



El Bosque Animado O Superordenador Virtual Galego dá conta do Render da Primeira Longametraxe 3D Europea

Proxecto é-GALEGO: Desenvolvemento dun curso multimedia de lingua galega en Rede. (páx. 2)

Proxecto PADO:

Software Interactivo para a definición dunha colección de pórticos de aceiro de deseño óptimo.
Patróns de Deseño e Programación Java. (páx. 3)

Repertorio de Software Científico no CESGA

Andrés Gómez Tato (páx. 4)

**ANSYS como Ferramenta de Simulación de Tratamentos
Térmicos de Materiais Metálicos con Láser**

Grupo de Aplicacións Industriais do Láser (páx. 6)

**A Colaboración CESGA -RETEGAL permite a realización de
Experiencias en TeleMedicina sobre Banda Ancha** (páx. 7)

O C.H. Juan Canalejo aposta pola TeleMedicina

Guillermo Vázquez González

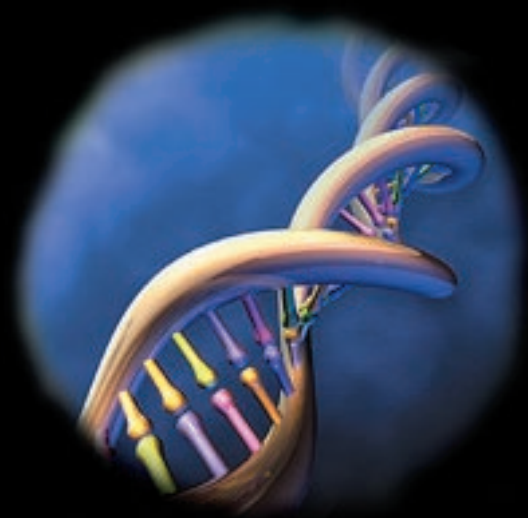
Computación Distribuída de Alto Caudal

Francisco Javier González Castaño (páx. 8)

Unha ducia de sistemas superan xa a barreira de 1 Teraflops (páx. 10)

O Papel da Bioinformática na Revolución Xenómica e Proteómica

Fredy Sussman (páx. 11)



PROXECTO é-galego:

Desenvolvemento dun curso multimedia de galego en rede

é-galego é un curso interactivo para a aprendizaxe da lingua galega, aplicando as novas tecnoloxías multimedia e de Internet. O proxecto conta coa financiación da Dirección Xeral de Política Lingüística e da Fundación Caixa Galicia. O Instituto da Lingua Galega (ILG) da Universidade de Santiago de Compostela traballou na procura dos contidos e da lingüística, e a empresa Eido Media colaborou na elaboración do soporte e do deseño. A coordinación entrámbolos dous veu da man do CESGA, que ademais desenvolveu as tarefas relativas a control de calidade e avaliación da usabilidade do curso. No mes de outubro o curso atopárase xa operativo e será accesible vía web.

O curso está orientado a servi-las necesidades de aprendizaxe nas áreas que a continuación se detallan de adultos non galegofalantes con estudos secundarios e coñecementos de portugués ou castelán.

- Aprendizaxe e desenvolvemento das funcións comunicativas básicas: presentación, solicitude de información, descrición de obxectos, expresión de acordo e desacordo, etc.
- Dominio das nocións principais empregadas na comunicación: espazo, tempo, localización, duración, frecuencia, etc.
- Comprensión e aprendizaxe das estruturas gramaticais e do vocabulario necesarios para o desenvolvemento das principais funcións comunicativas.

A organización do curso permite que poida utilizarse de xeito lineal ou de modo selectivo. O usuario poderá ir complementando as actividades de cada unha das unidades didácticas, desde a primeira ata a última, ou ben seleccionar, coa axuda do plan do curso, as unidades ou as actividades que máis lle interesen. Co desenvolvemento das citadas actividades perséguese a adquisición e o perfeccionamento das habilidades comunicativas básicas, tanto para a comprensión como para a produción de mensaxes orais e escritas. Asimesmo as actividades de *é-galego* axudan a mellora-la comprensión do galego falado e escrito, a aumenta-lo coñecemento da gramática e do vocabulario e tamén a descubrir algúns aspectos da cultura, xeografía e historia de Galicia.

O curso disporá de case un cento de actividades interactivas repartidas en catro seccións: comprensión, expresión, gramática e vocabulario. A información lingüística necesaria para o desenvolvemento das actividades aparece distribuída en dúas seccións que o alumno poderá consultar en calquera momento: vocabulario (un pequeno vocabulario con correspondencia en



castelán das palabras utilizadas e con información sobre a conxunción dos verbos) e a información gramatical. Ademais, unha sección de complementos (textos, ligazóns, etc.) axudarán a completa-la súa formación. Será de fácil acceso e de uso intuitivo.

O curso contará cun sistema de avaliación e control que lle permitirá ós alumnos coñecer os seus progresos e o nivel de desenvolvemento en que se encontra en cada momento.

Co recurso «correo ó titor» os usuarios do curso poden facer consultas sobre as dúbidas lingüísticas que lle xurdan ó realiza-las actividades.

é-galego é un curso electrónico para o acceso a través de Internet e distribución en CD-Rom contendo este último unha versión reducida do curso.

O desenvolvemento nun medio non tradicional (hipertexto) permite ofrecerlle ó usuario distintas posibilidades de acceso ós contidos: busca dunha información específica sobre unha estrutura lingüística; exploración libre dun contido; aplicacións prácticas, comunicacións, diálogos; uso guiado; revisión de contidos e autoavaliacións.



S.A. Xestión Centro de Supercomputación de Galicia.

Sociedade participada pola Xunta de Galicia e o Consejo Superior de Investigaciones Científicas.

Dirección: Javier García Tobío

Coordinación: Fernando Bouzas Sierra

Redacción: Dr. Ignacio López Cabido, Dr. Andrés Gómez Tato

Impresión: Litonor • **Depósito legal:** C-1604-1998 • **ISSN:** 1139-563X

Edita: CESGA • Avenida de Vigo, s/n (Campus Sur) • 15705 • Santiago de Compostela • A Coruña • España
Teléfono: 981 569810 • Fax: 981 594616 • Correo electrónico: dixitos@cesga.es • Enderezo Web: www.cesga.es/dixitos

PROXECTO PADO

Software Interactivo para a definición dunha colección de pórticos de aceiro de deseño óptimo

O obxectivo deste proxecto é a realización dunha aplicación informática denominada PADO, acrónimo de *Pórticos de Aceiro de Deseño Óptimo*, que terá como finalidade elaborar unha colección de estruturas porticadas de aceiro na que o rendemento fronte a tódolos requirimentos normativos e constructivos sexa óptimo. O programa é aplicable ó proxecto de pórticos de aceiro mediante seccións de ala ancha, de canto constante ou variable, realizadas con perfís de serie ou vigas armadas constituídas por chapa soldada. Deste xeito abrangúese o conxunto máis habitual das tipoloxías estruturais que se utilizan máis frecuentemente na construción. O programa estará preparado totalmente para o seu uso nun ordenador persoal do tipo dos empregados nas oficinas técnicas das em-

presas de construción ou gabinetes de enxeñeiros ou arquitectos.

Con isto, a empresa disporá dunha metodoloxía de deseño máis eficaz que a actual, verá mellorado o seu nivel tecnolóxico e gañará en competitividade ó obter un produto industrial mellor que o existente ó poder calcula-los pórticos das naves industriais do xeito máis óptimo posible nun tempo reducido, a un prezo máis baixo e cun prazo de entrega menor sen reduci-la súa calidade e seguridade.

É importante destacar que este tipo de software é innovador no mundo da construción metálica, aínda que hai tempo que se emprega noutros sectores industriais como son o automovilístico ou o sector aeroespacial.



Proxecto PADO Ficha Técnica

Período:

Marzo 2000 - Marzo 2002

Tipo de proxecto:

Investigación Xunta PGIDT

Investigador principal:

Santiago Hernández Ibáñez, Universidade da Coruña

José Ramón López González, Metalúrgica del Deza S.A.

Empresas participantes:

Universidade da Coruña, Metalúrgica del Deza S.A. e CESGA

Equipo de traballo:

Metalúrgica del Deza S.A. :

José Ramón López González, Alejandro Barrio Vidal, Francisco Canabal Fiestras, Jesús Baldonado Soto, Luis Diz Millán, Mónica Rodríguez Sanmartín

UDC:

Santiago Hernández Ibáñez, Juan Carlos Perezan Pardo, Arturo Norberto Fontán Pérez, José Ángel Jurado Albarracín, Luis Esteban Romera Rodríguez, Alejandro Mosquera Rodríguez, Ángel Sánchez de Dios

CESGA:

Andrés Gómez Tato

PATRÓNS DE DESEÑO E PROGRAMACION JAVA

Un curso de Extensión Universitaria da Universidade de Vigo celebrarase simultaneamente en catro cidades galegas facendo uso da rede de Aulas de Teleensino.

Tres profesores da Escola Superior de Enxeñaría Informática da Universidade de Vigo e un da Facultade de Informática da Universidade da Coruña impartirán este curso do catro ó trece de setembro facendo uso da rede de aulas de teleensino do CESGA. Os alumnos poderán asistir ó curso desde as aulas sitas nos campus de Lugo, A Coruña, Santiago e Vigo.

O curso está dirixido a tódolos interesados en tecnoloxías de desenvolvemento competitivo de software e na linguaxe de programación Java. A inscrición está



aberta a universitarios, estudantes de FP e profesionais.

Os interesados atoparán información acerca dos contidos do curso e do procedemento para formalizala súa inscrición neste, no sitio:

www.cesga.es/Cursos

Rede Aulas Teleensino





Render de «El Bosque Animado» sobre o Superordenador Virtual Galego

O día 27 de xullo terá lugar a estrea de “El Bosque Animado”, unha longametraxe de animación 3D baseada na novela de Wenceslao Fernández Florez, realizada íntegramente en España pola productora coruñesa DYGRA FILMS e que será distribuída en salas comerciais por Buena Vista Internacional. Trátase da primeira longametraxe realizada en 3D en Europa e conta coa participación de Vía Digital, TVG e cos apoios do Programa Media da UE e da Xunta de Galicia.

No proceso de renderización desta longametraxe de 80 minutos de duración participaron as máquinas integradas nos nodos do Superordenador Virtual Galego (SVG) localizados no Grupo de Sistemas Autónomos da UDC, no CIS Galicia e no CESGA. Para realíza-lo render, DYGRA tamén fixo uso dos equipos do Videalab da UDC e de equipos propios, xa que o render precisa dunha inxente cantidade de recursos.

Para facerse unha idea da intensa demanda de recursos deste traballo baste repasar algúns datos do filme. Oitenta minutos de película, tendo en conta 24 fotogramas por segundo, supoñen un total de 115.000 fotogramas compostos por múltiples capas de imaxe cada un de eles. Para o almacenamento dos arquivos a renderizar foi preciso facer uso dun espazo total de 1.2 TeraBytes. A renderización de cada fotograma precisa unha media de dúas horas de cálculo nun procesador Pentium III a 550 MHz. Nunha soa máquina precisaríanse 26 anos de computación para realizar este traballo. Por parte das máquinas conectadas ó SVG participaron neste traballo un total de 49 procesadores.

SVG Configuración

NODO CESGA:

18 procesadores Pentium III a 550 MHz + 2 K7 a 1GHz, 7 GB memoria e 106 GB de disco e sistema de almacenamento masivo, conexión á Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia (RECETGA).

NODO GSA - UDC:

11 procesadores K7 a 700 MHz, 4 GB de memoria e 140 GB de disco, conexión á RECETGA.

NODO CIS Galicia:

18 procesadores Pentium III a 800 MHz, 4.5 GB memoria, 120 GB disco, conexión á RECETGA.

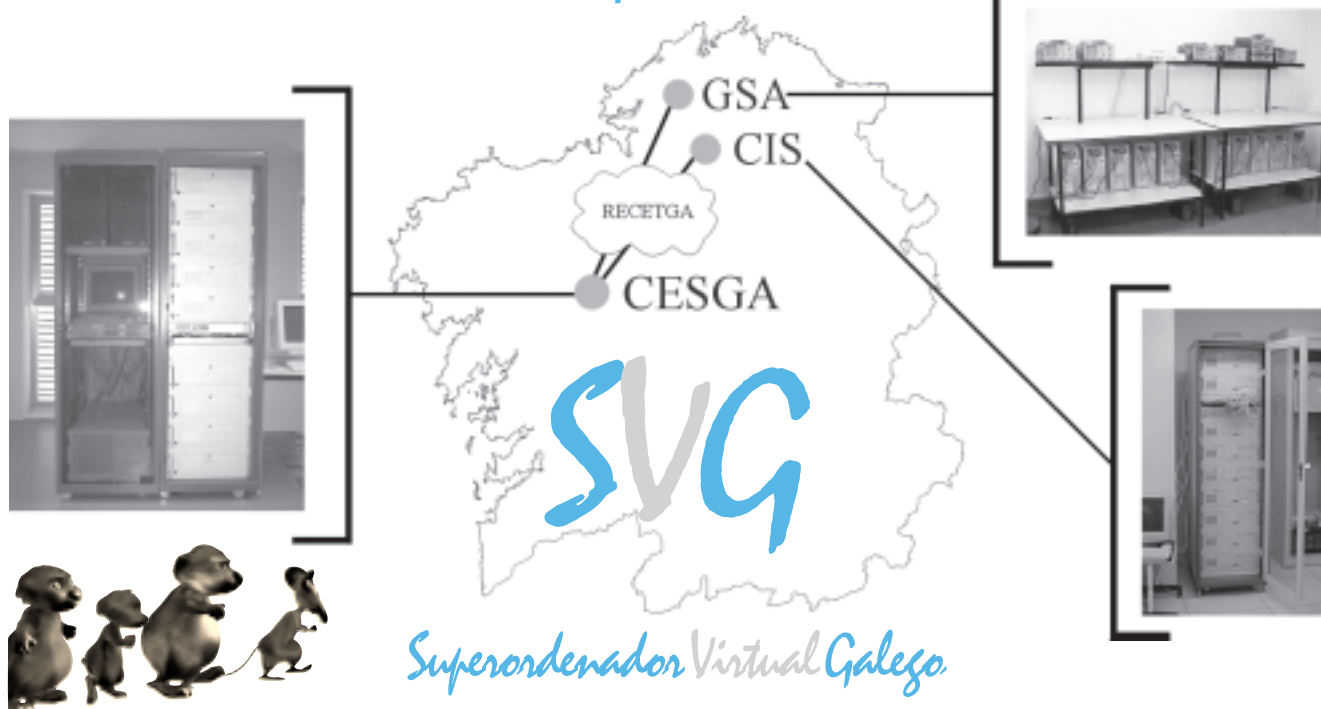
SISTEMA OPERATIVO:

Linux

SOFTWARE RENDERIZACIÓN:

Alias Wavefront Maya (licencia para renderizar en ata 10.000 máquinas)

Configuración e Conexión a través da RECETGA dos nodos do SVG no Render de «El Bosque Animado»



Repertorio de Software Científico

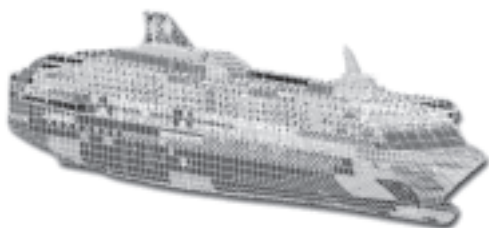
Andrés Gómez Tato,
Administrador de Aplicacións e Proxectos, CESGA.

Tras realizar unha intensa rolda de consultas cos usuarios respecto das súas necesidades de software, procedeuse nos últimos meses a instalar novas aplicacións que complementan a funcionalidade das xa existentes. Así, introducíronse xestores de desenvolvemento de proxectos de software (CMZ e CVS) coa fin de que os proxectos en marcha de desenvolvemento de software poidan contar cunha xestión de versións. Nestes momentos, o CESGA traballa na súa adaptación para seren empregados con MATLAB; un paquete de cálculo e optimización avanzada de estruturas (GENESIS); un visualizador de Densidade Molecular (MOLDEN) procedente de paquetes Ab Iníto como GAMESS-UK, GAMESS-US, GAUSSIAN e os paquetes Semi-Empíricos Mopac/Ampac; un simulador de detectores de partículas e radiacións (GEANT3) moi útil para o deseño de experimentos de Altas Enerxías ou de dispositivos de Radioloxía; paquetes de análise de datos (PAW, PAW++ e ROOT) deseñados explicitamente para tratar grandes cantidades de datos e que inclúen interpretes de comandos (por exemplo, ROOT inclúe un intérprete de C++.

Dado o alto nivel de uso do programa ANSYS/Multiphysics, os administradores de sistemas desenvolveron un script para que antes de executar a aplicación, se poida comprobar a existencia de licenzia e de non habela, o traballo sexa reencolado (este script pódese solicitar a aplicacions@cesga.es). Ademais, próximamente incluírase unha segunda licenzia de ANSYS/Multiphysics. Esta licenzia estará limitada a 32.000 nodos, para que aqueles traballos que estean dentro deste parámetro se poidan executar máis rapidamente ó quedar liberada antes a licenzia. A última versión de ANSYS inclúe as novidades incorporadas durante estes dous últimos anos, incluíndo as capacidades para o traballo con MEMS (Sistemas microelectromecánicos), o módulo PDS (Sistema de Deseño Probabilístico), e melloras en malladores e Solvers.

Recentemente foi instalado o SciLab, un programa de cálculo similar ó MATLAB. SciLab foi desenvolvido polo INRIA coa vantaxe de ter licenzia GPL e poder empregarse en máquinas paralelas. Neste momento, o CESGA en colaboración con usuarios, está procedendo a realiza-las probas de verificación de funcionamento e compatibilidade co MATLAB. En caso de que o resultado destas probas resulte satisfactorio, procederase a instalar o SciLab nos supercomputadores.

Aqueles usuarios que teñan necesidades específicas de software científico actualmente non cubertas polo repertorio de aplicacións dispoñible no CESGA, poden solicita-la adquisición ou/e instalación de novo software dirixíndose a aplicacions@cesga.es.



Andrés Gómez Tato

Temas	Programas e Aplicacións	Instalados en
Análise Científico	PAW, PAW ++, ROOT	HPC4500, AP3000
Bases de datos Científicas	CSD CRYSTMET ZENTRALBLATT MATH	db.cesga.es
Cálculo Estructural Flúidos e Magnetismo	ANSYS Multiphysics GENESIS	HPC4500
Simulación	MATLAB GEANT 3.21	HPC4500 VPP300 HPC4500,AP3000
Información Xeográfica	ARC-INFO/ARC-VIEW	-
Librerías de Formatos	NETCDF	HPC4500, AP3000, VPP300
Librerías de Matemáticas	BLAS/VP DASSL DSS/2 IMSL LAPACK/VP SSLII/VP-VPP	VPP300
Química Molecular	AMBER GAMESS GAUSSIAN MOPAC93	VPP300
	GAMESS MOLDEN NW-Chem	HPC4500 HPC4500, AP3000
Visualización Científica e Animación	AVS-Express MAYA NCAR Graphics	HPC4500 ani.cesga.es
Xestión de Software	CMZ, CVS	HPC4500, AP3000

ANSYS™ como Ferramenta de Simulación de Tratamentos Térmicos de Materiais Metálicos con Láser

J.C. Álvarez, J.M. Amado, A.J. López, G. Nicolás, J.A. Pérez, A. Ramil, E. Saavedra, J. Sanesteban, A. Yáñez.

Grupo de Aplicacións Industriais do Láser,
Universidade da Coruña

INTRODUCCIÓN

De entre tódolos procesos industriais de tratamento con láser (corte, soldadura...), os que máis interesan ó noso grupo de investigación son os de endurecemento superficial e recargue con láser. Ámbolos dous teñen en común que producen ciclos térmicos en rexións pequenas e moi localizadas sobre a superficie do material tratado acadando éste novas propiedades, de entre as cales as máis útiles son a mellora na resposta á corrosión e ó desgaste, mantendo o resto da peza as súas propiedades orixinarias.

Así, o tratamento térmico superficial de materiais con láser ten a vantaxe de actuar de forma rápida e selectiva sobre unhas poucas capas atómicas namentras que a súa principal dificultade radica na grande sensibilidade do resultado cos parámetros do proceso (potencia, velocidade relativa e anchura da fonte). Para a elección dos valores axeitados destes parámetros recórrase ós métodos numéricos de aproximación, de entre os que destaca pola súa flexibilidade para tratar xeometrías e condicións de contorno complexas, o método dos elementos finitos, FEM.

DESCRIPCIÓN DO MODELO

Estaría na nosa determinación resolvermos a ecuación do calor con dependencia temporal. Para levar a cabo esta tarefa escollemos, pola súa dispoñibilidade e prestixio, o código ANSYS™ soportado sobre a máquina SUN HPC 4500 do CESGA. Malia todo, o uso deste programa comercial de elementos finitos require da incorporación de ferramentas que suplan carencias e/ou as adapten a cada propósito. Para as nosas investigacións desenvolveuse un código en Fortran 77 que partindo dos parámetros do proceso xera un conxunto de documentos de entrada para ANSYS™ nos que se compón o maiado (de xeometría ortoédrica ou cilíndrica), asígnanse as propiedades materiais á probeta e, por último, adxudicase o fluxo de radiación correspondente a cada elemento, en modo estacionario ou en movemento, poidendo elixir a forma e tamaño da distribución (Fig. 1).

A ecuación a resolver está representada por:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla(\kappa \nabla T) = I_s(x, \vec{r})$$

onde a función $I_s(x, \vec{r})$ reproducirá a distribución de fluxo calorífico que simula a radiación láser incidente. Non tendo en consideración nin as perdas por radiación nin por convección térmica, a única condición de contorno contemplada consiste en:

$$T(0, \vec{r}) = T_{ambiente} \quad \forall \vec{r}$$

Por último, as tres propiedades do material, densidade (ρ), capacidade calorífica (c_p) e conductividade (κ) pódense considerar constantes ou dependentes da temperatura (T).

O método de elementos finitos unicamente proporcionará solucións estacionarias ó problema de transmisión do calor, construíndose as solucións transitorias coa interconexión entre estados estacionarios a través do método de Crank-Nicholson: as solucións nun paso temporal empregaránse como condicións iniciais no seguinte.

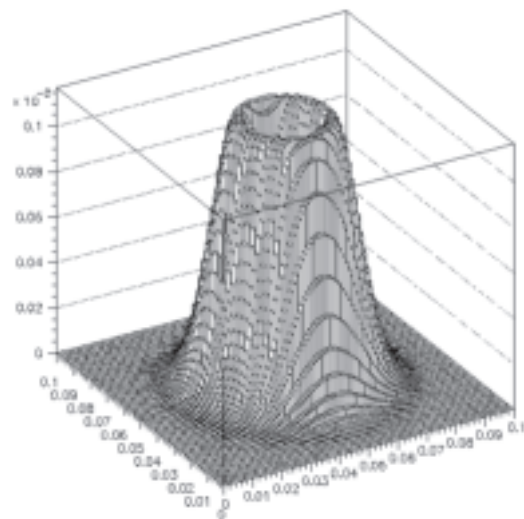


Figura 1: Distribución de Fluxo TEM01

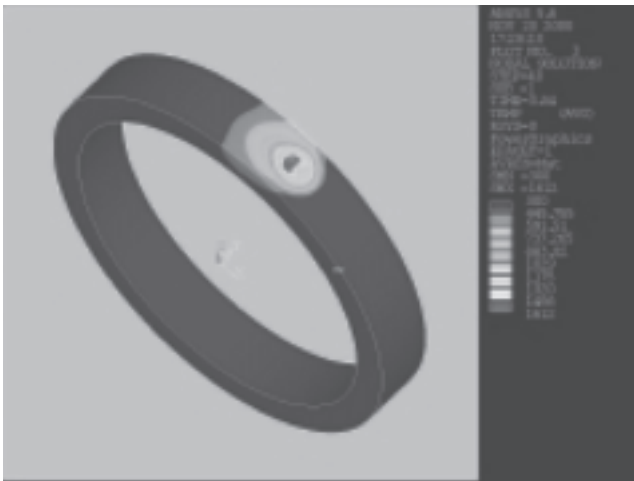


Figura 2.-Modelo. Distribución de fluxos caloríficos.

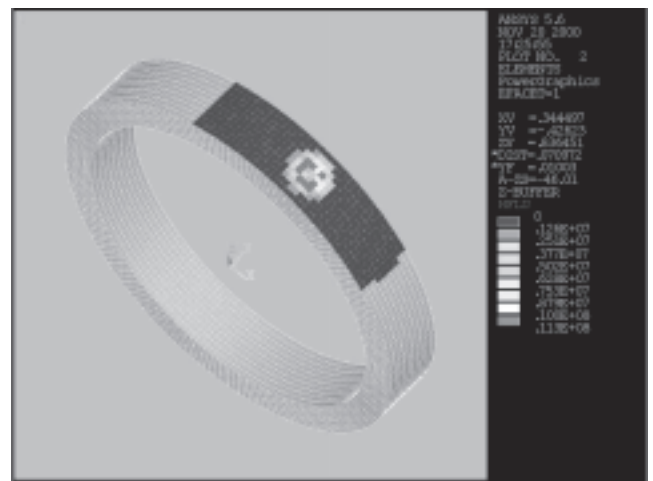


Figura 3.-Resolución do modelo. Distribución de temperaturas.

OPTIMIZACIÓN DO MODELO

Á hora de construír un modelo FEM haberán de tomarse un conxunto de decisións (dimensións do maiado, salto temporal...), conducentes a un compromiso entre os erros dos resultados e o tempo-memoria para a execución do código. Para estimar os devanditos erros cómpre comparar as solucións obtidas polos elementos finitos, cos resultados analíticos de casos sinxelos.

De entre os varios métodos de resolución que soporta ANSYS™, escollemos o gradiente conxugado (JCG) xa que garante a solución con modelos de ata 300.000 nodos (límite máximo posto a proba por nós) nun tempo asequible. Mesmamente, nun estudo sobre o consumo de memoria do código ANSYS™ comprobouse a existencia dunha relación lineal entre ésta e o número de nodos do modelo, ou o que é o mesmo, da dimensión alxebraica da matriz de estrutura. Pola contra, un crecente número de pasos temporais aumenta, ata un valor de saturación, o emprego da memoria antes citada.

Co gallo de comproba-lo código desenvolvido para introducirmos as fontes, simulouse o quentamento e posterior enfriamento dunha probeta ata acadar o equilibrio térmico, comparando entón o resultado coa solución analítica exacta equivalente. Esta confrontación acoutou o erro relativo nun 0.14 % manifestando un bo funcionamento do programa.

Un estudo en profundidade da influencia das distintas discretizacións no erro relativo permítenos aprender que éste diminúe ó reducirmos, tanto o tamaño da maia (tomando elementos cúbicos), como a dimensión do paso temporal: unha vez fixadas as dimensións xeométricas e temporais globais, a maior número de nodos e pasos temporais, menor erro, máis aumentan o consumo de memoria e o tempo execución.

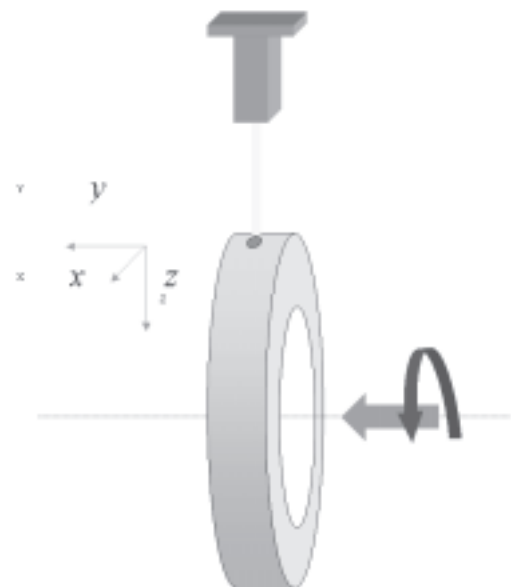
Co propósito de refina-lo modelo numérico, estudiamos a posibilidade de traballar cunha maia máis estreita na dirección normal á cara sobre a que incide o láser (Z). Os nosos resultados amosan que é posible, partindo dunha maia vas-

ta, mellora-la calidade da solución numérica alterando unicamente as dimensións da cela patrón na dirección Z; namentras que non apreciamos efecto algún cando se alteran as lonxitudes transversais da retícula (X ou Y).

Finalmente fíxose unha análise de cómo influenciaba a discretización da fonte na precisión dos resultados, observando que ó aumentar a calidade da discretización da irradiación (relación entre a anchura da fonte e o tamaño do elemento), o erro diminúe con tendencia asintótica.

CONCLUSIÓNS

O código de elementos finitos ANSYS™ amósase como unha ferramenta capaz de simular procesos de tratamento térmico de materiais metálicos con láser, ofrecendo a posibilidade de coñecer con boa precisión a temperatura de calquera punto da peza obxecto de estudo, manexando propiedades térmicas dependentes da temperatura e implementando xeometrías diversas.



A Colaboración CESGA - RETEGAL permite a realización de Experiencias en TeleMedicina sobre Banda Ancha

O pasado mes de xuño celebrouse na Coruña o Simposium Internacional de Cirurxía da Aorta e Restauración Ventricular, no marco do XXII Congreso da Sociedade Española de Cardiociruxanos. Ó evento asistiron máis de 300 profesionais de 27 países e foi dirixido conxuntamente polo Servizo de Cirurxía Cardíaca do Canalejo, que dirixe o Dr. Juffé Stein, o Heart Center de Saint Louis, o Cardio-Thoracic de Mónaco e o Instituto de Enfermedades Cardiovasculares do Clínico de Barcelona.

Máis de 300 Especialistas nun Quirófano Virtual

Os cirurxanos cardíacos congregados no Paraninfo da Universidade da Coruña puideron ser testemuñas virtuais de seis intervencións cirúrxicas realizadas sobre pacientes reais nos quirófanos do Canalejo. No quirófano atopábanse instaladas tres cámaras de vídeo dixitais manexadas por operadores profesionais. Xa fóra do quirófano, nun estudio preparado ad hoc, un realizador asesorado por un equipo médico producía o directo que sería retransmitido pola rede ata o Paraninfo. A Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia (RECETGA) permite, gracias o ancho de banda dispoñible, a transmisión de imaxe con calidade PAL. A través da teleconferencia, os asistentes no Paraninfo puideron interpelar sobre as novas técnicas que estaban a ser demostradas polos cirurxanos que neses momentos realizaban intervencións na sala de operacións.

Unha Colaboración Técnica Permanente

A realización desta teleconferencia de moi alta calidade é apenas un punto na permanente colaboración técnica e nos esforzos de coordinación inter-institucionais que, dende hai anos, veñen realizando de forma conxunta o CESGA, RETEGAL, o Dpto. de Informática do C. H. Juan Canalejo e o Servizo de Rede da Universidade da Coruña

Segundo explica o responsable técnico de comunicacións de RETEGAL, Juan Buján, «para posibilita-las transmisións das



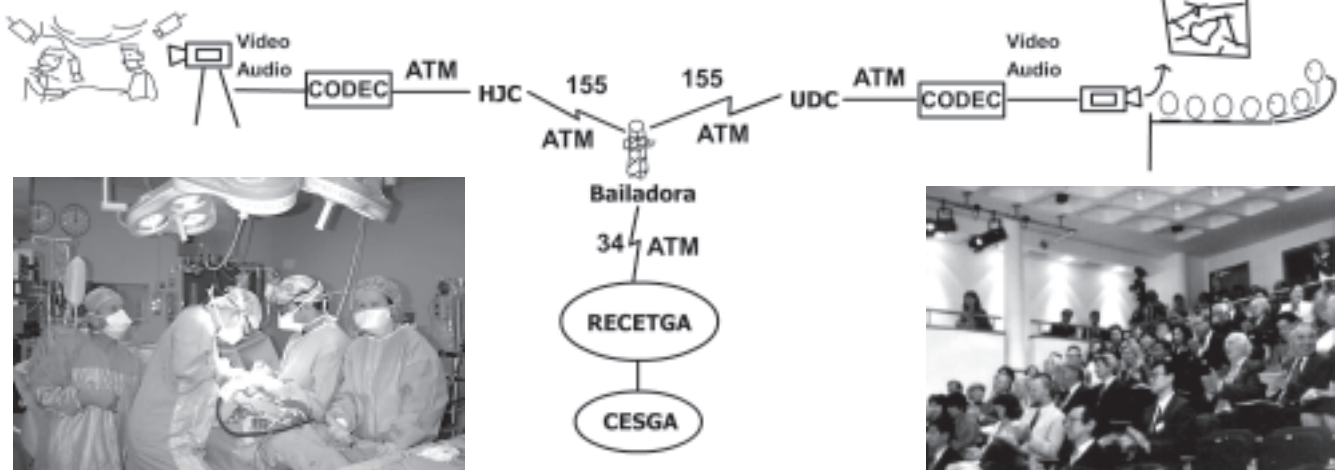
José Carlos Pérez do CESGA e Juan Buján de RETEGAL

Teleconferencias de Cirurxía en Vivo empregouse a Rede ATM que interconecta o C. H. Juan Canalejo coas universidades». RETEGAL puxo os medios técnicos necesarios para garanti-la dispoñibilidade da Autoestrada Galega da Información como soporte da RECETGA, e os medios humanos para a correcta configuración do equipamento empregado na transmisión.

O CESGA, por unha banda, achegou xunto a RETEGAL, a rede sobre a que se realizaron as transmisións, e por outra, participou no deseño e configuración do sistema. «A nivel técnico, a colaboración RETEGAL-CESGA é fluída e permanente xa que a propia xestión da rede fai imprescindible unha coordinación total nas operacións cotiáns» aclara José Carlos Pérez, técnico de comunicacións do CESGA.

O Centro de Supercomputación de Galicia xestiona a RECETGA en colaboración coa Dirección Xeral de Comunicación Social e Audiovisual da Consellería de Cultura, Comunicación Social e Turismo.

Configuración da Transmisión de Cirurxía Cardíaca



O C.H. Juan Canalejo aposta pola TeleMedicina

Guillermo Vázquez González
Servicios Informáticos,
Complejo Hospitalario Juan Canalejo



A posta en marcha e mantemento das transmisións de cirurxía cardíaca desde os quirófanos do Complejo Hospitalario Juan Canalejo e o Paraninfo da Universidade da Coruña, con calidade diagnóstica e transmisión en tempo real de dúas canles de vídeo e audio a 15 Mbps, cada un, posibilitando así o debate entre os cirurxanos e os asistentes ó congreso (cirurxanos de 32 países) supuxo un importante esforzo de colaboración entre persoal técnico de RETEGAL, do CESGA e do propio Juan Canalejo.

No tocante ós recursos humanos destinados á realización desta experiencia por parte do Juan Canalejo, cómpre resaltar que foron dous técnicos do hospital e dous cedidos por la empresa ALCATEL os que participaron. Os nosos técnicos situáronse no quirófano e no paraninfo, o persoal de Alcatel fíxose cargo dos equipos de comunicacións e do mantemento dun backup de imaxe. Para isto empregáronse: (1) Tres equipos de conmutación ATM ALCATEL (un de Backup), (2) Dous equipos de transmisión de vídeo sobre ATM - VAN de FVC, (3) Dous equipos de transmisión de vídeo sobre ethernet a modo de backup e (4) Equipos de filmación e mestura.

Unha experiencia destas mesmas características realizouse hai dous anos. Naquela ocasión transmitíranse cirurxías cardíacas minimamente invasivas, cun resultado extraordinario. A ese congreso asistiran cirurxanos de 28 países. O Complejo Hospitalario Juan Canalejo é moi activo na área de Telemedicina. Así, atópase actualmente en funcionamento un sistema de TeleRadioloxía, que conecta o centro de especialidades de Betanzos co Juan Canalejo, realizando por este medio o 100% do diagnóstico radiolóxico da área de Betanzos.

Estamos tamén conectados con telerradioloxía e teleconsulta coas hospitais: Meixoeiro, Xeral Cies e CHUS de Galicia, Asociación Española Primera de Socorros Mutuos e Casa de Galicia de Montevideo e Centro Gallego e Sociedad Española de Beneficencia - Hospital Español de Buenos Aires.

Adicionalmente, estase desenvolvendo un proxecto de TeleDiálisis con BAXTER. Tamén, na actualidade están sendo planificados outros proxectos como son: TelePatoloxía entre o Canalejo, Abente e Lago e o Virxe da Xunqueira de Cee. TeleDermatoloxía entre o hospital e o área asistencial dependente do complexo. Teleconsulta na área de corazón entre os hospitais: Xeral Calde, Arquitecto Marcide, Hospital da Costa e Juan Canalejo. Tamén proxectamos remata-la implantación de telerradioloxía en toda a área sanitaria, é dicir, instalala nos centros de especialidades de Carballo e Ponteceso.

Computación Distribuída de Alto Caudal

Francisco Javier González Castaño
Departamento de Ingeniería Telemática
Universidade de Vigo



A Computación Distribuída de Alto Caudal (*High Throughput Distributed Computing*) busca maximizar a utilización das máquinas dispoñibles. É dicir, o tempo de resposta *non* é a máxima prioridade (se esa fose a nosa intención, falaríamos de computación distribuída de altas prestacións, ou *High Performance Distributed Computing*). Erroneamente, poderíase entender que a maximización do caudal implica un tempo de resposta mínimo. Sen embargo, isto non é necesariamente así, como se ilustra co exemplo seguinte.

Supoñamos que unha escola universitaria ten cen ordenadores de hai dous anos (Pentium II a 350 MHz executando Linux, por exemplo). Nos meses lectivos, supoñendo unha utilización máxima, consúmense $20 \times 8 = 160$ horas para usos docentes, dun total de $30 \times 24 = 720$ horas de CPU. É dicir, un mero 22%. Habitualmente, o 78% restante non se explota de xeito sistemático. Polo tanto, un traballo plenamente paralelizable cun tempo de resposta de dúas semanas nunha máquina individual podería ser resolto en 0.02 semanas (tempo de resposta mínimo). Sen embargo, requirirá no mellor dos casos $0.02 \times 720 / 560 = 0.026$ semanas, se se maximiza o caudal dispoñible. En realidade, como consecuencia da compartición das máquinas, o tempo de resposta é impredecible.

Naturalmente, este modelo pódese estender a laboratorios de investigación ou empresas, e é un dos pilares dos super-ordenadores virtuais de tipo *grid*¹.

O termo *Power Grid* (NASA) está inspirado na rede eléctrica, e fai referencia a que unha colección heteroxénea de recursos de computación crece dunha maneira tan sinxela como cando se conecta un electrodoméstico a un enchufe. Simplificando, un *grid* está composto, ademais de polas máquinas, polos seguintes compoñentes:

- **Software de execución remota.** Indiscutiblemente, Condor² é o sistema líder. Evolucionou desde a súa sinxeleza inicial (execución de traballos independentes), a un sistema capaz de executar tarefas comunicadas mediante MPI. De feito, posúe varios records mundiais (programación enteira, NUG30). Condor permite a monitorización das colas de traballos e a consulta de históricos, e soporta as caídas de máquinas de maneira totalmente transparente, independentemente do nivel de fiabilidade das redes.
- **Middleware para a xestión dos traballos.** Hoxe, Globus³ estáse a converter no sistema de referencia, aínda que se realizaron outras propostas (CORBA, Jini). Existe unha distribución conxunta de Condor e Globus, Condor-G⁴.
- **Xestión de datos.** É unha liña relativamente recente, aínda que fundamental para os planes do CERN. Ata hoxe, faciase

Pasa á páxina seguinte

Ven da páxina anterior

Francisco Javier González Castaño

énfase na utilización da CPU. Sen embargo, os problemas actuais non admiten que tódolos datos de entrada ou saída residan nunha única máquina. Especificamente, como temas de interese, podemos cita-la minimización de latencia en transferencias masivas de datos, a súa distribución (sistemas NEST e Kangaroo de Condor) e a xestión de réplicas.

- **Software de acceso.** Segundo crece a complexidade dos sistemas, é necesario aillar ó usuario da súa mecánica. Unha solución interesante é o emprego de *portais* (páxinas *web*) para campos científicos concretos. Tamén hai propostas para a mobilidade dos *escritorios* dos usuarios e o acceso desde plataformas móbiles.

En Europa, os *grids* experimentaron un pulo considerable co proxecto IST DataGrid⁵, do V programa marco (e previsiblemente, co proxecto irmao CrossGrid). Este proxecto persegue a definición de *middleware* e a implementación de aplicacións paneuropeas. Na práctica, optouse pola utilización de Globus e sistemas asociados, e existe unha proposta de colaboración EU-US chamada DataGrid-US testbed.

Ó igual que no seu día se realizou un esforzo intenso de redeseño para portar programas de máquinas vectoriais a máquinas paralelas, actualmente se observa un esforzo similar para adaptarse ós *grids*. Dada a súa heteroxeneidade, é frecuente que un mesmo programa se compile para distintas plataformas (Intel, Sun, etc.). Algúns investigadores propuxeron a utilización de Java, aínda que se perde en prestacións de pico, se gaña en xeralidade, que é unha consideración máis importante desde o punto de vista da computación de alto caudal.

- (1) <http://www.mkpcom/grids>
- (2) <http://www.cs.wisc.edu/condor>
- (3) <http://www.globus.org>
- (4) <http://www.globus.org/retreat00/presentations/miron-08-00/sld001.htm>
- (5) <http://www.eu-datagrid.org>

Condor
High Throughput Computing

Unha ducia de sistemas superan xa a barreira de 1 Teraflops

No que se ten tornado no máis anticipado evento no mundo da supercomputación, o pasado 21 de xuño presentouse a dezaseteaba edición da lista TOP500. A lista TOP500 confecciónase semestralmente e presenta os cincocentos superordenadores máis rápidos do momento.

Nesta dezaseteaba edición, IBM ocupa o máximo posto de liderado co 40% de sistemas instalados e o 43 % da potencia total (en GFLOPS) reflectida na lista. Sun Microsystems sitúase en segundo lugar no tocante a sistemas instalados co 16%. Mentres Cray Inc. retén o segundo lugar no tocante a potencia total co 13% dos GFLOPS. SGI Inc. posicionouse no terceiro posto tanto en sistemas instalados cun total de 63 (12.6 %) como en potencia (10.2%).

Hans Meuer da University of Mannheim, Erich Strohmaier e Horst Simon do U.S. Department of Energy, National Energy Research Scientific Computing Center, e Jack Dongarra da University of Tennessee son os autores desta relación de sistemas. A lista foi desvelada e analizada na Supercomputer 2001 Conference en Heidelberg.

No cumio da lista atópanse catro sistemas desenvolvidos no marco do Proxecto ASCI (Accelerated Strategic Computing Initiative), promovido polo U.S. Department of Energy. O sistema IBM ASCI White instalado no Lawrence Livermore National Laboratory mantense como o superordenador número un en potencia no mundo cunha capacidade de cálculo incrementada ata os 7.2 teraflop/s (billóns de operacións de punto flotante por segundo) no benchmark Linpack. O posto número dous foi tomado por un novo sistema IBM SP instalado no NERSC/LBNL. No número cinco atopámonos cun novo Hitachi SR8000/MPP na University of Tokyo. No oitavo posto da lista sitúase un sistema vectorial SX5 da casa NEC. Este é o primeiro sistema de arquitectua vectorial que rompe a barreira do teraflop.

A lista contén agora un total de 12 sistemas que exceden 1 teraflop de potencia sostida empregando o Linpack, e un total de 25 sistemas que exceden esta magnitude en potencia pico teórica.

A lista amosa crecemento continuado en tódolos rangos de potencia. A potencia total combinada dos 500 superordenadores da lista é de 108.8 Tflops cando na lista anterior era de 88.1 Tflops. Cento trinta e dous sistemas presentes na anterior edición caeron da lista na edición de xuño. O sistema máis lento presente conta cunha capacidade de cálculo de 67.8 gigaflops, que comparado cos 55 Gflops da lista de hai 6 meses e os 43.82 Gflops da de xuño de 2000 supón un excepcional crecemento en potencia (www.top500.org).



○ ASCI White, cunha potencia de cálculo de 7.2 Teraflops

O Papel da Bioinformática na Revolución Xenómica e Proteómica

Fredy Sussman,
Departamento de Química Orgánica,
Universidade de Santiago de Compostela.

Os adiantos tecnolóxicos baseados na explotación da información xenómica están a punto de orixinar unha revolución na bioloxía e na medicina, que nun futuro próximo producirán cambios drásticos na praxis médica. Agárdase que a análise xenética de enfermos sexa rutinario nun futuro cercano; o que permitirá detecta-las variacións xenéticas que poderían indicar se un paciente é propenso a algún tipo de doenza, ou se responde negativamente a algún tipo de fármaco. O horizonte da medicina preventiva verase, polo tanto, substancialmente ampliado. En ocasións, unha análise de tipo xenético dun individuo poderá levar a suxerencias de trocos no seu estilo de vida e á posible detección de enfermidades nos seus estádios máis tempranos.

Poderáanse descubrir novos fármacos dirixidos a pacientes cun trasfondo xenético específico. Un dos maiores impactos producirase nas doenzas cun alto grao de mortalidade e que presentan asimesmo unha alta variabilidade dun paciente a outro, tales como o cancro, enfermidades cardíacas e enfermidades dexenerativas do sistema nervioso (caso do Alzheimer).

O número de secuencias xenómicas creceu exponencialmente nos últimos anos. Isto pódese ver no número de nucleótidos depositados na base de datos do consorcio Europeo de Bioloxía Molecular (EMBL) (ver Fig.1). A transformación da numerosa información de secuencias de xenomas en información útil para a biomedicina require a comprensión da función das proteínas codificadas polos xenos, un esforzo en que as ciencias e tecnoloxías da información teñen un papel central no que se deu en chamar **Bioinformática**. Esta nova disciplina está a posibilitar:

- A identificación de secuencias de ADN nun xenoma que codifiquen unha determinada proteína. Algunhas das bases de datos que se empregan para este fin son o GENBANK, o PIR e o SWISSPROT.
- Predicción da estrutura da proteína obxectivo por medio de métodos de similitude con proteínas con estruturas xa coñecidas. O Protein Data Bank (PDB) é a base de

datos depositaria de tódalas estruturas de proteínas coñecidas, o que o converte no centro da busca de proteínas de estrutura coñecida con algunha homoloxía coa construción case automática de modelos de estruturas de proteínas. Estes sitios inclúen o SWISSPROT. O maior problema que un

O desenvolvemento continuo de novos tipos de algoritmos ... acelerará o paso da nosa comprensión da función dos xenos.

se atopa neste tipo de modelización é que a experiencia demostra que se require un mínimo de 30-40% de identidade entre os residuos da proteína homologada na base de datos PDB e os da proteína obxectivo. Isto presenta limitacións na aplicabilidade deste método, xa que polo de agora só un tercio das proteínas están relacionadas cunha proteína dunha estrutura coñecida a este nivel. Agárdase que este problema teña solución nun futuro próximo. O feito de que as proteínas se preguen nun número restrinxido de conformacións, levou a predicir que nuns anos a maioría dos tipos de pregamento de proteínas serán determinadas, neste caso a modelización por homoloxía será o método primeiro de determinación estrutural. Os tipos de pregamento coñecidos están almacenados en bases de datos como PROSITE e CATH.

- Inferir a función das proteínas identificadas. Unha vez que a estrutura sexa determinada ou predicida, a súa función poderá ser inferida por métodos asistidos por ordenador. Por exemplo, o tipo de pregado da proteína é tamén un índice do tipo de funcionalidade que posúe. A análise da estrutura terciaria dunha proteína indicará que tipo de pregamento posúe, empregando bases de datos como as de PROSITE e CATH. Debido a que familias de proteínas cun mesmo pregado comparten un número limitado de funcións, a identificación do pregado é o primeiro paso para a determinación da función da proteína que se está a estudar. A base da funcionalidade de moitas proteínas reside na rexión de enlace con ligandos, que se pode predicir con alta certeza baseado no estudio das fendas ou cavidades que se observan nunha análise da estrutura das proteínas. Demostrouse que case sempre a cavidade ou fenda máis grande corresponde ó sitio principal de enlace dos ligandos. O seguinte paso é a identificación da composición química dos tipos de ligandos que teñan unha alta afinidade polo sitio de enlace recén identificado e a predicción da afinidade dos ligandos polos receptores e enzimas expresados polos xenos. A maior dificultade neste tipo de investigación está relacionada coa multiplicidade conformacional que o ligando pode adoitir no sitio de enlace da proteína e co cálculo de contribucións entrópicas e de solvatación á enerxía de enlace.

O desenvolvemento continuo de novos tipos de algoritmos para as tarefas xa nomeadas acelera o paso da nosa comprensión sobre a función dos xenos.

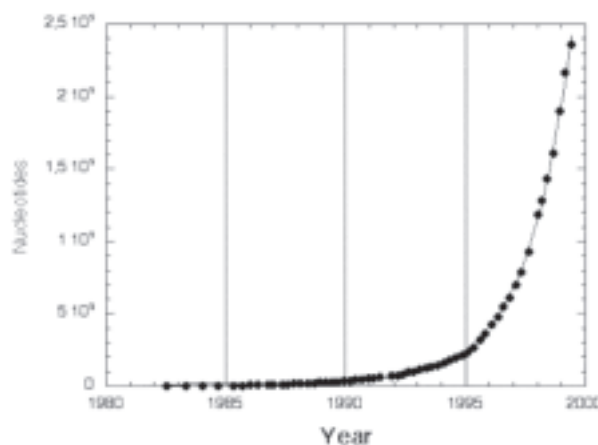


Figura 1. Crecemento do número de nucleótidos depositados no EMBL. O perfecto axuste dos datos a unha gráfica exponencial (líña delgada), é indicador da explosión da información xenómica (extraído do curso de bioinformática da Universidade de Munich, www.lmb.unimuechen.de/Groups/Bioinformatics).



si-Galicia

Foro da **S**ociedade da **I**nformación en **G**alicia

CONSTITUCIÓN

O pasado mes de abril constituíuse o Foro SI-Galicia.

Este é un Foro aberto promovido pola Secretaría Xeral de Investigación e Desenvolvemento dirixido a promover a extensión da sociedade da información e a implantación do Comercio Electrónico en Galicia.

PARTICIPACIÓN

O Foro conta coa participación das Universidades galegas, entidades financeiras, asociacións empresariais e diferentes Departamentos da Xunta de Galicia quedando aberto a inclusión posterior de novos membros.

Si-Galicia está baseado nun protocolo polo que os seus membros teñen interese en crear un foro común para favorece-la extensión da sociedade da información e a implantación do Comercio Electrónico en Galicia.

CONSECUCIÓN

Os obxectivos xerais de Si-Galicia son:

- Constituir un foro que coordine e impulse a extensión da Sociedade da Información e a implantación do comercio electrónico en Galicia.
- O foro apoiará e promoverá iniciativas para impulsa-la nova economía.
- Crear un espacio común onde compartir estas iniciativas así como programar novas actividades que reforen os espacios non cubertos.



Cualquiera puede guardar información en una Red de Almacenamiento.
La cuestión es cómo extraerla.



Fujitsu ha diseñado los Servidores PrimePower para dar respuesta a las aplicaciones de misión crítica y a las nuevas necesidades de comercio electrónico.

- Alta fiabilidad. Fujitsu ha aplicado a los Servidores PrimePower toda su experiencia como fabricante de mainframes.
 - Escalabilidad de uno hasta 128 procesadores.
- Solaris, el sistema operativo UNIX estándar, compatible en el futuro.
 - Amplio soporte de mantenimiento propio en toda España.
- Base de datos Jasmine para aplicaciones de comercio electrónico.

Servidores PrimePower



Jasmine es la forma más sencilla de publicar la información en internet y desarrollar rápidamente los servidores de comercio electrónico.

THE POSSIBILITIES ARE INFINITE
www.fujitsu.es FUJITSU ESPAÑA, S.A.