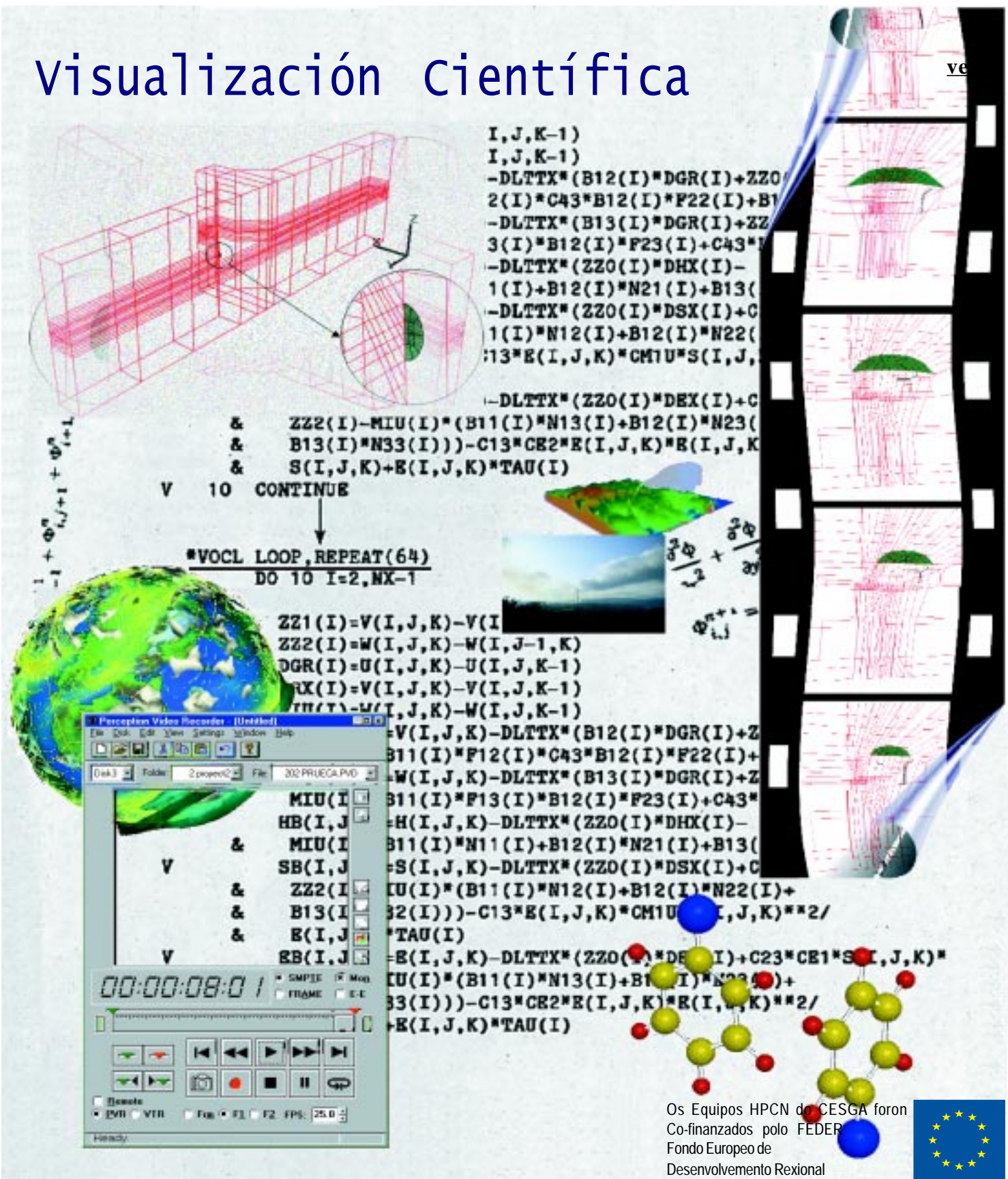


# dixitos

## Visualización Científica



$I, J, K-1)$   
 $I, J, K-1)$   
 $-DLTTX*(B12(I)*DGR(I)+ZZO(I)*$   
 $2(I)*C43*B12(I)*F22(I)+B12(I)*$   
 $-DLTTX*(B13(I)*DGR(I)+ZZO(I)*$   
 $3(I)*B12(I)*F23(I)+C43*B12(I)*$   
 $-DLTTX*(ZZO(I)*DHX(I)-$   
 $1(I)+B12(I)*N21(I)+B13(I)*N21(I)$   
 $-DLTTX*(ZZO(I)*DSX(I)+C43*B12(I)*$   
 $1(I)*N12(I)+B12(I)*N22(I)+B13(I)*N22(I)$   
 $:13)*E(I, J, K)*CM1U*S(I, J, K)**2/$   
 $+E(I, J, K)*TAU(I)$   
 $-DLTTX*(ZZO(I)*DEX(I)+C23*CE1*S(I, J, K)$   
 $U(I)*(B11(I)*N13(I)+B12(I)*N23(I)+B13(I)*N33(I))$   
 $-C13*CE2*E(I, J, K)*R(I, J, K)**2/$   
 $S(I, J, K)+E(I, J, K)*TAU(I)$

$V \quad 10 \quad CONTINUE$

$*VOCL \text{ LOOP, REPEAT}(64)$   
 $DO \ 10 \ I=2, NX-1$

$ZZ1(I)=V(I, J, K)-V(I, J, K-1)$   
 $ZZ2(I)=W(I, J, K)-W(I, J-1, K)$   
 $DGR(I)=U(I, J, K)-U(I, J, K-1)$   
 $DRX(I)=V(I, J, K)-V(I, J, K-1)$   
 $DRY(I)=W(I, J, K)-W(I, J, K-1)$

$V(I, J, K)-DLTTX*(B12(I)*DGR(I)+ZZO(I)*$   
 $B11(I)*F12(I)*C43*B12(I)*F22(I)+$   
 $W(I, J, K)-DLTTX*(B13(I)*DGR(I)+ZZO(I)*$   
 $B11(I)*F13(I)*B12(I)*F23(I)+C43*$   
 $H(I, J, K)-DLTTX*(ZZO(I)*DHX(I)-$   
 $B11(I)*N11(I)+B12(I)*N21(I)+B13(I)*N21(I)$   
 $S(I, J, K)-DLTTX*(ZZO(I)*DSX(I)+C43*B12(I)*$   
 $U(I)*(B11(I)*N12(I)+B12(I)*N22(I)+$   
 $B13(I)*N22(I))$   
 $-C13*E(I, J, K)*CM1U*S(I, J, K)**2/$   
 $+E(I, J, K)*TAU(I)$   
 $-E(I, J, K)-DLTTX*(ZZO(I)*DEX(I)+C23*CE1*S(I, J, K)$   
 $U(I)*(B11(I)*N13(I)+B12(I)*N23(I)+B13(I)*N33(I))$   
 $-C13*CE2*E(I, J, K)*R(I, J, K)**2/$   
 $+E(I, J, K)*TAU(I)$


$-1 + \Phi_{i,j}^n + \Phi_{i,j}^{n+1}$

$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}$

$\Phi_{i,j}^n + \Phi_{i,j}^{n+1}$

Percentage Video Recorder (Untitled)  
File Edit View Settings Window Help  
Disk3 Folder: 2proyec2 File: 302PRUEGA.PVD  
MIU(I) HB(I, J) MIU(I) SB(I, J) ZZ2(I) B13(I) E(I, J) EB(I, J)  
V & V SMP/E Mon FRAME E-E  
00:00:08:01  
Remote EVR VTR File F1 F2 FPS: 25.0  
Ready

Os Equipos HPCN do CESGA foron  
Co-finanzados polo FEDER  
Fondo Europeo de  
Desenvolvemento Rexional



## [sumario]

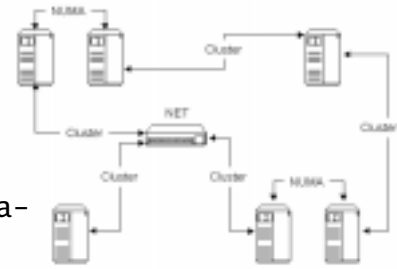
### [3] CESGA INFORMA

Laboratorio para a análise e interpretación visual de datos. O Matlab instalado no servidor de cálculo paralelo. Oferta de formación. 20 de maio, WORKSHOP HPCN, unha cita ineludible para os usuarios do CESGA.



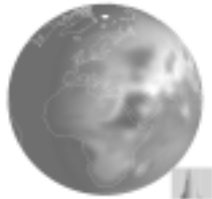
### [6] TECNOLOXÍA

Sinfinity interconecta ordenadores a 2.5 Gbps. The Mathworks presenta ferramentas para o desenvolvemento de software de DSP.



### [7] OPINIÓN

Rafael Escribano, investigador do CSIC con ampla experiencia no uso de recursos de «High Performance Computing» ofrece unha visión crítica acerca dos recursos do CESGA.



### [4-5] EXPERIENCIAS DO USUARIO

Saulo Vázquez presenta a aplicación de métodos ab-initio na determinación das vías de descomposición do nitrito de metilo.

### [8] TI GALICIA

A RECETGA, rede que vén dando servizo a unha comunidade científica composta por máis de 100.000 usuarios, verase ampliada para dar cobertura a outros nove centros de investigación. Cirurxía Cardíaca a través da Rede. Sistema Innova, ferramentas cara á estimulación do I+D en Galicia. O proxecto A PONTE bótase a andar co respaldo da administración e dos profesionais do ensino.

## [editorial]

### Reforzados os servizos de soporte ó Cálculo Científico

O CESGA reforza os servizos ós usuarios de recursos de cálculo científico mediante acordos firmados coas universidades. Estes acordos permiten dispoñer dende agora dun soporte técnico máis próximo ós usuarios.

Un bolseiro en cada universidade farase cargo de encamiñarl as solucións ós problemas ou consultas dos usuarios na área de cálculo: migracións de programas, algoritmos de cálculo, optimización, compilación, vectorización, paralelización de programas, funcionamento e uso axeitado do sistema de colas, etc.

Os usuarios que desexen optimizar o rendemento dos seus programas/códigos/traballo poden poñerse en contacto co equipo de soporte técnico ós usuarios do CESGA vía correo electrónico enviando a súa consulta ó enderezo [sistemas@cesga.es](mailto:sistemas@cesga.es)

Deixando unha mensaxe nese enderezo poderán obter máis información acerca desta ampliación de servizos ós usuarios na área de cálculo e a información necesaria para contactar co bolseiro na súa universidade.

### díxitos

S.A. Xestión Centro de Supercomputación de Galicia. Sociedade participada pola Xunta de Galicia e o Consejo Superior de Investigaciones Científicas  
Director:

Javier García Tobío  
Coordinador:

Fernando Bouzas Sierra  
Redacción:

Ignacio López Cabido,  
José Antonio Souto

Impresión:

Gráficas Litonor

Depósito legal:  
C-1604-1998

ISSN:

1139-563X

Edita:

CESGA

Avenida de Vigo, s/n  
(Campus Sur)

15706 Santiago

de Compostela

A Coruña, España

Teléfono: 981 569810

Fax: 981 594616

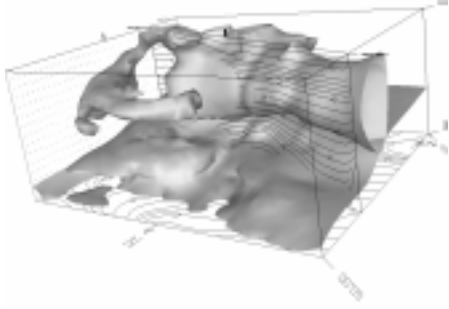
Correo electrónico:

[dixitos@cesga.es](mailto:dixitos@cesga.es)

Enderezo web:

[www.cesga.es/dixitos](http://www.cesga.es/dixitos)

# visualización e Animación Científica



## Laboratorio de Visualización e Animación Científica.

O Laboratorio de Visualización e Animación Científica do CESGA foi o primeiro laboratorio destas características establecido en Galicia. O principal cometido do Laboratorio é proporcionar a aqueles usuarios que o demanden asistencia técnica e recursos hardware-software na realización de visualizacións e animacións partindo dos seus traballos de cálculo intensivo realizados cos superordenadores. O laboratorio, ademais, ofrece servizos xerais multimedia á comunidade de usuarios do CESGA.

O laboratorio de Visualización e Animación Científica do CESGA dispón do Hardware e Software necesarios para proporcionar saída gráfica ás simulacións e modelizacións de procesos. Sen embargo, o recurso máis valioso co que conta o laboratorio é o equipo de analistas e programadores ó servizo dos usuarios. Estes profesionais da visualización científica están afeitos a traballar xunto cos usuarios que o demandan no desenvolvemento de interfaces gráficas para aplicacións e no refinamento das subrutinas, códigos, algoritmos e solucións de visualización deseñados ad hoc para os problemas do usuario.

O equipo humano do laboratorio ten acumulado no seu haber desenvolvementos como: a creación dun interfaiz gráfico dunha ferramenta de predicción de comportamento de fracturas en estruturas sólidas (HIPSIA), a realización de simulacións globais de cambio climático (CLIMA), modelizacións da meteoroloxía en Galicia (METEO), simulacións de dispersión dos contaminantes emitidos á atmosfera (DISPER), ademais de traballos de animación non directamente relacionados coa investigación.

## Formatos dispoñibles

Unha extensa experiencia no tratamento de imaxe mailo equipamento hardware-software dispoñible no laboratorio ofrecen ós usuarios a posibilidade de dar saída os seus traballos en multitude de formatos e sobre diferentes soportes como son: diapositivas, transparencias, impresións de alta resolución para imaxe estática e CD-ROM, Betacam-SP e VHS para imaxe en movemento. O laboratorio ofrece tamén a posibilidade de adaptar os traballos dos usuarios para a súa posterior distribución a través da RECETGA por exemplo como vídeo baixo demanda. Máis información consultando [www.cesga.es](http://www.cesga.es).

## APLICACIONES

### O MATLAB INSTALADO NO AP3000

Dende o pasado mes de marzo atópase a disposición dos usuarios o paquete MATLAB. Trátase dun contorno de computación e desenvolvemento de aplicacións totalmente integrado, orientado á realización de proxectos nos que haxa implicados elevados cálculos matemáticos e á visualización gráfica dos mesmos. O MATLAB integra análise numérica, cálculo matricial, proceso de sinal e visualización gráfica nun contorno completo no que os problemas e as súas solucións son expresadas do mesmo xeito no que se escribirían tradicionalmente, sen necesidade de facer uso da programación tradicional. Para información referente ó acceso consulte [www.cesga.es/matlab/uso.html](http://www.cesga.es/matlab/uso.html).

## FORMACIÓN

### WORKSHOP HPCN NO CESGA

O vindeiro 20 de maio celebrárase no CESGA un Workshop sobre "High Performance Computing and Networking" HPCN. No Workshop trataranse temas como (1) A Evolución de Solucións de Cálculo Intensivo, (2) As Tendencias e Evolución dos Sistemas de Almacenamento en Contornos HPCN, (3) Selección de Métodos de Cálculo: Escalar, escalar-paralelo, vectorial e vectorial-paralelo, (4) Next Generation Internet, As Comunicacións en HPCN, (5) Os Servizos dispoñibles ós usuarios doutros centros. Presentarán os seus traballos fabricantes de tecnoloxías HPCN, responsables e usuarios doutros Centros de Supercomputación como o CICA en Andalucía, o CIESCA en Cataluña e o Imperial College en Gran Bretaña.

### OFERTA DE FORMACIÓN PARA OS USUARIOS DO CESGA

O CESGA oferta ós seus usuarios formación práctica no uso de diversos paquetes de software entre os que se inclúen: ArcView 3.0, ANSYS Multiphysics, MATLAB e MAYA. Tamén se imparten cursos ós usuarios sobre Técnicas para un mellor aproveitamento dos recursos para investigadores na Internet. Celebráronse xa dous destes cursos, un sobre ArcView e outro sobre recursos en Internet para os investigadores do C.S.I.C. Para obter máis información acerca da oferta de formación consulte a nosa páxina web na dirección [www.cesga.es](http://www.cesga.es) ou escriba a [dixitos@cesga.es](mailto:dixitos@cesga.es)

#### Fé de Erros

(1) No mapa da RECETGA na portada do "dixitos" Xaneiro 99 omítese un centro conectado á rede dende 1995, o Instituto de Investigacións Agrobiolóxicas do C.S.I.C. en Santiago.

(2) No mesmo mapa, onde di Centro de Información Técnica Medioambiental debera dicir Centro de Información e Tecnoloxía Ambiental

O propósito da computación é a comprensión, o entendemento e o coñecemento. A visualización científica achega vías cara á exploración gráfica dos datos xerados nas computacións. A visualización científica é un proceso análogo á análise numérica. Os investigadores utilizan técnicas de visualización para estudar os resultados das simulacións computacionais, analízasos, interpretalos e tirar conclusións.

Visualización científica é o nome xenérico empregado para facer referencia ás técnicas de análise que fan uso de imaxes e animacións cara á interpretación de datos recollidos ou xerados no proceso da investigación científica. A diferenza doutros tipos de técnicas que tamén fan uso intensivo de imaxes, a visualización científica non está centrada na comunicación de información, senón na súa comprensión.

Os avances neste campo prodúcense en resposta á necesidade de obter coñecemento útil sobre os procesos en tempos limitados e en resposta, tamén, á dificultade que supón a interpretación das enormes cantidades de datos xerados por moitas aplicacións de computación. A miúdo, a grande dimensión do corpus de datos a analizar non fai doado a busca de correlacións entre as diferentes partes. A visualización facilita unha comprensión rápida, cuasi-intuitiva dos procesos baixo estudo. Por suposto, isto pódese facer de xeito máis tradicional aínda que consumiría máis tempo.

Hoxe o uso da visualización científica non se ve restrinxido exclusivamente á investigación básica, utilízase noutras aplicacións como son: deseño de roupa, deseño industrial, deseño de automóbiles e avións, enxeñaría xenética, produción química e farmacéutica, exploración mineral e de combustibles, deseño de plantas químicas e centrais de produción enerxética e animacións para a produción de efectos especiais na industria audiovisual. Esta técnica estase tornando rapidamente nunha necesidade para practicamente todas as disciplinas que teñen relación con elementos xeométricos.

# Dinámica Directa das Vías de Disociación e Eliminación na Descomposición Térmica do Nitrito de Metilo

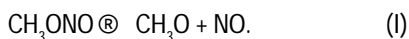
Neste artigo preséntase unha aplicación dos cálculos de ordenador en Química. Máis concretamente, invéstase a dinámica das dúas reaccións unimoleculares que inician a descomposición do nitrito de metilo ( $\text{CH}_3\text{ONO}$ ). Estas dúas vías de descomposición son (I) disociación O–N para formar  $\text{CH}_3\text{O}$  e  $\text{NO}$  e (II) eliminación concertada a través dun estado de transición de catro centros para producir  $\text{CH}_2\text{O}$  e  $\text{HNO}$ .



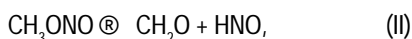
Saulo A. Vázquez, Departamento de Química Física, Universidade de Santiago de Compostela

## [1. Introducción]

A pirólise e fotólise do nitrito de metilo ( $\text{MeONO}$ ) foi o tema de moitas investigacións debido a que son unha fonte conveniente do radical metoxilo, o cal é moi importante na química atmosférica e de combustión. De acordo coa información experimental, a descomposición térmica global do  $\text{MeONO}$  está iniciada basicamente pola disociación



A maioría dos mecanismos propostos (alguns con ata 16 etapas elementais) tamén inclúen outra canle de descomposición unimolecular:



postulándose que evoluciona a través dun estado de transición de catro centros. A velocidade desta reacción é, sen embargo, moi inferior á de disociación.

Neste artigo avalíanse constantes de velocidade para as dúas reaccións unimoleculares anteriores mediante cálculos de dinámica directa [1]; isto é, os

cálculos dinámicos (avaliación das constantes de velocidade) están baseados directamente en datos da estrutura molecular e non utilizan ningún tipo de información experimental.

## [2. Metodoloxía]

En primeiro lugar, realizáronse cálculos *ab initio* para obter información estrutural das especies químicas que interveñen nas dúas reaccións. Para a reacción de eliminación optimizáronse os puntos estacionarios da superficie de enerxía potencial (reactivo, produtos e un estado de transición de catro centros) co programa GAUSSIAN94, primeiro ó nivel MP2 e logo ó QCISD, usando en ámbolos dous casos o conxunto base 6-311++G(d,p). As enerxías foron finalmente melloradas ó nivel QCISD(T). Ademais, construíuse o camiño de mínima enerxía (MEP) ó nivel MP2/6-311++G(d,p). A este mesmo nivel de teoría foron avaliadas as frecuencias de vibración ó longo do MEP. Finalmente, o MEP asociado á eliminación escalouse para reproducir a barreira enerxética calculada ó nivel QCISD(T)/QCISD.

Para estudar a disociación utilizouse o mesmo conxunto base e o método CASSCF, que se comporta axeitamente no límite de disociación, cun espa-

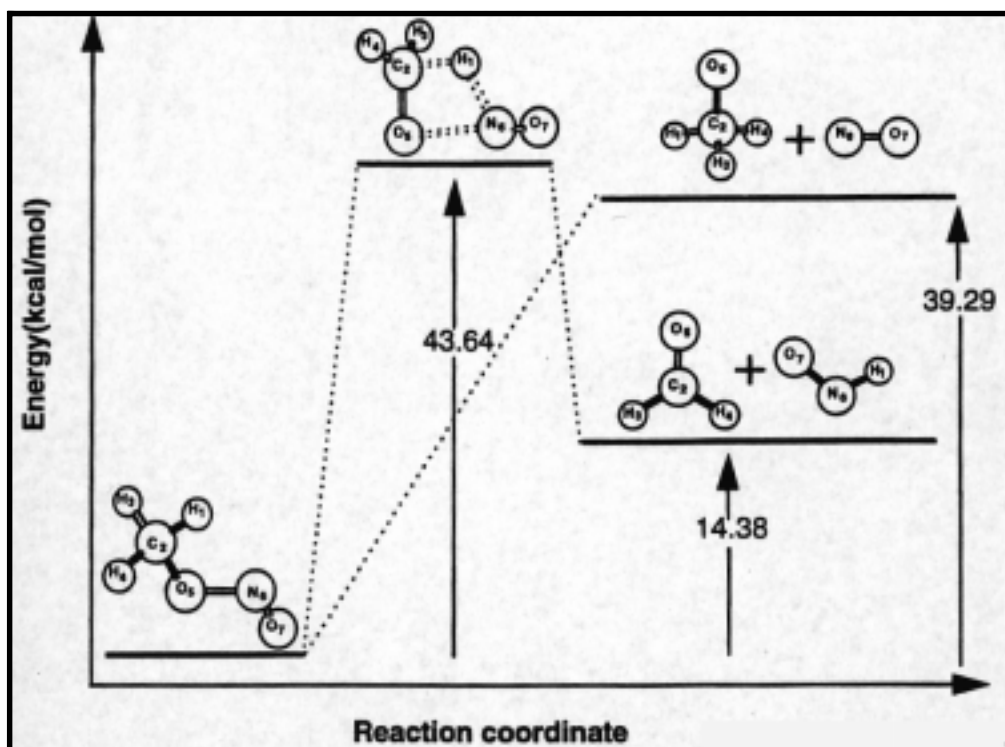


Figura 1. Diagrama de enerxía para a disociación e eliminación do  $\text{MeONO}$ .

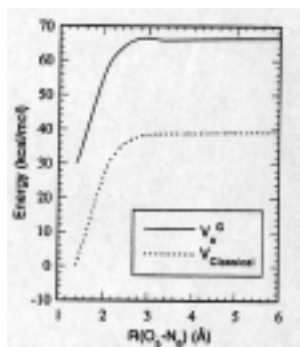


Figura 2. Potencial clásico e potencial adiabático vibracional do proceso de disociación.

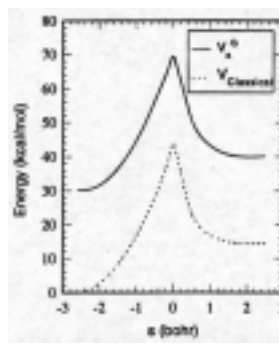


Figura 3. Potencial clásico e potencial adiabático vibracional do proceso de eliminación.

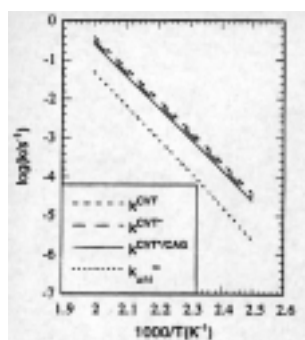


Figura 4. Representación de Arrhenius das constantes de velocidade experimental ( $k_{uni}^*$ ) e teóricas para a disociación.

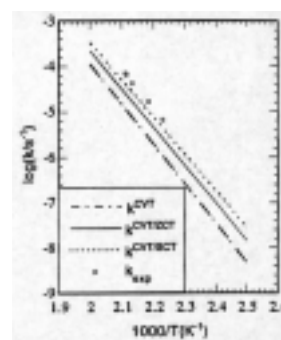


Figura 5. Representación de Arrhenius das constantes de velocidade experimental ( $k_{exp}$ ) e teóricas para a eliminación.

cio activo que incluíu oito electróns en oito orbitais. O correspondente MEP foi finalmente escalado para reproducir a enerxía de disociación calculada ó nivel QCISD(T)//CASSCF(8,8).

As constantes de velocidade para as dúas canles avaliáronse mediante a teoría variacional do estado de transición (CVT), unha derivación da coñecida teoría do estado de transición. Na teoría CVT, a constante de velocidade defínese como o fluxo mínimo de traxectorias, que van de reactivos a produtos, a través dunha familia de curvas perpendiculares ó MEP. Para estes cálculos utilizouse o programa POLYRATE xunto cos resultados *ab initio*.

### [3. Resultados e Discusión]

**3.1. Mínimos, estado de transición e camiños de reacción.** Os resultados enerxéticos máis relevantes obtidos mediante os cálculos *ab initio* amósanse na Figura 1. A enerxía de disociación para a reacción I vale 39.29 kcal/mol. A barreira de enerxía para o proceso de eliminación é un pouco maior: 43.64 kcal/mol. O estado de transición para esta reacción (II) é, como se postulara, unha estrutura de catro centros. Os produtos de eliminación posúen unha enerxía de 39.29 kcal/mol superior á do reactivo. Os camiños de mínima enerxía (tamén denominados potenciais clásicos,  $V_{Clásico}$ ) para a disociación e eliminación están representados nas Figuras 2 y 3 respectivamente, en forma de liñas a trazo discontinuo. Ademais, as figuras amosan, a trazo continuo, o que se coñece como potencial adiabático vibracional ( $V_a^0$ ), unha magnitude que se obtén engadindo ó  $V_{Clásico}$  a enerxía do punto cero. Esta magnitude utilízase na avaliación das constantes de velocidade.

**3.2. Estudio Dinámico.** As constantes de velocidade calculadas teoricamente para a disociación no rango de temperaturas 300–1500 K amósanse na Figura 4 mediante unha representación de tipo Arrhenius. Na mesma figura inclúense os valores experimentais a presións altas ( $k_{uni}^*$ , magnitude apropiada para unha correcta comparación cos resultados teóricos) obtidos por

extrapolación de velocidades estimadas a 710 Torr e temperaturas no rango 450–520 K [2]. Na figura aparecen tres liñas correspondentes a constantes teóricas, obtidas con diferentes aproximacións [1]. Como pode observarse, as constantes de velocidade teóricas son algo maiores que as experimentais. Sen embargo, o acordo é bastante bo para este tipo de cálculos nos que non se utiliza ningunha información experimental. Ademais, a determinación dos valores experimentais estivo suxeita a imprecisións, relacionadas en grande medida coa dificultade do sistema e coa extrapolación a presións altas.

Os resultados correspondentes á reacción de eliminación preséntanse na Figura 5. Unha vez máis indícanse os resultados teóricos obtidos con tres aproximacións diferentes. Neste caso o acordo teórico-experimental é mellor que para a disociación MeO–NO. De feito os resultados CVT/SCT case coinciden cos experimentais [3]. Os tratamentos CVT/SCT e CVT/ZCT inclúen correccións para o efecto túnel asociado á transferencia de H<sub>i</sub> entre os átomos de carbono e nitróxeno (véase Fig. 1).

Finalmente, nótese que os valores das constantes de velocidade calculados para a eliminación son moito menores que os obtidos para a disociación, en concordancia coas observacións experimentais. Os resultados teóricos indicanno-las razóns deste comportamento: (1) a barreira de disociación O–N (39.29 kcal/mol) é menor que a de eliminación (43.64 kcal/mol) e (2), actuando na mesma dirección, o proceso de disociación está favorecido entrópicamente. Para unha discusión detallada véxase Ref. 1.

### [Bibliografía]

1. A. Fernández-Ramos, E. Martínez-Núñez, M. A. Ríos, J. Rodríguez-Otero S. A. Vázquez e C. M. Estévez, *J. Am. Chem. Soc.*, **120**, 7594 (1998).
2. Y. He, W. A. Sanders, M. C. Lin, *J. Phys. Chem.* **92**, 5474 (1988).
3. L. Batt, R. T. Milne, R. D. McCulloch, *Int. J. Chem. Kinet.* **9**, 567 (1977).

## The Mathworks presenta un contorno aberto para acelera-lo desenvolvemento de software de DSP.

A vanguardia dos sistemas baseados en procesadores de sinais dixitais (DSP) está no núcleo dos progresos actuais en comunicacións, multimedia, electrónica médica e tecnoloxías radar e sonar. Para estes mercados lucrativos en pleno crecemento, os vendedores de chips DSP estanse dando présa para desenvolver solucións complexas e máis sofisticadas. Para continuar coa próxima xeración hardware de DSP, os desenvolvedores de software en tempo real para DSP programables estanse encontrando con enormes presións para acurta-los ciclos de deseño acelerando a simulación e o desenvolvemento do código.

Como os vendedores presionan para face-los chips máis potentes e máis rápidos, o hardware resultante é, a miúdo, incompatible co seu código software. Os deseñadores de software DSP, traballando con novas arquitecturas de chip ou novas características e/ou melloras, estanse encontrando que o código non é reutilizable. Por esta razón o enxeñeiro perde tempo escribindo o código moitas veces durante o proceso de deseño.

Moitos enxeñeiros DSP tentaron resolver estes

problemas adoptando unha variedade de ferramentas software. Sen embargo, utilizando ferramentas de distintos vendedores, así coma linguaxes e programación de baixo nivel, encontran que é difícil moverse dunha fase do deseño a outra. Acaban traducindo ou volvendo a escribi-los algoritmos, ralentizando o proceso de desenvolvemento de forma significativa. Entre cada fase do deseño —desenvolvemento do algoritmo, deseño e simulación e a implementación do prototipo— os enxeñeiros atópanse con atrancos e retrasos que rematan por traducirse nun maior gasto económico.

Entendendo este desafío, The MathWorks creou un contorno único e aberto para a exploración de algoritmos, o desenvolvemento, a simulación e a implementación. O novo DSP Workshop de The Mathworks acelera o desenvolvemento do software de DSP integrando estreitamente a simulación do algoritmo e a implementación do prototipo. O DSP Workshop permite ós usuarios completalos desafiantes deseños DSP e avalia-los cambios en calquera fase do proceso de desenvolvemento. Acelera os deseños DSP integrando unha linguaxe matricial, unha simulación

dos diagramas de bloques, unhas ferramentas de aplicacións específicas e unha xeración automática do código nun medio único e interactivo. A diferenza do desenvolvemento de ferramentas específicas de chip e dos contornos de simulación implementation-centric, a solución que ofrece The MathWorks acurta o tempo de desenvolvemento porque os deseños poden ser cambiados e testados de forma rápida e son facilmente portables dun contorno hardware a outro.

O conxunto de ferramentas que forman DSP Workshop son: MATLAB

Simulink

DSP Blockset

Signal Processing Toolbox.

The MathWorks inclúe ademais ferramentas opcionais como Real-Time Workshop e Communications Toolbox. A solución completa crea un contorno flexible e robusto para o enxeñeiro DSP. Dándolles acceso ós usuarios ás capacidades da linguaxe básica e dos diagramas de bloques, axúdalles a desenvolver algoritmos complexos nunha fracción do tempo que se necesita para crealos en código C.

## Synfinity: Interconexión de ordenadores a 2.5 Gbytes por segundo

A tecnoloxía de interconexión Synfinity foi desenvolvida por HAL Computer Systems of California, unha subsidiaria de Fujitsu e o seu principal centro de desenvolvemento de plataformas avanzadas e sistemas operativos. Synfinity foi orixinalmente deseñada para a interconexión de clusters de servidores RISC de Fujitsu baseados en tecnoloxía SPARC,

aínda que se estendeu para traballar coa arquitectura VIA (Virtual Interface Architecture), estándar desenvolvida por Intel e apoiada polos principais fabricantes de hardware e software, que define o xeito no que o software se comunica co hardware de paso de mensaxes. Máis aló da simple construción de clusters, Synfinity permite a construción de sistemas

de memoria compartida con coherencia de caché, utilizando a arquitectura ccNUMA (Caché Coherent Non-Uniform Memory Access).

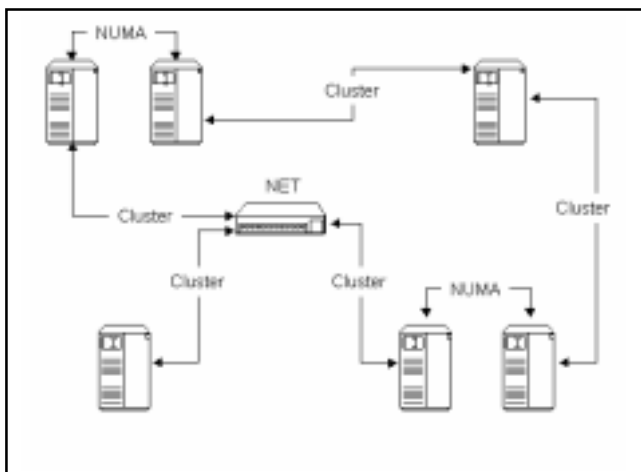
A diferenza deste sistema fronte a outras solucións parecidas existentes no mercado, é que coa arquitectura synfinity, esta interconexión é externa ós servidores, o que permite a construción posterior desta ar-

quitectura partindo de sistemas existentes, obténdose velocidades de comunicación similares ás existentes internamente nas máquinas actuais máis avanzadas. Hoxe, Synfinity está disponible con velocidades de conmutación de 1.6 GBytes/seg pero Fujitsu xa dispón dos circuitos integrados para construí-lo Synfinity II, que alcanzará os 2.5 GBytes/seg. Os bloques básicos existentes da arquitectura synfinity son:

1. Synfinity NUMA: tarxeta que permite a interconexión dos sistemas SMP para formar unha única máquina lóxica, compartindo potencia de proceso, recursos de memoria e capacidade de E/S.

2. Synfinity Cluster: Tarxeta PCI que permite a conexión dun sistema a un clúster.

3. Synfinity NET: Commutador non bloqueante de 6 portos que permite a interconexión de sistemas cunha frecuencia de reloxo de 200 MHz, cun ancho de banda de 1.6 Gbytes/s por porto e baixa latencia (42 ns).



## SEGUNDO UN USUARIO

**O Dr. Rafael Escribano do Instituto de Estructura de la Materia, investigador con ampla experiencia no uso de recursos de computación, comparte as súas opinións sobre os recursos do CESGA.**

**dixitos:** ¿Cal e a súa experiencia en cálculo intensivo utilizando recursos de computación de altas prestacións?

**Dr. Rafael Escribano:** Veño facendo uso do cálculo de altas prestacións dende hai catro ou cinco anos, en colaboración con outros investigadores do CSIC e dalgunhas Universidades. A maioría das veces utilizo o programa Gaussian en distintas actualizacións, para a obtención da xeometría e función potencial de moléculas de pequeno tamaño. Nalgunhas ocasións desenvolvemos nosos propios programas de cálculo, tamén para a obtención da función potencial molecular, ou para a predicción de espectros moleculares de especies inestables.

As máquinas utilizadas para facer estes cálculos foron as do Centro Técnico de Informática (CTI) do CSIC, algunhas estacións de traballo de Digital, as do Centro de Cálculo da Universidad Complutense de Madrid, e as do Centro de Computación da Universidad de Sevilla.

**dixitos:** ¿Que motivos o levaron a facer uso dos recursos disponibles no CESGA?

**Dr. R.E.:** Veño utilizando os recursos de computación do CESGA dende o pasado mes de novembro. Daquela eu sabía doutros colegas do CSIC que os utilizaban, e os outros recursos dos que dispoñía eran insuficientes para o traballo que desexaba facer. Utilizo o programa Gaussian 94 no superordenador vectorial Fujitsu VPP300E. O proxecto para o que utilizo este ordenador investiga as interaccións entre unha molécula de interese atmosférico, o ácido hipocloroso HOCl, e un número crecente de moléculas de auga, que se lle engaden dando lugar a especies estables, similares ás que se forman nas gotas de auga na atmosfera terrestre. A investigación pretende conseguir resultados de interese medio-ambiental.

**dixitos:** Vostede ten ampla experiencia no emprego dos recursos de moitos centros de computación. ¿Que opinión lle merecen os recursos no CESGA?

**Dr. R.E.:** En conxunto, considero os recursos disponibles no CESGA altamente satisfactorios. Hai unha serie de recursos alternativos ó CESGA que podería utilizar, como son: o ordenador de Pinar2 do CSIC; a estación de traballo alpha de Digital do meu Departamento de Física Molecular no Instituto de Estructura de la Materia do CSIC ou o ordenador EUCMOS da Universidad Complutense. Utilizo os recursos do CESGA xa que ningún destes outros ordenadores dispón da capacidade de almaceamento necesario para o traballo que estou realizando. O superordenador vectorial Fujitsu VPP300E, ademais de dispor desa capacidade, é moito máis rápido polo que supera amplamente ós outros ordenadores mencionados.

Sen embargo, quixera facer dous comentarios ó respecto. En primeiro lugar, o sistema de colas e prioridades quizais podería mellorarse facéndoo máis dinámico. Un exemplo: se se fixo uso extenso do ordenador, a prioridade baixa a un mínimo, e non se restablece ata que se restablecen as prioridades de tódolos usuarios (segundo me din outros usuarios, xa que a miña experiencia persoal aínda é pequena). No seu lugar, podería facerse que a prioridade aumentara progresivamente se non se utiliza o ordenador, en vez de quedarse no mínimo.

O segundo comentario refírese á posibilidade de acceso ó editor EMACS como alternativa ó editor vi. Ámbolos dous son compatibles con UNIX na maioría das máquinas, e EMACS é moito máis potente e versátil. Segundo parece, non está dispoñible na actualidade.

**dixitos:** ¿Atopou dificultades cando comezou a utiliza-lo VPP300E?

**Dr. R.E.:** Nos primeiros momentos de uso dos recursos do CESGA tiven algún problema debido a que o ordenador aparentemente denegaba o acceso ó programa Gaussian que dexesaba utilizar. Foi co soporte de

Guillermo del Río (do CTI de Madrid), como superei ese pequeno problema inicial, que resultou ser unha definición de instrucións de acceso que non estaba utilizando correctamente. Quizais se na pantalla de acceso ó CESGA figurara un teléfono ou un enderezo de correo electrónico ó que dirixirse nestes casos, poderíanse resolver estes pequenos problemas de xeito máis doado.

## NO CESGA GUSTANOS ACTUAR DE ACORDO ÓS CRITERIOS SUXERIDOS POLOS NÓSOS USUARIOS

Quixera dar resposta, breve mais puntual, ás cuestións formuladas polo Dr. Escribano:

**1. No tocante ó editor EMACS:** Efectivamente este editor non estivo ata hoxe dispoñible no VPP300. Sempre que consultámo-los usuarios acerca da conveniencia dunha alternativa ó «incomodo» vi, detectamos que moitos usuarios utilizan editores locais nos seus postos de traballo e logo transfírenos os ficheiros ó superordenador. A instalación deste tipo de produtos normalmente supón realiza-lo porting a esta plataforma. Na medida en que os usuarios do CESGA demanden este tipo de produtos, tomarémo-las medidas oportunas para instalalos. En resposta á súa suxerencia, quixera facer público que o editor EMACS se atopa xa portado, instalado e dispoñible para os usuarios que desexen utilizalo no VPP300E. O path de acceso é «/opt/emacs/bin/emacs».

**2. SISTEMA DE COLAS:** O Sistema de colas batch NQS amosa carencias no control das prioridades dos traballos, xa que estas son determinadas polo propio usuario no momento da submisión dun traballo á cola. Buscando un reparto máis equitativo do tempo de uso da máquina, o CESGA modificou o comportamento local do sistema de colas batch NQS, introducindo un sistema no que a prioridade coa que un usuario submite un traballo vai baixando na medida en que ese usuario consume horas de máquina nos seus traballos. Esta baixada, por suposto, é proporcional ó consumo realizado ata ese momento. A priori, este sistema parece bastante xusto. Sen embargo, efectivamente, parece prexudicar ós usuarios regulares da máquina, xa que ó consumir rapidamente unha cantidade importante de horas de CPU, a prioridade pode baixa-lo suficiente como para impedi-la entrada de novos traballos deste usuario. Estamos de acordo, a prioridade dos traballos debera corresponderse coa súa antigüidade na cola. A recuperación progresiva da prioridade contribúe a mellorar isto, pero introduce unha complexidade maior para a súa implantación. Non obstante, comprometémonos a estudar esta modificación con vistas a implantala no menor prazo posible.

**3. Tomamos nota e comunicámo-lle que temos actuado xa de acordo á súa última suxerencia.** A partir de hoxe pode atopar nas pantallas de entrada tanto do VPP300E coma do AP3000 mensaxes indicando ós usuarios que ante calquera dificultade poden dirixirse a: sistemas@cesga.es ou chamar ó teléfono 981 56 98 10 onde serán atendidos polos nosos técnicos de sistemas.

Desexo agradecer-la oportunidade que o Dr. Rafael Escribano me brinda cos seus comentarios e aproveitala para animar a tódolos usuarios a que expresen as súas necesidades a través do enderezo dixitos@cesga.es ou a través do buzón de suxerencias na www.cesga.es. O noso obxectivo prioritario é a satisfacción puntual das necesidades dos usuarios. No tocante á calidade dos servizos, os usuarios son os nosos mellores consultores.

Dr. Ignacio López Cabido  
Subdirector Técnico  
CESGA

**O SISTEMA INNOVA ESTREITA A COOPERACIÓN ENTRE PRODUCTORES DE TECNOLOXÍA E INVESTIGADORES**

O día 4 de marzo a Asociación Nacional de Industrias Electrónicas e de Telecomunicacións (ANIEL) presentou no CESGA o **Sistema Innova**. Este sistema, desenvolvido pola OTRI de ANIEL chega a Galicia da man da Secretaría Xeral de Investigación e Desenvolvemento coa colaboración do CESGA.

No acto de presentación, presidido por D. Miguel Angel Ríos, Secretario Xeral de Investigación e Desenvolvemento, presentaron as súas experiencias en innovación tecnolóxica no sector da electrónica e as telecomunicacións representantes da industria en Galicia como Televés, Intelsis e Arteixo.

O Sistema Innova é unha ferramenta informática que busca estreita-la cooperación entre os produtores de tecnoloxía e os científicos que traballan en liñas de investigación de interese para a industria e os mercados. [www.aniel.es](http://www.aniel.es)

**RECETGA POSIBILITA A CELEBRACIÓN DE EVENTOS DE TELEMEDICINA EN GALICIA.**

O Segundo Simposium Interinstitucional sobre Cirurxía Cardíaca Minimamente Invasiva congregou o 25 e 26 de febreiro a 150 especialistas de trinta países. Este Simposium foi organizado polo Hospital Juan Canalejo en colaboración co International Heart Institute of Montana e a Università degli Studi G. D'Annunzio, e co apoio do SERGAS e a UDC.

Os asistentes presenciaron en directo desde o Paraninfo da UDC tres intervencións de cirurxía coronaria e outras tantas de cirurxía valvular realizadas nos quirófanos do H. J. Canalejo. Os asistentes tiveron oportunidade de formular preguntas desde o Paraninfo ós seus colegas no quirófano do H.J.Canalejo mentres estes demostraban novos

métodos de operatoria sobre pacientes reais. Estas transmisións interactivas en tempo real foron posibles gracias á tecnoloxía de Banda Ancha que incorpora RECETGA. Rede que permite a transmisión de vídeo, voz e datos entre o H.J. Canalejo e a UDC utilizando tecnoloxía ATM a velocidades de 155 Megabites por segundo.

A xestión desta rede corre a cargo do CESGA en coordinación coa Consellería de Cultura, Comunicación Social e Turismo. RECETGA foi co-financiada por FEDER (Fondo Europeo de Desenvolvemento Rexional).

**AMPLIACIÓN DA RECETGA**

Coa incorporación á RECETGA(Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia) do Seminario de Estudos Galegos, a Estación de Viticultura e Enoloxía de Leiro e o Centro de Información e Tecnoloxía Ambiental da Consellería de Medio Ambiente, o CESGA dá por rematada a primeira fase de ampliación de RECETGA para o ano 99.

Xa está en marcha a segunda fase desta ampliación. Antes do mes de maio incorporaranse á rede o Centro de Investigacións Mariñas de Corón, o Centro de Control de Acuicultura de Vilaxoán, o Centro de Investigacións Agrarias de Mabegondo, o Centro de Experimentación en Acuicultura de Aguiño, o Centro de Cultivos Mariños de Ribadeo e a Secretaría Xeral de Investigación e Desenvolvemento.

**CELEBRADO EN SANTIAGO O PRIMEIRO WORKSHOP A PONTE (An approach to the deployment Of New Technologies in Education)**

O pasado día 5 de febreiro celebrouse en Santiago o 1º Workshop "A PONTE". Representantes das distintas entidades promotoras presentaron as principais liñas de actuación de "A PONTE" ós profesores e directores dos centros de educación

secundaria de Galicia e do Norte de Portugal involucrados no proxecto.

O proxecto A PONTE está financiado pola Comisión Europea a través do Programa ESPRIT.

O proxecto A PONTE é un proxecto de demostración sobre o impacto das Novas Tecnoloxías da Información e as Comunicacións (TIC) no ensino.

Trátase dun ambicioso proxecto que busca analiza-la implantación das TIC como vehículo de solucións ós problemas que sofren as comunidades educativas do rural de Galicia e do Norte de Portugal. A PONTE é un esforzo de concienciación, formación e divulgación das novas tecnoloxías. A través de servizos de apoio, accións de diseminación e experiencias pedagóxicas que se realizarán en 28 Centros de Educación Secundaria, identificáranse os posibles beneficios do uso das TIC para o sistema educativo. Os resultados de A PONTE servirán para aportar experiencias a rexións similares no resto de Europa.

No proxecto A PONTE participan o Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA), a Associação das Universidades da Região Norte de Portugal (AURN), SEMA Group, a Context European Educational Ltd. (CEEL), e o South Bristol Learning Network (SBLN). O CESGA conta co apoio no desenvolvemento do proxecto da **Secretaría Xeral de Investigación e Desenvolvemento**, da **Consellería de Educación e Ordenación Universitaria** (D.X. Ordenación Educativa e Formación Profesional), da **Consellería de Presidencia e Administración Pública** (D.X. Organización e Sistemas Informáticos), e da **Consellería de Cultura, Comunicación Social e Turismo** (DX Comunicación Social e Audiovisual). O soporte na área pedagóxica vén proporcionado pola Universidade de Santiago, a través da Facultade de Ciencias de Educación e do ICE.

**BOLETÍN DE SUBSCRIPCIÓN GRATUÍTA**

Nome .....Centro .....

Enderezo .....

Poboación .....

Código postal .....Correo electrónico .....

