

díxitos



CESGA

NOVAS DO CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA

XULLO 2009



CONSEJO SUPERIOR
DE INVESTIGACIONES
CIENTÍFICAS



XUNTA DE GALICIA
CONSELLERÍA DE
ECONOMÍA E INDUSTRIA



FEDER
FONDO EUROPEO DE
DESARROLLO REGIONAL



DIRECCIÓN

Javier García Tobío

COORDINACIÓN

Fernando Bouzas Sierra

REDACCIÓN

María Piñeiro

COLABORACIÓN

Hugo Gutiérrez de Terán

Sofía Calero Díaz

Balbina Virginia Casas Méndez

Carlos M. Herrera Maliani

Emilio Abad Vidal

Josefa Rey Castiñeira

Manuel Gago

PORTADA E GRAFISMO

Elena Botana

MAQUETACIÓN

Growcom SL

FOTOMECAÁNICA 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

4-5 CESGA: Ferramentas para a ciencia. Usuarios.

6 Data Deluge: diluvio de retos e oportunidades.

7 Entrevista con Adrián Sarasquete, Xerente de VICUS DT.

8-9 Realidade Virtual ao alcance. IDC Galicia.

10 CESGA Computational Science Summer School.

11 Compromiso coa Calidade. Convocamos novos Retos.

12 IBERGRID. Xornadas Ibéricas HPC.

13 Nova Lista TOP 500.

14 Estudo dos materiais arqueolóxicos con datos espaciais (IDE).

Toma posesión o novo presidente da Fundación CESGA



Ricardo Capilla Pueyo, presidente da Fundación Cesga (enriba) e Carmen Peláez Martínez, vicepresidenta.

O pasado día 16 de xullo, Ricardo Capilla Pueyo, director xeral de I+D+i da Xunta de Galicia, tomou posesión do cargo de Presidente do Padroado da Fundación CESGA. Capilla é enxeñeiro de Telecomunicacións pola Universidade Politécnica de Madrid. Durante seis anos ocupou o cargo de director xeral do Parque Tecnolóxico de Galicia, posto ao que chegou tras o seu paso pola tecnolóxica HP e polo Grupo PRISA. Capilla é un convencido da necesidade de mellorar a conexión entre os grupos de investigación do sistema público cos centros tecnolóxicos e coas empresas. Desde a saída do cargo de Salustiano Mato viñase facendo cargo dos asuntos da presidencia, Carmen Peláez Martínez vicepresidenta do CESGA e vicepresidenta de Investigación Científica e técnica do Consello Superior de Investigacións Científicas (CSIC). Carmen Peláez é doutora en Ciencias Biolóxicas e investigadora no Instituto do Frío de Madrid, con 20 anos de experiencia en biotecnoloxía de bacterias lácticas e deseño de cultivos iniciadores para a industria de produtos lácteos fermentados. Directora de varias teses doutorais e autora de numerosas publicacións, así como de varias patentes e resultados de interese tecnolóxico no campo da microbioloxía láctea. Investigadora invitada no NIZO Food Research Institute (Holanda) durante o ano 1986 e na Royal Veterinary Agricultural University (Dinamarca) durante 1992. Xefa do Departamento de Ciencia e Tecnoloxía de Produtos Lácteos no Instituto do Frío entre 1990 e 1998.



José Carlos Mouriño Gallego recollendo o prestixioso premio durante a International Supercomputing Conference (ISC'09), en Hamburgo.



A mellora da calidade de vida e o acceso á educación de pacientes de longa estada, valeulle un premio internacional a e-Hospital.

Recoñecemento internacional á investigación española en supercomputación

O estudo realizado no CESGA **High Scalability Multipole Method. Solving Half Billion of Unknowns**, gaña o prestixioso PRACE AWARD'09

O traballo realizado por investigadores do CESGA, a UVIGO e a UNEX, recibiu o PRACE AWARD'09 ao mellor artigo científico no campo da Supercomputación orientada ao Petascale. O documento presentouse á International Supercomputing Conference (ISC'09) que tivo lugar en xuño en Hamburgo. José Carlos Mouriño Gallego, Técnico de Aplicacións do CESGA, recolleuno en Alemaña en representación dos investigadores que colaboraron no traballo. É a única Investigación 100% europea premiada nesta edición.

O xurado destacou non só o "interese das grandes simulacións electromagnéticas para o deseño de produtos industriais de alta tecnoloxía que integran equipos electrónicos e a súa importancia para comprender e reducir o impacto sobre os seres humanos dos campos electromagnéticos", senón tamén a "complexidade do traballo técnico computacional realizado e a súa aplicación para a resolución de problemas complexos",

que abre o camiño a simulacións maiores e a novos retos computacionais.

O apoio técnico do CESGA aos usuarios favorece o desenvolvemento da investigación xa que, como sinala J. Carlos Mouriño, "En investigación en supercomputación non todo é cuestión de flops ou de euros. Cando o aplicativo HEMCUVE chegou ao CESGA, escalaba ata 12 procesadores. Hoxe en día executouse en 1024 e pode chegar a máis". O equipo humano é fundamental para conseguir o máximo rendemento da investigación científica. "Damos apoio ao usuario ao tempo que desenvolvemos a investigación en supercomputación; que eles fagan a súa ciencia, que da informática nos ocupamos nós".

O estudo desenvolve métodos de alta escalabilidade en electromagnetismo computacional para a súa aplicación en supercomputadores de moi altas prestacións. Por este método, o grupo de investigadores premiado conseguiu

eHospital recibe o European Lifelong Learning Award

O Proxecto e-Hospital, no que participaron o CESGA, a USC e o Complexo Hospitalario Universitario da Coruña recibiu o "European Lifelong Learning Award" da Comisión Europea (CE) como un dos tres mellores proxectos Grundtvig en Europa. Financiado durante os anos 2005-2008 pola CE dentro do programa Socrates/Grundtvig, e coa participación de institucións de seis países europeos, o seu obxectivo foi crear e avaliar a viabilidade da formación continua mediante formación en liña para pacientes adultos hospitalizados de longa duración.

o récord mundial en electromagnetismo computacional dando solución ao problema máis grande xamais analizado (500 millóns de incógnitas), resolto o pasado mes de xaneiro no Supercomputador FINIS TERRAE do CESGA.

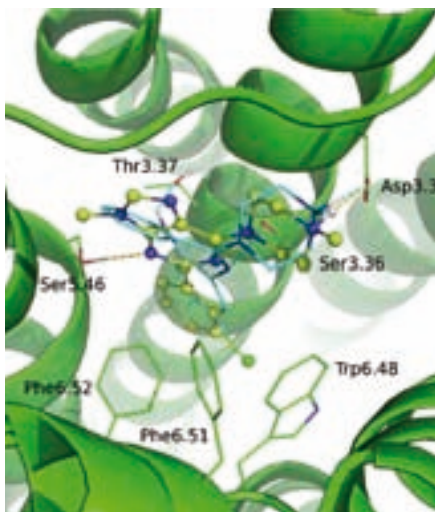


Investigador:
Hugo Gutiérrez Terán
 Organización:
Fundación Pública Galega de Medicina Xenómica
 Departamento:
Medicina Molecular (Sección b de modelado e simulación de moléculas biolóxicas)
Creación: FPGMX creada en 2004. Incorporado como IP á Fundación en Xaneiro de 2008
 Membros: 3 membros na miña sección, 15 membros na FPGMX
Colaboracións:
 USC. Universidade de Uppsala. Universidade Pompeu Fabra. Universidade de Florida. Universidade Autónoma de Barcelona

Liñas de investigación:

Modelización e simulación de Macromoléculas biolóxicas e as súas interaccións con ligandos. Deseño de fármacos asistido por ordenador. En liñas xerais, traballamos metodoloxías de modelización molecular, simulación molecular (ancoraxe de ligandos ou docking e simulacións de dinámica molecular) e cribado virtual na busca de novos fármacos.

A imaxe corresponde a un proxecto de descubrimento de novas estruturas químicas como potenciais antipsicóticos. Móstrase un dos compostos da nosa quimioteca (bólas e paus) superposto co antipsicótico de referencia, Clozapina (paus) na estrutura do receptor de serotonina 5-HT_{2A} (verde, lazos). Extraído de Gutiérrez-Terán e col. QSAR & Combinatorial Sciences, 2009 (doi: 10.1002/qsar. 200860198)



Estamos interesados en novos protocolos de cribado virtual que inclúan simulacións de dinámica molecular e cálculos de enerxía libre como estimación á afinidade dos compostos pola súa diana farmacolóxica. Outro foco de interese é predicir o efecto de mutacións na estrutura de proteínas e na súa afinidade por ligandos. En concreto, temos actividade nos seguintes sistemas biolóxicos: i) receptores adaptados a proteínas G, en particular receptores de adenosina; ii) proteasas aspárticas. iii) También introducímonos, a través de colaboracións con outros grupos, noutros sistemas como canles de sodio/potasio ou fibras de péptido beta-amiloide, ambos os dous relacionados con procesos neurodexenerativos.

Páxina web:
<http://web.usc.es/~hugogdt>

Relación co CESGA:

Comecei a utilizar os servidores do CESGA dende a miña incorporación como investigador en Galicia, en setembro de 2006. Dende entón utilicei principalmente os ordenadores SVGD e FINISTERRAE. Principalmente o software utilizados son programas de dinámica molecular (algúns dos cales tivemos que compilar especificamente), ou a suite de modelización molecular Schrödinger. Manteño un estreito vínculo co CESGA a través da Rede Galega de Bioinformática, de cuxo comité xestor formo parte.

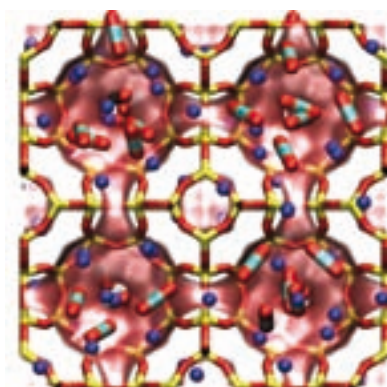


Investigadora:
Sofía Calero Díaz
 Organización:
Universidad Pablo de Olavide (colaboración co Instituto Nacional del Carbón, INCAR-CSIC)
 Departamento:
Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales
 Creación:
 O grupo RASPA de Simulación en Materiais creouse en 2007.
 Membros: O grupo está formado por oito membros, aínda que nesta colaboración só participamos dous.
Colaboracións:
 Colaboración co INCAR, CSIC Oviedo, Universidade de Amsterdam, Universidade de Delft, Universidade Católica de Lovaina, Universidade libre de Bruxelas, Universidade de Berkeley, Universidade de Northwestern, entre outras.

Liñas de investigación:

Simulación molecular en sistemas confinados; Estudo de procesos de adsorción e transporte molecular en materiais porosos; Estudo de procesos de separación; separación de propano e propileno, separación de dióxido de carbono e metano, purificación de gas natural); Estudo de procesos de captura e almacenamento (fundamentalmente de hidróxeno e de dióxido de carbono).

Imaxe extraída do noso propio traballo. Representa unha ceolita tipo A con catións sodio e con dióxido de carbono no seu interior. Foi realizada polos membros do grupo e unha imaxe igual, pero noutras cores, publicouse no artigo mencionado no apartado anterior.



no). Estudos de separación de isómeros (estruturais e enantiómeros) usando materiais porosos (ceolitas e MOFs).

Páxina web:
http://www.upo.es/depa/webdex/quimfis/miembros/Web_Sofia/Sofia.htm

Relación co CESGA:

A relación co CESGA iniciouse no ano 2008 por medio dunha colaboración activa que mantemos co grupo do Dr. Parra e a Dra. Ovin (INCAR, CSIC). Con este grupo levamos a cabo estudos de adsorción en materiais porosos (principalmente ceolitas e MOFs). Estudamos estes procesos a nivel molecular e desenvolvemos mecanismos e campos de forza que nos permitan reproducir de forma efectiva e barata os resultados experimentais. Para iso utilizamos o código que se desenvolveu dentro do noso grupo (código RASPA) e usamos os servizos do CESGA para correr parte das nosas simulacións. O soporte e apoio técnico do CESGA traducíuse xa na publicación: *Transferable Force Field for Carbon Dioxide Adsorption in Zeolites*. A. García-Sánchez, C.O. Ania, J.B. Parra, D. Dubbeldam, T.H.J. Vlugt, R. Krishna, and S. Calero. *Journal of Physical Chemistry C*, 113, 20, 8814-8820, (2009).



Investigadora:
Balbina Virginia Casas Méndez

Organización:
Universidade de Santiago de Compostela, USC

Departamento:
Estatística e Investigación Operativa. Grupo: GI-1914-Modelización Estatística e Aplicacións.

Creación: Xuño de 2006
Membros: 28 membros da Universidade de Santiago
Colaboracións: Universidade de A Coruña e Universidade de Vigo entre outras

Liñas de investigación:

Modelos de predición, Datos categóricos, Técnicas de mostraxe Bioestatística, Técnicas de remostraxe, Series de tempo, Análise Multivariante, Modelos de regresión. Inferencia non paramétrica, Datos censurados, Xeoestatística, Equilibrio en xogos non cooperativos, Xogos cooperativos, Votación e índices de poder, Asignación de custos e deseño de tarifas, Aplicacións da teoría de xogos, Modelos interactivos da IO, Decisión e programación multicriterio e multinivel, Programación matemática

Páxina web:
<http://eio.usc.es/>

Relación co CESGA:

No marco do proxecto "Transferencia tecnolóxica no ámbito das aplicacións da investigación operativa na xestión das cooperativas agrarias" (CONS-C2-0060), financiado por Proxecto Enxeño Mathematica (i-math), 18 meses (2007/2008), utilizamo-

so SUPERDOME do CESGA para executar problemas de optimización coa aplicación X-Press. Se considerou un problema de decisión acerca de ordes de propietarios e rutas de parcelas a seguir por unha cultivadora de forraxe nunha cooperativa agrícola na que cada socio ten unha petición acerca do instante en que quere que a cultivadora comece o traballo na súa propiedade, aínda que admite un intervalo de adianto ou demora. Propúxose un modelo de programación lineal binaria para minimizar custos. A facturación polo tempo de traballo da cultivadora é por períodos curtos de tempo de ata 5 minutos. Este feito incrementa enormemente o número de variables e de restricións e provoca que resolver o modelo de modo exacto, con datos reais, é moi custoso computacionalmente. Por iso introducíronse e implementáronse dous algoritmos heurísticos que reducen moito o tempo computacional. Aplicáronse ao caso real da cooperativa lucense de "Os Irmandiños", cun gran número de socios e parcelas, nas campañas de colleita de herba e millo. Os resultados numéricos mostraron que cos heurísticos, ademais de automatizar o proceso de planificación das máquinas, se poden resolver de xeito eficiente problemas de gran tamaño cun esforzo computacional razoable. Referencia: "A model and two heuristic approaches for a forage harvester planning problem: a case study". Luisa Carpenle, Balbina Casas-Méndez, Cristina Jácome y Justo Puerto. Aceptado



Arriba, Grupo de Investigación do Departamento de Ecología Evolutiva, Estación Biológica de Doñana. Abaixo, interrelación entre plantas e insectos.



Investigador:
Carlos M. Herrera Maliani

Organización:
Consejo Superior de Investigaciones Científicas, CSIC

Departamento:
Biológico de Doñana, Departamento de Ecología Evolutiva

Creación: Hai aproximadamente 20 anos.
Membros: 12 membros (Consejo Superior Investigaciones Científicas, CSIC).

Liñas de investigación:

Ecoloxía e evolución das relacións planta-animal. Neste momento, o noso obxectivo fundamental é avaliar o significado dos efectos evolutivos, ecolóxicos, xenéticos, históricos e demográficos que concorren a escala micro e macroevolutiva sobre a evolución dos trazos reprodutivos e vexetativos das plantas na súa relación cos animais. Actualmente estamos a realizar estudos de variación xeográfica en gradientes de selección; estruturas xenéticas, filoxeografía molecular, evolución filoxenética e xenética de poboacións.

Páxina web:
www.plant-animal.es

Relación co CESGA:

Dende 2008 son usuario dos servizos de computación do CESGA, concretamente dos clusters Finis Terrae e SVGD. Utilizo diversas aplicacións para efectuar análises xenéticas de poboacións vexetais, especialmente aqueles que requiren moita capacidade de cálculo.



Area xeográfica da Cooperativa na que se fixo o estudo

Data Deluge: Un diluvio de retos e oportunidades

Sismógrafos, sincrotróns, satélites, secuenciadores, aceleradores, espectrógrafos, escáneres, tomógrafos, radiotelescopios, redes de estacións de medida, simuladores e un longo etcétera de instrumentos de captura e xeración, poñen á nosa disposición unha exhuberancia de datos científicos.

As fontes de datos e a súa capacidade de xeración non paran de crecer. Tanto que á data nos resulta imposible almacenar e procesar toda a información existente.

Un auténtico diluvio de datos que presenta tanto grandes retos ao seu almacenamento, conservación, manexo, xestión e análise, como renovadas oportunidades para afondar e acelerar o noso ritmo de creación de novo coñecemento.

Entre os retos destacan a creación de estándares de anotación con metadatos que permitan sistemas o uso de sistemas de minaría máis amigables sobre arquitecturas de almacenamento máis eficientes e seguras. A colaboración entre diversas disciplinas será fundamental para a superación dos retos técnicos. Esta será clave para garantir a preservación e para facilitar a explotación das novas Alejandrías dixitais que hoxe estamos a crear.

De onde proceden os datos?

A continuación presentanse algúns exemplos que ilustran o crecemento previsto para os próximos anos de produción e almacenamento de datos en diversas disciplinas científicas:

Astronomía:

En USA (NVO), Europa (AVO) e UK (AstroGrid), os “observatorios virtuais” rexistran datos astronómicos. Só o NVO almacena 500 Terabytes de datos/ano.

O telescopio VISTA (Visible and Infrared Survey Telescope for Astronomy) xera 250 Gigabytes de datos brutos por noite.

Bioinformática:

MEDLINE, a base de datos da Biblioteca Nacional de Medicina de USA recolle información de toda a literatura de Medicina e Ciencias da Vida. Contén máis de 11,3 millóns de entradas, e o seu tamaño é duns 100 gigabytes.

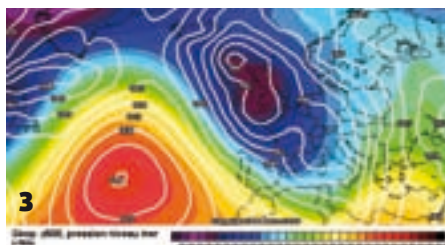
EMBL Nucleotide Sequence Database, ten tres centros en UK, USA e Xapón para depósito de datos de secuencias de nucleótidos. Recibe unha nova entrada



1



2



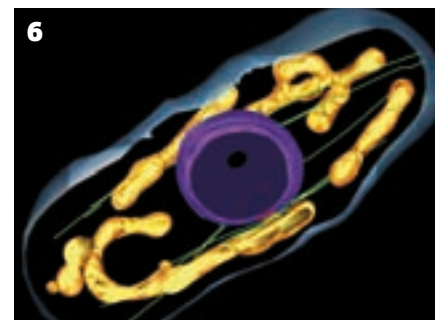
3



4



5



6

1 e 2. Túnel do LHC no CERN e detalle do LHC (imaxes cortesía CERN). 3. Mapa meteorolóxico (cortesía ECMWF). 4. BepiColombo's Cruise (foto cortesía ESA) 5. Estación de toma de datos meteorolóxicos (cortesía de AVO). 6. Ensaio Bradford de proteínas, amosa volumes crecentes de proteínas (foto cortesía EMBL)

1 millón de caracteres	1 Megabyte	unha novela longa
1000 Megabytes	1 Gigabyte	información do xenoma humano
1000 Gigabytes	1 Terabyte	producción anual de literatura
1000 Terabytes	1 Petabyte	todas as bibliotecas de investigación de EE.UU.
1000 Petabytes	1 Exabyte	2/3 da produción anual de información

cada 10 segundos, sincronizando os datos entre centros cada 24 horas. Almacena Terabytes de información.

Ciencias Ambientais:

O European Centre for Medium Range Weather Forecasting (ECMWF) en Reading, UK, dende 1998 aumenta anualmente o seu volume nun 82%; aumento paralelo ao da capacidade dos seus supercomputadores. 330 Terabytes almacenados.

A Axencia Espacial Europea (ESA), xera uns 100 Gigabytes de datos/día. Cos úl-

timos satélites (Envisat, Meteosat 2º xeración e MetOp), o seu volume aumenta aínda máis rápido que a NASA.

Física de Partículas:

O Large Hadron Collider (LHC), no CERN en Xenebra, pronto comezará a xerar datos de colisións. Nos experimentos ATLAS e CMS no LHC hai uns 2.000 físicos traballando, de 200 institucións en Europa, Norteamérica e Asia. Cada experimento xerará 10 Petabytes de datos/ano. En 2015 terá almacenado Exabytes de datos.

«O noso traballo, en termos de tempo e diñeiro, sería **imposible sen simulación**»

Adrián Sarasquete, Xerente de VICUS DT

Vicus Desarrollos Tecnolóxicos S.L. é unha empresa nova que ofrece desenvolvemento e soporte a todo tipo de proxectos de I+D dos sectores naval e enerxético.

Nacida como departamento de I+D de Baliño, empresa viguesa vinculada ao Sector Naval dende 1948, no 2007 VICUSDT independízase como empresa innovadora dedicada á investigación e o desenvolvemento tecnolóxico con ferramentas de simulación.

Un equipo de 6 investigadores (enxeñaría naval, industrial, eléctrica e de minas) especializados na análise e deseño con ferramentas CAD-CAE e simulación numérica, traballan en tres liñas: Hidrodinámica, Deseño mecánico, estrutural e análise térmica e Investigación en máquinas eléctricas innovadoras. O aproveitamento da enerxía undimotriz, (proxecto financiado polo Plan Incite e en colaboración coa empresa NORVENTO, CIS Ferrol, USC e UDC) para a validación dun prototipo de artefacto para o aproveitamento da enerxía das ondas, é un exemplo do traballo que fan empregando de forma masiva a simulación CFD e estrutural.

Segundo Adrián Sarasquete, Xerente de VICUSDT, a súa empresa ofrece aos clientes desenvolvementos á medida con estudos personalizados para cada buque, realización de cálculos moi complexos en prazos moi competitivos, e o respaldo dos departamentos de enxeñaría do grupo industrial EMENASA, do que son membros, “o que supón ofrecer un amplo abano de coñecemento a disposición das necesidades dos nosos clientes en diferentes ramas da enxeñaría”. Os seus clientes son empresas de estaleiros, enerxías, armadores, e fabricantes de bens de equipo, xeralmente do Naval, aínda que se están a expandir cara á industria do transporte.

“O noso traballo en termos de tempo e de diñeiro sería imposible sen empregar simulación. O esforzo sería inmenso”. Con ferramentas de simulación fluidodinámica (CFD) encóntranse as combinacións de maior eficiencia enerxética ao estudar a interacción de

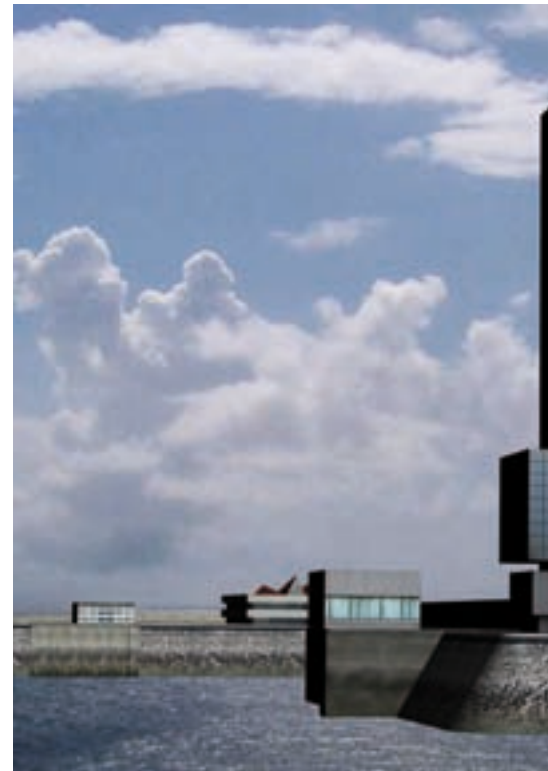


Adrián Sarasquete, Xerente de VICUS DT. Na pantalla, unha simulación acoplada CFD e térmica dun intercambiador de calor.

todos os elementos (carenas, hélices e temóns no caso dos buques). Redúcese o número de prototipos necesarios ao mínimo, chegando a eliminalos en ocasións. “A simulación achega en cada proxecto un valor diferente, pero sempre moi importante. O aforro de tempo e diñeiro, de cara á empresa, é o máis interesante, pero tamén a garantía de que se está a empregar o mellor modelo de entre todas as variables posibles”, afirma.

Ademais, para a análise estrutural, térmico e electromagnético, VICUSDT traballa con programas de simulación por elementos finitos, analizando cargas e frecuencias de resonancia, garantindo solucións mecánicas optimizadas. De grande interese para VICUS son as enerxías renovables mariñas, desenvolvendo novos conceptos de máquinas eléctricas adaptadas para usar como motor en propulsión naval,

enerxías renovables mariñas e turbinas hidroeléctricas. “O noso interese esta máis en maquinaria especial, ofrecendo tecnoloxía en áreas onde existen ocios de mercado, porque hai necesidades concretas que podemos cubrir grazas á nosa especialización,”. Investigadores do Master de Enxeñaría Matemática das universidades galegas realizan prácticas na empresa, así como doutourados. “Estamos en contacto constante co Centro Tecnolóxico Naval de Galicia, Centros Tecnolóxicos do País Vasco, Plataformas Tecnolóxicas e universidades”. En cuestións de transferencia Adrián Sarasquete sabe que moitas veces as empresas non teñen claros os seus obxectivos para solicitar axuda da ciencia: “Tendo os obxectivos claros e marcando os prazos e os custos, as colaboracións con grupos de investigación universitarios teñen moito que ofrecer á empresa”.



O simulador fai casi real a experiencia de pilotar un buque. Os portos de Galicia estarán incluídos no simulador, de xeito que agora coa nova tecnoloxía sí será posible para

Realidade virtual ó alcance

O IDC Galicia (Interactive Digital Center), departamento do CIS Galicia situado en Ferrol, dedícase ao desenvolvemento de aplicacións de Realidade Virtual (RV), Realidade Virtual Aumentada e ao estudo de novas utilidades neses campos.

No IDC Galicia (Interactive Digital Center) Nel, un grupo de profesionais de múltiples disciplinas, dende o deseño e modelado 3D, a texturizado e programación de simulacións interactivas, traballan desenvolvendo proxectos subvencionados polas liñas de financiamento europeo, estatal e galego en colaboración con empresas e grupos de investigación de Galicia. Realizan servizos avanzados de visualización como revisións técnicas de proxectos ou visualización de datos complexos. Dotado con moderno equipamento como unha cova inmersiva (CAVE), equipos portátiles que permiten a visualización e a interacción coas aplicacións de tempo real, unha sala de desenvolvemento e outra de formación cun equipamento software e hardware especialmente enfocado ao traballo de RV, desenvolven proxectos propios e de I+D que

pon de relevo a súa importancia para a innovación.

Dado que a RV é aplicable a moitos campos os proxectos son variados: representación de terreo, geolocalización, pantallas multitáctiles, simuladores de manobra con maquinaria complexa (grúas, escavadoras, buques, etc.) e a integración con todo tipo de elementos hardware (luvas, sistemas hidráulicos, covas este-reoscópicas...), para iso colabora con outros grupos de RV do sistema de I+D de Galicia: o Grupo de Procesado de Imaxe e RV (UVIGO), o Laboratorio de Sistemas (USC) e o Videalab e o Laboratorio de Enxeñaría Mecánica (UDC). Algún dos traballos destes grupos pódese ver na exposición Galicia Dixital, en Santiago.

Un caso interesante que ilustra o espírito do traballo do IDC é o proxecto “Deseño e Implementación dun si-

mulador naval inmersivo de baixo custo”. SINABACO. Partindo dun programa de simulación para navegación creado e desenvolvido hai anos en BASIC polo Catedrático de Navegación e Instalacións Mariñas do IES Cruceiro Baleares, José Manuel Costas Capelo, estase a refacer agora con ferramentas de RV no IDC, empregando motores de renderización (OGRE) e programando unha nova aplicación para PC para múltiples alumnos. Correrá tamén nun simulador físico con tres pantallas de 30”, un posto de mando con leme, telégrafo de hélice e unha pantalla de 19” LCD con toda a información necesaria para navegar e manobrar. Será máis dinámico, interactivo, manexable que o programa orixinal, e seguramente, patentable. Está financiado pola Consellería de Economía e Industria da Xunta coa participación do Laboratorio de Siste-



Os alumnos realizan a manobra de entrada en porto e atraque.

mas da USC, CIS Galicia e IES Cruceiro Baleares.

UN BUQUE NA AULA

O Profesor Costas comezou o programa en BASIC no seu primeiro Spectrum, hai 20 anos. A súa idea era “achegar a aula ao buque” para os seus alumnos, futuros Patróns de Altura. Enxeñoullas para completar un programa que permite simular todos os tipos de navegación en canto a recursos e espazos, da máis clásica á máis sofisticada, integrando manualmente as necesidades que xurdían na aula. Non obstante o BASIC

dificultaba, por exemplo, introducir cartas mariñas, zoom ou actualizar datos con frecuencia. Cando chegaron novos sistemas, o programa estaba completo e pasalo a Visual supoñía empezar de cero e sen financiamento nin medios.

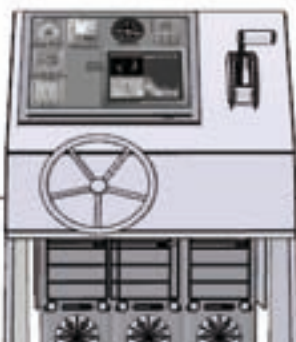
Así que cando José Luis de Nicolás, Xefe de Unidade Deseño e Simulación Virtual do IDC, decatouse da existencia do programa e o seu creador, ofreceulle a oportunidade de poñer as instalacións do IDC e o coñecemento dos seus expertos a disposición. Na súa opinión “hai moitas boas ideas entre os docentes galegos que se po-

derían beneficiar do apoio de instalacións como o IDC”. Para Costas, “é un luxo ter o apoio dun centro de innovación que poña ao servizo do coñecemento docente a súa capacidade tecnolóxica. Cobren unha necesidade ofrecendo ao alumno tecnoloxía que doutro xeito sería inaccesible polo seu custo”. Trabállase pensando nun modelo de baixo custo que podería ser útil tamén para academias dedicadas á formación de patróns e outras titulacións marítimas. Cuestións económicas á parte, “aínda que existen programas de simulación de gran calidade no mercado, a súa finalidade é máis descritiva que explicativa. Importa o procedemento e non o concepto”, recorda Costas.

Cando estea rematado en 2010 será máis áxil, incluírá manobras de atraque, navegación e desatraque e simulacións dos principais portos galegos, así como a recente normativa de emerxencias, LSD (Chamada Selectiva Dixital), pero mantendo o espírito inicial do programa. A experiencia será tan real como pilotar un barco porque ao movemento físico se corresponde o virtual. Imos cumprir o sono do Profesor Costas levando fisicamente o barco á aula”.



O cadro de navegación do que disporá o novo simulador é como ter unha ponte de mando na aula.



Primeira edición **CESGA Computational Science Summer School**



O pasado 15 de xuño inaugurouse a primeira edición de “CESGA Computational Science Summer School”, o primeiro curso en España que ofrece unha formación completa en programación, paralelización, optimización e execución de aplicativos, depurado e análise de rendemento.



Javier García Tobío, Director do CESGA, e Andrés Gómez Tato, Administrador da Área de Proxectos e Aplicacións do CESGA, recibiron aos alumnos do Summer School na súa primeira sesión.

En CESGA Summer School mostráranse os usos actuais da computación e a simulación en supercomputadores en diversas aplicacións como matemáticas, biomedicina e nanotecnoloxía. Trátase de ofrecerlles aos membros de grupos de investigación (usuarios ou non do CESGA) as ferramentas precisas para sacar o maior rendemento de supercomputadores como Finis Terrae e aplicalo ás súas investigacións. Realizarán prácticas con casos reais propostos por eles mesmos e que se poderán poñer en práctica no FT, do que terán polo menos dous nodos completos á súa disposición. Ao finalizar posuirán a formación suficiente para poder desenvolver as súas propias aplicacións científicas en grandes supercomputadores.

Os 15 alumnos son enxeñeiros e investigadores de diferentes disciplinas, (matemáticos, físicos, químicos e informáticos con nivel académico de doutoramento), que desexan formarse en técnicas de computación e

novas ferramentas de cálculo científico. O desenvolvemento dos cursos utiliza o Campus Virtual da Summer School sostido pola plataforma de formación en liña de código aberto “Aula CESGA”, desenvolvida polo

ESTADÍAS DE INVESTIGACIÓN

En virtude dun acordo con i-MATH e a Rede GHPC, investigadores doutros centros españois poderán beneficiarse da formación impartida nesta escola. Así, por primeira vez, tres investigadores novos participarán nestes cursos a través de estadía de investigación. Durante tres meses traballarán no CESGA asistindo aos cursos e desenvolvendo ao mesmo tempo o seu proxecto de investigación, ao que lle achegarán os coñecementos e ferramentas adquiridos na etapa de formación da escola. Os tres proxectos de investigación seleccionados pertencen aos campos da Física de Altas Enerxías, Mecánica de Fluídos e Linguaxes de Programación.

Dep. de Formación en Liña.(e-learning) do Centro. Na primeira semana de oferta de prazas completouse o 100% da inscrición. E é que o único xeito de conseguir esta formación completa ata agora, era realizando unha serie de cursos individuais en diferentes centros e datas. Adicionalmente aos cursos de formación, realizaranse catro seminarios de presentación da necesidade da ciencia computacional en diversas áreas científicas, impartidos por investigadores especialistas de prestixio internacional.

Está financiada polo Nodo CESGA dentro do Proxecto Enxeño Mathematica, i-Math, a Rede Galega de Computación de Altas Prestacións, GHPC, a Rede Mathematica Consulting & Computing de Galicia, o Ministerio de Ciencia e Innovación e a DXIDI da Xunta de Galicia, e conta coa colaboración de HP Invent e Dell.

<http://www.cesga.es/SummerSchool2009>

Compromiso constante coa calidade no **sector TIC galego**



Este ano a Fundación CESGA conseguiu a recertificación para a norma ISO9001:2008 de sistemas de xestión da calidade, auditada durante o ano 2009 pola empresa DNV (Det Norske Veritas).



A obtención do certificado acreditativo deixa obsoleta a anterior versión da norma (ISO9001:2000).

Na súa misión de fomentar, difundir, prestar servizos de cálculo intensivo e comunicacións ás comunidades investigadoras galegas e do CSIC, así como a empresas ou institucións que o soliciten, o CESGA contribúe, mediante o perfeccionamento tecnolóxico e a innovación, á mellora da competitividade das empresas. A adopción de procesos de calidade e a súa correspondente acreditación é parte deste compromiso coa calidade que vai alén da propia institución. Así, o CESGA participou como coordinador administrativo no proceso de adaptación de 9 empresas

do sector TIC galego para a consecución da Acreditación CMMI (Capability Maturity Model Integration). Tan só 2500 empresas en todo o mundo, 85 en España, posúen esta acreditación de calidade de software, creada polo SEI (Software Engineering Institute de Estados Unidos).

O obxectivo deste certificado é unificar os procesos de software mediante a aplicación de mellores prácticas e innovación no ámbito da enxeñaría de software. En virtude do proxecto creado dentro da Plataforma Vindeira (www.vindeira.org/) da Consellería de Economía e Industria e co cofinanciamento do Ministerio de Industria, Turismo e Comercio a través do pro-

grama PROFIT, a acreditación conseguida polas empresas 2 Mares, Aldaba, Altia, Bahía Software, Igalia, ImaxinSoftware, Lambda Stream, Sadata, e Shylex garante a súa eficacia e competitividade no mercado a nivel internacional.

A CMMI está considerada como un modelo para a mellora e avaliación de procesos para o desenvolvemento, mantemento e operación de sistemas de software en todo o mundo. Ao usar idénticos modelos créase unha linguaxe común entre as empresas que lles permite desenvolver software de maneira conxunta e ser máis competitivas, facilitando a captación de socios e clientes no ámbito internacional.



Supercomputador galego reta a científicos audaces

O Supercomputador FINIS TERRAE enfrontarase de novo a tres grandes retos computacionais, tras os realizados con grande éxito durante a súa etapa de proba.

Nunha nova convocatoria, o CESGA ofrece agora a investigadores de España e Portugal a oportunidade de utilizar o FT, poñendo á súa disposición os recursos computacionais e o soporte técnico preciso para realizar casos singulares de computación que non se

poidan resolver coa infraestrutura de cálculo habitual dun grupo de investigación nun tempo razoable, e que pola súa dificultade poidan beneficiarse da arquitectura e capacidade dun supercomputador cunha excelente ratio memoria-procesador.

Os casos a resolver foron seleccionados a través da CONVOCATORIA CESGA'09 que, en réxime de concorrencia competitiva, se ofertou aos grupos de investigación das universidades

da Coruña, Santiago de Compostela, Vigo, centros do CSIC de España, Universidades de Portugal, calquera centro de investigación ou centro tecnolóxico radicado en Galicia e calquera empresa cun centro de traballo en Galicia no que haxa un laboratorio de I+D+i, así como a calquera investigador de España participante no proxecto i-MATH. Haberá que esperar á volta do verán para coñecer os resultados.



De esquerda a dereita, Javier García Tobío, CESGA, Juan Antonio Ortega, CICA, e Mateo Valero, BSC, durante a mesa redonda organizada polo CICA en Valencia.

Os problemas comúns ás infraestructuras HPC a debate



Como parte das iniciativas levadas a cabo pola Área de Infraestructuras HPC da Rede de e-Ciencia de España,

o pasado 19 de Maio se celebraron as I Xornadas Ibéricas de Supercomputación na Facultade de Informática da Universidade Politécnica de Valencia (UPV). Organizada polo Centro Informático Científico de Andalucía (CICA), a reunión convocou a maioría dos Centros de Supercomputación de España, e tivo como invitados a varios centros de Portugal. A circunstancia de que neses días se celebre en Valencia 3ª edición de Ibergrid que reunía á maioría dos grupos e institucións dedicados a HPC, motivou a elección da sede, aínda que ambos os dous eventos son totalmente independentes.

As xornadas abordaron as necesidades dos investigadores e as respostas dos fabricantes de HPC. Os centros e empresas participantes na reunión,

algúns de nova creación e outros xa consolidados, presentaron as súas experiencias, estratexias e os servizos que ofrecen ao usuario.

Deste xeito, os máximos responsables das infraestructuras de HPC do noso país debateron en dúas mesas redondas, entre outras cousas, o futuro da Supercomputación nos próximos 10 anos, e a situación en España. Trátonse temas de máximo interese nesta mesa redonda, fundamentalmente os problemas, similares en todos os centros, e as perspectivas de futuro destas instalacións.

Ademais dos problemas comúns como o consumo enerxético, a disipación da calor nas grandes infraestructuras e o seu posible aproveitamento noutros usos como calefacción ou transformación en frío, o gran tema común a todos é sen dúbida o financiamento, porque a renovación tecnolóxica e os gastos operativos dos centros obrigan a manter activas unhas liñas de financiamento suxeitas en boa medida a subvencións das Administracións Públicas.

O Cesga participa activamente en Ibergrid 2009

IBERGRID Baixo o lema “Cara a unha Rede Internacional: Un traballo de todos” celebrouse en Valencia o pasado mes de maio IBERGRID’2009, a terceira da serie de conferencias organizadas dende 2007 no marco do acordo bilateral de 2003 entre Portugal e España para a Ciencia e a Tecnoloxía. Coa Universidade Politécnica de Valencia (UPV) como organizadora e anfitriona, o interese da conferencia centrouse nesta ocasión en ser un foro de discusión entre os principais axentes na Península Ibérica e os países de América Latina para tratar sobre os avances no desenvolvemento das infraestructuras de rede, as tecnoloxías e aplicacións. As grandes redes son cruciais para facer fronte a moitos dos problemas máis desafiantes da ciencia e a enxeñaría e son cada vez máis importantes na saúde, medio ambiente, negocios e outras aplicacións. Como foro internacional, IBERGRID reúne ademais investigadores de todo tipo de disciplinas científicas cunha necesidade común de potencia de computación, visualización e/ou recursos de almacenamento.

AMPLA PARTICIPACIÓN DO CESGA

O CESGA participou intensamente en IBERGRID un ano máis. Dende a primeira edición organizada en Santiago de Compostela, o compromiso con este foro maniféstase cada ano na ampla colaboración dos técnicos e investigadores do CESGA, presentando os seus traballos e participando nas sesións:

Too many grids? How to share resources between different Grid infrastructures

Alvaro Simón García

Integration of SLAs with GridWay in BEinEIMRT project

Marta González Bugeiro

FORMIGA/G-FLUXO: Adding Computer Labs to the Grid

Javier López Cacheiro

Metaschedulers in the environment of eScience portals: a case study with GridWay

Carmen Coteló Queijo

TOP500 xuño 09

Novos países, novos mercados

Os supercomputadores máis potentes do mundo seguen sendo os americanos IBM Roadrunner (1.105 petaflop/s) e Cray XT5 Xaguar (1.059 petaflop/s). Así o indica o TOP500 de Junio09, a lista semestral dos 500 sistemas de computación máis potentes do mundo segundo o seu rendemento no LINKPACK Benchmark, presentada durante a International Supercomputing Conference (ISC) en Hamburgo. A hexemonía americana nos 10 primeiros postos rómpese nesta 33 edición coa entrada directa ao terceiro e décimo posto respectivamente do JUGENE (825.5 tflop/s) e o JUROPA (274.8 Tflop/s.), ambos os dous no Forschungszentrum Juelich (FZJ) en Alemaña. A gran novidade é non obstante a primeira entrada de Arabia Saudí, directamente ao número 14 co sistema IBM BlueGene/P, instalado na King Abdullah University of Science and Technology (KAUST).

A importancia da supercomputación no desenvolvemento industrial déixase ver coa entrada de países de economías emerxentes. India aparece no 18º lugar co EKA, e China no número 15 co Dawning 5000 A, fabricado en China e aloxado no Shangai



Supercomputer Center; trátase do sistema máis grande que pode ser operado con Windows HPC 2008.

HP (42.4% dos sistemas da lista) e IBM (37.6%) seguen liderando radicalmente o ranking de fabricantes, aínda que algunhas compañías con menor número de sistemas instalados ocupan, non obstante, os primeiros postos con algunha das súas máquinas. É o caso de Cray Inc., SGI, SUN Microsystems ou BULL.

O 82% das arquitecturas dos sistemas listados son clusters, fronte ao 17.60% de arquitecturas MPP; algo lóxico por outra parte tendo en conta que o LINKPACK Benchmark é a base deste listado.

O único sistema español situado entre os 100 primeiros é, nesta ocasión, o MareNostrum do BSC, no número 60. Ademais aparecen outros catro clusters instalados en España (todos eles de HP), en postos inferiores.

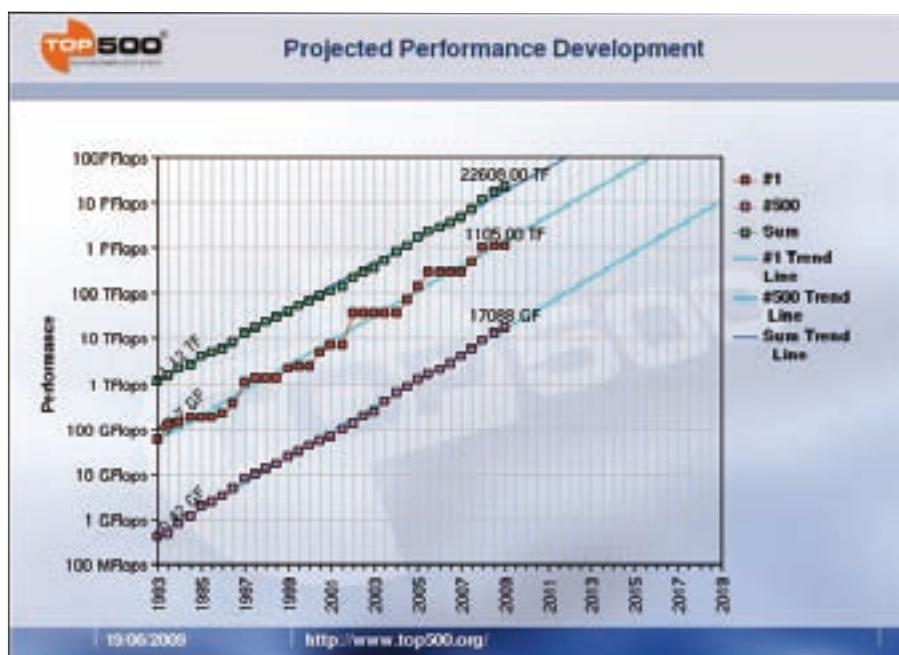
Finalista pola Itanium Solutions Alliance®

A Itanium Solutions Alliance® anunciou que o CESGA foi seleccionado finalista na categoría de Aplicacións de Computación Intensiva no seu programa de premios á innovación do 2009. As Universidades de Vigo e de Extremadura xunto co CESGA utilizan o superordenador Finis Terrae para analizar problemas electromagnéticos de gran complexidade, o maior con 500 millóns de incógnitas, para contribuír a mellorar o deseño na industria. O traballo contou con servidores de base Itanium HP Integrity con 1024 procesadores en paralelo e 6TB de memoria para conseguir a solución.

Os premios á innovación de Itanium Solutions Alliance foron concibidos para recompensar aos usuarios e desarrolladores polo uso destacado de servidores Intel® de base Itanium nas súas aplicacións. O xurado evaluó as propostas presentadas de acordo con criterios como, o reto proposto, os resultados producidos e a originalidade da solución.

«Para a segunda edición dos nosos premios anuais á innovación, recibimos un gran número de entradas convincentes de todas as partes do mundo, mostrando unha ampla variedade de aplicacións innovadoras apoiadas na tecnoloxía con base Itanium», comentou Joan Jacobs, o presidente e director executivo da Itanium Solutions Alliance. «Comprácenos recoñecer aos finalistas deste ano polo seu traballo pionero cos sistemas baseados en Itanium de todo o espectro da industria e a investigación».

A categoría de Aplicacións de Computación Intensiva recoñece ás organizacións que utilizaron sistemas Itanium para abordar enormes cargas críticas de traballo que demandan recursos compartidos de alto rendemento e escalabilidade. Os gañadores serán homenaxeados nun evento especial durante o foro Intel Developer, en Setembro no Museo de Arte Moderna de San Francisco.



Metodoloxía e criterios para o estudo dos **materiais arqueolóxicos** dende as infraestruturas de datos espaciais (IDE)

O xeorreferenciamento permite o establecemento de relacións entre obxectos nun espazo físico e é básica para o tratamento da información mediante SIG, ou calquera outra ferramenta que poida explotar este tipo de información.

Emilio Abal Vidal.
CESGA
Josefa Rey Castiñeira.
GENP Universidade de Santiago de Compostela

Calquera traballo arqueolóxico se plasma na recolección de datos patrimoniais, ambientais ou de calquera outro tipo. A súa representación espacial pode concretarse de xeito implícito ou explícito pero, en todo caso, converte a información patrimonial en xeodatos (entendidos como obxectos espaciais nun sistema de coordenadas e datum concreto). O xeorreferenciamento polo tanto permite o establecemento de relacións entre obxectos nun espazo físico e é básica para o tratamento da información mediante SIG, ou calquera outra ferramenta que poida explotar este tipo de información.

Esta actividade é unha gran xeradora

de datos para os cales son necesarios considerables cantidades de recursos, tanto económicos, materiais ou humanos. A xeración do rexistro arqueolóxico orientase á formación dunha base documental aproveitable por traballos posteriores ás intervencións individuais. En ocasións, as tarefas de investigación sobre esta documentación non poden ser asumidas polos arqueólogos ou son retomadas por outros investigadores, polo que se fai necesaria a formulación dunhas normas e estándares que permitan o seu mantemento e intercambio de forma coherente, sostible e interoperable.

As infraestruturas de datos espaciais (IDE) defínense como o conxunto de tecnoloxías, políticas e acordos institucionais, que lles facilitan o acceso aos datos espaciais. Segundo os principios establecidos na iniciativa europea INSPIRE, as IDE facilitan o acceso

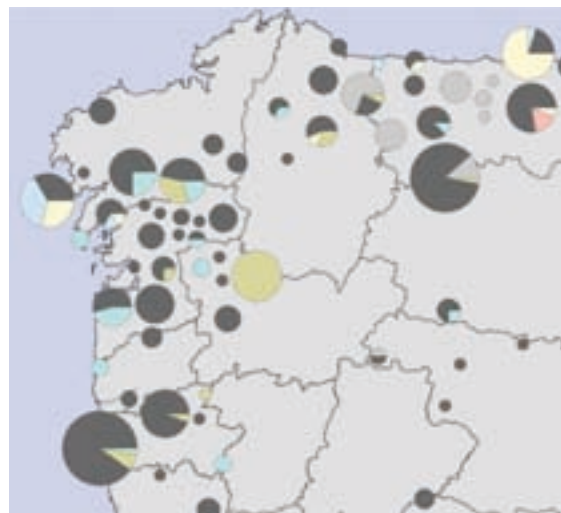
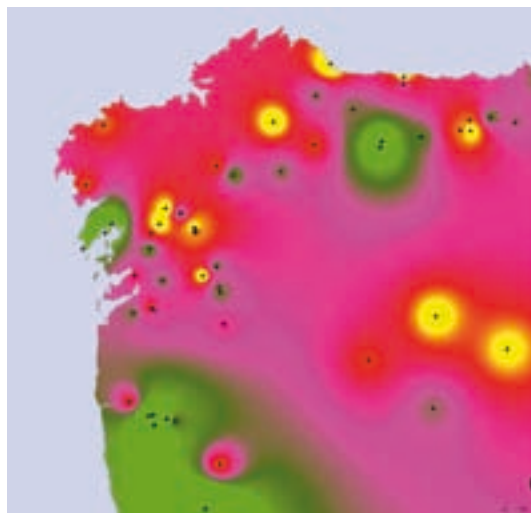
á información espacial que xeran os diferentes axentes, e actúan como a base para o almacenamento, a busca e a explotación dos datos.

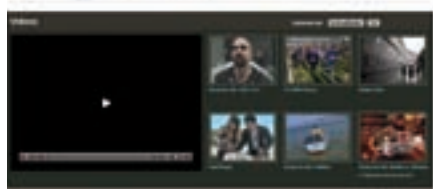
Polo tanto, na tarefa arqueolóxica son perfectamente asumibles os principios xerais das IDE.

Os datos son recollidos unha vez, polo que debe facerse do xeito máis eficaz posible. Debería ser posible combinar, de forma simple, información espacial dunha ou varias intervencións arqueolóxicas, e compartila entre moitos usuarios e aplicativos. Debe ser posible que a información recollida a un nivel sexa compartida entre diferentes niveis, xa sexa investigadores ou público en xeral.

A información arqueolóxica é abundante e debería estar nun formato que permita o seu uso masivo. Tamén debería ser sinxelo descubrir que xeodatos están dispoñibles, sabendo se nos poden ser útiles e en que condicións poden ser usados.

Dende o GEPN e o CESGA colaboramos en diferentes proxectos de investigación sobre a base de criterios unificados para crear un sistema coordinado de traballo que eleve as posibilidades de análise e interpretación no marco xeral da cultura castrexa. A adopción dos principios básicos e recomendacións para a formación dunha IDE con información patrimonial froito das nosas investigacións, permítenos o tratamento de grandes cantidades de datos. Pero non soamente isto, senón tamén a racionalización e definición dos propios elementos arqueolóxicos, sobre a base de criterios coherentes que nos permitan interrelacionar información e acadar modelos máis completos.





culturagalega.org

Unha interfaz para a cultura galega

Manuel Gago.
director@culturagalega.org
Consello da Cultura Galega

A principal revolución da dixitalización está na creación dunha nova filosofía para a cultura galega, unha nova suma de hábitos, de procedementos e de ferramentas de comunicación que enriquecen o feito cultural e a súa posta en valor pública. Para unha institución coma o Consello da Cultura Galega, a dixitalización nos está a ofrecer importantes valores de actuación: o principal é estender a cultura galega a todos os fogares dos cidadáns conectados a Internet, superando os problemas da localización física das nosas instalacións.

En outubro do 2000 naceu culturagalega.org, o portal de divulgación do Consello da Cultura Galega. O seu obxectivo era dar valor á cultura galega de cara á formación de novos públicos na rede, ofrecendo unha experiencia cultural rica, multimedia e interactiva en Internet a través do esforzo por ofrecer un enfoque xornalístico, divulgativo e atractivo para a cultura galega. Desde o primeiro, contamos coa atenta e eficaz colaboración do CESCga, desde onde realizamos o noso labor a través do almacenamento e a distribución dos nosos contidos.

Oito anos despois, culturagalega.org é unha das plataformas que hospeda na rede con máis contido cultural multimedia do Estado, ofrecendo un servizo diario de noticias da cultura en Galicia, unha completa axenda cultural, certames e convocatorias que se combinan, nun modelo orixinal de relación entre contidos, con potentes bancos de datos sobre os creadores e as producións culturais contemporáneas do país no ámbito do audiovisual, da

música, da banda deseñada e da literatura e outros recursos. O usuario pode acceder a unha plataforma que é información, pero que tamén é entretemento, exploración e investigación, acumulando horas e horas de tempo de consumo cultural.

Algunhas cifras permiten comprender a volumen de datos do noso universo cultural almacenados en culturagalega.org. Máis de 5.000 fotografías, case 15.000 noticias publicadas, 250 libros de libre descarga, unha axenda con máis de 4.000 eventos publicados, información sobre case 500 entidades do audiovisual, sobre 1.000 producións audiovisuais e sobre 2.700 profesionais do sector, que figuran completados con case 4.000 extras multimedia de todos os tipos (galerías fotográficas, vídeos, audio). Na literatura, tamén cifras: máis de 1600 fichas sobre publicacións contemporáneas, sobre 300 álbumes de cómic e 224 creadores da BD galega, información multimedia sobre máis de 200 novidades discográficas galegas. Toda unha radiografía viva sobre o presente dinámico da cultura de Galicia.

No futuro inmediato, os planes de desenvolvemento pasan por asentar máis a plataforma de difusión cultural e profundizar na fórmula "información + divulgación + recursos culturais", converténdonos non só nun medio de comunicación, senón nunha aplicación permanente que exerza como interfaz multimedia e xeográfica para a cultura galega. Estamos a concentrar no CESCga unha significativa parte da produción de investigación, difusión e documentación do Consello da Cultura Galega e os diversos e potentes bancos de datos culturais da institución, para garantir a rapidez de consulta e accesibilidade desde o país e o exterior.



TURGALICIA
DIRECCIÓN XERAL DE TURISMO

www.turgalicia.es

TODOS OS RECURSOS E ALOXAMENTOS TURÍSTICOS DE GALICIA



XUNTA DE GALICIA
CONSELLERÍA DE INNOVACIÓN
E INDUSTRIA

UNA VISION INNOVADORA
SOBRE LA FIABILIDAD

¿Dónde
guardaría
un millón
de archivos?



HP StorageWorks 9100

Para más información www.hp.es/ExD59100



©2008 Hewlett-Packard Development Company, L.P. Todos los derechos reservados.

Expanding the Frontiers
of
Knowledge

Accelerating Researchers'
Time-to-Solution

Creating Tight Networks
of
Researchers

GALICIA SUPERCOMPUTING CENTRE



CESGA

CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA



www.cesga.es

Avda. de Vigo, 49 | Campus Sur |
15703 Santiago de Compostela, 15709
A. | 3498000000 | Fax: 3498000000
info@cesga.es