

# díxitos

febreiro 2010

Novas do Centro de Supercomputación de Galicia



**DIRECCIÓN**

Javier García Tobío

**COORDINACIÓN**

Fernando Bouzas Sierra

**REDACCIÓN**

María Piñeiro

**COLABORACIÓN**

Juan Castro

Carlos Fernández Balseiro

Carlos Fernández Sánchez

Alberto García Vela

Miguel Ángel Herrera Tardáguila

Ignacio López Cabido

Javier López Cacheiro

David Posada González

Peregrina Quintela Fernández

Daniel Rivero Cebrián

Armando J. Yáñez Casal

**GRAFISMO E MAQUETACIÓN**

Jose Armesto

**FOTOMECAÁNICA E IMPRESIÓN**

Artes Gráficas LITONOR S.A.L.

**DEPÓSITO LEGAL**

C 1604-1998

**ISSN**

1139-563X

**EDITA**

FUNDACIÓN CESGA

Avenida de Vigo, s/n (Campus Sur)

15705 Santiago de Compostela

Tel. 981 569 810

Fax. 981 594 616

dixitos@cesga.es

**CONTIDOS**

CTAG. Simulación para a automoción 4

CSIC. Aposta pola Transferencia 5

TransMath. Transferencia matemática 6-7

Usuarios CESGA 8-9

Meteogalicia. Moito máis que o tempo 10-11

Green Computing no Cesga 12-13

Cloud Computing: Proxecto Nuba 14

Ibergrid/Recetga Nova 15

## En 2010 o Cesga abre as súas portas á comunidade investigadora global

A inclusión do CESGA no Mapa de Infraestruturas Científico Tecnolóxicas Singulares, ICTS, do Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN), permitirá a investigadores nacionais e internacionais acceder aos recursos e servizos do CESGA, independentemente da súa pertenza ao CSIC ou ao Sistema Universitario Galego, usuarios habituais da instalación ata o momento.

A selección de proxectos para desenvolver no CESGA farase por convocatoria e a través dun comité de acceso, que decidirá a calidade, mérito e oportunidade dos traballos para ser admitidos á instalación. O MICINN financiará estes proxectos mediante axudas concedidas ao CESGA, como ICTS.

Ademais, en virtude deste acordo fináncianse 18 estadias curtas de investigación, tanto nacionais coma internacionais, cunha duración aproximada dun mes. Serán de dous tipos: Estancias de Doutorandos, para que adquiran coñecementos de utilidade no contexto da súa tese e Estancias para Doutores con experiencia que lles vai permitir familiarizarse coa tecnoloxía de uso no CESGA ou realizar experimentos dun proxecto concreto.

Este acordo permitirá ao CESGA e aos seus usuarios establecer e estreitar colaboracións con grupos de investigación nacionais e internacionais de excelencia pertencentes a países membros da Unión Europea, o Espazo Económico Europeo e ao Programa Iberoamericano de Ciencia e Tecnoloxía para o Desenvolvemento, CYTED.

O CESGA segue así traballando no desenvolvemento da Ciencia Computacional e dando servizos de cálculo e computación a unha comunidade científica cada vez máis ampla e global.



## Infraestruturas para o avance da ciencia

O Ministerio de Ciencia e Innovación, en liña cos obxectivos estratéxicos formulados polo Programa Enxeño 2010, a estratexia Nacional de Ciencia e Tecnoloxía, e o Plan Nacional de I+D+i 2008-2011, e en colaboración coas Comunidades Autónomas, elaborou o Mapa Estratéxico de Instalacións Científico-Técnicas Singulares, ICTS, do que forma parte o CESGA co Supercomputador Finis Terrae.

Unha ICTS é unha grande instalación, única en España polo seu contido e prestacións, e de grande utilidade para o sistema de I+D+i, avanzada, imprescindible científica e tecnoloxicamente para o avance da Ciencia e para a mellora competitiva dos grupos de investigación que desenvolven a súa actividade en España. Estas instalacións están abertas á totalidade da comunidade científica e tecnolóxica española para desenvolver os seus experimentos ou ensaiar tecnoloxías.

As ICTS abranguen dende as Ciencias da Vida ás Ciencias Sociais e Humanidades. Poden ser infraestruturas físicas cunha situación especial, ou móbiles (como os barcos oceanográficos), virtuais ou distribuídas en rede, grandes equipamentos, recursos únicos que permiten acceso a datos e tecnoloxías clave para o avance da ciencia.

O Mapa de ICTS recolle actualmente 50 instalacións necesarias para o desenvolvemento tecnolóxico de vangarda, e para fomentar a xeración, transmisión, intercambio e preservación do coñecemento, así como para favorecer a transferencia de novo coñecemento á industria e ás administracións.

### Instalacións Científico Técnicas Singulares en España

<b>PSA</b>	<i>Plataforma Solar de Almería</i>
<b>TJ-II</b>	<i>Dispositivo de Fusión Termonuclear TJ-II del CIEMAT</i>
<b>CNA</b>	<i>Centro Nacional de Aceleradores</i>
<b>LSC</b>	<i>Laboratorio Subterráneo de Canfranc</i>
<b>CEHIPAR</b>	<i>Canal de Experiencias Hidrodinámicas de El Pardo</i>
<b>CIEM</b>	<i>Canal de Investigación y Experimentación Marítima</i>
<b>ISIC</b>	<i>Instalaciones singulares de ingeniería civil en el CEDEX</i>
<b>BSC-CNS</b>	<i>Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación</i>
<b>CT/ISOM</b>	<i>Central de Tecnología del Instituto de Sistemas Opto-electrónicos de la UPM</i>
<b>CESCA</b>	<i>Centro de Computación y Comunicaciones de Cataluña</i>
<b>CESGA</b>	<i>Centro de Supercomputación de Galicia - Finis Terrae</i>
<b>RedIRIS</b>	<i>RedIRIS de servicios telemáticos avanzados</i>
<b>SBCNM</b>	<i>Sala Blanca del Centro Nacional de Microelectrónica</i>
<b>CISA</b>	<i>Instalación de alta seguridad biológica del CISA</i>
<b>RMN</b>	<i>Laboratorio de Resonancia Magnética Nuclear del PCB</i>
<b>CAHA</b>	<i>Centro astronómico de Calar Alto</i>
<b>YEBES</b>	<i>Centro astronómico de Yebes</i>
<b>ORM</b>	<i>Observatorio del Roque de Los Muchachos</i>
<b>OT</b>	<i>Observatorio del Teide</i>
<b>IRAM</b>	<i>Radiotelescopio del IRAM en el Pico Veleta</i>
	<i>Base antártica española Gabriel de Castilla</i>
	<i>Base antártica española Juan Carlos I</i>
<b>B/O Cornide</b>	<i>Buque de investigación Oceanográfica Cornide de Saavedra</i>
<b>B/O Hespérides</b>	<i>Buque de Investigación Oceanográfica Hespérides</i>
<b>B/O Sarmiento</b>	<i>Buque de investigación Oceanográfica Sarmiento de Gamboa</i>
<b>RCD</b>	<i>Reserva Científica de Doñana</i>





### O sector facturou no ano 2009 uns 9000 millóns de euros en Galicia



Miguel Ángel Herrera Tardaguila  
Coordinador da Área de Cálculo do CTAG

O Centro Tecnolóxico de Automoción de Galicia, CTAG, ofrece solucións tecnolóxicas avanzadas ao sector da automoción. A maioría dos seus clientes son empresas provedoras de compoñentes para fabricantes de vehículos, polo que un dos servizos máis demandados é a simulación numérica para deseño e produción.

Segundo o Coordinador da Área de Cálculo do CTAG, Miguel Ángel Herrera, "traballamos cos nosos clientes e colaboradores en función das súas necesidades. Os que dispoñen de equipos de desenvolvemento acoden a nós para cubrir necesidades puntuais dentro dun proxecto, como realización de ensaios, simulación, colaboracións en deseño etc...; outros, os que non dispoñen de equipos, acoden ao CTAG para realizar o desenvolvemento completo dun produto. Realizamos todo o proceso, dende os estudos iniciais, deseño, simulación, ensaio e desenvolvemento dos medios produtivos e mesmo a planificación de actividades en bordo de liña, empregando moito ferramentas de simulación".

E é que neste sector é unha esixencia: "Non se trata soamente de mellorar o produto, ou aforrar na fabricación de prototipos (que tamén) senón que os provedores dos fabricantes de automóviles, ou empregan simulación ou directamente

non poden optar ás fases iniciais de deseño do produto. Sen simulación, sinxelamente, non poden competir". A simulación está presente en todas as fases do deseño, tanto nas previas nas que non se fabrican prototipos coma nas de desenvolvemento. "O apoio de CTAG en simulación a todas estas empresas abrangue todas as fases, axudámolos en todos os pasos".

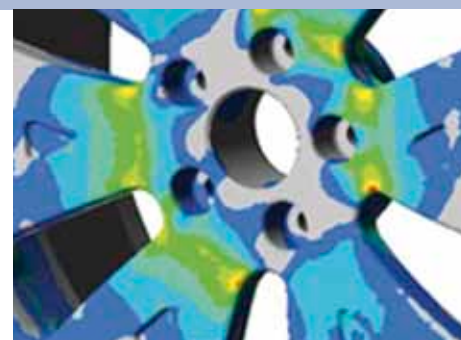
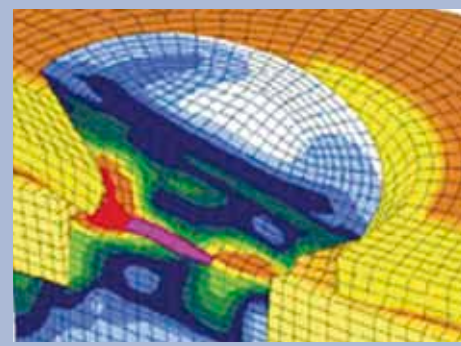
Como destaca Herrera, "cambiar unha peza dun modelo virtual pódese facer dun día para outro. O mesmo cambio feito nun prototipo supón prazos máis longos, semanas ou meses... só en tempo é un aforro importante. Pero ademais os modelos virtuais permiten comprender mellor como traballa fisicamente o produto, obtense máis información destes, o que axuda a tomar decisións para desenvolver produtos máis fiables, lixeiros e económicos, ou cunha solución máis simple ou que sexa máis doado de fabricar. Facer cálculo durante un desenvolvemento supón un gasto, pero está demostrado que aforra moito máis do que custa, xa que reduce o número de prototipos e ensaios e o tempo de desenvolvemento".

#### SIMULACIÓNS GRANDES E PEQUENAS

Os servizos da área de cálculo do CTAG abranguen simulacións CRASH, FEA e CFD. Actualmente están a traballar de forma continuada con ao redor de 10 empresas de automoción, con distintas necesidades computacionais. Algúns precisan simulacións pequenas que se poden facer nun PC e se son máis longas córrense no Cluster do CTAG. As máis grandes envíanse ao Finis Terrae, no CESGA. Segundo Herrera, "sería absurdo para traballos puntuais comprar capacidade computacional que quedaría pronto obsoleta. Pareceunos unha solución inmejorable ter un servizo como o que presta CESGA, ao que poder

lanzar un cálculo sen preocupación, con tempos de espera máximos que garanten a efectividade da colaboración e que nunca se atrase o traballo". O CTAG consumiu durante 2009 preto de 12.500 horas de cálculo no Finis Terrae, executando programas como Fluent para CFD, MSC-Nastran para análises lineais e non lineais ou Hyperworks e Radioss para CRASH.

[www.ctag.com](http://www.ctag.com)



Juan Castro  
Coordinador da Unidade de Apoio á Creación de Empresas do CSIC



#### IMPULSO AO ESPÍRITO EMPREENDEDOR

A Unidade de Apoio á Creación de Empresas do CSIC púxose en marcha en Santiago de Compostela como elemento clave na política de fomento e xeración de empresas de base tecnolóxica. Transferir os resultados da investigación a institucións públicas e privadas, e impulsar a creación de entidades e empresas tecnolóxicas son funcións principais do CSIC.

Juan Castro, coordinador da nova Unidade, sinala que a tarefa "estriba en facilitar as ferramentas para a estruturación de proxectos de empresa solventes, poñendo a disposición dos emprendedores servizos e utilidades de difícil acceso por custo ou complexidade". O obxectivo final é poder realizar unha valoración cabal sobre o activo público posto a disposición da nova empresa a cambio dun retorno razoable ao CSIC segundo o correspondente Acordo de Transferencia de Tecnoloxía.

Segundo Castro, "traballamos para minimizar a incerteza inherente á posta en marcha das características dunha empresa de base tecnolóxica. E isto lévanos a considerar cada iniciativa de futura empresa como un proxecto de longo recorrido no cal a implicación do CSIC vai máis alá da constitución desta, considerando a súa posta en marcha e maduración ata o momento de desvinculación total no medio prazo cando a empresa se consolide e

## A aposta do CSIC pola Transferencia

alcance un tamaño suficiente. Sempre coa dobre visión do servizo profesional de apoio á creación de empresas e a promoción e impulso ao espírito emprendedor".

#### TRANSFERENCIA EN GALICIA

Nos últimos anos leváronse a cabo relevantes accións de colaboración público-privado nas que resultados de investigación do CSIC deron solución a demandas concretas da industria e hoxe son realidades comerciais. Cabe destacar o exemplo do grupo de Viticultura da Misión Biolóxica de Galicia en Pontevedra, dirixido pola Dra. Carmen Martínez, en colaboración co grupo do Prof. Alfonso Carrascosa do Instituto de Fermentacións Industriais do CSIC en Madrid e a adegas Terras Gauda, que recentemente foi premiado pola Real Academia Galega das Ciencias pola mellora da calidade do viño albariño. "É un proxecto que creo que reflicte as accións de transferencia do coñecemento sinxelamente, mostrando que innovación e sectores tradicionais non son un matrimonio imposible, senón unha necesidade máis que evidente na nosa terra".

Exemplos de colaboración son as iniciativas conxuntas do CSIC coas tres universidades galegas, contando co apoio económico da Xunta de Galicia, como o programa Empresa-Concepto (orientado á estruturación empresarial de oportunidades baseadas en desenvolvementos tecnolóxicos das Institucións) que permitiu a creación da

empresa XENOTECHS LABORATORIOS S.L., con equipos do Instituto de Investigacións Mariñas do CSIC en Vigo e a Universidade de Santiago. Tamén se está a traballar nunha oportunidade de servizo no ámbito do tratamento dos alimentos na que se ten depositada unha grande confianza.

En opinión de Juan Castro "isto non sería posible sen a existencia dun polo de coñecemento en Galicia no ámbito do emprendimento, capitaneado neste caso pola Universidade de Santiago, no que participan activamente as universidades de Vigo e A Coruña; e polo apoio constante da Dirección Xeral de Investigación, Desenvolvemento e Innovación da Xunta de Galicia".

<http://ebt.ott.csic.es>





# TransMath: Transferencia Matemática

## Oferta e Demanda Empresarial

Peregrina Quintela Estévez.  
Coordinadora Nodo Cesga de i-MATH

Desde o proxecto Consolider Ingenio Mathematica (i-MATH), e a través do Nodo CESGA, levouse a cabo un dobre estudo para coñecer cal é a situación actual da matemática española no ámbito da súa transferencia ao sector produtivo. Os resultados recóllense nos Mapas TransMATH Oferta e TransMATH Demanda.

### Mapa TransMATH Demanda

Trátase dun proxecto pioneiro e moi ambicioso, no que se enquisaron telefónicamente a preto de 8.000 empresas de máis de 10 traballadores, de todo o territorio nacional e con representación de todos os sectores. O mapa permitirá detectar problemas empresariais nos que as Matemáticas poidan ser unha ferramenta complementaria ou fundamental, coñecer a demanda de formación matemática e definir, si é necesario, novas liñas de investigación en Matemáticas orientadas a resolver estes problemas. A súa elaboración contou co asesoramento dun Panel de Expertos universitarios, empresariais e de centros tecnolóxicos con especialistas en CAD, CAE, TE/IO e OTM con experiencia en transferencia.

[www.i-math.org/mapa\\_demanda](http://www.i-math.org/mapa_demanda)

### Conclusiones

1. Hai un bo nivel de implantación de coñecementos matemáticos e as empresas son conscientes diso, constatando que as matemáticas non están afastadas da realidade industrial e empresarial (Fig. 1). A implantación de TE/IO é ampla (49%), destacando no sector do Comercio (65%), aínda que a diferenza entre sectores non é moi acusada (Fig. 2). En segunda e terceira posición aparecen a utilización do CAD (34%), e do CAE (13%), destacando no seu uso o sector de Metal e Maquinaria; na metade dos casos o CAE utilízase para realizar cálculos mecánicos ou estruturais (Fig. 3). O último posto ocúpao o uso de OTM cun 8%, duplicándose este valor nos sectores de Servizos Técnicos e Informática e Comunicacións; na metade das empresas, estas técnicas úsanse no

tratamento de imaxes dixitais e case no 40% dos casos para o deseño de sistemas de localización xeográfica como GIS ou GPS (Fig. 4). En OTM atopámonos coa dificultade adicional de que estas adoitan aparecer mesturadas con outro tipo de ferramentas (informáticas, sobre todo), que dificultan a súa percepción separada

nas empresas. Isto consideramos que é tanto unha dificultade de comprensión do papel das matemáticas, como un reflexo dunha situación ben real: as matemáticas son cada vez máis interdisciplinares e aparecen en contextos nos que son dificilmente separables doutros ámbitos do coñecemento.

Fig. 1: Uso de cada unha das técnicas matemáticas atendendo ao tamaño da empresa.

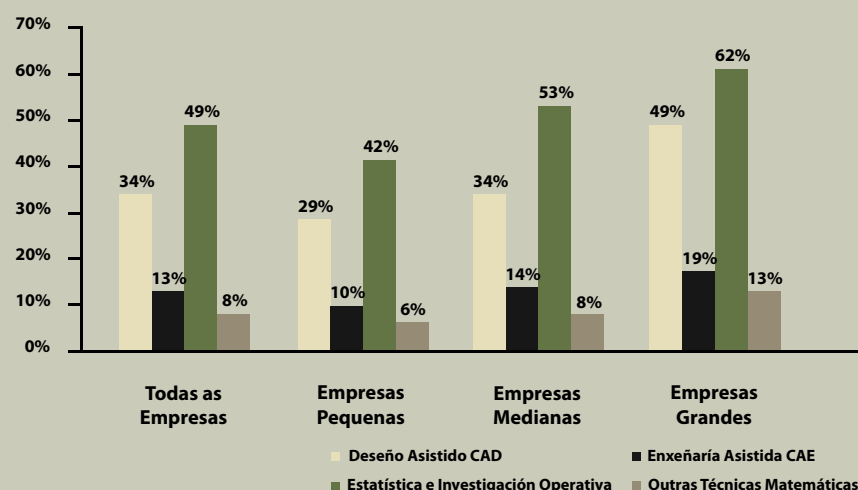
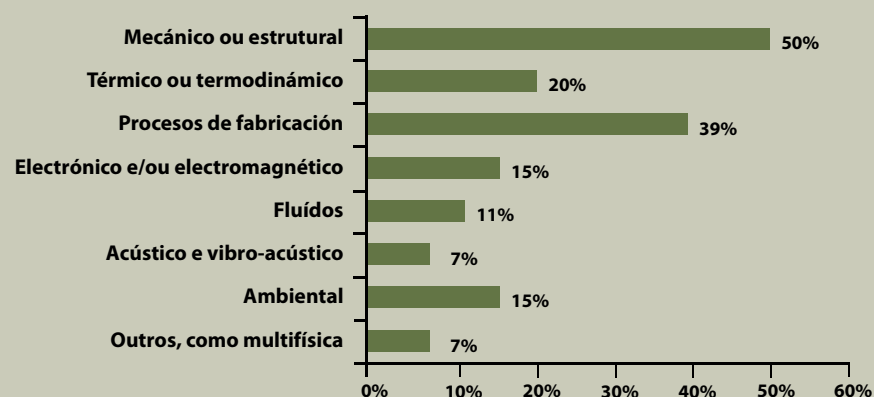


Fig. 2: Tems nos que se usan TE/IO nas empresas da mostra (n = 3.317)



Fig. 3: Tems de uso do CAE (n = 866)



2. Para todas as técnicas, o uso é maior a medida que aumenta o tamaño de empresa: as técnicas CAD en empresas grandes superan en 20 puntos ás pequenas e en 15 ás medianas; porcentaxes similares téñense para TE/IO. Con todo, a diferenza entre ambas acúrtase se se trata do CAE ou do uso de OTM. É remarcable o esforzo que moitas empresas pequenas están a realizar para incorporar estas ferramentas, cunhas porcentaxes de uso moi elocuentes.

3. Moi destacable é que unha boa porcentaxe de empresas (32%) estean dispostas a colaborar con universidades e outros organismos de investigación. Máis significativo aínda é que estas empresas coincidan na súa maior parte con aquelas que levaron a cabo en anos precedentes actividades deste tipo; tamén é alentador o grao de satisfacción que teñen as empresas destas colaboracións que as cualifican cun notable. A conclusión parece clara: si fixérono unha vez, quedaron satisfeitos e querían repetir.

Á vista destes resultados, i-MATH organizará cursos de formación especializados, orientados a sectores específicos, promoverá foros sobre a aplicabilidade das técnicas matemáticas aquí analizadas e fomentará a organización de semanas de modelización nas que as empresas poidan tratar con especialistas sobre problemas do seu interese.

### Mapa TransMATH Oferta

A terceira edición do Mapa i-MATH TransMATH Oferta, permite visualizar a capacidade e experiencia de i-MATH en transferencia de tecnoloxía matemática ao sector produtivo e axuntar sinerxías entre os 49 grupos de investigación implicados e conectados en Rede, para abordar novas iniciativas. A súa oferta tecnolóxica móstrase na Fig. 5. As súas actividades de transferencia contan cunha carteira entorno aos 200 clientes de administracións públicas e empresas privadas, destacando os sectores: Administracións Públicas,

Materiais, Enerxía, Sanidade, Informática e Comunicacións, Medio Ambiente, Economía e Finanzas, e Turismo e Lece, con máis de 15 actividades realizadas en cada un deles.

No portal [www.i-math.org/oferta\\_tecnologica](http://www.i-math.org/oferta_tecnologica) as empresas interesadas en abordar innovacións ou desenvolvementos nos que sexan necesarios métodos

matemáticos, estatísticos e/ou computacionais, poderán acceder a investigadores experimentados dispostos a xerar solucións a medida e a un equipo de técnicos que lles axudará a definir e expor o seu problema achegando solucións axustadas ás súas necesidades.

Fig. 4: Tems de aplicación de OTM (n = 542)

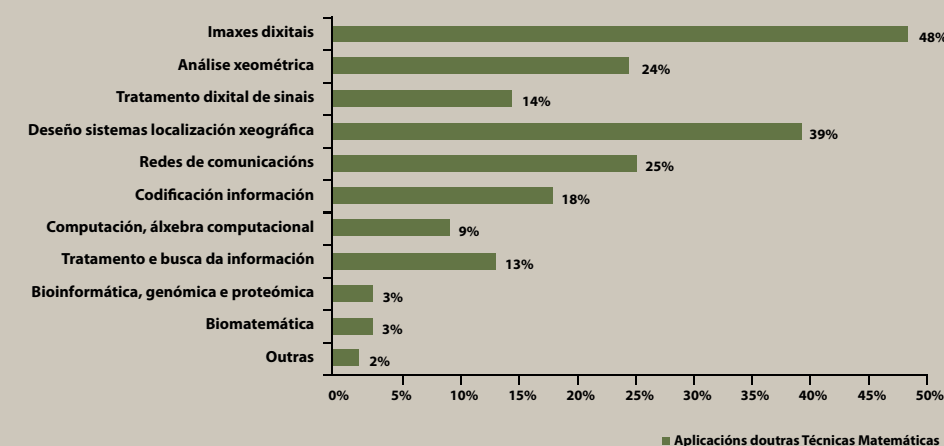
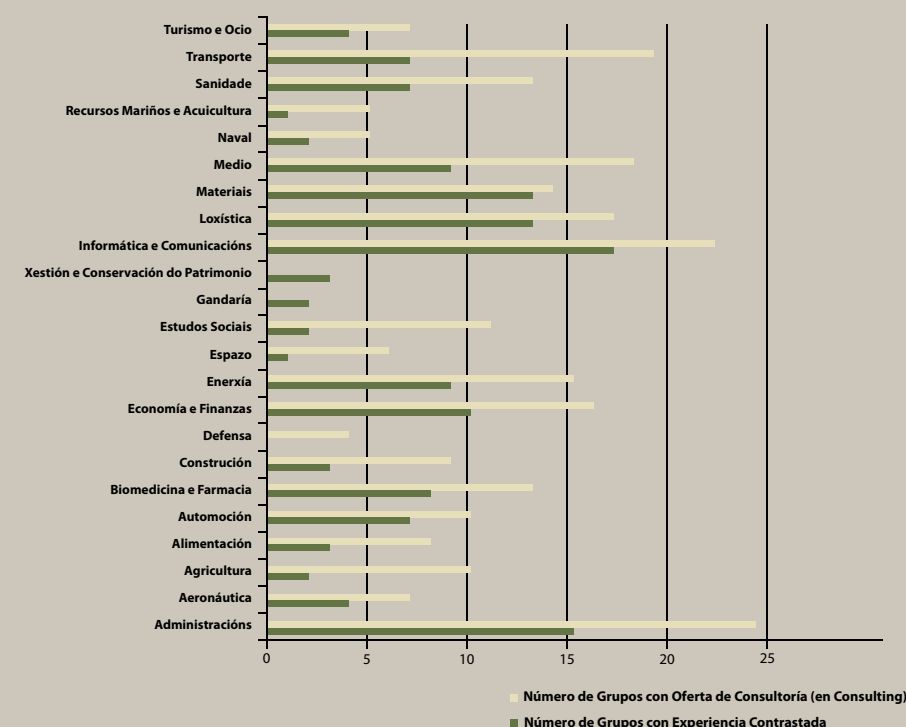


Fig. 5: Capacidade e experiencia dos grupos de investigación de i-MATH



O proxecto Consolider Ingenio Mathematica (i-MATH), no que participan preto de 350 grupos de investigación, propón un Programa de Actividade Investigadora integral para a matemática española, co obxectivo de promover e executar actuacións estratéxicas que incrementen o peso da matemática no panorama internacional e no sistema español de ciencia, tecnoloxía e empresa. [www.i-math.org](http://www.i-math.org)



## MECÁNICA CUÁNTICA

**Investigador:** Alberto García Vela

**Organización:** Instituto de Física Fundamental

Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC).

**Área:** Física Atómica, Molecular e de Agregados.

**Grupo:** Dinámica de Fotodisociación de Pequeños Agregados e Moléculas.

**Creación:** Setembro de 1999. 3 membros (CSIC).

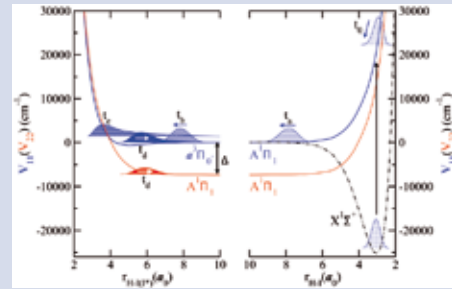
**Colaboracións:** U. Complutense de Madrid, Universidad Nacional de Córdoba (Arxentina), University of California at Irvine (USA).

**Liñas de investigación:** Modelización e simulación de procesos de disociación inducida por excitación mediante láser (fotodisociación) en moléculas pequenas e en agregados formados por unha molécula enlazada debilmente (por forzas de Van der Waals) a un ou varios átomos de gas nobre. Estudo dos mecanismos mediante os cales estes procesos teñen lugar. Aplicación e desenvolvemento de métodos de mecánica cuántica para realizar os anteriores estudos.

**Relación co CESGA:** Dende o ano 2002 utilizamos os servizos de computación dos servidores do CESGA: HPC, Superdome, SVGD, e Finis Terrae. Apoiámonos nos servizos de asesoramento do Dep. de Sistemas do CESGA para solucionar problemas técnicos puntuais xurdidos durante a execución dalgúns traballos. O emprego destes servizos foi fundamental durante todo este tempo (e seguirao sendo no futuro) para a realización do noso traballo.

As aplicacións que utilizamos tipicamente no CESGA son códigos propios realizados e desenvolvidos no meu grupo. Nestes códigos adóitase chamar ás subrutinas de librería que están instaladas no CESGA.

[www.iff.csic/fama/index.html](http://www.iff.csic/fama/index.html)



Representación esquemática da fotodisociación non adiabática do agregado I\*-HI nas curvas de enerxía potencial relevantes. Figura publicada no artigo S. López-López, R. Prosmitti and A. García-Candeia, J. Phys. Chem. A 112, 2762 (2008)

## REDES DE NEURONAS ARTIFICIAIS

**Investigador:** Daniel Rivero Cebrián

**Organización:** Universidade da Coruña

**Departamento:** Tecnoloxías da Información e as Comunicacións.

**Grupo:** RNASA-IMEDIR (Redes de Neuronas Artificiais-imaxe Médica e Diagnóstico Radiolóxico).

**Creación:** Creouse en 1997 contando na actualidade con máis de 20 membros.

**Colaboración:** Colaboramos cunha gran cantidade de institucións, principalmente universidades, tanto a nivel estatal como internacional: Universidade de Santiago, Universidade de Aveiro, Universidade de Castela-A Mancha, University of Hull, etc.

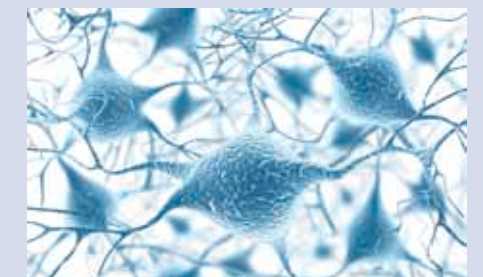
**Liñas de investigación:** Uso de técnicas de Computación Evolutiva (CE) para optimizar Redes de Neuronas Artificiais (RR.NN.AA.), así como uso de técnicas de CE e RR.NN.AA. para resolver problemas do mundo real, en ámbitos como enxeñaría civil ou biomedicina.

**Relación co CESGA:**

Inicio da relación en 2005. Utilizamos compiladores de C e C++ (g++, gcc, icpc), sistema de colas para enviar traballos.

Utilizamos aplicacións desenvolvidas dentro do grupo de investigación.

<http://sabia.tic.udc.es>



## MODELIZACIÓN DO PROCESADO DE MATERIAIS CON LÁSER

**Investigador:** Armando J. Yáñez Casal

**Área:** Laboratorio de Aplicacións Industriais do Laser.

**Grupo:** creado en 1999 na Universidade da Coruña, composto por 13 membros.

**Colaboracións:** Empresas e Institucións coas que colaboramos en Proxectos financiados: AIMEN, AIDO, CETNAGA, Universidade Politécnica de Valencia, Universidade de Cádiz, ENDESA, Neodyn, Palladiun, estudo de arqueoloxía.

**Liñas de investigación:**

Procesos de tratamento de materiais con láser. Análise química de materiais asistido por láser. Modelización de Procesos. Monitorización e control de procesos de tratamento de materiais con láser.

**Relación co CESGA:**

Iniciouse en 1999. Utilizamos servizos de Programas de elementos finitos (FEM) e de dinámica de fluídos (CFD).

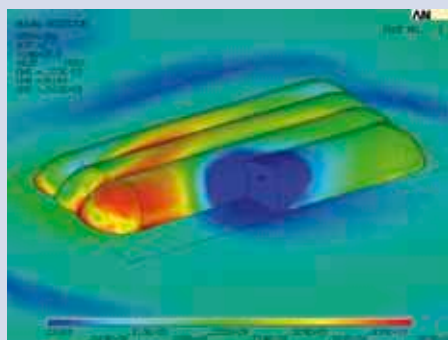
Desenvólvense aplicacións específicas para programas FEM e CFX comerciais. O obxectivo é o modelado de procesos de recargue e de soldadura por láser. Realízanse análises térmicas, mecánicas e metalúrxicas. Búscase que o software de simulación sirva para o mellor entendemento e optimización dos procesos.

Aínda que ata o momento non se tivo a oportunidade de traballar en Proxectos conxuntos, agradecemos ao CESGA as oportunidades que brinda aos estudantes do Máster de Fotónica e Tecnoloxías do Láser que imparten as tres universidades galegas.

[www.ii.udc.es/lail/index.htm](http://www.ii.udc.es/lail/index.htm)



Imaxe 1:  
Imaxe do sistema láser para recargue e soldadura



Imaxe 2:  
Tensións de Von Mises no proceso de recargue dunha aleación base Co sobre un aceiro inoxidable AISI 304



## BIOINFORMÁTICA E EVOLUCIÓN MOLECULAR

**Investigador:** David Posada González

**Organización:** Universidade de Vigo

**Grupo:** Bioquímica, Xenética e Inmunoloxía/Xenética/Bioinformática e Evolución Molecular.

**Creación:** 2008. Conta con 12 membros, todos investigadores da Universidade de Vigo

**Colaboracións:** Brigham Young University (EUA), University of California (EUA), CSIC, ISCIII, etc.

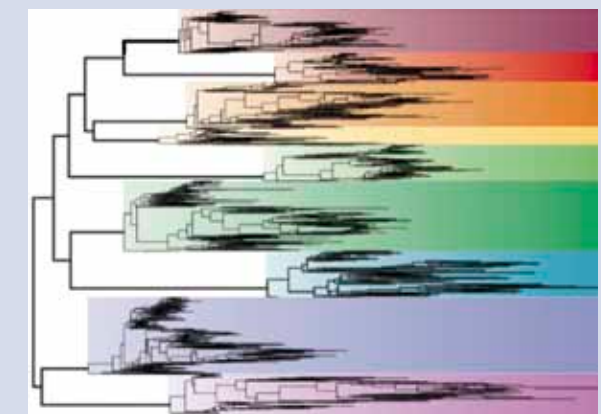
**Liñas de investigación:** Evolución molecular, bioinformática, filoxenómica, filoxenética, evolución viral.

**Relación co CESGA:**

Iniciamos a relación en 2008. Realizamos paralelización de ferramentas bioinformáticas desenvolvidas polo grupo. Utilizamos e desenvolvemos (sobretudo en C e Perl) unha grande variedade de aplicacións OpenSource no noso traballo diario. En xeral executamos as aplicacións no noso propio cluster.

O CESGA apoiou, ben como Ente Promotor Observador ou como Asesor distintos proxectos de investigación rexionais (Xunta), nacionais (MEC, MICINN) e europeos (ERC Ideas), sobre evolución do virus da SIDA e sobre modelos de evolución xenómica.

<http://darwin.uvigo.es>



Evolución do virus do VIH-1. Mostra un árbol filoxenético construído a partir de 1195 secuencias do xen da envoltura do virus. Cada cor representa un doente distinto



# MeteoGalicia

## Moito máis que o tempo

Carlos Fernández Balseiro  
Dpto. Predición Numérica e Investigación. MeteoGalicia



O activo máis importante de MeteoGalicia, o seu equipo humano

MeteoGalicia, Servizo Meteorolóxico da Xunta de Galicia dependente da Consellería de Medio, Territorio e Infraestruturas, naceu en 1999 froito dun Convenio coa USC. MeteoGalicia consta de catro grandes áreas; predición operativa, predición numérica, climatoloxía e observación e a área de TICs. Actualmente o persoal de MeteoGalicia é de 35 persoas fundamentalmente licenciados e doutores en físicas.

A rede de observación de MeteoGalicia consta ao día de hoxe de 72 estacións meteorolóxicas automáticas que recollen en tempo real datos de temperatura, vento, humidade, precipitación, radiación solar e temperatura do chan. Dispón por outra parte dun receptor satélite Meteosat de 2ª xeración, un sistema de detección de raios, así como tamén efectúa o lanzamento de radiosondaxes en situacións meteorolóxicas especiais.

Para predicir o comportamento futuro da atmosfera utilízanse modelos atmosféricos.

Un modelo meteorolóxico non é máis que unha serie de ecuacións matemáticas que tratan de describir o comportamento físico da atmosfera. Polo tanto, unha vez coñecida a situación nun instante dado, ofrécenos unha solución da atmosfera para un instante posterior.

Para coñecer a situación nese instante dado e que sirva como campo inicial do modelo empréganse os datos de observación antes comentados. Este campo inicial do modelo só será unha aproximación á realidade, debido ao número limitado de datos existentes para xeralo. Ademais, é necesario contar con multitude de datos no resto do mundo, para saber que será o que nos afectará nos próximos días.

Por outro lado, as ecuacións non teñen unha solución exacta, e hai que discretizalas, é dicir, resolvelas en puntos determinados e cun determinado espaciado horizontal e vertical (resolución do modelo). O sistema de predición operativa de MeteoGalicia

cobre toda Galicia con 4 km, baixando ata 1 km de resolución en lugares concretos e de difícil orografía. A alta capacidade de computación, como a que ofrece o Finis Terrae, permitiu chegar a este nivel de detalle, impensable hai poucos anos.

Grazas a estas predicións, MeteoGalicia pode ofrecer os seguintes servizos:

### Predición operativa

Os predictores sobre a base da súa experiencia e coñecemento do clima galego “traducen” estes campos en mapas con símbolos, en predicións para as principais localidades galegas e para os Camiños de Santiago, que se publican diariamente na web (<http://www.meteogalicia.es>), así como nos medios de comunicación escritos, de radio e televisión. Realizan tamén a predición de fenómenos meteorolóxicos adversos, que se subministran a Protección Civil para que estes realicen as tarefas correspondentes de aviso á poboación en función do risco meteorolóxico predito.



### Produtos numéricos

Entre eles cabe destacar a predición do vento para o cálculo da potencia que xera un parque eólico, a previsión de fenómenos adversos nas estradas, a predición de precipitación para a previsión de desbordamento de ríos, ou a predición que se realiza no verán, en colaboración co SERGAS, para alertar de posibles episodios de vaga de calor.

As predicións meteorolóxicas numéricas permítenos tamén traballar con sistemas de predición oceanográficos, xa que estes están moi ligados ao que acontece na atmosfera. Dende MeteoGalicia empregamos, tamén de forma operativa, modelos para a predición de ondata e da hidrodinámica (velocidade e dirección da corrente, nivel do mar, temperatura e salinidade). Estes modelos están baseados nas mesmas técnicas que os modelos meteorolóxicos, se ben neste caso, a xeración do campo inicial é moito máis complexa que no caso da atmosfera, debido a que o número de datos reais rexistrados no mar é moito menor.

Grazas a diversos proxectos europeos (ECOOP do 6º programa marco, EASY, RAI, EASYCO, EROCIPS e ARCOPOL de Interreg) e conxuntamente con Intecmar, Cetmar e a Universidade de Vigo, o número de plataformas e boias oceanográficas está a aumentar significativamente nos últimos

anos. Isto permitiranos xerar campos iniciais moito máis precisos mellorando así as posteriores predicións, e validar e axustar os modelos oceanográficos, comparando os seus resultados cos datos reais en múltiples puntos e condicións.

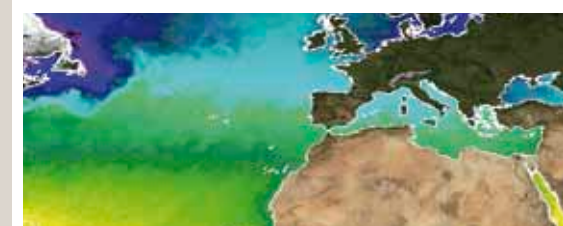
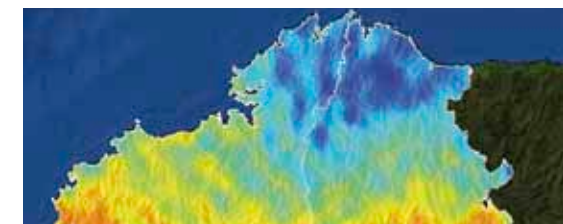
Por último resaltar que a natureza non lineal das ecuacións da atmosfera e a inexactitude das condicións iniciais antes comentada nos levan a erros nas predicións numéricas, de tal xeito que, canto máis lonxe estea o instante a predicir do instante inicial, maior será o erro, e mesmo facendo tecnicamente imposibles as predicións a longo prazo. Estes inconvenientes, son aproveitados para xerar un conxunto de posibles campos iniciais dos que partan distintos modelos e ter así distintas solucións para un mesmo instante temporal. Nacen así as predicións por conxunto ou probabilísticas. Fixándonos nun determinado fenómeno, pódese estimar a probabilidade de que este aconteza. Por exemplo, a probabilidade de que chova nun determinado día ou a unha determinada hora. Esta é a técnica usada por MeteoGalicia, para facer predicións a medio prazo.

En termos xerais adóitase dicir que as predicións deterministas teñen unha fiabilidade aceptable nos 2-3 primeiros días, sendo necesario recorrer a técnicas probabilísticas como a anterior para predicións a medio prazo.

Proximamente, MeteoGalicia contará cun radar meteorolóxico que lle permitirá seguir e predicir con máis detalle os fenómenos adversos, así como mellorar os campos iniciais de contido de auga na atmosfera e a validación da precipitación predita polos modelos. En canto aos modelos, o próximo paso será implementar o modelo ROMS oceánico na marxe ibérica, así como prover de predicións de caudal dos ríos realistas aos modelos costeiros.

<http://www.meteogalicia.es>

© iStockphoto.com/Drazen Vukelic





# Green Computing

## Accións a prol da eficiencia enerxética no CESGA

J. López Cacheiro, C. Fernández Sánchez, J.I. López, P. Rey, A. Feijoo, S. Díaz  
Dpto. Sistemas, CESGA  
sistemas@cesga.es

O CESGA conta actualmente cun CPD de 300 m<sup>2</sup> que dispón de 2 transformadores capaces de subministrar máis de 1.5 MW e está respaldado con 4 SAIs cunha capacidade total de 980 KVA e un grupo electrógeno de 1125 KVA. O mecanismo utilizado para refrixerar o CPD é mediante dúas arrefriadoras, cunha capacidade refrixeradora de 580 KW cada unha, que subministran auga fría a 8 climatizadoras interiores que á súa vez arrefrían o aire da sala. A potencia media de toda a infraestrutura de supercomputación e de soporte rolda os 600KW polo que resulta moi importante unha correcta análise da eficiencia enerxética dos distintos compoñentes.

O feito de que a eficiencia enerxética é un tema de especial relevancia no mundo da supercomputación vese claramente reflectido na creación da lista do Green500 (www.green500.org) unha lista análoga ao Top500 (www.top500.org) pero onde se ten en conta non só a potencia de cálculo senón tamén a eficiencia enerxética dos superordenadores.

Os superordenadores requiren de condicións específicas de temperatura e humidade para operar que obrigan aos centros de supercomputación a instalar custosos sistemas de climatización para garantir o seu funcionamento. Estes sistemas ademais consumen cada ano unha parte moi importante da enerxía eléctrica total do centro.

### Free Cooling e Recuperación de Calor

Precisamente o sistema de climatización (HVAC) é o lugar onde se presentan a maior parte das oportunidades de mellora da eficiencia enerxética. A eficiencia deste é a que determina en último lugar o grao de eficiencia global do CPD, a cal se adoita medir a través da métrica denominada PUE (Power Usage Effectiveness):

$$PUE = \text{Potencia Total} / \text{Potencia Equipos IT}$$

Actualmente o PUE do CESGA é lixeiramente inferior a 2, o ideal sería que o PUE estivese o máis próximo a 1 posible. Compañías como Google conseguiron que o PUE media dos seus CPDs sexa de 1.22, chegando nalgúns deles a valores de 1.15.

O CESGA conta con dúas arrefriadoras cunha capacidade de 580 KW cada unha que se encargan de arrefriar a auga quente procedente do CPD ata 11°C. Esta auga chega ás climatizadoras interiores que a aproveitan para arrefriar o aire do CPD, posteriormente a auga quente volve ás arrefriadoras e repítese o ciclo.

O Free Cooling é un mecanismo que permite ás arrefriadoras aproveitarse das baixas temperaturas do aire exterior para arrefriar a auga sen necesidade de utilizar os compresores. En xeral, a experiencia di que se a diferenza de temperatura entre o aire exterior e a temperatura da auga é de máis de 4° C as arrefriadoras empezan a utilizar o Free Cooling.

Outra das tecnoloxías de aforro enerxético coa que conta unha das arrefriadoras é a de recuperación de calor. Esta funcionalidade permite á arrefriadora aproveitar a calor xerada polos compresores para quentar auga que é utilizada no sistema de calefacción do centro. Un dos problemas que se nos pode formular é que, nalgúns situacións, este sistema pode ser incompatible co Free Cooling xa que se se está a aproveitar o aire exterior para arrefriar a auga e non se están a utilizar os compresores entón non teremos calefacción. No CESGA nestes casos contamos coa posibilidade de utilizar unha bomba de calor que funciona de forma independente ás arrefriadoras.

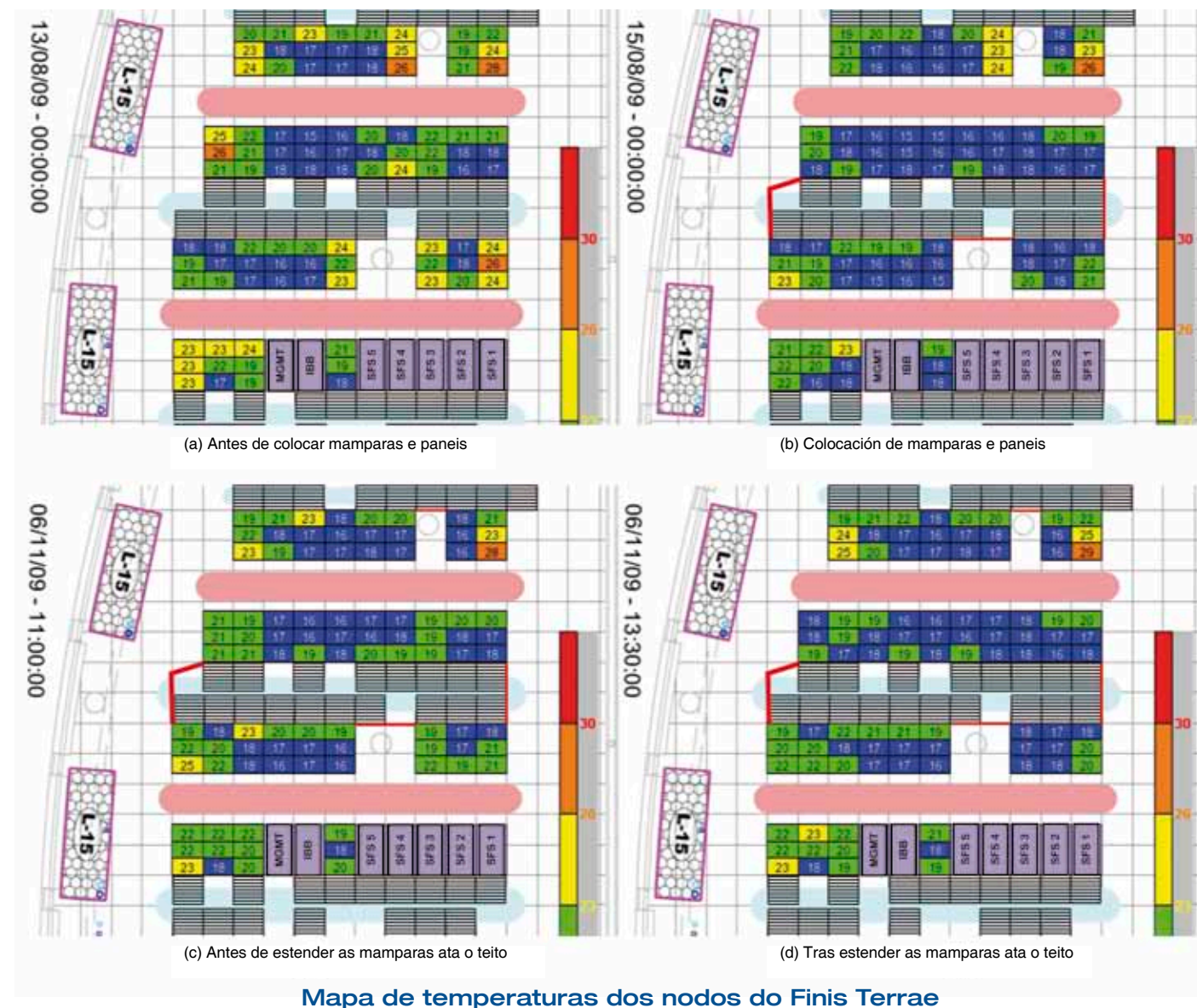
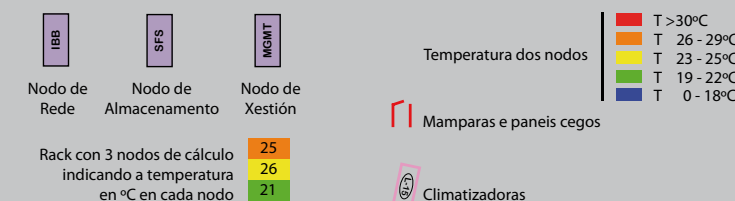


Figura 1: Mapa de temperaturas dos nodos de cálculo do Finis Terrae en distintas configuracións do CPD utilizando mamparas e paneis para evitar a recirculación do aire.



### Peche de corredores

É importante unha correcta distribución dos racks no CPD para que se estableza unha boa circulación de aire. Hoxe en día a configuración que se considera óptima é colocar os racks en filas coas partes frontais enfrontadas entre si formando corredores quentes e fríos. É moi importante asegurar que non se produce unha re-circulación do aire quente. Unha solución que se adoita adoptar é pechar unha clase de corredores, ou os fríos ou os quentes. No noso caso optamos por pechar os corredores fríos. Adicionalmente colocáronse paneis cegos para evitar a recirculación do aire nos ocios entre racks que queda debido á presenza de columnas no CPD.

Na Figura 1 móstrase o efecto da colocación das mamparas e paneis cegos nun dos corredores. Como se pode ver comparando as gráficas 1a e 1b a temperatura á que reciben o aire os nodos descende en xeral, especialmente no caso dos tres nodos que anteriormente estaban a 26°C e que agora pasan a 22 e 20°C, non quedando ningún nodo na zona laranxa.

Gustaríanos rematar este artigo destacando todos estes aspectos que se están a ter en conta no deseño dun novo edificio que servirá para aloxar o novo CPD do CESGA. Confiamos en que grazas aos novos mecanismos de aforro enerxético se poida mellorar notablemente a eficiencia enerxética do CPD actual.



# Cloud Computing

## PROXECTO NUBA PARA MELLORAR A COMPETITIVIDADE

Carlos Fernández Sánchez  
Administrador de Sistemas do CESGA

“Cloud Computing”, o novo paradigma de xestión de infraestruturas de computación que ofrece servizos a través de Internet, facilitará ás empresas a converter os seus custos fixos en variables ao transformarse a infraestrutura informática nunha “utility” para o negocio (similar á contratación do gas, por exemplo) con recursos asignados baixo demanda e facturados polo seu uso real.

Grazas a este paradigma aparecerán novos servizos en Internet ao minimizar risco e investimento en CAPEX e OPEX, ademais de mellorar substancialmente o “time-to-market”. O risco no investimento redúcese, establecéndose unha relación directa entre os custos con produtividade/rendibilidade e estimulando a actividade empresarial, e en especial das PYMEs, ao reducir a barreira de entrada tecnolóxica e os riscos de investimento, repercutindo nunha maior eficiencia, produtividade e nun posicionamento máis competitivo das empresas no mercado.

Desenvolver este paradigma supón a implantación de novas tecnoloxías TIC que simplificarán a relación entre provedor, servizo e infraestrutura. Para iso en España estase a desenvolver **NUBA**, (Normalized Usage of Business-oriented Architectures) un proxecto tecnolóxico singular que investiga e desenvolve tecnoloxías que abordarán os retos do mercado “Cloud”.

Coordinado por Telefónica Investigación e Desenvolvemento, **NUBA** conta con socios como Atos Origin, Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación, Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA), Universidade Complutense de Madrid, Catón Sistemas Alternativos, Digital Bubble, EyeOS e Xeridia. **NUBA** está financiado polo Ministerio de Industria, Turismo e Comercio dentro do programa Avanza I+D, cun presuposto de 4.740.614,87€ durante os anos 2009 a 2011.



**NUBA** centrarase na xestión dunha “Cloud” orientada a servizos que integra infraestruturas de diferentes provedores, sobre as que transparentemente os provedores de servizo poidan definir os requisitos dos seus ámbitos virtuais e despregar e xestionar os seus servizos. Tamén considerará a automatización da supervisión, escalado, control de custos e a xestión remota. A investigación centrarase no modelo de xestión do negocio “Cloud”, no deseño e implementación da arquitectura software e na evolución do estado da arte actual. Os resultados serán Software Libre e publicaranse na Comunidade Morfeo

[www.morfeo-project.org](http://www.morfeo-project.org)

Crearase así as tecnoloxías que permitan xestionar en tempo real as “Clouds” de computación baixo criterios de negocio, onde a asignación de recursos de infraestrutura se realice garantindo os niveis de servizo (SLA) requiridos e onde se consiga minimizar os custos dos ámbitos de computación e o seu consumo enerxético.

Os provedores de infraestruturas (Centros de Supercomputación, grandes Empresas de comunicacións ou Telcos e empresas de “hosting” tradicionais) dispoñerán de tecnoloxías, ferramentas e modelos de xestión de referencia para optimizar a asignación dos seus recursos, xerar novas oportunidades de negocio e competir nunha situación máis favorable nos mercados emerxentes “Cloud” de USA e Europa (Amazon, GoGrid, FlexiScale, etc).

A validación dos resultados será a través de catro “*experiencias piloto*”:

- “Posto de traballo virtual” (TID)
- “Servizos de Marketplace de aplicacións (TID) [www.tid.es](http://www.tid.es)
- “Radioterapia para hospitais” (CESGA) <http://eimrt.cesga.es>
- “Escritorio online” (EyeOS) <http://eyeos.org/es>
- “Cloud para Aplicacións Web” (ATOS) [www.es.atosorigin.com/es-es](http://www.es.atosorigin.com/es-es)

## Salvando o espazo entre a e-Ciencia de Europa e Iberoamérica

**IBERGRID**  
4 rd IBERIAN GRID INFRASTRUCTURE CONFERENCE  
Braga (Portugal) May 24 - 27, 2010



A 4ª **IBERIAN GRID INFRASTRUCTURE CONFERENCE, IBERGRID 2010**, celébrase este ano os días 24-27 de Maio en Braga, Portugal. A Universidade do Minho, organizadora de esta edición, acaba de lanzar o primeiro “call for papers”. O prazo para a entrega de traballos remata o vindeiro 7 de marzo de 2010.

**IBERGRID 2010** é xa a cuarta edición da serie de conferencias iniciadas pola infraestrutura Grid Ibérica, co obxectivo de impulsar a construción dunha infraestrutura Grid común ibérica e de fomentar a cooperación nos campos da computación distribuída e supercomputación. O evento reúne a académicos, investigadores, estudantes, especialistas da industria e os profesionais en todas as ramas do coñecemento que comparten unha necesidade común, é dicir, a informática de grande alcance, a visualización e / ou recursos de almacenamento.

O lema deste ano é “*Bridging the gap between European e-Science and Iberian America*” (Salvando o espazo entre a e-Ciencia de Europa e Iberoamérica) apunta ao compromiso de promocionar e consolidar a investigación aplicada no marco da e-Ciencia e europea e iberoamericana.

No marco de IBERGRID celébrase tamén, o día 27 de marzo, a **II Xornada HPC**, sobre casos de computación de altas prestacións.

[www.ibergrid.eu/2010/index.html](http://www.ibergrid.eu/2010/index.html)

## Fibra escura ao servizo da ciencia galega despega RECETGA NOVA

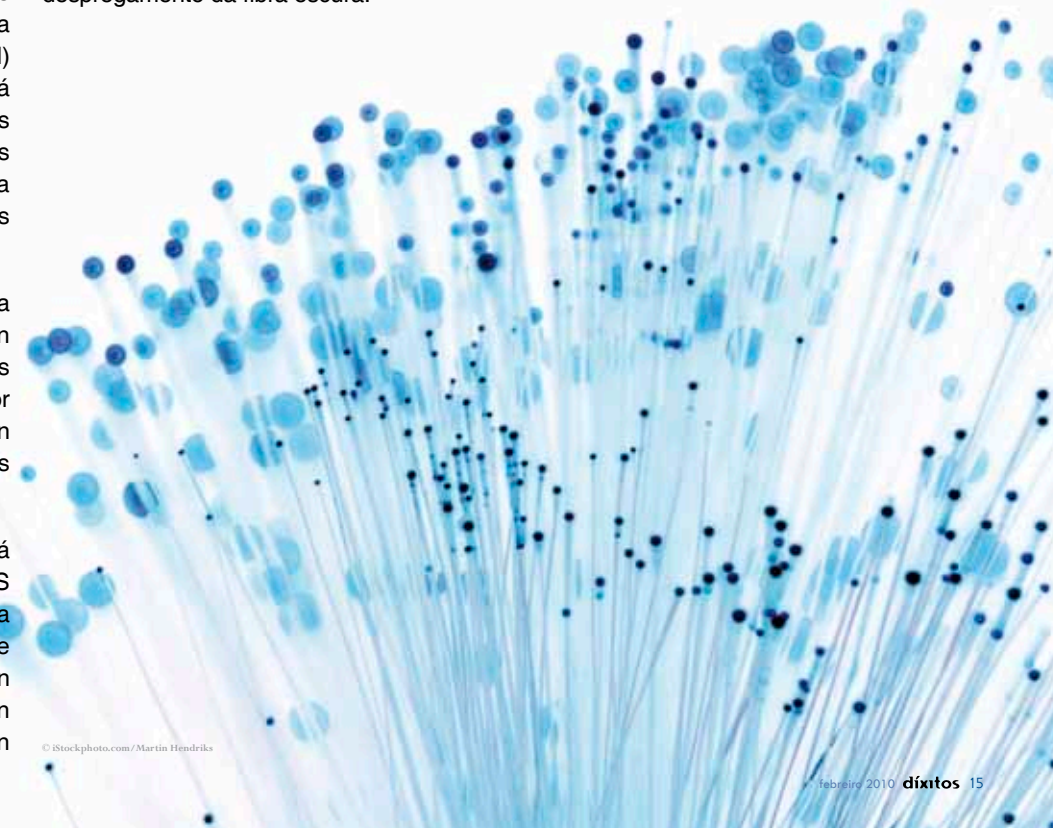
**RECETGA**  
Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia

RECETGA, a Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia, comeza a última actualización da súa tecnoloxía, coa interconexión, con fibra óptica escura, das 7 cidades galegas, RedIRIS e a rede para a Computación Científica Nacional (FCCN) de Portugal. A súa capacidade permitirá á comunidade científica galega dispoñer dos máis avanzados servizos de comunicacións e cálculo proporcionando o ancho de banda requirido para os máis ambiciosos proxectos de investigación.

Nace así **RECETGA NOVA**, unha actualización que posibilita a interconexión con fibra escura das tres universidades galegas, os centros que o Consello Superior de Investigacións Científicas (CSIC) ten en Galicia, así como outras institucións vinculadas ao I+D+I.

**RECETGA NOVA** dará acceso á comunidade científica de Galicia a RedIRIS NOVA, a nova rede estatal soportada en fibra escura, actualmente en desenvolvemento e que se conectará a **RECETGA NOVA** en Lugo e Ourense. O modelo de colaboración CESGA-RedIRIS para a implantación

conxunta da rede autonómica, será un modelo a seguir para o establecemento de futuras colaboracións en España para o despregamento da fibra escura.







CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA

Instalación Científico Tecnológica Singular **ICTS**

