



CESGA

díxitos

NOVAS DO CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA

Febreiro 2009



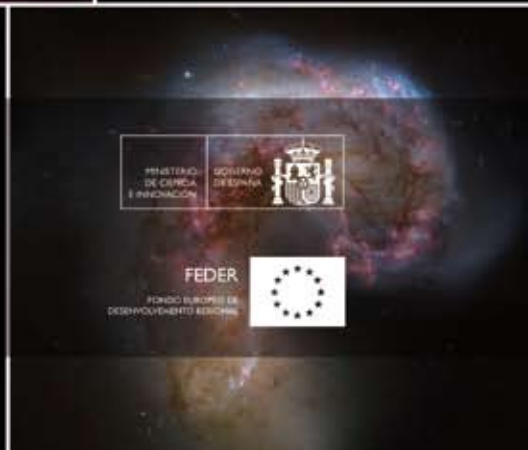
NOVA CONSTELACIÓN NA CIDADE DA ESTRELA



CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS



XUNTA DE GALICIA
CONSELLERÍA DE INNOVACIÓN,
E INDUSTRIA



FEDER
FONDO EUROPEO DE
DESARROLLO REGIONAL



DIRECCIÓN

Javier García Tobío

COORDINACIÓN

Fernando Bouzas Sierra

REDACCIÓN

María Piñeiro

COLABORACIÓN

Damián Álvarez Mallón

Teresa Sánchez Rúa

Víctor Fernández Albor

Andrés Gómez Tato

Montserrat Villar Martín

Ana Ulla Miguel

Enrique Zas

Ricardo Vázquez

Gonzalo Iglesias

PORTADA E GRAFISMO

Elena Botana

MAQUETACIÓN

Growcom SL

FOTOMECAÍNICA E IMPRESIÓN

Artes Gráficas Litonor

DEPÓSITO LEGAL

C-1604-1998

ISSN

1139-563X

EDITA

FUNDACIÓN CESGA

Avenida de Vigo s/n (Campus Sur)

15705 Santiago de Compostela

Teléfono 981 569 810

Fax 981 594 616

dixitos@cesga.es

CONTIDOS

- 2-3 La astronomía: ciencia milenaria, ciencia moderna.
- 4 Pierre Auger Collaboration.
- 5 Finis Terrae aberto.
- 6 GRID para a planificación da radioterapia.
- 7 GRID Mathematica.
- 8-9 Nova sé do CESGA.
- 10 SSH con certificado de atributos.
- 11. MPI Communications protocols.
- 12. Actividades Rede GHPC.
- 13-15. Novas.

A Astronomía

Dende hai miles de anos o ser humano que revela como a observación do celeste proxectou os seus anhelos e

Montserrat Villar Martín

Coordinadora do AIA-IYA2009 en España

Ana Ulla Miguel

Coordinadora de actividades en universidades do Equipo de Traballo do AIA-IYA2009 en España
http://u4.cesga.es/web_U4.htm

En 1609 Galileo Galilei apuntou o seu telescopio por primeira vez ao ceo estrelado. Descubriu que Xúpiter ten satélites, que a Vía Láctea está formada por incontables estrelas e que a Lúa ten montañas (Fig.1). Aquelles estudos marcaron un antes e un despois na nosa comprensión do Universo. Foi o comezo dunha extraordinaria historia de descubrimentos que continúa nos nosos días. En 2009 celebraremos o cuarto centenario daquel ano revolucionario para a Astronomía.

¿Por qué un Ano Internacional da Astronomía?

A Astronomía, o estudo do Universo, naceu moi pronto e trátase dunha das ciencias básicas máis antigas, que exerceu unha influencia prolongada e profunda na nosa cultura. É ao mesmo tempo unha ciencia de máxima actualidade grazas aos importantes avances, científicos e tecnolóxicos logrados durante as últimas décadas. En particular, o avance que a Astronomía experimentou en España nos últimos 30 anos é admirable. Pasamos de ser un país onde a Astronomía era unha 'anécdota' a contar cunha sólida comunidade de investigadores profesionais e a liderar grandes proxectos científicos e tecnolóxicos. O Gran Telescopio Canarias é un claro exemplo. Cos seus 10.4 metros de diámetro, será o maior telescopio óptico do mundo.

UNESCO e as Nacións Unidas quixeron recoñecer a valiosa contribución da Astronomía á sociedade e a

a: ciencia milenaria, ciencia moderna

ano sentiuse fascinado polo ceo estrelado. Así o demostran numerosos depósitos arqueolóxicos, ceo xogou un papel fundamental na orientación de certas estruturas arquitectónicas. Na bóveda medos; alí situou o fogar dos seus deuses e o lugar ao que aspira chegar tras a morte.

cultura mediante a declaración do 2009 como Ano Internacional da Astronomía. Trátase dunha iniciativa impulsada orixinalmente pola Unión Astronómica Internacional.

Os proxectos e actividades do AIA-IYA2009

Baixo o lema 'O Universo para que o descubras' (Fig.2), o 2009 será unha celebración mundial da Astronomía. Só en España hai implicadas unhas 140 entidades públicas e privadas de natureza moi diversa que traballan na maior rede de divulgación xamais

creada: homes e mulleres dedicados á investigación, ao ensino, profesionais de museos e planetarios, medios de comunicación, astrónomos afeccionados e todos os amantes da Astronomía compartirán con público de calquera idade, raza e condición social a súa paixón por descubrir o Universo e internarse nos seus misterios.

Un dos proxectos nacionais do AIA-IYA2009 en España é o denominado "Unha universidade, un Universo," ou proxecto "U4" (Fig.3), o

obxectivo básico do cal é conseguir que se imparta ao longo de 2009 polo menos unha conferencia de Astronomía ou materias afíns en cada unha das 77 universidades españolas.

Naquelas universidades que posúen Departamentos de Astrofísica ou grupos numerosos de investigación neste campo, intentarase conseguir ademais unha conferencia en cada Escola ou Facultade. Así, U4 persegue contribuír a romper a dicotomía entre Ciencias e Letras existente na nosa sociedade e a promover o diálogo Ciencia-Sociedade dende o marco das universidades españolas.



O Universo para que o descubras

Os proxectos e actividades do AIA-IYA2009

- **Astronomía nas aulas:** recursos educativos para as distintas idades
- **Un portal ao Universo:** noticias, eventos, imaxes, vídeos, etc. e todo a un clic de rato en www.astronomia2009.es
- **Exposicións astronómicas** en parques e avenidas
- **Xornadas de portas abertas,** blogs, entrevistas, talleres, mesas redondas, ciclos de charlas
- **Programas especiais de planetario.**
- **Un telescopio en cada praza:** a beleza dun ceo escuro e estrelado amosado por astrónomos afeccionados e profesionais.
- **Astronomía para todos:** persoas con discapacidade, nenos en ambientes desfavorecidos... sen dúbida un Universo para todos.



A situación do proxecto U4 nas universidades galegas



UDC• Na de Coruña impartirán as súas conferencias os profesores Daniel Fernández Mosquera e Minia Manteiga Outeiro, falando

sobre "**¿Qué fai un planeta habitable? O reto da busca doutras Tierras**" e "**A Terra, un planeta con estrela**", respectivamente.

USC• Na de Santiago de Compostela organizarase un completo elenco de conferencias e actividades coordinadas polos profesores José Ángel Docobo Durántez, Josefina Ling Ling, Salvador Bará Viñas e Juan Antonio Garzón Heydt. En concreto o 5 de febreiro, o catedrático da Universidade de Granada, Eduardo Battaner López, impartirá a súa conferencia titulada "**O Universo Magnético**".

UDV• Na de Vigo, no mes de abril, o Científico Titular do Instituto de Astrofísica de Andalucía (IAA-CSIC), Luis Felipe Miranda Palacios, impartirá a súa conferencia titulada "**Descubrimiento de auga nunha estrela moribunda**". http://u4.cesga.es/web_U4.htm

The Pierre Auger Collaboration

The Pierre Auger Observatory has been designed to study the highest-energy cosmic rays, charged particles that reach the Earth at energies 10 million times higher than the world's highest-energy particle accelerator.

By Enrique Zas and Ricardo Vázquez
Departament Particle Physics, USC

Until now, there has been no consensus on the origin of these highest-energy cosmic rays. These particles are however of twofold interest in Astrophysics and Particle Physics. Their interactions are probing matter at energies which are completely unreachable with current acceleration technologies and they provide information on extreme astrophysical objects which are capable of producing particles of such energies.

The detection of these particles is a real challenge because the arrival rate at the Earth of the most energetic particles is of about a particle per square kilometer per millennium. As they penetrate in the atmosphere they share their energy to more and more particles giving rise to an atmospheric shower. These particles travel almost parallel to the first one and by the time they reach the

Earth's surface they extend to form a pancake of several km of diameter that travels practically at the speed of light and that can contain over a billion of particles, mostly photons, electrons, positrons and muons. To witness these extremely rare events, the Pierre Auger

The Astroparticle Physics Group of the University of Santiago has participated actively in this project since 1995 and, as a result, Spain became a full member of the Observatory in 2001

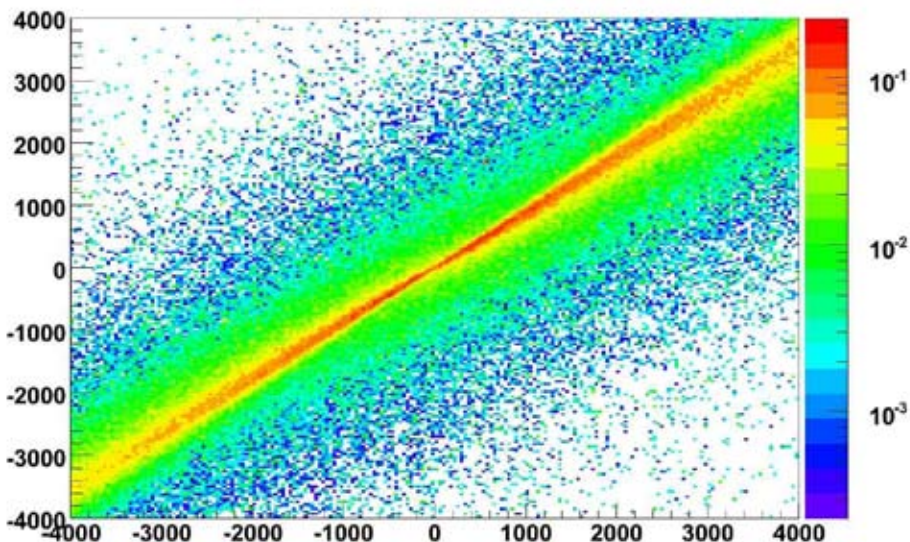
Collaboration began the construction of its Southern Observatory in the year 2000 in Malargüe, Argentina. It consists of an array of 1600 particle detectors spread over 3000

square kilometers in Argentina's Mendoza Province, just east of the Andes Mountains. These are water tanks in which particles produce Cherenkov light that is recorded by sensitive light devices (photomultiplier tubes). The slightly different arrival time of the particles at different detectors gives directional information of the shower front in an analogous way to the way we can detect the direction of sound using two ears. Surrounding the array is a set of 24 fluorescence telescopes that follow the faint ultraviolet light emitted by nitrogen molecules as the shower particles cascade through the atmosphere leaving a light trail that could be compared to a very weak and fast shooting star.

The results

The Pierre Auger collaboration published its first physics results in the fall of 2007, revealing new insights into the properties of the highest-energy particles in the universe. The collaboration found that the

arrival directions of the highest-energy cosmic rays are anisotropic what showed up as a correlation with nearby galaxies that contain gigantic black holes that are actively emitting all sorts of particles and radiation (Active Galactic Nuclei). Several science organizations selected this remarkable result as one of the most important scientific breakthroughs in 2007. The collaboration used its growing detector array to measure the cosmic-ray energy spectrum at the highest energies, achieving higher precision than any previous experiment. The Auger scientists found a fall-off of the flux at the highest energies. This is consistent with an idea, proposed about 40 years ago, that cosmic rays interact with photons of the ubiquitous microwave background radiation on their way through the universe. New limits on the photon and neutrino content in cosmic rays have put stringent constraints on theories of cosmic-ray origins.



In the image the density profile at ground of a simulated shower is shown. Distances are marked in meters. The color levels represent the density of particles per square meter. The shower has a zenith angle of 86 degrees. The initial particle has an energy of 10 EeV. The shower is elongated in two lobes which correspond to the positive and negative muons.

The Southern Observatory was inaugurated on November 14th 2008 and the event marked the completion of the first phase and the beginning of the project's second phase, which includes plans for an Observatory in the northern hemisphere in Colorado, USA, and enhancements of the southern hemisphere site.

International Collaboration

The collaboration includes more than 450 physicists from 100 institutions in 17 countries. The Astroparticle Physics Group of the University of Santiago has participated actively in this project since 1995 and as a result Spain became a full member of the Observatory in 2001. This group, together with other four institutions from Spain that joined the effort, provided the solar panels that power the isolated particle detectors in the "Pampa Amarilla". The group is involved in the analysis of the showers that are detected and this requires much computing power because of the extremely large

The Pierre Auger collaboration published its first physics results in the fall of 2007, revealing new insights into the properties of the highest-energy particles in the universe

numbers of particles that make the showers. Simulations of these showers have been made using CESGA resources. For instance, the simulation of a single shower can take 1 hour of CPU in a desktop PC and the output can have several tens of Mb. For the study and analysis of cosmic rays, thousands of simulated showers are needed, so that a complete simulation may need several years of CPU time and consuming hundreds of Gb.



Finis Terrae aberto aos grupos de excelencia da península

Búscanse investigadores audaces dispostos a abordar retos científicos nas fronteiras do coñecemento

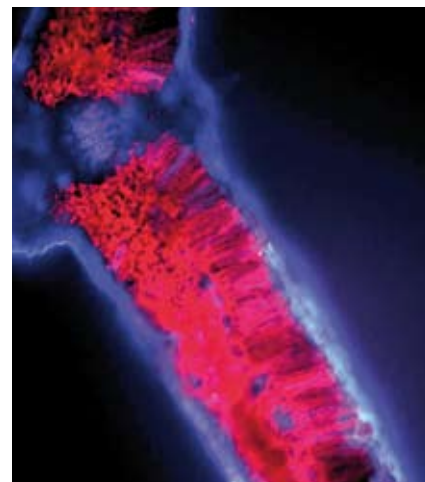
Ademáis de atender a demanda diaria dos seus usuarios, dende a instalación e posta en marcha do Finis Terrae abordáronse no CESGA seis casos singulares de cálculo computacional que requiriron diferentes esixencias de recursos. Este tipo de "retos" científicos, grandes problemas computacionais que ou ben non foran formulados ata o momento ou que se puideron completar grazas á potencia de cálculo do supercomputador, resultaron moi útiles para coñecer os límites de capacidade da propia máquina.

Agora, o CESGA convoca un proceso de selección de dous casos singulares de computación, en réxime de concorrencia competitiva, que necesiten recursos computacionais maiores dos límites estándar no Finis Terrae. Os casos executaranse en cooperación co CESGA. A cada proxecto seleccionado asignaráselle un equipo de soporte de técnicos e investigadores do CESGA para facilitar a migración e execución do caso singular.

Poderán participar os grupos de investigación ou investigadores de todas as universidades españolas e portuguesas, centros do CSIC, centros de investigación ou tecnolóxicos radicados en Galicia e calquera empresa con centro de traballo en Galicia que conte cun laboratorio de I+D+i.

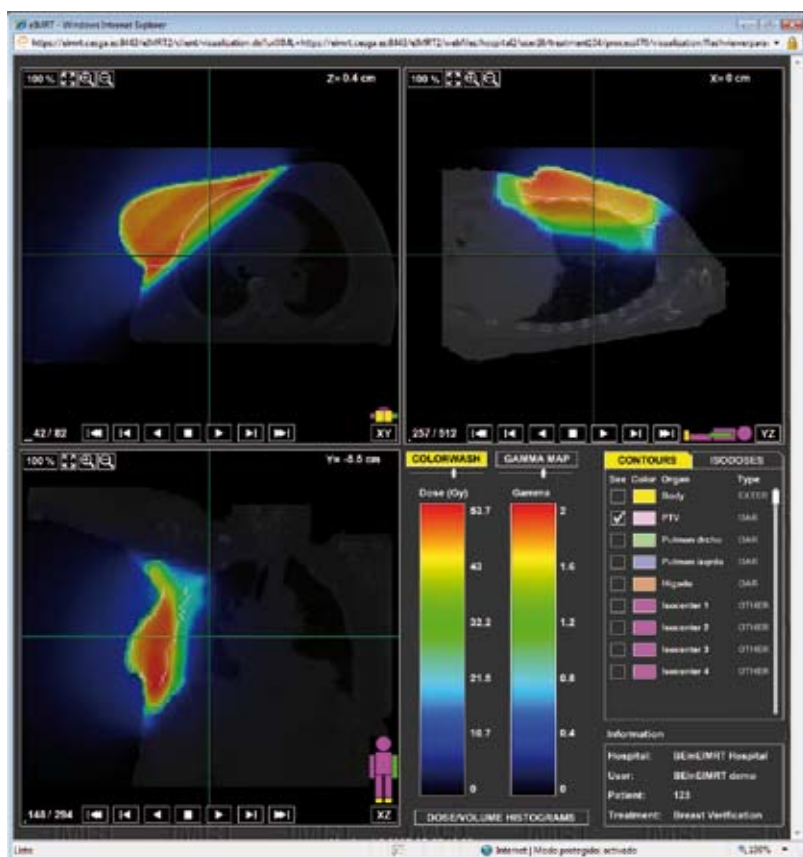
Seleccionaranse aqueles casos con evidente interese científico-técnico que requiran unha grande infraestrutura como o Finis Terrae e que non se poidan resolver coa infraestrutura de cómputo habitual dun grupo de investigación nun tempo razoable. O software empregado debe ser de dominio público ou de licenza libre para I+D, ou de desenvolvemento do propio grupo.

Para coñecer os detalles e esixencias técnicas (paralelización, esixencias de memoria e capacidade, software a empregar etc.) pódense poñer en contacto cos membros do Departamento de Aplicacións e Proxectos do CESGA (aplicacions@cesga.es).

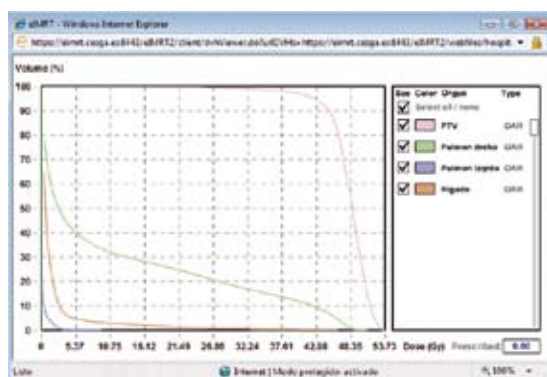


BEinEIMRT: Mellorando a planificación en radioterapia con GRID

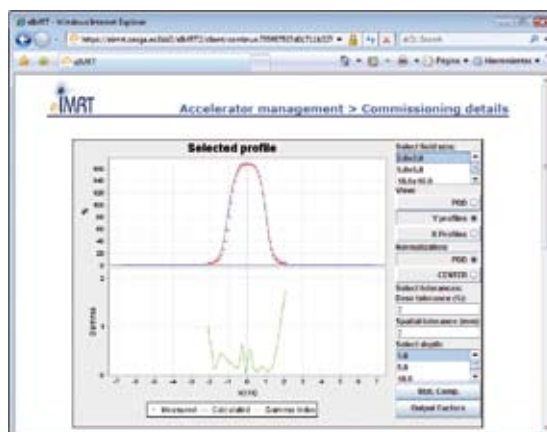
O cancro é unha das principais causas de morte en Europa e a súa incidencia medrará nos próximos anos. No ano 2000, 10 millóns de persoas no mundo desenvolveron un tumor, 6.2 millóns faleceron por esa causa.



Mapa de doses para un paciente con cancro.



Histograma de volume de doses 1



Histograma de volume de doses 2

Por Andrés Gomez Tato
Administrador de Aplicacións e Proxectos

Moitos casos de cancro teñen cura na actualidade. Un dos tratamentos mais frecuentes é a radioterapia que, soa ou combinada con outras técnicas, consegue altas taxas de erradicación dos tumores. Segundo oncólogos españois reunidos en Elche, Alicante, “a radioterapia é, despois da cirurxía, o tratamento que mais cura o cancro”.

Para axudar aos radiofísicos a planificar a aplicación do tratamento prescrito, o proxecto e-IMRT (<http://eimrt.cesga.es>) desenvolveu ferramentas que fan uso intensivo da computación: a verificación virtual dun tratamento utilizando técnicas Monte Carlo e a busca usando opti-

mización do mellor tratamento posible. A plataforma está deseñada de forma flexible e no futuro poderá incorporar novos servizos computacionais remotos.

O proxecto usa tecnoloxías GRID para acceder a recursos adicionais cando os propios son insuficientes. Para amosar as posibilidades desta tecnoloxía, o proxecto europeo BEinGRID (<http://www.beingrid.eu>) incluíu a e-IMRT como un dos seus experimentos de negocio. O experimento conta coa participación da USC, a UVIGO, a Fundación IDCHUS e a Complutense de Madrid.

e-IMRT integrará e validará ferramentas baseadas en GRID: a negociación de acordos de calidade de servizo ou Service Level Agreement (a través do compoñente SLA-Negotiation) e a

seguridade de acceso a servizos WEB integrando a solución de Vordel (que xestiona políticas de seguridade). Tamén incluírá como xestor de traballos multiplataforma o middleware español GridWay, que será estendido cun módulo para negociar recursos adicionais a través da solución SLA Negotiation. O acceso de e-IMRT a Gridway farase a través do estándar DRMAA.

Os cambios realizados permitirán garantir o tempo de resposta dos seus servizos e-IMRT. Así, poderase verificar un tratamento en poucas horas (hoxe tarda a case un día) ou, en poucos minutos, buscar un tratamento axustado ás prescricións. Todo, usando recursos remotos coa seguridade necesaria dos datos, sen comprometer a intimidade do doente.

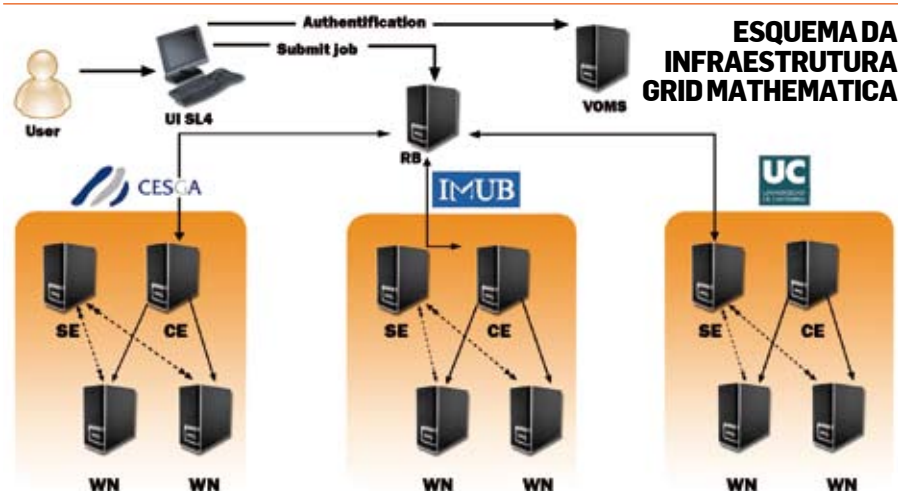
Grid Mathematica: unha realidade

Esta actividade, que forma parte do proxecto Consolider Ingenio Mathematica, nace para crear unha infraestrutura GRID permanente para os investigadores en Matemáticas. O CESGA colaborou coas Universidades da Coruña, Barcelona, Cantabria e Santiago de Compostela.

Por M^a Teresa Sánchez Rúa
Técnico Superior de Proxectos, CESGA

A primeira fase, finalizada xa con éxito, consistiu en crear a primeira Organización Virtual (VO) dedicada exclusivamente ás matemáticas: “imath.cesga.es”, dentro do proxecto europeo EGEE. Ademais para demostrar que é posible utilizar GRID, realizouse unha validación de concepto executando tres casos prácticos (asociación enfermidade-xenotipado, meteoroloxía e optimización) de interese en matemáticas e computación.

Os resultados obtidos nos tres casos indican a grande utilidade da infraestrutura GRID para os investigadores en matemáticas; a tecnoloxía GRID adáptase ás necesidades de



computación de moitos tipos de problemas matemáticos, fundamentalmente aqueles que necesitan moitas tarefas independentes. O esforzo que leva consigo a adaptación dos códigos

a GRID é amplamente compensado polos beneficios derivados de compartir infraestrutura. Esta experiencia ábrese agora a todos os investigadores en Matemáticas de Europa.

ADAPTACIÓN DOS SVMs AOS ESTUDOS CASO-CONTROL CON DATOS XENÉTICOS PROCEDENTES DE SNPs (UDC E USC)

Un dos retos máis importantes xurdidos dende a finalización da secuenciación do Xenoma Humano é a identificación dos polimorfismos xenéticos (SNPs) involucrados na aparición de enfermidades complexas.

Os SNPs son un descubrimento relativamente recente no campo da bioloxía molecular, responsables de arredor o 90% da variabilidade xenética entre humanos. Grupos das Universidades de Santiago e da Coruña están a utilizar técnicas estatísticas para identificar estas variacións. A necesidade de uso de técnicas GRID xorde da combinación de tres factores: o uso da técnica SVMs (moi esixente computacionalmente), a adaptación que se realizou a datos xenéticos procedentes de SNPs e o tamaño da batería de simulacións. Estes tres factores fan imposible executar estes métodos en ordenadores estándar seguindo as canles comúns.

SIMULACIÓN MONTE CARLO DA SENSIBILIDADE DO CLIMA (UC)

Realizadas 150 perturbacións de SST para o fenómeno El Niño durante 1997-1998. Produtividade: un día de execución no Grid equivale a 85 días nunha CPU, Corroborando a idoneidade do GRID para experimentos matemáticos paramétricos.

O obxectivo é estudar a resposta da atmosfera (en particular a precipitación) a condicións máis ou menos extremas do fenómeno de El Niño (quentamento/arrefriamento anómalo da superficie do océano) na zona do Pacífico tropical. É necesario xerar múltiples realizacións do modelo de clima para a caracterización estatística das incertezas existentes na predición de precipitacións. O GRID ofrece unha aproximación ideal para a súa resolución xa que é necesaria a execución de moitas simulacións independentes que resultan de variar os valores dun parámetro nun rango dado. A posibilidade de almacenamento para análise posterior é outra das súas vantaxes.

ESTIMACIÓN DE PUNTOS DE FEKETE (UPC)

Executado en GRID para 482 puntos e 3000 configuracións iniciais, utilizando 30 CPUs nun tempo de 210 minutos. Nunha única CPU serían necesarios 4500 minutos.

Recentemente, o grupo VARIDIS desenvolveu algoritmos para a minimización de funcionais de enerxía potencial dependentes das distancias relativas entre N puntos baixo restricións xerais. Os problemas que se encadran neste contexto teñen aplicacións nunha grande variedade de ramas da Física, a Bioloxía, os Métodos Numéricos e a Teoría da Complexidade Computacional. Para estudar as propiedades dos devanditos algoritmos para distintas xeometrías e enerxías é necesario realizar unha grande cantidade de experimentos numéricos e o conseguinte tratamento estatístico dos resultados.

OS RESULTADOS DESTA ACTIVIDADE PRESENTÁRONSE EN DOUS CONGRESOS INTERNACIONAIS:

- M.T. Sánchez, R. Cao, J. Fernández, M. García-Magariños, F. García-Torre, J. M. Gesto, A. Gómez, W. González-Manteiga e J. M. Gutiérrez. imath.cesga.es, the VO for the European mathematicians. 2nd Iberian Grid Infrastructure Conference, Porto (Portugal), do 12 ao 14 de Maio de 2008.
- R. Cao, M. García-Magariños, W. González-Manteiga. Support Vector Machine Adaptation to Biallelic SNP Data. XXIVth International Biometric Conference University College Dublin, Dublín (Irlanda), do 13 ao 18 de Xullo de 2008.

Unha nova 'constelación' na cidade

No contexto do seu plan estratéxico, o CESGA prevé seguir medrando no seu labor tecnolóxico, investigador e de servizos de cálculo intensivo e comunicacións avanzadas á comunidade investigadora. Pero este desenvolvemento esixe dun espazo adoitado aos novos requerimentos.

O 1 de decembro o conselleiro de Innovación e Industria, Fernando X. Blanco Álvarez, e o coordinador institucional do Consejo Superior de Investigaciones Científicas en Galicia, Uxío Labarta, presentaron no CESGA o fallo do xurado do concurso de ideas para a construción do novo edificio que albergará o CESGA recoñecido como Infraestructura Científico Tecnolóxica Singular do Estado, así como Centro de Investigación de Excelencia en Ciencia Computacional.

O PROXECTO GANADOR

O xurado considerou especialmente a calidade da proposta arquitectónica. Trátase dun conxunto que, aprofundando na integración na contorna, crea per se, pola súa imaxe, paisaxe; engade valor de paisaxe á contorna a través dunha axeitada reflexión en relación a visión que do edificio se poder ter dende o tecido de infraestructuras urbanas, ademais de acadar un valor como peza arquitectónica en si.

Considerouse igualmente a importancia da situación proposta para a sala de ordenadores e servizos comúns así como o valor simbólico e flexible que esta situación aporta ao edificio.

Dende un punto de vista espacial, considerouse moi atinada a definición dunha estrutura que configura a flexibilidade e versatilidade da proposta. Tamén se valora a posición dos espazos destinados a comunicacións e os recorridos verticais das instalacións así como as posibilidades de ampliación.

Igualmente, valorouse a accesibilidade aos espazos, especialmente en relación á tecnoloxía destinada.

O arquitecto valenciano Carlos J. Meri Cucart, resultou gañador do concurso de ideas e opta agora á redacción do proxecto técnico e á dirección de obra do edificio.

O xurado, con representantes do CESGA, do Colexio Oficial de Arquitectos de Galicia (COAG) e varios vocais designados a proposta do CESGA, do COAG, da Consellaría de Vivenda e Solo e dos propios concursantes, seleccionaron o proxecto de Meri pola súa calidade arquitectónica e a súa integración na paisaxe, a funcionalidade e accesibilidade do edificio, así como pola flexibilidade e versatilidade da proposta espacial.

Características do edificio. O complexo, que estará ubicado no Parque Empresarial de Santiago de Compostela na Sionlla, ocupará unha superficie construída de 11.105 m². Contará coas últimas tecnoloxías dispoñibles e permitirá aloxar a máis de 200 investigadores e tecnólogos, así como aos

supercomputadores.

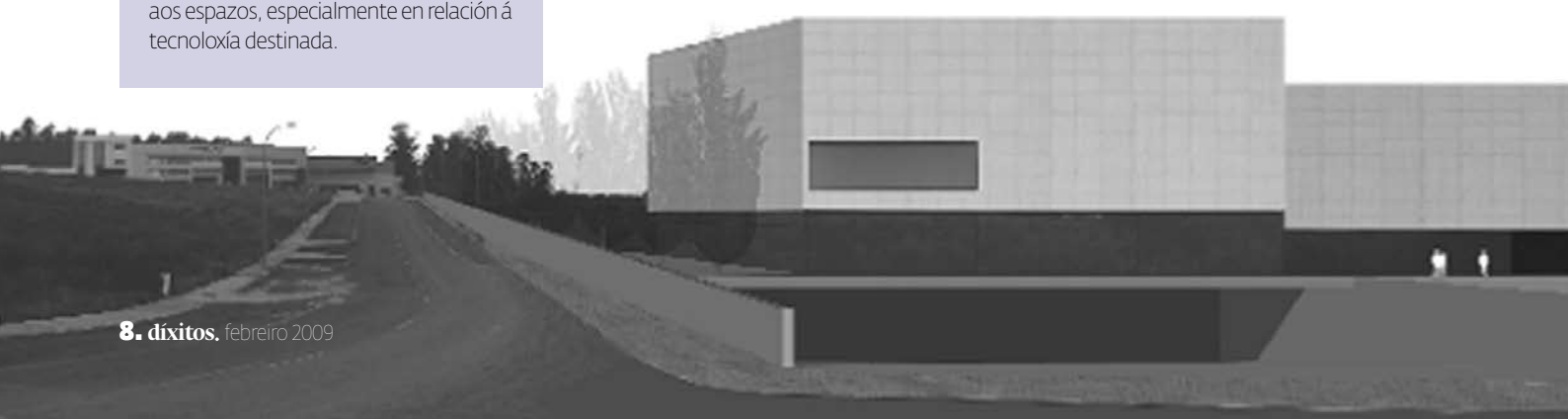
A proposta gañadora estrutúrase en dúas edificacións que ocupan a cuarta parte da superficie da parcela. O edificio principal contará con espazos de usos comúns, como o auditorio, biblioteca, sás de xuntas, guardería, cafetería e conserxería, coa finalidade de compartir custos operativos en previsión das ampliacións e novas construcións que se produzan. Así mesmo, terá tres andares e destinarase ás actividades de investigación, tecnolóxicas e administrativas propias do CESGA. Nun segundo edi-



SEGUNDO PREMIO E ACCESITS

O segundo premio recaeu no estudo de arquitectura coruñés Collarte Architects Studio. Do segundo premio, o xurado destacou a distribución espacial xeral, a súa distribución en dous bloques e o esforzo por aportar solucións para a ordenación da tecnoloxía.

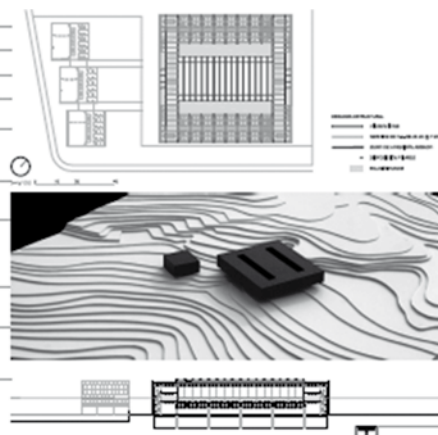
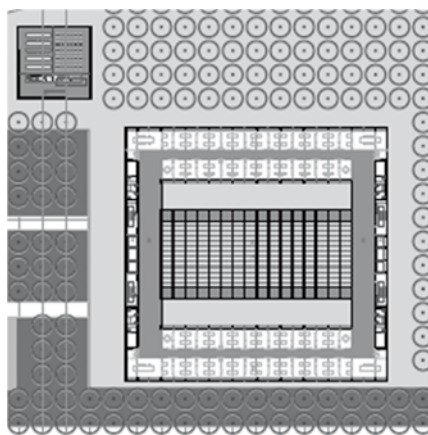
Os tres accésits recaeron nos seguintes equipos: Estudio Santos Zas & Graño Nieto Arquitectos; David Ferrero Antón & Pablo Palomino-Llaguno Calvo e Irisarri-Piñera. Dos tres accésits o xurado apuntou ao valor arquitectónico dos conxuntos.



le da estrela. A nova sé do CESGA

ficio ubicaranse as infraestruturas de supercomputación, que disporán dunha superficie de 840 m², ademais de dous sotos para infraestruturas: transformadores, grupos electróxeños, sistema de alimentación ininterrompida, etc.

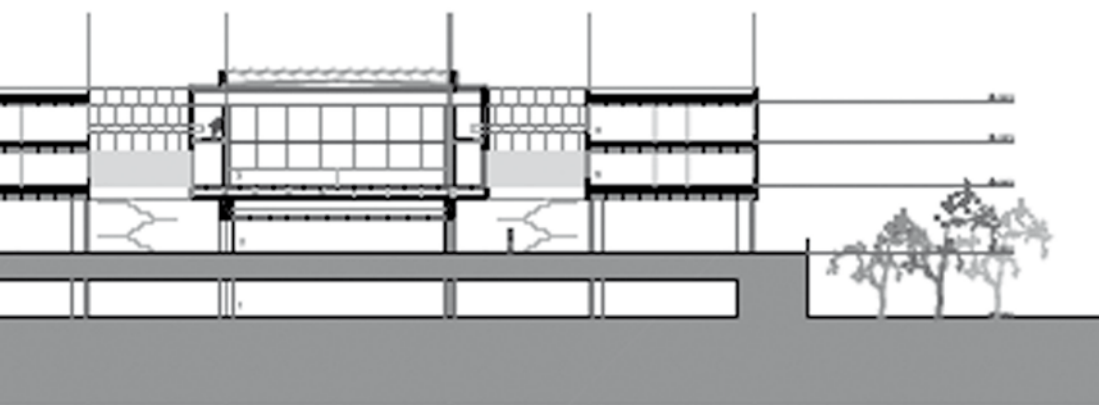
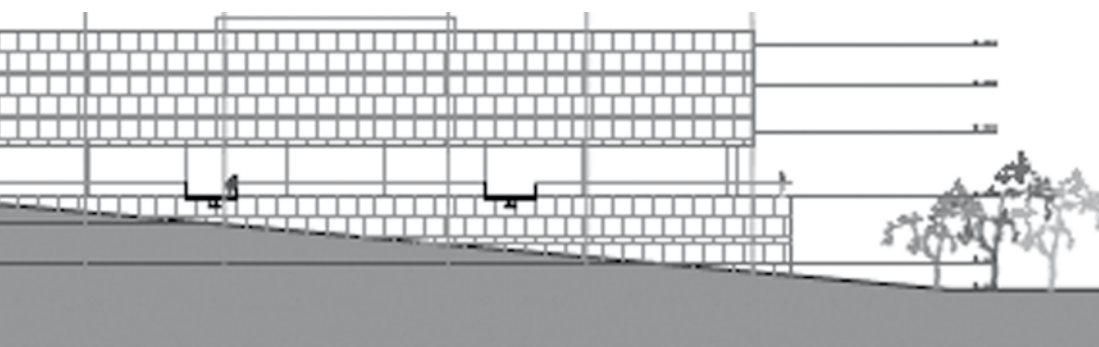
As instalacións están deseñadas para ser facilmente ampliáveis tanto por requerimentos propios do CESGA como para poder aloxar novos centros e institucións de I+D+I na mesma parcela como son o nodo en Galicia do Instituto Español de Matemáticas (IEMATH) e o Consor-



cio de Bibliotecas Universitarias de Galicia (BUGALICIA).

Cofinanciado con fondos FEDER. O orzamento total estimado para a construción do edificio é de 25,5 millóns de euros,

incluíndo a compra do terreo, a execución da obra e a dotación tecnolóxica do novo edificio. Trátase dun investimento conxunto ao 50% da Consellaría de Innovación e Industria e o Consejo Superior de Investigaciones Científicas.

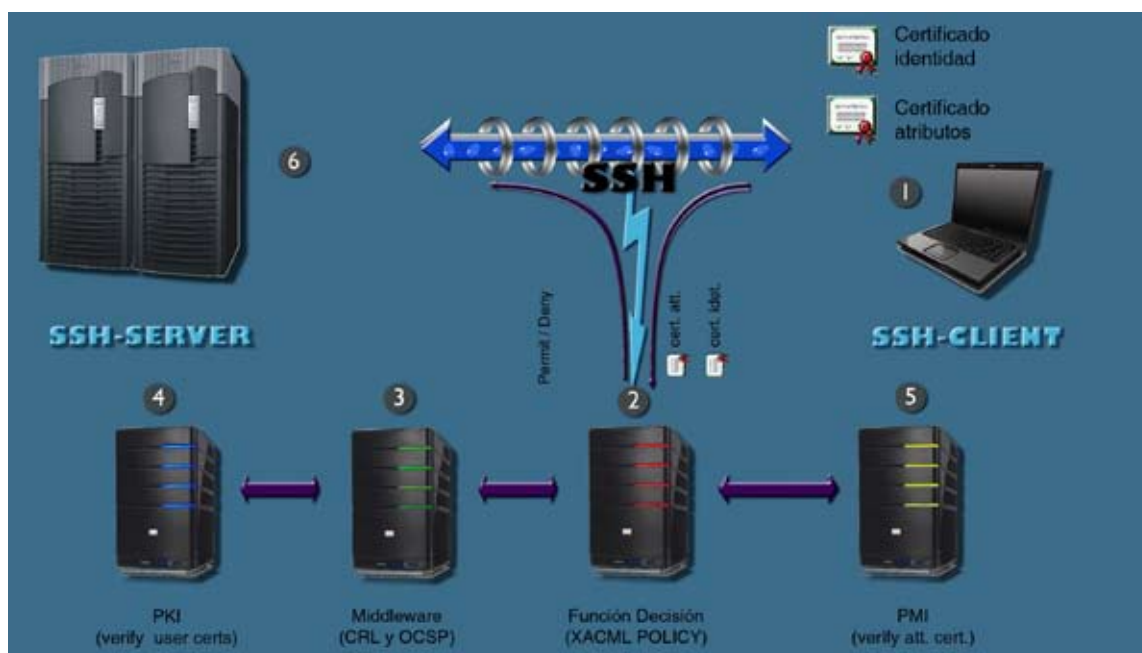


1. Centro de supercomputación. 2. Centro de transformación. 3. Centro de alimentación ininterrompida. 4. Centro de grupos electróxeños. 5. Centro de climatización. 6. Centro de distribución eléctrica. 7. Centro de distribución de gases. 8. Centro de distribución de agua. 9. Centro de distribución de residuos. 10. Centro de distribución de residuos líquidos. 11. Centro de distribución de residuos sólidos.



Acceso SSH con certificados de atributos: a nova versión libre do CESGA

A conexión segura, cara as máquinas, utilizada en moitos centros de supercomputación de todo o mundo como o CESGA, é o SSH. Hoxe en día SSH está presente tanto no mundo académico como o empresarial, no que o acceso aos servizos da rede necesita ser o máis seguro posible.



Secuencia acceso SSH xunto coa verificación de certificados de usuario e atributos

Por Víctor Fernández Albor
Técnico de Aplicacións, CESGA

Existen necesidades que non están implementadas no SSH na actualidade. Por exemplo, os dereitos dun usuario para acceder ao sistema nun momento dado, segundo a política de acceso que poida ter a organización. A xestión de políticas é unha parte moi importante, xa que é o propio organismo quen ten o poder de decisión en todo momento sobre o tipo de usuario que poderá acceder aos recursos dispoñibles.

Outra necesidade hoxe non cuberta por SSH é a identificación da persoa, como integrante dunha entidade, cun rol característico na mesma. SSH non aporta Certificados de Atributos asociados a un certificado de usuario. Para solucionar estas carencias, o CESGA desenvolveu unha nova versión a través da inclusión dun novo protocolo de identificación e autentificación baseado en certificados de identidade e mais de rol. A solución é completamente transparente ao usuario final e permite ao

proveedor do servizo aplicar políticas de acceso segundo o estándar XACML.

Que cambia nesta nova versión?

Na nova versión realizada polo CESGA, sobre openSSH (a versión libre do SSH), o usuario necesita un certificado de identidade (xerado por unha PKI recoñecida) e un certificado de atributos (ou rol) creado nunha PMI (Infraestrutura de Xestión de Privilexios, como a desenvolvida no proxecto IFEC). O novo protocolo, envía ambos certificados, para nun primeiro paso identificar ao usuario, comprobando a validez do certificado de identidade contra o middleware IFEC. Este fai transparente o acceso ao sistema de verificación da PKI asinante do certificado. Logo, verifícase a validez do certificado de atributo usando os servizos IFEC. Finalmente, se ambos son válidos, consúltase a política de uso do servizo para ese rol, establecida polo proveedor do servizo e pola institución do usuario final. A consulta utiliza un servizo baseado en XACML desenvolvido polo CESGA. O novo servizo de XACML pode utili-

zarse noutros ámbitos. Así, un usuario poderá facer calquera tipo de xestión ou tarefa nunha rede organizativa, outorgando a propia organización estes privilexios a través dun motor de avaliación de políticas de acceso XACML 2.0, que aparte da verificación de certificados, ten en conta os dereitos do usuario para utilizalo recurso. Na infraestrutura IFEC, a propia organización á que pertence o usuario é a encargada de definir quen poderá acceder, a que servizos e que privilexios terá.

E no futuro?

O acceso aos supercomputadores a través de SSH, podería incluír políticas de acceso para os usuarios, que deberán conectarse co seu certificado de identidade e/ou de atributos (ou rol). A validación destes certificados e a garantía da política fixada pola súa organización serán o que permitirá aos usuarios o acceso aos recursos. O novo SSH do CESGA supón unha nova versión do programa, máis segura, máis sinxela de actualizar e coas vantaxes de empregar software libre.

MPI, Communications Protocols, Uncached Data, Performance and You

In the supercomputer Finis Terrae, users can take advantage of two great MPI runtimes, HP MPI and Intel MPI. In both, there are different communications protocols, designed for optimal performance.

By Damián Álvarez Mallón
Applications and Projects, CESGA

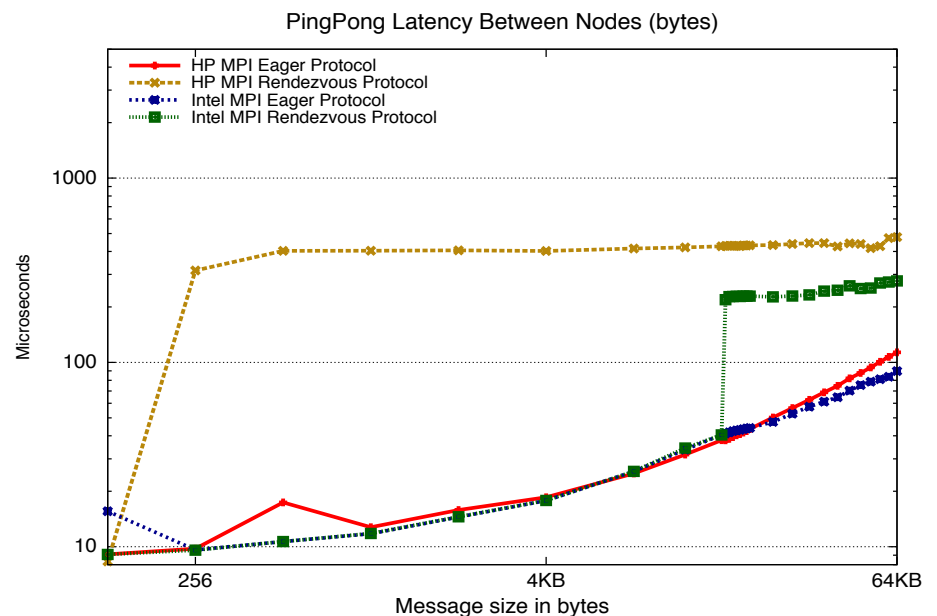
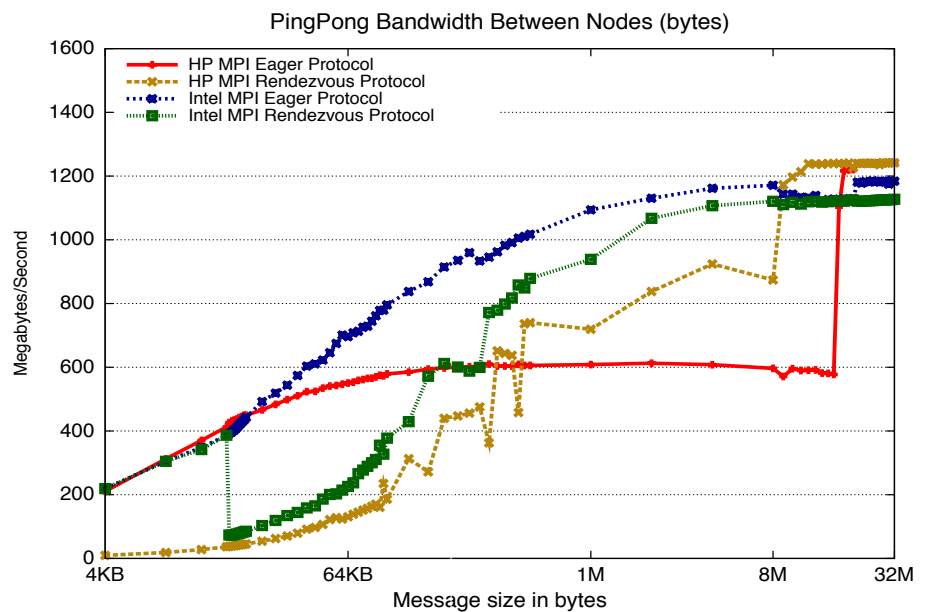
Both HP MPI and Intel MPI use, mainly, two communication protocols: *eager* and *rendezvous*. In the *eager* protocol, the sender simply sends the data to the receiver, who will handle the communication. In the *rendezvous* protocol the sender first sends a communication request with the size of the data to be transferred to the receiver. The receiver sends back an acknowledgement to the sender, who will finally send the real data. Thus, the *eager* protocol is suitable when the data size is small and the latency is important, meanwhile the *rendezvous* protocol is more appropriate for large transfers where the bandwidth is more important than the latency.

The use of the right protocol is critical for communication performance. It is runtime's job to decide which protocol should be used, and most of the time the runtimes do their job quite well. In most cases, when the data about to be sent is in the cache memory, the runtime will choose the right protocol. But the performance is completely different if the data is not in cache. In the figure the reader can see the performance obtained using each protocol, with unidirectional communications and uncached data.

Sadly, the runtimes make decisions in a static way, ignoring the application communication patterns and the data state. This way, by default, for messages smaller than 16 KB the data will be sent in a *eager* fashion, and for messages bigger the *rendezvous* protocol is used. Therefore, there could be a chance for a performance boost with no effort, if the runtime is choosing the wrong protocol for the user application.

HP MPI and Intel MPI allows the user to indirectly force the use of the desired protocol. With HP MPI the *mpirun* com-

INFLUENCE OF THE PROTOCOLS IN MPI COMMUNICATIONS WITH UNCACHED DATA



mand support the flag `-e MPI_RDMA_MSGSIZE=x,y,z`, whereas with Intel MPI the adequate flag is `-env I_MPI_RDMA_EAGER_THRESHOLD x`. For further information about these options please refer to the software documentation. In conclusion: the users whose applica-

tions do communications of uncached data can easily benefit of an extra performance boost in communications. More information about performance of MPI communications can be seen in CESGA technical report CESGA-2009-001.

Rede Galega de Computación de Altas Prestacións

Programación de actividades

Por Gonzalo Iglesias Aguiño
Xestor da Rede GHPC

Actividade da Rede G-HPC neste primeiro ano de existencia centrouse na posta en marcha da súa infraestructura interna e en accións de formación e transferencia de coñecemento, non só realizando e propondo cursos de formación, senon tamén participando na proposta dun novo máster, Máster Interuniversitario de Investigación en Tecnoloxías da Información, único na comunidade autónoma con cursos en especialización en tecnoloxías HPC, que se encontra en fase de validación polo Ministerio para a súa implantación no curso 2009-2010.

Os obxectivos para este ano 2009 perseguen as colaboracións en proxectos conxuntos coa participación de varios grupos da Rede. Neste senso dende a Rede estase a traballar analizando as necesidades dos grupos pertencentes á Rede e detectar as sinerxias latentes, para que as actividades de investigación que se inicien a raíz desde estudo den froito.

CURSOS

Curso de Optimización de Aplicacións Científicas para Sistemas Multinúcleo. Este curso presentase como unha aproximación á programación paralela baseada no análise do código fonte dun programa secuencial co obxecto de descompoñelo nun conxunto de núcleos computacionais que posteriormente permitirán a súa transformación en código paralelo eficiente. Esta aproximación permite paraleli-

zar un programa sen a necesidade de ter un coñecemento detallado do algoritmo e dos métodos de resolución de problemas de cada aplicación. Ademais basease en conceptos xenerais que permiten implementar o programa paralelo en múltiples linguaxes de programación.

Curso de Optimización do Uso da Xerarquía da Memoria.

Este curso ten como obxectivo axudar a comprender o impacto dos accesos a datos sobre o rendemento dos programas, para o cal se da unha introdución ó funcionamento das xerarquías da memoria dos computadores. O segundo obxectivo é ensinar



CURSOS. ONDE. CANDO. CON QUEN

Curso Programación GPGPU (General

Purpose Computation on Graphics Processing Units)

Lugar: CESGA

Data: Febreiro 2009

Duración: 15 horas

Profesores: Margarita Amor López e Emilio Padrón González

Curso de Optimización de Aplicacións Científicas para Sistemas Multinúcleo

Lugar: CESGA

Data: Marzo 2009

Duración: 15 horas

Profesor: Manuel Arenaz Silva

Curso de Optimización do Uso da Xerarquía da Memoria

Lugar: CESGA

Data: Marzo 2009

Duración: 15 horas

Profesor: Basilio Fraguela

as técnicas de programación e de reestructuración dos códigos que permitan facer un uso óptimo de esta xerarquía, tanto en programas secuenciais como en aplicacións paralelizadas en sistemas de memoria compartida.

Curso Programación GPGPU. (General Purpose Computation on Graphics Processing Units)

Este curso propón unha introdución á programación das GPUs (Graphics Processing Units) para a computación de propósito xeral. Presentarase a arquitectura das GPU e as principais linguaxes de programación das GPU. Tamén se presentarán os problemas da programación e as técnicas de optimización para solucionarlos. Por último proporáanse algúns casos de estudo para os que se usará CUDA.

WORKSHOP

A Rede organizará o segundo Workshop sobre Aplicacións da Supercomputación o día 17 de Setembro e que este ano celebraráse na Facultade de Informática da Universidade da Coruña. Este workshop coincidirá coa celebración das XX Xornadas de Paralelismo que terán lugar entre os días 16 a 18 de setembro de 2009 en A Coruña.

CONFERENCIA

A Rede é patrocinadora no 7º Congreso Español de Dispositivos Electrónicos e financia unha interesante conferencia que terá lugar o día 11 de Febreiro de 2009 as 10:30 impartida polo profesor Asen Asenov. O título da conferencia é "Simulation of statistical variability in NanoCMOS devices".

MÁIS INFORMACIÓN: <http://ghpc.udc.es>

O acordo entre CESGA e DGT beneficiará á comunidade científica galega

O pasado 15 de decembro o Centro de Supercomputación de Galicia, CESGA, e a Dirección Xeral de Tráfico, DGT, asinaron un convenio de colaboración en reciprocidade por 10 anos para o uso de infraestruturas de interese común en proxectos concretos.

A DGT conta con canalizacións e galeirías de servizo ao longo da rede de infraestruturas de estradas en Galicia, de interese para o desenvolvemento da rede de comunicacións que o CESGA xestiona e da que se benefician de modo directo as comunidades académico-científicas instaladas en Galicia. O CESGA conta con recursos de interese para a DGT para o desenvolvemento de modelos de simulación e almacenamento masivo de datos aplicados á súa actividade.

A utilización das infraestruturas que a DGT achega a este convenio facilitará a evolución, de forma eficiente no tocante a aspectos técnicos e económicos, da Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia cara á rede de fibra escura, xa en marcha.



O Cesga interconectará RedIRIS NOVA coa rede portuguesa

A finais do ano 2009 estará operativa a Rede de Fibra Escura para a conexión entre a Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia (RECETGA), a Rede Académica Española (RedIRIS) e a Rede Académica Portuguesa (RCTS), que fortalecerá as redes de Ciencia e Investigación. Non obstante, e para comezar á maior brevidade posible a prestación de servizos de comunicacións avanzadas entre as Redes Científicas portuguesa, galega e española, establecerase de xeito inmediato e provisional, unha conexión Gigabit Ethernet entre Oporto e o CESGA en Santiago.



Pedro J. Pastor del Castillo, Xefe Provincial de Tráfico de A Coruña e Coordinador dos Centros Territoriais da DGT en Galicia, Salustiano Mato de la Iglesia, Presidente do CESGA e Director Xeral de I+D+i da Consellería de Innovación, e Javier García Tobío, Director Xerente do CESGA, na sinatura do convenio, na se do CESGA.

A Consellería de Innovación e Industria da Xunta de Galicia, a Fundación Centro Tecnolóxico de Supercomputación de Galicia, CESGA, o Ministerio de Ciencia e Innovación (MCINN), a Secretaría de Estado de Telecomunicaciones y para la Sociedad de la Información (SETSI), do Ministerio de Industria e a entidade

pública empresarial Red.es, asinaron o pasado 12 de decembro o convenio de colaboración que establece as canles de cooperación e os acordos técnicos necesarios entre CESGA, como entidade xestora de RECETGA e Red.es, de RedIRIS, para despregar a rede de fibra escura que permita unir as redes de ambos países.

O trazado de infraestrutura de rede de 150 kilómetros, discorrerá entre o Punto de Conexión da RCTS na ponte internacional sobre o río Miño co Punto de Presenza da RedIRIS en Galicia, situado no Nodo Central de RECETGA, na sé do CESGA en Santiago.

A dotación total do conxunto é de 3.400.000 euros, financiando Red.es o 70% e a Consellería de Innovación e Industria, a través da súa Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación, o 30% restante. A titularidade da Rede de Conexión corresponde ao Ministerio de Ciencia e Innovación e a súa xestión técnica e operativa á empresa pública Red.es, xunto co CESGA. Este último terá dispoñibilidade do 30% da infraestrutura adquirida ao amparo deste convenio, para uso propio de RECETGA. A conexión das redes académicas garantirá unha conectividade internacional de alta capacidade permitindo potenciar proxectos interrexionais e transfronteirizos, facendo posible a creación de polos de excelencia en torno a aqueles centros de I+D xa existentes ou que xurdan nun futuro. Galicia colabora así dun modo decidido no despregue da RedIRIS Nova, que interconectará no 2011 todos os seus puntos de presenza a través de fibra escura.

CESGA pon a súa experiencia ao dispor das infraestructuras de cómputo de nova creación do Estado

Nos últimos meses o CESGA recebeu frecuentes visitas de diversas institucións do estado que comparten o interese en poñer ao dispor de científicos e tecnólogos novas plataformas de cómputo. Responsables e técnicos destas institucións acuden ao CESGA co ánimo de coñecer a súa experiencia en implantación e administración de infraestructuras auxiliares, plataformas HPC, HTC, GRID, sistemas de almacenamento, xestión de servizos aos usuarios, etc. Entre as institucións que se achegaron ao centro se atopan outros centros de supercomputación de nova creación e institucións relacionadas de toda España, que veñen buscando coñecer a experiencia dos técnicos.

Así, visitou o CESGA unha delegación de membros da Junta de Extremadura, que se atopa en fase de posta en produción do supecomputador Lusitania.

Tamén, a Axencia de Innovación do Goberno de Canarias visitou o centro xa que ten previsto crear unha infraestrutura de cálculo científico.

O Parque Científico de Murcia visitou as instalacións do supercomputador, que ven de crear un novo centro de supercomputación.

Abrindose ás instalacións de nova creación no Estado, O CESGA pretende facilitar, na medida das súas posibilidades á consolidación do ecosistema de computación en España.



Salustiano Mato, Presidente CESGA (2º pola esquerda) e Javier García Tobío, Director do CESGA (1º pola dereita) xunto aos outros galardoados nos Premios a Excelencia de APPLUS

Recoñecemento á excelencia para o CESGA

O CESGA recibiu o Premio APPLUS+ á Excelencia na xestión da calidade, que distingue ás organizacións de diversos sectores da Eurorrexión Atlántica Galicia – Norte de Portugal que destacan pola súa aplicación dos principios de excelencia e innovación na xestión da calidade empresarial. Nesta 12ª edición, o CESGA foi galardoado na categoría de Organización non Empresarial.

APPLUS+ é unha empresa líder en certificación e servizos tecnolóxicos, presente nos 5 continentes e que opera en máis de 25 sectores punteiros da economía mundial.

Software libre en ciencia e enxeñaría

XORNADAS DO I-MATH NODO CESGA

O próximo venres 13 de marzo o Nodo CESGA de i-MATH celebrará na Universidade de A Coruña, UDC, a “Xornada de difusión de software libre en Enxeñaría e Ciencias Aplicadas”. Trátase dunha xornada orientada a investigadores, docentes, técnicos de empresas e alumnos de grao e Master, para mos-

trar a gran capacidade actual que ten o software libre para resolver problemas estándar en ciencias e enxeñaría.

Que é o software libre, como se desenvolve, como se distribúe, vantaxes, modelos de negocio, panorámica do software libre existente en ciencias e enxeñaría, etc. serán os temas a tratar, e se traballará con ferramentas de software que se explican nos respectivos cursos de software libre de i-Math, moi testadas e de ampla utilización no contexto académico pero de incipiente uso no ámbito empresarial.

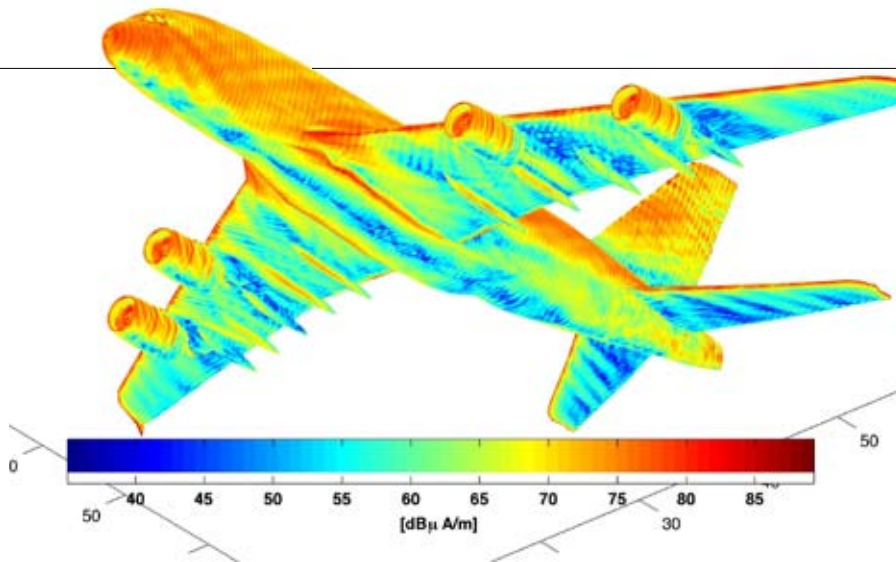
Deste xeito se percorren dende software matemático básico (Octave), ferramentas de propósito xeral (Phyton), ata software máis avanzado con orientación cara á Estatística (R), o Deseño Asistido por Ordenador (Salomé), a Simulación Numérica de diversos procesos físicos que poidan chegar a adaptarse entre eles (Code-Aster, Elmer, OpenFoam...) e o Cálculo de Altas Prestacións (OpenMP).

Se fará especial fincapé nos casos de éxito e na utilidade, dándose ademais cabida a equipos dentro de i-Math que participen resolvendo problemas industriais ou empresariais con ferramentas de software libre.

MÁIS INFORMACIÓN:

<http://mathematica.nodo.cesga.es>





Simulación das ondas electromagnéticas dun Airbus a 380 GH

Finis Terrae facilita a resolución dun problema con 500 millóns de incógnitas



O grupo HEMCUVE composto por Fernando Obelleiro e José Luis Rodríguez da U. de Vigo e Luis Landesa e José Manuel

Taboada da U. de Extremadura, en estreita colaboración cos técnicos do CESGA, voltou a bater o record mundial en simulación electromagnética: 500 millóns de incógnitas, resoltas a principios do mes de xaneiro no supercomputador FINIS TERRAE.

Empregáronse 64 nodos completos do Finis Terrae, 1024 cores (aproximadamente o 42% do supercomputador) e ao redor de 6 TB de memoria RAM. En canto ao tempo, empregáronse unhas 12 horas nos cálculos iniciais (setup), e deixouse iterar unhas 26 horas, ata que o erro residual quedou por debaixo de $5E-2$. A aplicación empregada no reto, HEMCUVE++ é moi eficiente para un número elevado de procesadores, e cunha alta escalabilidade. O Finis Terrae amosou a súa capacidade, comportándose de forma excelente durante o reto, aínda que o uso que se fixo del foi “extremadamente esixente”.

Esta ferramenta pode variar todos os parámetros de operación, o que supón un importante aforro económico e de tempo respecto a probas experimentais, permitindo analizar e predicir o comportamento electromagnético de estruturas de grandes dimensións eléctricas cun luxo de detalles ata agora inabordable. Sen dúbida unha

importante vantaxe competitiva para aquelas industrias con acceso a esta tecnoloxía. un ámbito de aplicación novidoso son radares de automoción, pero tamén o deseño de grandes estruturas dotadas de sistemas de radio como barcos ou avións.



Persoal técnico do CESGA e do Centro de Supercomputación de Murcia durante a visita ao CPD

CESGA amplía as colaboracións en HPC

Nos últimos tempos o CESGA está a manter relacións de colaboración con múltiples institucións como a Universitat de lles Illes Balears, UIB, coa que hai xa asinado un convenio de colaboración mediante o cal os seus investigadores poderán utilizar a infraestrutura de cálculo do CESGA, podendo desplazar ademais persoal para realizar proxectos de investigación conxuntos.

Tamén se recibiron nos últimos tempos visitas de institucións tales como a Fundación Parque Científico de Murcia, cuxo novo supercomputador Ben Arabí, ten previsto a súa posta en funcionamento para o primeiro trimestre deste ano, ou o Centro de Supercomputación de Castilla-León, que iniciará a súa acti-

vidade na primavera de 2009, ou tamén o Centro de Supercomputación de Extremadura, co seu ordenador Lusitania, de inminente posta en marcha.

Ademais, na primeira metade do ano, asinarase un convenio de colaboración coa Czech Technical University of Praga, a primeira universidade tecnolóxica da República Checa.

Cursos no CESGA para usuarios

Como todos os anos, durante o 2008, o CESGA organizou cursos para usuarios dentro do Plan de Actividades Formativas Externas, polos que pasaron ao longo do ano máis de 150 investigadores e tecnólogos, recibindo formación a través deses cursos en diferentes materias. O obxectivo final desta programación anual é que os usuarios do CESGA saquen o maior rendemento posible ás súas aplicacións sobre as plataformas ao seu dispor no Centro, coñecendo as ferramentas e posibilidades destas.

Os cursos foron altamente valorados polos asistentes, e moi demandados de xeito que o interese amosado polos usuarios obrigou a realizar segundas edicións dalgúns cursos.

No ano 2009, o CESGA intensificará a actividade formativa dos seus usuarios con cursos de temáticas similares ás de anos anteriores, xa que cada vez son máis os membros dos grupos de investigación que mostran interese en programación e utilización das ferramentas de computación.

MÁS INFORMACIÓN: Cursos en www.cesga.es

CURSOS IMPARTIDOS NO 2008 DENTRO DO PLAN DE ACTIVIDADES FORMATIVAS EXTERNAS
Curso de Django

HP CMU + General Cluster Overview + Management Tricks
HPSFS

Ferramentas de Desenvolvemento de Intel
Voltaire Technical Training Class

Visión Xeral do Hardware Superdome
Matemática Computacional: Compilación,
Execución e Optimización de Programas

Introdución á programación en MPI
Curso de Fortran

Programación Paralela mediante Directivas
OPENMP

Ferramentas de Software libre para DEBUGGING
Análise do Rendemento de Aplicacións



TURGALICIA
DIRECCIÓN XERAL DE TURISMO

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

© 2008 Hewlett-Packard Development Company, L.P. Todos los derechos reservados. IBM, Intel Itanium, Intel Inside logo, Intel Centrino, Intel Core logo, Colson, Intel Atom, Intel SpeedStep, Banker, Pavilion, y Pavilion II Atom son marcas registradas de Intel Corporation y sus subsidiarias en los Estados Unidos y otros países. Microsoft y Windows son marcas registradas de Microsoft Corporation. Linux es una marca registrada de Linus Torvalds.

Expanding the Frontiers
of
Knowledge

Accelerating Researchers'
Time - to - Solution

Creating Tight Networks
of
Researchers

GALICIA SUPERCOMPUTING CENTRE

CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA

www.cesga.es

Avda. de Vigo s/n | Campus Sur |
15005 Santiago de Compostela, SPAIN
Ph: (34)981 249010 | Fax: (34)981 249008
info@cesga.es