

# díxítós

CESGA

NOVAS DO CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA XANEIRO 2006



CONSEJO SUPERIOR DE  
INVESTIGACIONES  
CIENTÍFICAS



XUNTA DE GALICIA  
CONSELLERÍA DE INNOVACIÓN  
E INDUSTRIA

MINISTERIO  
DE EDUCACIÓN  
Y CIENCIA



CENTRO COFINANCIADO  
A TRAVÉS DO FONDO EUROPEO DE  
DESENVOLVEMENTO REXIONAL



**DIRECCIÓN** Javier García Tobío  
**COORDINACIÓN** Fernando Bouzas Sierra  
**COLABORACIÓN** Carlos Fernández Sánchez  
Javier López Cacheiro  
Manuel Pereiro López  
Daniel Baldomir Fernández  
Juan Villasuso Barreiro  
Ignacio López Cabido  
José Carlos Mouriño Gallego  
Xosé A. Regos Varela  
Irene Touriño Eirin

**PORTADA** Laura Gómez Fernández

**MAQUETACIÓN** Laura Gómez Fernández  
Patricia Álvarez Portas

**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

- INAUGURADO BSC-CNS
- INSTALACIONES ESPAÑOLAS NO TOP500 [03]
- DEZANOVEMIL CPUS AO DISPOSIBILIDADE DOS USUARIOS [04-05]
- POSIBLES APLICACIONES BIOMÉDICAS DE CLUSTERS DE PRATA [06-07]
- EDUROAM CHEGA A GALICIA [08]
- OPTIMIZA TEMPOS DE EXECUCIÓN NO SUPERDOME [09]
- CESGA OBTÉN CERTIFICACIÓN ISO:9001
- BUGALICIA AMPLÍA A OFERTA [10]
- PROTOTIPO DE TELEXERONTOLOXÍA
- AVANCE PROXECTOS [11]

## EVOLUCIÓN DOS 500 SISTEMAS MÁIS POTENTES DO MUNDO

TOP 500

Carlos Fernández Sánchez

Durante a celebración do Congreso Supercomputing 2005 o mes de novembro en Seattle, publicouse a vixésimo-sexta edición da lista Top500. Nela recóllense as 500 instalacións que obtiveron o maior rendemento na execución do benchmark Linpack.

O superordenador máis potente é o IBM BlueGene/L, dos Laboratorios Nacionais Lawrence Livermore (LLNL), pertencente ao DOE dos Estados Unidos. Este sistema xa presente na anterior edición do TOP500, duplicou nos últimos 6 meses a súa capacidade, acadando 280.6TFlop/s. O segundo é tamén un IBM eServer BlueGene, pero con tan "só" 40.960 procesadores, do Centro de Investigación Thomas J. Watson de IBM, cun rendemento de 91,20TFlop/s. O terceiro lugar ocúpao tamén un sistema IBM: o ASCI Purple, instalado tamén no LLNL. A diferenza dos 2 anteriores está baseado en servidores pSeries 575 e procesadores Power5 (os BlueGene utilizan PowerPC con menor capacidade de cálculo, pero con maior potencia global grazas a que utilizan un elevadísimo número de procesadores). Este sistema acadou os 63.4TFlop/s.

As 5 instalacións con maior potencia de cálculo atópanse en EEUU. En Europa, o sistema máis potente é o servidor de IBM Marenostrom, instalado no BSC-CNS.

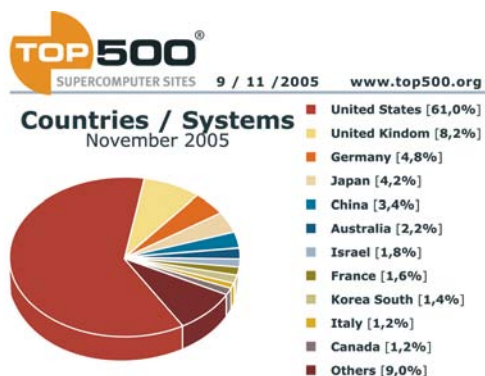
É significativo o crecemento experimentado nos últimos anos polos superordenadores baseados en procesadores compatibles x86. En concreto, un total de 333 sistemas utilizan procesadores Intel. Os novos procesadores de 64 bits, denominados EM64T, foron ben recibidos na comunidade HPC e, a pesar da súa recente aparición no mercado, 64 sistemas están baseados nesta CPU, moi por riba dos 46 sistemas baseados en Itanium,

aínda que este último leva preto de 2 anos no mercado. Os seguintes procesadores con maior presenza son os Power de IBM (73 sistemas), por diante dos procesadores Opteron de AMD (55 na lista actual fronte aos 25 de hai 6 meses). Ademais, xa hai 5 sistemas baseados en procesadores Opteron que utilizan a nova versión do chip de dobre núcleo (dual core).

En canto ás arquitecturas, novamente apréciase un crecemento dos sistemas cluster, cun total de 360 instalacións. No que respecta ás redes de interconexión, case a metade das instalacións do Top500 utilizan Gigabit Ethernet, por diante dos 70 que utilizan Myrinet.

IBM permanece como o fabricante líder dentro na lista cun 43.8% das instalacións e aportando o 52.8% da potencia de cálculo. HP é o segundo fabricante por número de instalacións cun 33.8% dos sistemas e o 18.8% da potencia de cálculo. Os EEUU son claramente os líderes en consumo de sistemas HPC con 305 instalacións. Europa aparece con 100 sistemas e Asia con 66. En Europa, Alemaña con 24 sistemas perde o liderato que tiña hai seis meses fronte a Inglaterra, que ten agora 41.

España mantense no cuarto lugar en Europa en canto a potencia de cálculo instalada (décimo mundial) grazas ao Marenostrom. Por número de instalacións, España atópase no sétimo posto en Europa (xunto con Noruega, Bélxica e Irlanda) e no posto 23 no mundo.



# INAUGURADO O CENTRO NACIONAL DE SUPERCOMPUTACIÓN EN BARCELONA



O Barcelona Supercomputing Center – Centro Nacional de Supercomputación (BSC–CNS), que acolle o supercomputador Mare Nostrum foi inaugurado o 22 de novembro. Comezou a funcionar en abril de 2005 e chegou ao seu máximo rendemento en xuño deste mesmo ano e conta cunha capacidade de cálculo de 42,35TFlop/s. Os usuarios do CESGA poden facer uso dos recursos do BSC – CSN, grazas a un convenio

asinado entre as dúas institucións.

O BSC–CNS está xestionado por un consorcio no que participan o Ministerio de Educación e Ciencia, a Generalitat de Catalunya e a UPC.

Ao longo do acto, o Dr. Mateo Valero, Director do Centro, anunciou que se está a traballar no Mare Nostrum 2, que espera multiplique por 25 a capacidade actual en 2008.



MATEO VALERO (3º POLA ESQ.) AMOSA O MARE NOSTRUM A MARÍA JESÚS SAN SEGUNDO E PASQUAL MARAGALL.

## PRINCIPAIS INSTALACIÓNS DE COMPUTACIÓN EN ESPAÑA



Ademais do Mare Nostrum, as outras instalacións máis significativas de carácter científico-técnico do estado son o INM, a UPM, o IFCA, o CESGA, o CIEMAT, a UPV, o CESCA e a UV. Todas elas están por enriba do medio teraflops. Todas as instalacións teñen máquinas masivamente paralelas, se ben o BSC e a UPM utilizan arquitectura de memoria distribuída, o INM tecnoloxía vectorial, o IFCA de tipo cluster e o resto arquitectura de tipo NUMA.

Na táboa obsérvase a evolución histórica das instalacións españolas na lista top 500. Pódese constatar algunha presenza das instalacións máis emblemáticas, a pesar da dificultade de figurar na lista co paso do tempo, sobre todo nos últimos anos. Isto parece reflexar unha demanda cada vez máis crecente deste tipo de grandes sistemas.

### INSTALACIÓNS CON MAIOR POTENCIA DE CÁLCULO EN ESPAÑA NA ACTUALIDADE



### POSICIÓN NAS LISTAS TOP 500 DAS INSTALACIÓNS CIENTÍFICO-TÉCNICAS ESPAÑOLAS 1993-2005

	mai-93	nov-93	mai-94	nov-94	mai-95	nov-95	mai-96	nov-96	mai-97	nov-97	mai-98	nov-98	mai-99	nov-99	mai-00	nov-00	mai-01	nov-01	nov-03	mai-04	nov-04	mai-05	nov-05	
<b>CESGA</b>	163	146	200	255	427														227	475				
<b>CESCA</b>	364	428			377		169	210	381	240	356	439												
<b>INM</b>			205	137	174	278	371													363			235	400
<b>UAM</b>				237																				
<b>CEDEX</b>					432																			
<b>UJ I</b>							257	399																
<b>CEPBA</b>							466	289	282	172	261	275	441	367			284							
<b>CICA</b>									439															
<b>EPPE</b>									475	362														
<b>UV</b>										212	300	402												
<b>CIEMAT</b>											231	306	500		427									
<b>BSC-CNS</b>																					4	4	8	
<b>UPM</b>																						341		

Fonte: www.top500.org



# DEZANOVE MIL CPUS AO DISPOR DOS USUARIOS

## [ACCESO AO GRID EGEE]



**Carlos Fernández Sánchez**  
Técnico de Sistemas

**Javier López Cacheiro**  
Técnico de Sistemas  
CESGA  
sistemas@cesga.es

O proxecto EGEE (Enabling Grids for e-Science) está financiado pola Comisión Europea e o seu obxectivo é crear unha infraestrutura computacional que estea dispoñible para os científicos as 24 horas do día utilizando as tecnoloxías grid, e facilitarles así o acceso a importantes recursos computacionais, independentemente da súa localización xeográfica.

O EGEE permite á comunidade científica realizar de forma moito máis rápida cálculos que antes requirirían de longos períodos de tempo. No número anterior de Díxitos xa se falou do uso da infraestrutura do EGEE para a busca de novos fármacos para loitar contra a malaria.

Actualmente o EGEE dispón da maior rede grid de ordenadores, formada por máis de 19.000 CPUs distribuídas entre máis de 200 sitios e que xa está a ser usada por investigadores de todo o mundo. Neste momento xa se superaron os 2 millóns de traba-

llos executados dende principios do 2005.

A nivel operacional o EGEE está organizado en doce federacións en cada unha das cales se engloban países próximos. As competencias están distribuídas entre as Federacións e o control de operacións global lévao a cabo o CERN, que é un dos grandes impulsores do proxecto.

O CESGA forma parte da Federación SouthWest (SWE), a cal engloba a institucións de España e Portugal. Dentro da Federación, o CESGA é responsable da monitorización dos recursos e do "accounting" (é dicir, a medición de como están a ser usados os recursos polos investigadores). Ademais, apórtalle á infraestrutura do EGEE parte dos seus recursos computacionais, na actualidade 46 CPUs.

A Federación SWE está formada, ademais do CESGA, por outras 14 institucións (BIFI, CIEMAT, CNB, IFAE, IFCA, IFIC, INTA, LIP, PIC, UAM, UB, UPV e USC), que lle aportan ao EGEE un total de 772 CPUs e un espazo de almacenamento que supera os 1000 Terabytes. A lista detallada de recursos pode consultarse en <http://www.egee.cesga.es/EGEE-SA1-SWE/resources/>

### Organizacións Virtuais (VO)

Da mesma forma que no EGEE os sitios que aportan recursos computacionais están agrupados en Federacións, os usuarios agrúpanse no que se denominan Organizacións Virtuais (VO). Unha VO vén ser unha comunidade de usuarios con intereses comúns. Por exemplo, existe a VO LHCb, que engloba a usuarios relacionados co experimento do mesmo nome do CERN. Desta VO forma parte, entre outros, o grupo do profesor da USC Juan José Saborido.

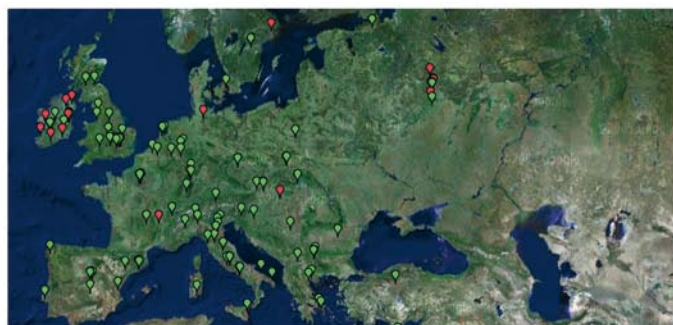
Actualmente existen máis de 70 VOs con acceso á infraestrutura do EGEE que engloban distintas disciplinas, como Física, Ciencias da Terra, Biomedicina, Química, Astronomía, Xeofísica, etc. Por exemplo, existe unha VO de recente creación denominada CompChem, que engloba a usuarios de Química Computacional.

Para poder acceder aos recursos computacionais do EGEE, é necesario dispoñer dun certificado dixital que lle permite ao usuario identificarse dentro do grid de forma similar a como se identifica co DNI. Posteriormente, o usuario deberá afiliarse a algunha VO afin á súa área de investigación e a partir deste momento poderá executar traballos no grid.

PERSOAL INVOLUCRADO NO PROXECTO EGEE. CESGA REALIZA UN IMPORTANTE ESFORZO DE PERSOAL INVESTIGADOR, TÉCNICO, ADMINISTRATIVO, DE XESTIÓN E DIFUSIÓN NO EGEE.



## MAPA DOS NODOS DO EGEE



número de institucións 223

total CPUs 19027

almacenamento 5 PB

Para poder lanzar os traballos o usuario só ten que conectarse a un ordenador denominado User Interface (UI), dende o que poderá utilizar a infraestrutura de forma transparente como se fose un só cluster.

O sistema de envío de traballos utiliza comandos similares aos que se utilizan para enviar os traballos ás colas noutros servidores de cálculo do CESGA, e os resultados dos traballos tamén se devolven directamente ao User Interface. Desta forma permítese centralizar os ficheiros de entrada e saída nun único ordenador, evitando as incomodidades de ter que recuperar os resultados en distintos servidores.

Para facilitarlles o acceso ao grid aos usuarios que estean interesados, o CESGA creou unha VO propia coa que calquera usuario do CESGA pode probar a infraestrutura do EGEE, e se despois lle resulta apropiada para as súas necesidades pode rexistrarse nunha VO afín á súa disciplina. Os usuarios interesados poden atopar información sobre como comezar a utilizar os recursos dispoñibles en <http://www.egee.cesga.es/vo.html>

### Tarefas desenvolvidas polo CESGA

Ademais de aportarlle recursos computacionais á infraestrutura de produción do EGEE, o CESGA tamén desenvolve outras tarefas dentro da Federación SWE.

O CESGA encárgase de xestionar a información de "accounting" (consumo de recursos) dos distintos sitios. Para recoller esta información o EGEE dispón de ferramentas especializadas que almacenan información do consumo de recursos nunha base de datos central.

Aproveitando a súa experiencia, o CESGA deseñou o portal de "accounting" da Federación SWE. Este portal permite xerar estatísticas do uso que se está a facer dos recursos computacionais e mostrar estatísticas de número de traballos, consumo de CPU, consumo de memoria, informes mensuais en PDF, etc. Tamén, permite facer consultas personalizadas para facilitar a realización de procesos de minería de datos. Ademais dispón dunha zona de acceso restrinxido onde se pode acceder á información de consumo por usuario.

Outra das tarefas das que se encarga o CESGA é da monitorización do estado das máquinas do EGEE que se atopan na Federación SWE. Para realizar esta tarefa o CESGA ten instaladas distintas ferramentas que comprobán periodicamente dende o funcionamento correcto do envío de traballos en cada un dos sitios ata a información publicada por cada un deles. O servizo de monitorización denominado GridICE permite ver o estado de cada un dos sitios de España e Portugal, incluíndo o estado das colas e información de cada un dos ordenadores. Caso de que aparezan problemas dispón dun sistema de notificación automática por email para alertar ao sitio afectado.

O CESGA tamén se ocupa de dar soporte tanto a usuarios como a administradores de sistemas. Existe un portal de soporte global no que os usuarios poden introducir incidencias, e estas envíanse automaticamente ao sitio adecuado. Atópase en <http://ggus.org>

Referencias: [www.egee.cesga.es](http://www.egee.cesga.es)

### O futuro middleware: gLite

O software que se utiliza para crear un grid denomínase middleware, o cal permite illar aos usuarios das aplicacións e ás aplicacións mesmas da complexidade do Grid.

O CESGA colabora no teste da nova versión de middleware que se vai utilizar no EGEE, denominada gLite. Este novo middleware está deseñado baseándose en servizos web e é unha evolución do middleware actual denominado LCG-2.

Actualmente gLite está en fase de probas. Para isto estase empregando unha infraestrutura reducida (comparada coa de produción) formada por máis de 15 sitios, denominada sistema de pre-produción (PPS).

Está previsto que gLite substitúa o middleware actual a principios do 2006 aportándolle nova funcionalidade á infraestrutura do EGEE.

# SORPRENDENTE APARICIÓN DO MAGNETISMO EN PEQUENOS CLUSTERS DE PRATA: POSIBLES APLICACIONES BIOMÉDICAS



## Manuel Pereiro López

Investigador contratado no Instituto de Investigacións Tecnolóxicas e no Dept. de Física Aplicada da U. S. C.  
fampl@usc.es

## Daniel Baldomir Fernández

Profesor titular da U. S. C.  
fadbal@usc.es

Nas dúas últimas décadas, o campo de investigación dedicado ao estudo dos clusters de metais de transición vén de sufrir un amplo desenvolvemento tanto dende o punto de vista experimental coma dende o teórico. Como exemplos cabe citar as tradicionais aplicacións ao campo da catálise debido á enorme razón superficie/volume dos clusters. Incluso, máis recentemente, os clusters magnéticos (aqueles que posúen un momento magnético total distinto de cero) están a ofrecer novas e excitantes aplicacións no campo da biomedicina, entre as que cabe destacar: i) entrega de medicamentos, vía un campo magnético, que dirixe exactamente a droga a zona danada; ii) tratamento hipertérmico de células tumorais; iii) e moi recentemente téñense descrito aplicacións para a manipulación das membranas das células.

Abondando máis na idea dos clusters, cabe dicir que estes son sinxelamente agrupacións de átomos ou moléculas de tamaño nanométrico (a mil millonésima parte dun metro) onde o número de constituíntes varía entre  $10^1$  e  $10^6$ . Esta é unha nova estrutura da materia que está a cabalo entre os átomos illados e os condensados amorfos ou cristalinos macroscópicos, punto este que fai os clusters moi atractivos para comprender como evolucionan as propiedades electrónicas e magnéticas dos materiais cando transitamos dende a estrutura macroscópica á estrutura microscópica da materia. Un exemplo disto atopámolo nos metais de transi-



MANUEL PEREIRO LÓPEZ E DANIEL BALDOMIR FERNÁNDEZ EXPLICAN OS RESULTADOS DA INVESTIGACIÓN NO CESGA.

ción 3d, 4d e 5d, dos cales soamente uns poucos elementos dos 3d (Fe, Co, Ni) son magnéticos na fase cristalina macroscópica. Porén, moitos dos metais que son non magnéticos na fase macroscópica convértense en magnéticos cando condensan en clusters. De forma xeral, pódese dicir que os clusters presentan dúas características que axudan a entender o porqué deste comportamento, é dicir, o seu reducido número de coordinación e a alta simetría axudan á aparición de magnetismo e, polo tanto, de clusters que condensan en estruturas tales como a icosaédrica, que posúe unha alta simetría favorecerán un estado magnético. De acordo con este estraño comportamento dos clusters e en vista das actuais aplicacións biomédicas deles, dicimos usar como elemento a prata, pois esta é inocua podendo introducirse así no torrente sanguíneo sen problemas de intoxicación para o paciente. Ademais, no estado cristalino é diamagnética, pero cando condensa en

clúster, tal como veremos despois, é sorprendentemente magnética e cun momento magnético nada desprezable para un metal nobre como é a prata.

O estudo dos clusters de metais de transición, sobre todo cando teñen un reducido número de constituíntes, menor dos 20 átomos, faise moi difícil experimentalmente dado que illalos resulta unha tarefa moi complicada. Porén, o seu estudo dende un punto de vista teórico resulta moito máis axeitado. Existen varias técnicas ou métodos teóricos para levar a cabo esta tarefa, pero pódese dicir de forma global que estes se dividen entre modelos semiempíricos e modelos ab initio ou de primeiros principios. De entre estes últimos cabe destacar que todos eles están baseados na famosa ecuación mecánico-cuántica de Schrödinger que describe o comportamento dos electróns ligados aos átomos dos clusters que se desexan estudar.



En particular, nós utilizamos un método creado alá polos anos 60 chamado "teoría do funcional da densidade" que en esencia describe a estrutura electrónica e as propiedades magnéticas dos clusters baseándose na densidade electrónica como único parámetro para describir o comportamento dos electróns, en vez de considerar a función de onda electrónica, e permite así unha fácil implemetación computacional ademais dunha considerable aceleración dos calculos dado que escala como  $N^3$  fronte a outros métodos como Hartree-Fock que escalan como  $N^4$ , sendo  $N$  o número de elementos da base na que se expande a función de onda.

En particular, nós fixemos un estudo tratando de calcular as propiedades eléctricas e sobre todo magnéticas, que abarca dende o cluster de 2 átomos de prata ata o de 22 átomos. En primeiro lugar, fíxose unha busca variacional da multiplicidade dos clusters para logo facer unha relaxación das posicións atómicas obtendo unha xeometría optimizada, tal como se reflicte na Fig. 1. Unha vez que esta foi achada procedeuse ao cálculo da estrutura electrónica e obtención dos momentos magnéticos de cada átomo do cluster. Os cálculos realizáronse nos nodos Itanium2 do servidor HP Integrity Superdome. Inicialmente os técnicos de soporte de aplicacións do CESGA optimiza-

ron os códigos usados no Superdome para incrementar a súa eficiencia. Empregáronse unhas 46.322 horas das que un 90% foi investido na optimización da xeometría e o resto na busca do mínimo de multiplicidade. Os resultados que obtivemos dende o punto de vista magnético son claramente espectaculares, tal como se mostra na Fig. 2. Pode observarse nela sobre todo como o cluster de 13 átomos, que é o que condensa en simetría icosaédrica (ver Fig. 1), é o que maior momento magnético por átomo presenta.

A explicación deste considerable magnetismo de  $Ag_{13}$  recae en dúas particularidades deste cluster, é dicir, a súa alta simetría e o reducido número de coordinación dos átomos da periferia. A alta simetría favorece unha transferencia de carga electrónica de cada átomo da periferia ao átomo central (ver Fig. 1), compensando así o *exchange splitting* do átomo central pero de forma contraria descompensándoo para os átomos da periferia. Este *exchange splitting*, ao multiplicalo polos 12 átomos da periferia, crea un momento magnético para o cluster relativamente elevado. O resto dos clusters, por non reuniren tales condicións, posúen un momento magnético neto que decrece a medida que se van perdendo estas propiedades, tal como se ve na Fig. 1.

A pesar das múltiples aplicacións biomédicas dos clusters que subliñamos anteriormente, temos que facer notar que aínda así presentan certos problemas, tales como a toxicidade dos clusters e a opsonización, que é o proceso polo cal os clusters se recubren de proteínas do plasma sanguíneo sendo facilmente recoñecible así polo sistema inmune que as identifica como un corpo invasor. O primeiro problema adoita solucionarse recubriendo os clusters con polímeros biocompatibles, pero isto incrementa cuantitativamente o tamaño da partícula e faino máis facilmente recoñecible polo sistema inmunitario, xa que logo, estes dous problemas son claramente pouco desexables sobre todo se queremos que a inserción dos clusters no torrente sanguíneo sexa o menos prexudicial posible para o doente. É neste punto onde o uso de clusters de prata se fai claramente moi interesante por dúas razóns. Primeiro, como a prata é un metal nobre, é dicir, tende a ser bastante inerte, evita o problema da toxicidade e, en segundo lugar, ao non ter que recubrirse con polímeros, favorece que a opsonización se reduza. Ademais, tal como quedou demostrado anteriormente, debido ao comportamento magnético destes clusters, en particular da  $Ag_{13}$ , o seu uso para levar medicamentos ás zonas afectadas mediante un campo magnético queda claramente xustificicado.

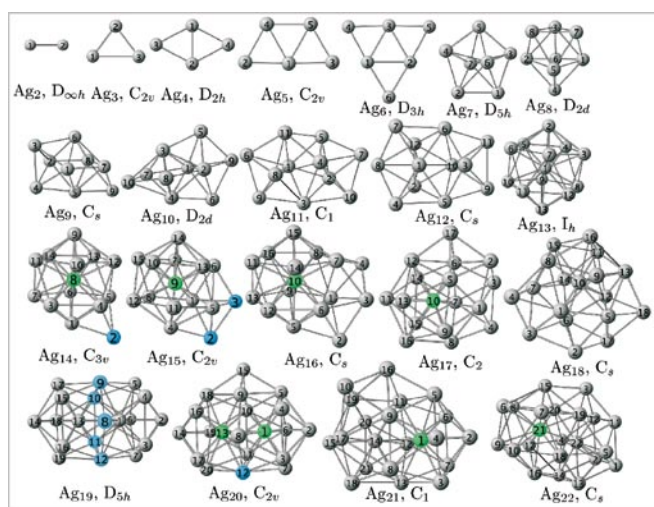


FIG. 1: ESTRUCTURAS DE MÍNIMA ENERXÍA XUNTO COS GRUPOS PUNTAUIS ASIGNADOS AOS CLUSTERS DE  $Ag_N$  ( $2 \leq N \leq 22$ ). OS MOMENTOS MAGNÉTICOS,  $M$ , DOS ÁTOMOS COLOREADOS EN VERDE ( $-1.5 \mu_B \leq M \leq -0.4 \mu_B$ ) E EN AZUL ( $-0.1 \mu_B \leq M \leq 0 \mu_B$ ) ESTÁN ALIÑADOS ANTIFERROMAGNETICAMENTE CO RESTO.

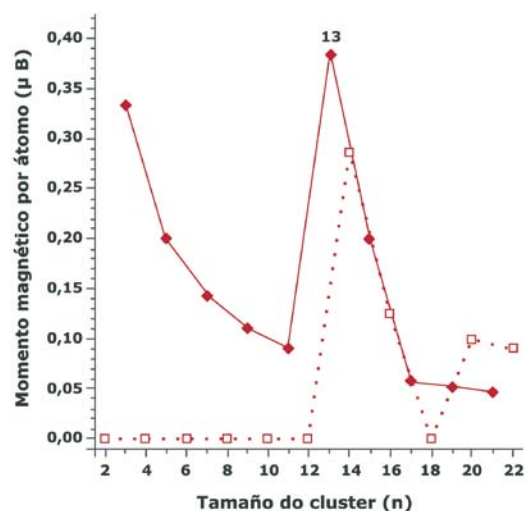


FIG. 2: EVOLUCIÓN DO MOMENTO MAGNÉTICO POR ÁTOMO DOS CLUSTERS MÁIS ESTABLES EN FUNCIÓN DO TAMAÑO DO CLUSTER.



## José Carlos Mouriño Gallego

Técnico de Aplicacións  
CESGA  
aplicacions@cesga.es

A compilación de aplicacións en contornos de Altas Prestacións (HPC) debe realizarse adecuadamente para obter un bo aproveitamento do sistema. O servizo de soporte de aplicacións vén de publicar na web do Centro un informe técnico para facilitar aos usuarios a compilación e o desenvolvemento de pequenas aplicacións de cálculo científico. O estudo presenta as opcións de optimización do compilador Fortran de HP no sistema Superdome.

En xeral, os usuarios tenden a empregar pouco ou nada as opcións de compilación. Estas opcións deberanse utilizar habitualmente, xa que, con elas se conseguen importantes melloras no tempo de execución dun programa. Como exemplo, dicir que un programa de proba utilizado, sen ningunha optimización, consumiu 400 minutos de execución. Coas opcións por defecto 300 minutos e coa máxima optimización apenas 20 minutos. Porén, estas opcións deben utilizárense con precaución, pois algunhas delas fan variar a execución do programa e/ou poden alterar os resultados finais. Por isto, non só se deben utilizar as opcións de compilación e as librarías matemáticas máis axeitadas, senón tamén comprobar o funcionamento correcto do programa executando os tests dispoñibles.

Entre outras analízanse as opcións:

**+Dsitanium2:** optimiza o código para a arquitectura da máquina

**+OX (X=0, 1, 2, 3, 4):** nivel de optimización. A maior valor maior grao de optimización.

**+Ofast:** conxunto de opcións para reducir o tempo de execución. É moi recomendable, pero ao mesmo tempo moi agresiva. Aplica: +O2, +Olibcalls, +Ofitacc=relaxed, +Onolimit,

+FPD, +mergeseg, +DSitanium2 -WI, +pi4M, +pd4M,.

**+Oall:** aplica varias opcións: +Oaggressive, +Onolimit (é conveniente con +O4).

**+Onolimit:** aplica optimizacións aínda que incrementen o tempo de compilación ou uso de memoria.

**+FPD:** permite overflow e pon a cero todos os valores desnormalizados.

**+Onofitacc, +Ofitacc=relaxed:** habilita optimización en operacións de punto flotante. Cómpre ter coitado coa precisión nos resultados.

**+Onoloop\_transform:** non permitir transformacións nos bucles (unroll, fusión, etc.). Por defecto as permite.

**+Oaggressive:** aplica optimizacións agresivas: +Oentrysched, +Olibcalls, +Onofitacc, +Onoinitcheck, +FPD.

**-g:** xera información necesaria para programas de debug.

**-WI, +pd(size), +pi(size), +mergeseg:** opcións de "link: pd" é o tamaño da páxina de datos, "pi" o tamaño da páxina de instrucións e "mergeseg" permite que ambos os dous segmentos estean mesturados. Os resultados varían considerablemente variando o valor de "pd".

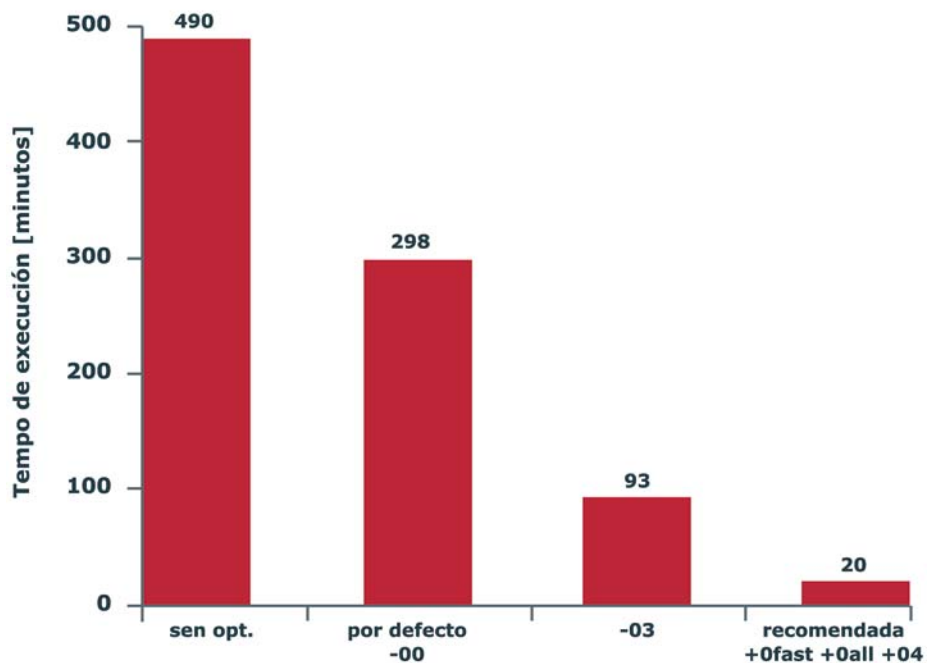
A maior grao de optimización, maior probabilidade de erro. Se o grao de erro non é aceptable, debe baixarse o nivel de optimización, buscando sempre un compromiso entre velocidade de proceso e precisión.

Aquí apenas se describen unhas poucas opcións. Recomendamos aos usuarios que desenvolvan e/ou executen os seus propios programas consulten o documento elaborado como resultado do estudo e que poden atopar en [www.cesga.es/infotec-2005-004](http://www.cesga.es/infotec-2005-004).

Para ampliar información poden igualmente contactar co servizo de soporte de aplicacións a través de [aplicacions@cesga.es](mailto:aplicacions@cesga.es).

Consulte o informe técnico completo en: [www.cesga.es/infotec-2005-004](http://www.cesga.es/infotec-2005-004)

## VALORES REAIS OBTIDOS COA APLICACIÓN DE PROBA







**Juan Villasuso Barreiro**  
Técnico de Comunicac[i]o[n]s  
CESGA  
comunicacions@cesga.es

Eduroam é unha iniciativa europea que facilita a mobilidade de investigadores e estudantes. Nacida no grupo de traballo TF-Mobility Task Force de TERENA encargado de avaliar e analizar as distintas soluc[i]o[n]s co fin de conseguir un espazo único de mobilidade. Dito espazo consiste nun amplo grupo de organizac[i]o[n]s baixo unha política de uso e requirimentos comúns, permiten que os seus usuarios poidan desprazarse entre elas, dispondo dos servizos m[ó]viles que puidesen necesitar. O obxectivo é que, ao chegar a outra organizac[i]o[n], os usuarios dispuxesen, de maneira transparente, dun contorno de traballo virtual con conex[i]o[n] a Internet, acceso a servizos e recursos da súa organizac[i]o[n] orixe, así como acceso a servizos e recursos da organizac[i]o[n] que nese momento lles acolle.

Eduroam baséase nunha xerarquía do servizo sustentado en radius (internacional, estatal, rexional/local) para a autenticac[i]o[n] do usuario desprazado contra o servidor radius da súa instituc[i]o[n] orixe, e no método de acceso á rede (802.1X, control de acceso vía web e a través de redes privadas virtuais – VPN). A coordinac[i]o[n] e o ser-

vizo de radius para os dominios .es é xestionado polo grupo de traballo MOVIRIS de RedIRIS.

As universidades galegas e o CESGA uníronse á iniciativa desde o primeiro momento, adecuando as súas infraestructuras de rede implantando eduroam en practicamente o 100% dos seus campus e facultades. É destacable que a nivel galego se usa o mesmo método de acceso, facilitando a mobilidade dos usuarios entre os distintos centros e unha política de uso e seguridade moi similar, o que redundará no feito de que un investigador podería practicamente facer o mesmo estando desprazado que na súa propia instituc[i]o[n]. Tras a implantac[i]o[n] deste servizo, un investigador de, por exemplo, a UDC que o teña, poderá acceder co seu portátil dotado de conectividade wi-fi aos servizos proporcionados pola súa propia universidade ou simplemente conectarse a Internet cando se encontre desprazado na UVIGO, na USC ou no propio CESGA, sen necesidade de solicitar ningunha conta e de maneira totalmente transparente.

Eduroam está dispoñible en case todos os países europeos. No estado español, é en Galicia e Cataluña onde se atopa máis implantado ([www.eduroam.es](http://www.eduroam.es)).

<http://eduroam.cesga.es>

**Ignacio López Cabido**  
Subdirector Técnico  
CESGA  
info@cesga.es

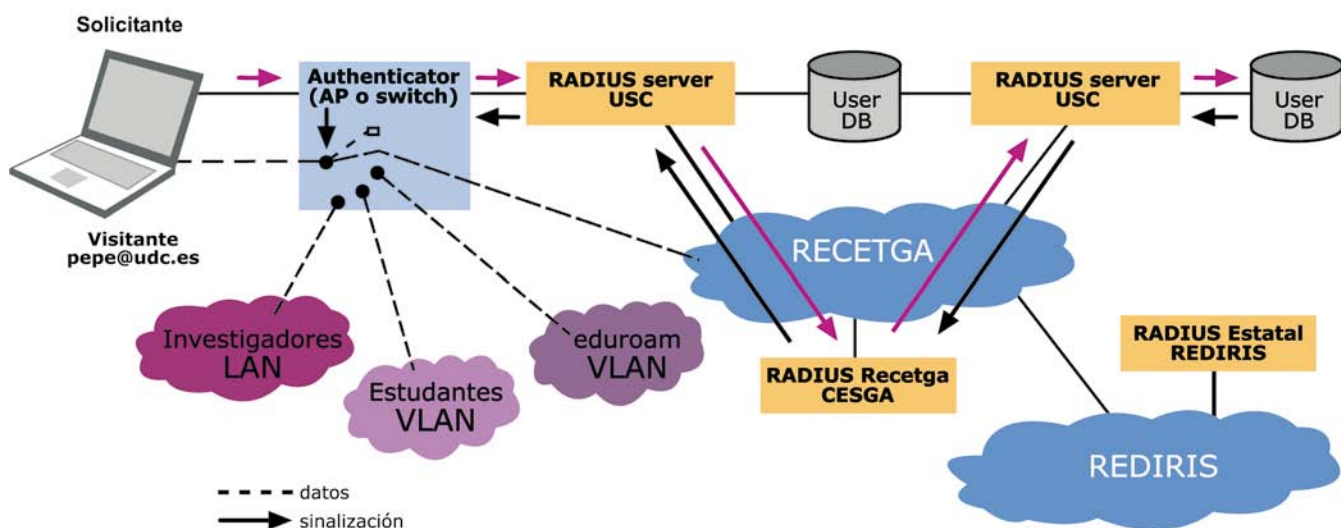
CESGA adquiriu mediante concurso público un novo gigarouter que reforzará a dispoñibilidade do nodo central da RECETGA, Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia.

Cun orzamento total de licitac[i]o[n] de 148.000 euros, financiado pola D.X. de I+D+i, resultou adxudicataria a empresa Telindus que fornecerá unha combinac[i]o[n] dun novo gigarouter da marca Juniper modelo M10i, e un Conmutador gigabit ethernet da marca Enterasys, modelo N3. O equipo adquirido será o elemento que interconecte as fibras ópticas das universidades e o nodo de Rediris aloxado no CESGA, que proporciona acceso aos investigadores galegos ás redes de investigac[i]o[n] e Internet.

Coa incorporac[i]o[n] do novo equipamento, disporase de portos suficientes para a conex[i]o[n] dual de todos os tramos troncais, ao tempo que se melloran as características de alta dispoñibilidade do propio router, ao estar todos os elementos críticos redundados.



ESQUEMA XERÁRQUICO DE AUTENTICACIÃO EN EDUROAM



## CESGA OBTÉN A CERTIFICACIÓN ISO: 9001



### Javier García Tobío

Director-Xerente  
CESGA  
info@cesga.es

A entidade certificadora Det Norske Veritas (DNV) vén de acreditar que o sistema de xestión do CESGA é conforme a norma ISO 9001:2000. Ao longo de 2005 o persoal do Centro de Supercomputación acometeu todas as accións necesarias para adecuar os sistemas de xestión e os cotiáns procesos de prestación de servizo.

Creado pola Organización Internacional para a Estandarización (ISO), o estándar ISO 9001:2000 céntrase nos sistemas de xestión da calidade. Esta última versión do estándar é aplicable a todos os procesos da organización que inflúen na calidade de servizos e produtos. Así, a norma

afecta aos sistemas de xestión da calidade, á responsabilidade da xestión, á xestión dos recursos, á realización de produtos e prestación de servizos, aos sistemas de medición, así como á análise e á mellora continua. Esta norma, internacionalmente reconecida, fai especial fincapé na satisfacción dos usuarios/clientes e nos procesos de mellora continua.

Tanto a Fundación Centro Tecnolóxico de Supercomputación de Galicia como a Sociedade Anónima de Xestión Centro de Supercomputación de Galicia obtiveron a prestixiosa acreditación.

A consecución deste logro é importante para o Centro e os seus usuarios, xa que, con el, quedan normalizados os esforzos que regularmente viña realizando o CESGA por mellorar os servizos á súa comunidade de usua-

rios nas institucións de I+D+i en Galicia e no CSIC. O mantemento desta norma de xestión de calidade suporá un garante de que a calidade dos servizos do Centro experimentarán permanentes melloras.



EMPRESA CERTIFICADA  
UNE-EN-ISO 9001



## BUGALICIA AMPLIA A SUA OFERTA DE BASES DE DATOS



### Xosé A. Regos Varela

Director Técnico  
BUGALICIA  
direccion@bugalicia.org

O Consorcio de Bibliotecas Universitarias de Galicia comenza o ano 2006 ofertando aos seus usuarios dúas novas bases de datos internacionais e un novo módulo de Aranzadi.

**Westlaw "Práctico"** é o nome da nova incorporación procedente da base de datos Aranzadi. O módulo ofrece información de carácter doutrinal (normativa básica, comentarios, casos prácticos, formularios, textos das normas, webs...), que, sumándose aos seis servizos de Westlaw ofertados xa con anterioridade polo Consorcio de Bibliotecas, complementará a parte lexislativa, xurisprudencial e bibliográfica do mesmo.

A aplicación está dispoñible para as áreas Fiscal, Social e de Administración Local. Relacionado tamén con este tipo de datos, Bugalicia proporcionará información legal, económica e empresarial, entre outras, a través da base de datos LexisNexis.

O servizo ofertado por **LexisNexis**, considerado actualmente un dos máis relevantes de información online sobre novidades empresariais, permite o acceso a información actualizada de centos de periódicos, revistas, xornais comerciais, boletíns de noticias de industria, información e datos sobre impostos, datos financeiros de contabilidade, rexistros públicos, rexistros lexislativos ou datos sobre importantes empresas e o seus directivos.

**SportDiscus** é o terceiro dos servizos que completan a nova oferta de Bugalicia. Esta base de datos, realizada por Sport Information Resource Center en colaboración con organismos pertencentes á International Association for Sport Information, inclúe unhas 700.000 referencias bibliográficas de libros, artigos de revistas, teses, actas de congresos e material audiovisual do campo das ciencias do deporte e doutras disciplinas relacionadas. A cobertura cronolóxica de SportDiscus abrangue dende o ano 1830, actualizándose mensualmente cunha cifra media superior aos 2.000 rexistros.



Consorcio de Bibliotecas  
Universitarias de Galicia

# DESENVOLVEMENTO TECNOLÓXICO INTEGRAMENTE GALEGO PROTOTIPO DE PASARELA PARA TELEXERONTOLOXÍA



O pasado 20 de decembro presentouse na Coruña o prototipo dun proxecto pioneiro de telexerontoloxía. O prototipo consta dun sistema composto por diverso hardware/software no que participaron no seu desenvolvemento e inicial testado Televés, o grupo de enxeñaría telemática da UVIGO, CESGA, o Centro Xerontolóxico de estancias diurnas "La Milagrosa", a Asociación de Pensionistas e Xubilados da Coruña (promotor do proxecto) e o grupo de xerontoloxía da UDC dirixido polo Dr. Millán Calenti (coordinador do proxecto).

O prototipo é un sistema que permite a avaliación e intervención a distancia de problemas que afectan á poboación maior empregando internet. As funcionalidades que ofrece este novidoso sistema inclúen entre outras: aplicación para a xestión de historiais clínicos, aplicación de teleestimulación cognitiva, videoconferencias de atención médica e rehabilitación. Un común receptor de televisión é o que este sistema emprega como interface no domicilio do maior. As comunicacións xestionáanse a través dunha pasarela desenvolvida por Televés, quen tamén deseñou un

dispositivo navegador adaptado a poboación de maiores. O grupo de enxeñaría telemática deseñou o sistema de localización permanente do maior cun dispositivo de telealarma integrado. O proxecto contou con financiamento da Dirección Xeral de I+D+i da Consellería de Innovación e Industria.



JACOBO PENIDE DE TELEVÉS PRESENTA O PROTOTIPO DE PASARELA ASISTENCIAL.

## AVANCE PROXECTOS

### [e-HOSPITAL]

O proxecto e-Hospital analizará as vantaxes da aprendizaxe electrónica con pacientes adultos hospitalizados facilitándolles o acceso a formación continua durante a súa convalecencia.

Financiado pola Comisión Europea e participado por institucións de cinco países, por España participan o Grupo de Innovación e Tecnoloxía Educativa da USC e o CESGA. Cóntase tamén coa colaboración do Centro Hospitalario Universitario Juan Canalejo.

[www.ehospital-project.net](http://www.ehospital-project.net)

### [ENSIGNA]

O proxecto ENSIGNA ten como obxectivo desenvolver unha metodoloxía innovadora para a realización do curso de Lingua de Signos Española empregando as TIC.

Para isto analizaranse as tecnoloxías dispoñibles, os formatos e soportes máis axeitados para os contidos didácticos.

Financiado pola Dirección Xeral de I+D+i, no proxecto colaboran o CESGA, a USC, a Fundación da Federación de Persoas Xordas de Galicia e o Grupo FEMXA.

### [EFELCREN]

Educational Flexible and Creative Environments. CESGA participa no proxecto UE a través de Socrates - Comenius 2.1. Analizarán e desenvolverán un contorno de traballo colaborativo para a creación e validación de materiais didácticos destinados a educación primaria e secundaria. Crearán una base de datos con materiais flexibles para e-learning.

Participan institucións de 6 países europeos. Proxecto coordinado por Beatriz Cebreiro do Dpto. Didáctica e Organización Escolar da USC.

<http://efelcren.cesga.es>





**TURGALICIA**  
DIRECCIÓN XERAL DE TURISMO

[www.turgalicia.es](http://www.turgalicia.es)

**TODOS OS RECURSOS E ALOXAMENTOS TURÍSTICOS DE GALICIA**



XUNTA DE GALICIA  
CONSELLERÍA DE INNOVACIÓN  
E INDUSTRIA



**AHORA  
LA VIRTUALIZACIÓN  
ES UNA REALIDAD.**

Con los servidores HP Integrity  
con procesadores Intel® Itanium® 2



LLAME AL **902 10 14 14**  
VISITE [www.hp.es/integrity-virtualizacion](http://www.hp.es/integrity-virtualizacion)



© 2006 Hewlett-Packard Development Company, L.P. Todos los derechos reservados. Intel, Intel logo, Intel Inside, Intel Inside logo, Intel Centrino, Intel Centrino logo, Celeron, Intel Xeon, Intel SpeedStep, Itanium, Pentium, y Pentium III Xeon son marcas registradas de Intel Corporation o sus subsidiarias en los Estados Unidos y otros países. Microsoft y Windows son marcas registradas de Microsoft Corporation. Linux es una marca registrada de Linux Torvalds.

**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](http://www.dell.es/hpcc)

**902 119066**