnica, en su caso, tanto el importe de las mencionadas ayudas como el origen de las mismas.

Quinta. *Amortización del anticipo reembolsable.*

Devolución aportación FEDER anticipada por el Ministerio de Economía y Competitividad (2.858.640,00 euros): El libramiento de la ayuda proveniente del FEDER se realizará en formalización, sin salida física de fondos, aplicándose a la amortización

del anticipo reembolsable. Si los fondos FEDER percibidos no fueran suficientes para amortizar los fondos anticipados, el beneficiario ingresará la diferencia en el Tesoro Público antes del transcurso de dos años contados desde el pago del saldo final del Programa Operativo previsto en el Artículo 76 del Reglamento (CE) n.º 1083/2006 del Consejo de 11 de julio de 2006.

El CESGA registrará, de acuerdo con los principios contables que le resulten de aplicación, el ingreso de los fondos cuya contrapartida es una deuda.

Cuando se reciban los fondos del FEDER, la Dirección General de Investigación Científica y Técnica informará al CESGA de esta circunstancia, de modo que podrán reconocer la subvención recibida de la Unión Europea mediante el registro de la subvención de acuerdo con los principios contables que le son de aplicación, lo que a su vez permitirá cancelar la correspondiente deuda.

Sexta. *Seguimiento y Evaluación.*

Para garantizar la correcta ejecución y el seguimiento de lo pactado en este Convenio se constituirá una Comisión de Seguimiento integrada por dos personas designadas por el Ministerio de Economía y Competitividad, dos designadas por la Agencia Gallega de Innovación y, de acuerdo con lo dispuesto en el artículo 27.1.b) de la Ley 6/1997, de 14 de abril, de Organización y Funcionamiento de la Administración General del Estado, una designada por la Delegación de Gobierno en la Comunidad Autónoma de Galicia. Las personas designadas por el Ministerio de Economía y Competitividad serán nombradas por la Dirección General de Investigación Científica y Técnica. La presidencia de la Comisión corresponde al Ministerio de Economía y Competitividad a través de la Dirección General de Investigación Científica y Técnica, sin voto de calidad.

Esta Comisión realizará el seguimiento de las actuaciones del Convenio y resolverá las dudas y controversias que pudieran surgir en la aplicación e interpretación de las Cláusulas del mismo.

Adicionalmente, la Comisión de Seguimiento podrá autorizar, por acuerdo unánime de sus miembros, la modificación de las actuaciones previstas en el Convenio, previa solicitud o conformidad acreditada de la Fundación CESGA y siempre que las modificaciones no supongan alteración sustancial del objeto del presente Convenio. Cualquier modificación que se acuerde en este sentido deberá reflejarse en el acta de la Comisión de Seguimiento.

La Comisión de Seguimiento se reunirá cuantas veces lo solicite alguno de sus miembros.

Esta Comisión se regirá en cuanto a su constitución, funcionamiento y adopción de acuerdos por la normativa vigente en materia de órganos colegiados contenida en el Capítulo II del Título II de la Ley 30/1992, de Régimen jurídico de las Administraciones Públicas y del Procedimiento Administrativo Común.

Séptima. *Entrada en vigor, duración y resolución del Convenio.*

El presente convenio entrará en vigor en el momento de su firma, con excepción de lo dispuesto en la cláusula novena, párrafo segundo, respecto a la fecha inicial de subvencionabilidad de gastos. La vigencia del convenio finalizará cuando se hayan cumplido totalmente las obligaciones de las partes.

Serán causas de su resolución anticipada, las siguientes:

- a) El acuerdo expreso y escrito de las partes.
- b) El incumplimiento por alguna de las partes de cualquiera de las prescripciones contenidas en este Convenio, lo que se comunicará por aquella que la invoque a las restantes de manera fehaciente, previa audiencia de las mismas y con un mes de antelación.
- c) La denuncia escrita formulada por cualquiera de las partes con una antelación mínima de dos meses a la fecha en que vaya a darlo por finalizado.

En cuanto a la forma en la que habrán de concluirse los proyectos, se actuará de acuerdo con las normas específicas reguladoras del FEDER y los Fondos Estructurales.

Octava. *Pérdida del derecho al cobro y reintegro de las ayudas.*

1. Se producirá la pérdida del derecho al cobro de la ayuda o, en su caso, procederá el reintegro de la misma con los intereses correspondientes, en los supuestos y términos establecidos en el artículo 37 de la Ley 38/2003, General de Subvenciones. Además de las previstas en dicho artículo, serán también causa de reintegro de las ayudas:

- a) las modificaciones no autorizadas en las condiciones de ejecución contenidas en el presente convenio.
- b) los incumplimientos que se pongan de manifiesto en los informes de control de los órganos nacionales o comunitarios competentes en la materia.

2. El reintegro de las ayudas se regirá por lo establecido en el Título II de la Ley General de Subvenciones y en el Título III del Reglamento de dicha Ley.

3. En la graduación de los posibles incumplimientos que determinen la pérdida del derecho al cobro o el reintegro de las ayudas, se tendrán en cuenta los siguientes criterios:

a) Cuando el cumplimiento por el beneficiario se aproxime de modo significativo al cumplimiento total y se acredite por este una actuación inequívocamente tendente a la satisfacción de sus compromisos, la cantidad a reintegrar vendrá determinada por la aplicación de los siguientes criterios de proporcionalidad:

1.º El incumplimiento de los objetivos parciales o actividades concretas de la actuación conllevará la devolución de aquella parte de la ayuda destinada a las mismas.

2.º La realización de modificaciones no autorizadas en el presupuesto financiable, supondrá la devolución de las cantidades desviadas.

3.º La realización de gastos fuera del plazo de ejecución, supondrá la devolución de las cantidades invertidas fuera de plazo.

4.º La no presentación de las correspondientes justificaciones, de acuerdo con lo establecido en la cláusula tercera, apartado 5 del presente convenio, conllevará la devolución de las cantidades percibidas y no justificadas.

b) El incumplimiento total y manifiesto de los objetivos científicos y técnicos establecidos en el presente convenio y su anexo, determinado a través de los mecanismos de seguimiento y control científico técnico, será causa de reintegro total de la ayuda.

Sin perjuicio de los criterios anteriormente descritos, se aplicarán los establecidos en materia de correcciones financieras, por la Comisión Europea y las Autoridades de Gestión y Certificación de los Programas Operativos financiados por el FEDER en el Estado español.

Novena. *Plazo de ejecución de los proyectos.*

Los proyectos identificados en el Anexo, deberán finalizar su ejecución antes del 31 de diciembre de 2015, fecha de fin de subvencionabilidad en el periodo de programación 2007-2013. Todos los gastos tienen que estar realizados y pagados antes del 31 de diciembre de 2015.

Serán subvencionables, al amparo de este convenio, los gastos elegibles realizados y pagados desde el 1 de enero de 2014 hasta la fecha fin de ejecución.

Décima. *Publicidad de las actuaciones.*

Las partes firmantes se comprometen a hacer constar la colaboración del Ministerio de Economía y Competitividad y de la Comunidad Autónoma de Galicia en todas las actividades informativas o de promoción en relación con las actuaciones contempladas en este Convenio. Asimismo, se comprometen a observar estrictamente la normativa aplicable en materia de publicidad de los Fondos Estructurales que cofinancian las actuaciones.

Undécima. *Régimen jurídico y resolución de controversias.*

Este Convenio es de carácter administrativo, de los contemplados en el artículo 4.1.c) del texto refundido de la Ley de Contratos del Sector Público aprobado por Real Decreto Legislativo 3/2011, de 14 de noviembre, por lo que queda fuera de su ámbito de aplicación, sin perjuicio de la aplicación de los principios y criterios en él contenidos para resolver las dudas y lagunas que pudieran producirse.

Las controversias sobre la interpretación y ejecución del presente Convenio de colaboración serán resueltas de mutuo acuerdo entre las partes en la Comisión prevista en la cláusula sexta de este Convenio. Si no se pudiera alcanzar dicho acuerdo, las posibles controversias deberán ser resueltas en la forma prevista en la Ley 29/1998, de 13 de julio, reguladora de la Jurisdicción Contencioso-Administrativa.

En prueba de conformidad, las Partes firman el presente Convenio por triplicado ejemplar y a un solo efecto en el lugar y fecha arriba indicados.—Por el Ministerio de Economía y Competitividad, Luis de Guindos Jurado, Ministro de Economía y Competitividad.—Por la Comunidad Autónoma de Galicia, Francisco José Conde López, Conselleiro de Economía e Industria, Presidente de la Agencia Gallega de Innovación.—Por el CESGA, Manuel Antonio Varela Rey, Presidente CESGA.

Anexo al Convenio de colaboración entre el Ministerio de Economía y Competitividad, la Comunidad Autónoma de Galicia y la Fundación Pública Gallega Centro Tecnológico de Supercomputación de Galicia, en la selección y ejecución del proyecto de infraestructuras científicas «Instalación del Superordenador FINIS TERRAE II» cofinanciado por el FEDER

Introducción

El CESGA es una institución fundada en el año 1993 cuyo objetivo es prestar servicios de cálculo intensivo y comunicaciones avanzadas a la comunidad universitaria e investigadora gallega y del CSIC, así como a aquellas instituciones y empresas que lo soliciten. Desde entonces, el CESGA ha venido prestando sus servicios 24x7 todos los días del año, habiendo participado, al mismo tiempo, en más de 170 proyectos de I+D+i.

En el año 2006, la Xunta de Galicia, CSIC y CESGA firmaron un Convenio de Colaboración para la implantación de una infraestructura de cálculo que diese respuesta a requerimientos de computación de altas prestaciones entonces no satisfechos con las disponibilidades existentes en el Estado, naciendo de este modo el Supercomputador Finis Terrae.

El equipo actual de supercomputación del CESGA, Finis Terrae, fue instalado en el año 2007, siendo reconocido como Instalación Científico-Técnica Singular (ICTS). Además del CESGA, en España existen únicamente dos instalaciones más reconocidas como ICTS en el área de Computación: el Centro Nacional de Supercomputación -Barcelona Supercomputing Center (CNS-BSC) y el Centro de Supercomputación de Cataluña (CESCA).

Finis Terrae es un supercomputador tipo constelación formado por dos subsistemas: un sistema de computación y un sistema de almacenamiento masivo en línea, ambos imprescindibles para realizar correctamente su función.

En el año 2013, este superordenador ha sido amortizado tanto tecnológicamente como económicamente y para mantener el nivel de competitividad del CESGA, se hace imprescindible renovar la infraestructura, con nuevo superordenador (FINIS TERRAE II) con una arquitectura que incluya nodos con gran tamaño de memoria y capacidad de acceso a ella, y que es demandada por una gran cantidad de problemas científicos de nuestros usuarios, complementando, de este modo a las arquitecturas de cálculo de las otras dos ICTS.

Objetivo general

El CESGA ofrece servicios de cálculo y almacenamiento a toda la comunidad científica gallega, del CSIC y a los investigadores nacionales, europeos y de países del Programa CYTED, a través del acceso como ICTS. Dichas capacidades se han mostrado imprescindibles para un gran número de áreas científicas. El CESGA da servicios de cálculo y almacenamiento en la actualidad a más de 550 investigadores. Dichos investigadores participan en numerosos proyectos que demandan tanto recursos de cálculo intensivo como capacidad de almacenamiento.

Teniendo en cuenta las líneas de investigación a futuro, así como otras nuevas que puedan surgir del grupo de investigadores en Ciencia Computacional que acceden al CESGA, o de los propios proyectos de investigación del CESGA, así como un análisis pormenorizado de lo que han sido los últimos años de uso de la infraestructura Finis Terrae (FT), en términos de aplicaciones científicas utilizadas, modos de uso, evolución de los sistemas de cálculo, es posible establecer la oferta computacional actualizada con características diferenciadoras como ICTS nacional, con la solución propuesta.

La configuración del nuevo superordenador, descrita en el apartado de Objetivos específicos, es el resultado de un estudio de necesidades de la comunidad de usuarios del CESGA, y de una evaluación de las diferentes tecnologías disponibles en el mercado.

Desde el punto de vista regional, los estudios de impacto realizados para el reconocimiento del CESGA como ICTS, han desvelado el impacto positivo, tanto científico como económico que tiene sobre la región la actualización de infraestructuras tecnológicas como la que aquí se propone. En concreto:

1. Desde el punto de vista científico se han utilizado dos índices para analizar la bibliografía generada gracias a la utilización de la infraestructura del CESGA. INVO (Indicador de visibilidad basado en el Orden del JCR) e IVFI (Indicador de visibilidad basado en el Factor de Impacto del JCR). En ambos casos se ha mostrado que las publicaciones realizadas con recursos computacionales del CESGA están por encima de los obtenidos a nivel nacional. Para el periodo analizado (2002 a 2007), el INVO del CESGA ha oscilado entre 0,7 y 0,8 sobre 1, mientras que el nacional estaba un poco por debajo de 0,4. Para el caso del IVFI, el de los usuarios del CESGA estaba entre 0,4 y 0,2 (dependiendo del año) y el nacional alrededor del 0,15. En términos brutos, la producción científica de usuarios del CESGA ha crecido desde algo menos de 100 artículos en revistas del año 2002 a cerca de 296 en el año 2011. En la página 21 del «Annual Report 2011» adjunto se detalla la evolución de la aportación del CESGA a la producción científica. Por tanto, la infraestructura computacional del CESGA contribuye a una evolución positiva de la producción científica de los investigadores, que previsiblemente continuará mejorando en cantidad y calidad con la incorporación del FT-II que permitirá mantener la competitividad de la investigación regional.

2. Desde el punto de vista de impacto económico en la región por la instalación y operación del Finis Terrae se ha estimado en un Valor Añadido Bruto de 2,8 millones de Euros/año, con una generación de empleo medio de 80 empleos/año, teniendo en cuenta los efectos directos e indirectos. Por tanto es previsible que la instalación del FT-II genere también una actividad económica positiva en la región gallega, pudiendo mantener un conjunto de empleos de calidad, alto valor añadido y conocimiento necesarios para la competitividad regional.

Aparte de los efectos científicos y económicos, existen otros relacionados con la visibilidad regional a nivel internacional y a la política europea de apoyo a las regiones menos favorecidas y más alejadas del centro de Europa. Galicia pertenece a ambos ámbitos (está entre las menos favorecidas y además geográficamente está alejada del centro de Europa). En cuanto a la visibilidad, durante los últimos años el CESGA ha incrementado notablemente su actividad a nivel internacional, participando en más de 30 proyectos Europeos. El Finis Terrae ha atraído además la atención internacional gracias a sus características especiales. El FT-II permitirá mantener esa visibilidad internacional de la región gallega, lo que indirectamente influye positivamente también en los grupos de investigación regionales, gracias a su capacidad para participar en iniciativas internacionales de calidad.

Objetivos específicos

Superordenadores tan complejos como el actual Finis Terrae no son equipos disponibles de manera estándar en el catálogo de los fabricantes de ordenadores, sino que precisan de complejos diseños que combinan tecnologías, unas veces existentes y otras desarrolladas a medida, con un alto grado de involucración de los equipos investigadores. Por ello, el CESGA ya ha utilizado en el pasado y de modo particular en Finis Terrae, una metodología para diseñar el superordenador de producción, con una participación activa de los equipos de investigación, tanto usuarios como los internos del CESGA y de los fabricantes de tecnología.

A partir de la información recopilada, la solución de supercomputación que consideramos está basada en un cluster de nodos de computación heterogéneos, que combine las capacidades de las arquitecturas de memoria compartida y distribuida, y que proporcione una potencia pico en torno a 250 teraflops. De este modo, el cluster debe incluir un número elevado de nodos con al menos 16 núcleos de procesador y 64 GB de memoria, otro número de nodos con al menos 32 núcleos de procesador y 1 TB de memoria. Algunos de estos nodos dispondrán de aceleradores (GPGPUs, Manycores, etc.) y todos ellos estarán interconectados mediante una red de baja latencia de tipo Infiniband o similar.

El sistema incorporará una solución de almacenamiento paralelo, capaz de proporcionar en torno a 200 Terabytes, en un entorno de altas prestaciones.

FT-II estará compuesto por una arquitectura de nodos heterogénea, formado por nodos de computación con aceleradores y nodos de computación sin aceleradores.

Nodos de computación general: Un 90% aproximadamente de los nodos no dispondrán de sistemas aceleradores. Estos sistemas de cómputo contarán con, al menos, 16 cores de procesamiento general por nodo en arquitectura SMP o NUMA (imagen única del sistema). Asimismo cada nodo deberá de contar con al menos 64 GB de memoria principal por nodo, lo cual da un ratio de aproximadamente 4 GB/core que se estima adecuado para la gran mayoría de los cálculos. Se dispondrá de un sistema heterogéneo en cuanto a la distribución de memoria por nodo (o core), y en función de esto podrá haber nodos con más memoria (128 GB por nodo). Al menos deberán existir 4 nodos dotados inicialmente con 1 TB y capacidad de llegar a 2 TB de memoria.

Nodos de computación con aceleradores: El 10% aproximadamente de los nodos contará con procesadores de propósito general conectados con algún sistema de aceleración de cálculo. Este sistema podrá estar basado en arquitecturas de tipo GPGPU, coprocesadores manycore, o algún otro tipo de tecnología aceleradora dependiendo de la mejor opción disponible en el mercado en ese momento. El sistema de aceleración deberá estar balanceado. La arquitectura que aloje estos aceleradores deberá ser la misma que en los nodos convencionales, teniendo en cuenta que se elegirá la configuración de nodo que proporcione mejor balanceamiento en cuanto al acceso a los aceleradores, lo que a su vez podría depender de los diferentes fabricantes. En la actualidad la arquitectura más adecuada parece la utilización de GPGPUs o aceleradores Manycore y, aproximadamente, es razonable mantener una relación del 10% de aceleradores frente al número total de nodos de la solución.

Disco local de los nodos (computación y aceleradores)

Todos los nodos deberán contar con 2 sistemas de disco diferenciados:

1. Sistema operativo (1 o 2 discos de 100GB para sistema operativo o imágenes principales).
2. Datos locales temporales (scratch local). Basado en un sistema híbrido de SSD y discos de alta capacidad, con un ancho de banda de al menos 400MB/s y una capacidad mínima de 4TB por nodo. Se analizará la conveniencia de contar con nodos con mayor o menor capacidad de almacenamiento de datos temporales, así como la provisión de esta funcionalidad por el sistema de almacenamiento paralelo masivo de altas prestaciones.

Red de interconexión de altas prestaciones: El sistema de interconexión de los diferentes de computación será de tipo infiniband o similar, con un elevado ancho de banda y una latencia inferior a 2 microsegundos. En función del fabricante y los productos disponibles en el momento de la adquisición, se contempla la utilización de otras posibles interconexiones propietarias que favorezcan la agrupación de varios nodos en soluciones de memoria compartida.

Sistema de almacenamiento paralelo masivo de altas prestaciones: Estará basado en un sistema de ficheros paralelos que garantice un ancho de banda mínimo de 10 GB/s. Será un sistema heterogéneo basado en discos de estado sólido que actúen de caché para los accesos más frecuentes y discos SATA (baratos en capacidad). La capacidad mínima del sistema de discos será de 200 Terabytes.

El modo de uso de la nueva infraestructura ha de compatibilizar las dos formas habituales de ejecución:

a) *Capability*: bien todo el supercomputador o una fracción importante del mismo se destina temporalmente a la ejecución de un único problema muy demandante, bien por ser un problema muy grande o por la necesidad de ejecutarlo muy rápidamente. Un ejemplo de este tipo de utilización lo representan los retos ya ejecutados en el FT actual en donde se han resuelto problemas de electromagnetismo con 1.000 millones de incógnitas que han necesitado todo el FT.

b) *Capacity*: aún utilizando aplicaciones paralelas, el tamaño del problema a resolver es menor y, frecuentemente, es necesario ejecutarlo varias veces con parámetros diferentes (por ejemplo, para estudios paramétricos). En este caso, además, es probable que se desee la ejecución simultánea de varios casos. La ejecución simultánea de este gran número de casos permite abordar problemas que utilizando sistemas secuenciales sería inviable.

Objetivos científicos

El perfil de las aplicaciones utilizadas en los últimos años con la inclusión del Finis Terrae en el CESGA ha cambiado radicalmente. Frente a una situación en donde el 45% de la CPU estaba siendo utilizada por una sola aplicación (Gaussian 03/98), ejecutándose en serie o paralelo de memoria compartida, se ha pasado a otra situación en donde el número de aplicaciones con un uso representativo ha crecido notablemente.

Basándose en los datos de consumo de aplicaciones en los últimos años y en los consumos relativos semanales de las aplicaciones es posible extraer la siguiente serie de tendencias a expensas del 30% de consumo no catalogado:

El 40% de las horas consumidas se centran en las siguientes aplicaciones relacionadas con las áreas de Química Cuántica, modelado molecular y física del estado sólido. Es una tendencia clara, no sólo en estos últimos años, sino en lo que llevamos de siglo que las áreas de modelado molecular y física del estado sólido están superando en uso a las de pura Química Cuántica, aunque la frontera algorítmica que las separa no es en absoluto clara, mezclando en los diferentes paquetes algoritmos propios de las 3 áreas.

La tendencia general es el uso de algoritmos con los mejores escalados paralelos (tendencia natural impuesta por la evolución del hardware), pero los algoritmos clásicos poco o nada escalables están permanentemente presentes.

El 2.º tramo de aplicaciones (consumo entre 10.000 y 100.000 horas) representa el 20% del consumo total. Siguen dominando aplicaciones de las áreas de Química Cuántica, modelado molecular y física del estado sólido aunque aplicaciones del área de la bioinformática y simulaciones meteorológicas o climatológicas (como WRF y WACCAN) ya están presentes.

En el 3.º tramo de aplicaciones (consumo menor a 10.000 h) con un consumo relativo despreciable frente al total empiezan a aparecer aplicaciones de otras áreas como física de partículas, elementos finitos, etc.

Es de gran dificultad predecir totalmente las necesidades futuras de las aplicaciones de nuestros usuarios, pero considerando un servicio general podemos catalogar las aplicaciones en 3 grupos:

- Aplicaciones altamente paralelas: son fundamentalmente aplicaciones científicas ligadas a las áreas históricamente más consumidoras de CPU y su evolución como Química Cuántica, modelado molecular y física del estado sólido. Es muy probable que en estas áreas existirán aplicaciones adaptadas a las últimas novedades del hardware como GPUs.

- Aplicaciones muy paralelas con fuerte dependencia de la memoria: destacarán probablemente las aplicaciones relacionadas con la Física de la Tierra, climatología, meteorología u oceanografía (como WRF, WACAMM, NEMO o ROMS) o las asociadas al electromagnetismo como HEMCUVE. Aunque su grado de paralelización es alto, el consumo de memoria necesario para su ejecución es también muy alto.

- Aplicaciones poco paralelas o con escalado medio: En este grupo pueden aparecer aplicaciones de muy diferentes áreas y engloba aplicaciones de desarrollo reciente como aplicaciones históricas cuyo desarrollo se ha congelado o su algoritmia no permite escalado. Este grupo de aplicaciones habitualmente necesitan menos experiencia en computación y son usadas por una más amplia comunidad de usuarios. Son las que más se benefician de nodos grandes de fácil uso, numerosos procesadores y alta memoria en el nodo.

Las aplicaciones descritas anteriormente así como el perfil de los usuarios coinciden en gran medida con las necesidades científicas detectadas en el proyecto europeo PRACE. Dicho proyecto considera que los problemas a resolver en Europa utilizando medios computacionales se dividen en cinco áreas:

- Meteorología, Climatología y Ciencias de la Tierra: destacan los problemas asociados al calentamiento de la tierra y escenarios de clima futuros; comprender y predecir las propiedades y variaciones de los océanos; eventos meteorológicos y de crecidas.

- Astrofísica, Física de partículas elementales y física del plasma: destacan los problemas asociados a sistemas y estructuras astrofísicas con diferentes rangos de escalas de longitud y tiempo; Teoría Cuántica de Campos (como QCD) y simulaciones de plasma para el ITER.

- Ciencia de Materiales, Química y Nanociencia: detecta dos problemas fundamentales: comprender materiales y química complejas y nanociencia y la determinación de propiedades electrónicas y de transporte.

- Ciencias de la Vida: los problemas destacados son los asociados a la Biología de Sistemas, dinámica de proteínas, agregación y asociación de proteínas, sistemas supramoleculares y medicina.

- Ingeniería: Simulaciones complejas tanto en la ingeniería tradicional (aeronáutica, turbinas de gas y motores de combustión interna) como en áreas menos frecuentes (flujos biomédicos, propagación de incendios forestales).

Cuatro de las cinco áreas del PRACE coinciden con las áreas de mayor actividad de los usuarios del CESGA. Solo el área de Astrofísica, Física de partículas elementales y Física del Plasma tiene una reducida presencia en el CESGA. El resto de las áreas es básicamente coincidente y en el futuro probablemente se mantendrá.

A continuación se describen los grupos considerados más representativos, con ejemplos de proyectos y líneas futuras que demandan un fuerte incremento de recursos de cálculo y almacenamiento.

Grupo de Matemática Aplicada. Universidad de Santiago de Compostela.
Actividad/Línea: Modelos Matemáticos.

Este grupo de investigación tiene como área principal de trabajo la simulación numérica de procesos industriales en sus diferentes etapas: la modelización, el análisis matemático de los modelos, la resolución numérica con diferentes técnicas de discretización (elementos finitos, volúmenes finitos, elementos de contorno, etc.) y la implementación en ordenador de los diferentes métodos incluyendo interfaces de usuario, salida gráfica, etc.

Las aplicaciones tratadas recorren la mayoría de los campos de la física: acústica, mecánica de sólidos, mecánica de fluidos, electromagnetismo, transferencia de calor, combustión, etc. En los últimos años se están realizando códigos en la modalidad de software libre en acústica y electromagnetismo. Tras una primera etapa de consolidación se pretende implementar estos códigos en ordenadores con arquitectura paralela. Por otra parte, en el marco de diferentes proyectos de investigación, se está llevando a cabo la escritura de un programa para la simulación de la combustión del carbón en una caldera, bien con aire o en régimen de oxicomustión. La enorme complejidad de los modelos que se resuelven (mecánica de fluidos turbulenta, radiación térmica, química, etc.) hace imprescindible el uso de ordenadores de altas prestaciones para simular los procesos en tiempos accesibles.

Grupo de Química Física. Universidad de Santiago de Compostela.

Actividad: Simulaciones de la dinámica de «soft-landing» y adsorción de péptidos sobre superficies monocapa auto-organizadas.

Esta línea se centra en el desarrollo y en la aplicación de métodos computacionales para el estudio de interacciones de péptidos y proteínas con superficies monocapa auto-organizadas (SAMs, self-assembled monolayers). Se buscará alcanzar una mayor comprensión de dos fenómenos de relevancia en este tipo de sistemas: (1) la deposición o «soft-landing» de péptidos protonados en fase gas sobre SAMs y (2) la adsorción de péptidos sobre SAMs en medio acuoso. El «soft-landing» se viene utilizando para la preparación de nuevos materiales sintéticos con aplicaciones en biotecnología. La investigación de la adsorción de péptidos y proteínas sobre SAMs posee un gran interés, ya que estos materiales sirven como modelos de las interacciones de proteínas con materiales de implantes.

Grupo de Electrónica y Sistemas. Universidad de Coruña.
Actividad: GHPC.

Esta línea de investigación se basa en Arquitecturas, Sistemas y Herramientas para Computación de Altas Prestaciones, y se trabajará utilizando las infraestructuras proporcionadas por el CESGA en líneas de investigación tales como:

- mejora de la programabilidad paralela a través de librerías tanto para lenguajes PGAS como para Java;
- middleware de comunicaciones de baja latencia para clusters basados en nodos multinúcleo;
- tolerancia a fallos para aplicaciones HPC (High Performance Computing); o gestión de infraestructuras para cloud computing.

– Improving UPC Usability and Performance in Constellation Systems: Implementation /Extensions of UPC Libraries.

Grupo de Física Macromolecular. Instituto de Estructura de la Materia, CSIC.
Actividad: Estructura de Proteínas.

Realización de simulaciones de Dinámica Molecular de diversos complejos proteicos con pesos moleculares superiores a 100 kDa. Para el estudio de dichos sistemas se emplearan tanto modelos atomísticos como de mesoescala, según el tamaño del sistema a estudiar.

Simultáneamente se realizaran estudios estructurales de los sistemas proteicos seleccionados mediante Microscopia Electrónica de Transmisión. Para el análisis de las imágenes producidas durante la visualización así como la reconstrucción tridimensional de la proteína también se requiere, en ciertos casos, la utilización de un superordenador.

Grupo de Tecnologías das Comunicacóns. Universidad de Vigo.
Actividad/Línea: Simulación de problemas electromagnéticos.

La principal línea de investigación que está desarrollando el grupo en relación con la supercomputación se basa en el desarrollo de programas de predicción electromagnética rigurosos, de baja complejidad y altamente escalables, aplicados a la resolución de problemas electromagnéticos de gran complejidad incluyendo todo tipo de materiales conductores o penetrables arbitrarios. En los próximos años se pretende continuar avanzando en la implementación de técnicas avanzadas de aceleración y paralelización que permitan explotar la disponibilidad de supercomputadores de altas prestaciones con gran cantidad de memoria y procesadores en paralelo.

En los últimos años ha habido un crecimiento extraordinario en el desarrollo de aplicaciones basadas en el método de los momentos para la resolución de problemas electromagnéticos que involucren objetos conductores de gran tamaño eléctrico. Este aumento está motivado por los avances significativos tanto en la capacidad de los computadores como en la implementación de métodos eficientes en electromagnetismo computacional (campo en el que el grupo cuenta con un reconocido prestigio a nivel internacional).

En este contexto, la línea de investigación que se pretende desarrollar actualmente en el ámbito del electromagnetismo computacional se basa en extender las técnicas anteriores, en principio desarrolladas para conductores perfectos, al análisis de todo tipo de materiales, incluyendo materiales no convencionales como los metamateriales (materiales artificiales con propiedades electromagnéticas extraordinarias), y el análisis de nanopartículas metálicas a frecuencias de THz y ópticas (en las que dejan de comportarse de modo convencional, exhibiendo un cambio en la naturaleza de su respuesta que es preciso considerar). Mencionar que esta investigación es de gran originalidad y se sitúa en la frontera del conocimiento en el campo del electromagnetismo computacional aplicado a la nanotecnología.

Grupo Física Aplicada. Universidad de Vigo.
Actividad: Modelos Meteorológicos.

La principal línea de investigación que está desarrollando el grupo en relación con la supercomputación se basa en:

- 1) simulaciones climáticas de alta resolución a fin de contribuir a las acciones internacionales de validación de modelos climáticos de la Organización Meteorológica Mundial (WMO) e informes del Panel Intergubernamental sobre Cambio Climático (IPCC).
- 2) cálculos de fuentes de humedad atmosféricas y precipitación: los informes del IPCC sobre cambio climático identifican los cambios en el balance hídrico como uno de los problemas críticos en el futuro. Es por ello de la mayor importancia conocer con exactitud las fuentes de humedad que afectan a nuestro país y el planeta, para lo cual se requiere la utilización de modelos matemáticos lagrangianos, cuya precisión y ejecución se beneficiará claramente de unas mejores infraestructuras de computación.

3) modelización de impactos en recursos energéticos: la sostenibilidad energética de España y la UE no está bien estudiada. La aplicación de modelos matemáticos no lineales sería de gran utilidad para las proyecciones de necesidades energéticas en un futuro y políticas de adaptación a las mismas. Para ello obviamente se necesitan infraestructuras de supercomputación para ejecutar estos modelos.

Grupo de Química Física. Universidad de Santiago de Compostela.

Actividad: Química Cuántica.

La investigación de este grupo está centrada en la evaluación de forma altamente precisa de propiedades moleculares y de interacción. Para ello, se desarrolla código dentro del programa químico cuántico DALTON, que posteriormente se aplica al estudio de un considerable número de sistemas químicos. Las aplicaciones se centran en el estudio de interacciones intermoleculares, importantes tanto en sistemas biológicos como en un considerable número de materiales moleculares. Para la descripción altamente precisa de la mayoría de las interacciones intermoleculares y especialmente de la contribución de dispersión, es necesario recurrir a la metodología Coupled Cluster CCSD y CCSD(T)6 y hacer uso de bases de cálculo considerablemente grandes, lo que conlleva un elevado coste computacional.

Grupo de Meteogalicia. Secretaría Xeral de Calidade e Avaliación Meidoambiental, Consellería de Medio Ambiente, Territorio e Infraestructuras, Xunta de Galicia.

Actividad: Modelos meteorológicos.

El Servicio Meteorológico Regional, Meteogalicia, dependiente de la Xunta de Galicia, entre las distintas funciones que tiene encomendadas, tiene la de realizar una predicción meteorológica y del estado de la mar para Galicia de forma operacional diariamente. Esto requiere la ejecución de modelos meteorológicos y oceanográficos diariamente que se llevan ejecutando de manera operacional en los superordenadores del CESGA. El incremento de potencia de cálculo por parte del CESGA en los últimos años ha permitido ir evolucionando en la consecución de cada vez más y mejores objetivos, ejecutando modelos de mayor resolución y con una física más avanzada. Así en los próximos años las mejoras previstas en los ordenadores del CESGA permitirán ir evolucionando a modelos de predicción por conjunto para el corto y medio plazo, tanto en meteorología como en oceanografía.

Grupo de Ecología Integrativa. Estación Biológica de Doñana, CSIC.

Actividad: Modelos biológicos.

Analizar la estructura y dinámica de redes ecológicas, en particular introducir las interacciones entre especies en las teorías dominantes de biodiversidad y efectos de cambio global. Es un trabajo interdisciplinario que integra análisis de grandes bases de datos con modelos de simulación.

Grupo de SIESTA. Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona (ICMAB), CSIC.

Actividad/ Línea: Simulación de materiales.

– Interacción de moléculas complejas con superficies, en colaboración con diversos grupos experimentales en el estudio de la interacción de moléculas con superficies, con el objetivo de comprender las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de estos sistemas. Uno de los aspectos más complejos es la comprensión de los cambios que induce la presencia de la superficie en las interacciones entre moléculas adsorbidas. Al tratarse de moléculas complejas y de gran tamaño, los cálculos de estructura electrónica de primeros principios involucran un gran uso de recursos, por lo que la infraestructura de supercomputación es esencial.

– Propiedades de transporte en dispositivos nanoelectrónicos y electrónica molecular. Mediante el uso de programas de simulación desarrollados por el grupo, esta línea se centra en la comprensión y predicción del funcionamiento de dispositivos electrónicos de

tamaño nanométrico. La descripción mecano-cuántica es esencial para capturar los efectos relevantes a estas escalas, por lo que se necesitan cálculos sofisticados de estructura electrónica, de gran coste computacional.

Grupo de Física Aplicada. Universidad de Santiago de Compostela.
Actividad: Física de la materia condensada.

En los próximos años se dedicará a describir la transición metal-aislante para fases cuánticas en distintos materiales que pueden presentar este efecto. Además se realizarán cálculos en materiales nanoestructurados para conocer el efecto magnetocalórico, extendiendo el estudio a los materiales termoeléctricos. Simultáneamente a ambas líneas de investigación, estas se complementarán con cálculos en clústers atómicos.

Para llevar a cabo esta actividad se emplean exhaustivamente, tanto los medios de supercomputación como los humanos del CESGA.

Presupuesto

Concepto	Descripción	Importe (euros)
Equipo principal.	Supercomputador Finis Terrae II, según configuración descrita en apartado «Objetivos específicos».	3.000.000,00
IVA elegible.	91% del IVA.	573.300,00
TOTAL		3.573.300,00