

díxitos

xullo 2010

Novas do Centro de Supercomputación de Galicia

DIRECCIÓN

Javier García Tobío

COORDINACIÓN

Fernando Bouzas Sierra

REDACCIÓN

María Piñeiro González

COLABORACIÓN

M^o Jesús Frieiro

Paula Tosar

Carmen Coteo Queijo

M^o José Rodríguez Malmierca

Enrique Álvarez Fanjul

Marcos García Sotillo

DESEÑO, GRAFISMO E MAQUETACIÓN

Jose Manuel Armesto Mantilla

FOTOMECÁNICA 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

I Encontro Vindeira Capital Network	2
Apoio ao Emprendedor	3
De EGEE a EGI.eu	4
IBERGRID	5
AIMEN	6
Modelos Climatolóxicos no FinisTerra	7
USUARIOS	8 - 9
OPEN CIRRU: Por un Cloud de Código Aberto	10
Primeira Convocatoria CESGA - ICTS	11
Novas	12
Aula CESGA - Avaliación Positiva	13
Un gran salto para a Ciencia Mariña	14 - 15



I Encontro Vindeira Capital Network

Co fin de dar a coñecer o tecido empresarial galego e atraer o interese de co-inversores potenciais para completar roldas de financiamento de empresas tecnolóxicas locais ou de novos proxectos empresariais, o "I Encontro Vindeira Capital Network", reuniu este mes en Santiago a inversores, analistas e emprendedores no que é o primeiro paso para a creación dunha estrutura estable de Capital Risco para empresas e proxectos TIC en Galicia.

Organizado polo Cluster TIC Galicia e a Plataforma Tecnolóxica Galega das TIC - Vindeira, coa colaboración do CESGA e GRADIANT, dentro do proxecto [AEI] Cluster TIC - Vindeira, contou coa asistencia de quince entidades inversoras de Fondos de Capital Risco e Business Angels a nivel estatal en materia TIC, cun rango de investimento entre os 100.000 e 6 millóns de euros.

Dos vinte proxectos presentados polos emprendedores, unha Comisión de Detección e Avaliación de Proxectos seleccionou oito, segundo criterios de adecuación ás características expresadas polos inversores, que foron presentados durante os dous días que durou a reunión. Ademais a outro grupo de proxectos abriuselle a oportunidade de ser presentados aos inversores a través dun "book" e unha presentación breve a cargo de Vindeira, que os interesados puideron consultar, e deste xeito garantir que todas as ideas prometedoras de proxectos de I+D tiveran a oportunidade de conseguir un adecuado financiamento. Sen dubida esta iniciativa é unha ferramenta clave para mellorar as capacidades galegas de I+D+i.

O evento serviu coma punto de partida para pór en marcha o proceso de creación dunha estrutura estable de Capital Risco para o sector TIC galego. A creación desta rede entre os emprendedores galegos e importantes entidades de Capital Risco e Business Angels en España dentro do sector das TIC será clave para duplicar a inversión en I+D+i neste sector, o que é o primeiro obxectivo do Plan Estratégico da [AEI] Cluster TIC - Vindeira. Asimesmo dende o Grupo de Traballo de Emprendedores de Plataforma Tecnolóxica Galega das TIC - Vindeira crearase un foro para emprendedores do sector TIC de Galicia para facilitar o desenvolvemento de proxectos empresariais, e a longo prazo, a creación dun Fondo de Capital Risco público-privado para financiar proxectos de I+D+i dos membros.

www.vindeira.org

Apoio ao Emprendedor

María Jesús Frieiro

e-Business & Transfer department - ICHNOS Plus Project, CESGA

O CESGA, como socio participante do proxecto europeo ICHNOS Plus do programa INTERREG IVC, que versa sobre mecanismos de apoio rexional a emprendedores e empresas, acudiu o pasado 16 de Xuño ao "V Día do emprendedor", organizado polo IGAPE e que se celebrou en Santiago. Os emprendedores tiveron alí ocasión de coñecer novas ferramentas e sistemas de apoio aos emprendedores, como os viveiros de empresa e formas de financiamento. As dúas sen dubida ferramentas de valor, a ter en conta á hora de iniciar unha aventura empresarial.

Viveiros de empresa en Galicia

Os Viveiros de Empresa son iniciativas promovidas por Institucións públicas (Universidades, Xunta de Galicia,...) e privadas, sen ánimo de lucro. Nacen para proporcionar axuda a emprendedores, apoiando ás iniciativas desde o seu inicio, ata que poidan empezar a producir e expandirse. Ofertan espazo físico, en despachos ou naves, que poden arrendar a baixo custe, ou gratis, así como servizos comúns (salas, fax) e individuais (internet, mobiliario). Tamén proporcionar apoio técnico e asesoramento legal, empresarial e financeiro desde o inicio da actividade e na permanencia e tutela posterior. Existen ademais numerosos Concellos que incentivan o tecido empresarial local e o fomento do emprego a través de viveiros.

Financiamento: Business Angels e Empresas de Capital Risco

Os Business Angels (BA) e as Empresas de Capital Risco, invisten en negocios de nova ou recente creación, con potencial de crecemento e aportan experiencia e contactos. Son inversores privados ou públicos que aportan capital ou financiación, concedendo préstamos (participativos ou ordinarios), grazas a Fondos de Capital Risco.

O principal obxectivo dos BA é a capitalización de novas empresas, e poñen en contacto a emprendedores con inversores.

A empresa tipo a financiar por estes BA son as de nova ou recente creación, empresas en proceso de expansión ou empresas xa consolidadas con dificultades económicas.

A súa participación é temporal vai dos 3 aos 7 anos. A inversión vai dos 60.000 € ós 300.000 € aproximadamente.

Son, en definitiva, instrumentos eficaces para o fomento da cultura emprendedora, que potencian a modernización, o crecemento do tecido empresarial e a creación de emprego.



Financiamento: Iniciativas galegas

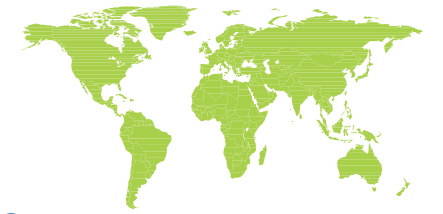
Nome	URL
BANG	http://www.bang.es
UNIBAN	http://www.uniban.org
InnoBAN	http://www.businessangelsinnoban.es
XesGalicia	http://www.xesgalicia.org
UNIRISCO	http://www.unirisco.org
IGAPE	http://www.igape.es

Viveiros de Empresas en Galicia

Nome	URL
UNIEMPRENDE - Santiago	www.uniemprende.es
UNINOVA - Santiago	www.uninova.org
Cámara Vigo	www.camaravigo.com
Cámara A Coruña - Carballo	www.camaracoruna.com
Cámara Lugo	www.camaralugo.com
Cámara Ourense	www.camaraourense.com
Cámara Santiago	www.camaracompostela.com
Cámara Ferrol	www.camarafferrol.org/viveiro.asp
Cámara Vilagarcía de Arousa	www.camaravilagarcia.com
Fundación CEL - Lugo	www.fundacioncel.org
CEI - Lugo	http://cei.lugo.es
CIE - A Granxa - Porriño	www.cieagranxa.com
Mans - A Coruña	www.mans-paideia.com/que_es.html
Vivero de empresas ESCI - A Coruña	www.udc.es
Tecnopole - San Cibrao das Viñas	www.tecnopole.es
Incubadora de Empresas Centro de Negocios de Ferrol	http://centrodenegociosferrol.com
C I E Concello de Ourense	www.ourense.es/portaIOurense
Empresa-Concepto	http://www.empresaconcepto.org
FP Emprande	http://www.edu.xunta.es/fp/fpplus



Fonte: web de Viveiros de Empresa, Business Angels e Empresas Capital Risco mencionados
<http://www.ichnos-project.org>
<http://ichnos.e-negociogalicia.com>



Isabel Campos Plasencia

Coodinadora da NGI Española
Representante de España en EGI.eu
Membro do Executive Board

“O MIDDLEWARE É O GRAN RETO DO GRID”

Para asegurarse de que se aproveita plenamente o grande investimento realizado nos últimos anos en Europa en programas de e-ciencia, en infraestruturas de rede, desenvolvemento de middleware e aplicacións, nace EGI (European Grid Initiative). Finalizado en abril de 2010 o proxecto EGEE-III (www.egee.com), EGI.eu recolle a testemuña, pero cun novo modelo de organización baseado na federación de Iniciativas Grid Nacionais (NGI). Garántese así a sostibilidade da infraestrutura grid europea, creada nos proxectos DataGrid, EGEE-I, -II e -III, que ofrecerá as mesmas ferramentas e servizos, pero aproveitando a experiencia cos seus usuarios dos centros nacionais xa establecidos. 42 países sumáronse xa á iniciativa.

Isabel Campos Plasencia, Coodinadora da NGI Española e representante de España no Consello de EGI.eu, considera que unha das súas vantaxes “é precisamente que non é unha macroorganización instalada nun país e que dende aí intenta contactar cos usuarios. As NGIs ofrecen o soporte aos usuarios, que se canaliza de forma directa e logo se pode escalar a nivel europeo”.

A importancia das iniciativas nacionais vese no propio consello de EGI, no que España ten unha destacada responsabilidade “somos un dos patróns da Fundación, xunto con outras 4 NGIs elixidas polo Consello e levamos unha parte importante do traballo de coordinación do Middleware dentro do proxecto EGI Inspire. O middleware é o pegamento do grid, o software que o fai funcionar. E por iso é o gran reto do GRID, do dependerá a súa operabilidade”.

Aínda que o traballo de desenvolvemento de middleware, como os portais de Contabilidade e de Métricas desenvolvidos polo CESGA para EGEE, “é moi duro e moi desagradecido mentres o fas, con pouca visibilidade... ata que está finalizado”, porque son ferramentas que todos os centros europeos consultan cada día para ver o que se está a executar. “Todo o mundo vai ao portal de Métricas e ao de Accounting, e iso dá visibilidade a todo o traballo de Grid de España”. Na súa opinión hai que seguir traballando nestes desenvolvementos, para conseguir cálculos máis refinados que sirvan, por exemplo, como estudo para estender os modelos de cobramento por uso do grid. “É unha ferramenta moi útil e unha rama de traballo con moito futuro”.

<http://web.eu-egi.eu/partners/ngi>
www.eu-egi.eu

EGi.eu

EGi.eu é unha fundación baixo dereito neerlandés. O seu obxectivo é crear e manter unha Infraestrutura Grid PanEuropea en colaboración coas National Grid Initiatives (NGIs) co fin de garantir a dispoñibilidade a longo prazo dunha e-infraestrutura xenérica e-infraestrutura para todas as comunidades de investigación europeas e os seus colaboradores internacionais.

EGI-INSPIRE

O proxecto EGI-Inspire avarará a transición dun sistema baseado en proxectos a unha e-Infraestrutura sostible pan-europea, apoiando redes de HPC e recursos de HTC. EGI-INSPIRE estará ademais nunha posición ideal para integrar as novas infraestruturas distribuídas de computación (CDIS), como o cloud, redes de supercomputación e grids de escritorio, beneficiando ás comunidades de usuarios no Espazo Europeo de Investigación.

MOBILIDADE XEOGRÁFICA EN e-CIENCIA: “IBERGRID INTERCAMBIARÁ PERSOAS”

Baixo o lema “**Bridging the gap between European e-Science and Iberian America**” celebrouse en Maio en Braga, Portugal, a cuarta edición de IBERGRID. Resultou ser o marco ideal para o anuncio dos responsables de ciencia de ambos países, de compromisos relevantes como a convocatoria do Programa de Mobilidade de investigadores entre España e Portugal, que permitirá recibir estanzas en centros de ambos países por períodos curtos, para desenvolver accións e proxectos específicos, previamente acordados. Gaspar Barreira, Presidente do LIP (Laboratório de Instrumentação e Física Experimental de Partículas de Lisboa) anunciou a convocatoria para proxectos de e-Ciencia do 1 ao 21 de xullo.

O protocolo de financiamento para a convocatoria de proxectos comúns en 2011 con fondos dos dous países, asinarase no cumio Luso-Español de Setembro. O Ministro de Ciencia portugués, Mariano Gago, afirmaba que “o Grid implica moito traballo de natureza técnica e científica que esixe, non só acordos sobre o papel, senón enxeñeiros e técnicos que traballen en conxunto todo o ano, desenvolvendo aplicacións e protocolos de seguridade”. Segundo Javier García Tobío, director do CESGA, “a rede IBERGRID pretende crear o espazo único Ibérico de investigación. Ata o momento só intercambiaba servizos de máquinas; a partir de agora intercambiará tamén coñecemento a través das persoas”.

Pola súa banda, José Manuel Fernández Labastida, en representación da Ministra de Ciencia, Cristina Garmendia, anunciou o compromiso político de finalización e operatividade da rede de fibra óptica para uso científico e tecnolóxico entre España e Portugal, para finais de 2010. A interconexión destas redes é posible grazas á colaboración da Xunta de Galicia, que participa facilitando as súas infraestruturas da “Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia”, xestionada polo CESGA.

IBERGRID Conference Chairs:
Javier G. Tobío (CESGA, Galicia), Lúcia Ribeiro (U. Porto),
António Pina (U. Minho) e Alberto Proença (U. Minho).

LOBBY IBERICO

IBERGRID é unha plataforma e grupo de presión importante no grid de Europa, “España e Portugal suman 100 votos dos 900 que ten o Consello de EGI, máis que calquera outro país: teñen que negociar con nós”, recordou a coordinadora da NGI española Isabel Campos. En opinión de Mario Campolargo, da Comisión Europea, o traballo realizado entre as comunidades portuguesa e española no ámbito Grid, reflectido en IBERGRID, “se ten en Europa como un exemplo a seguir de colaboración e posta en común de recursos humanos e infraestruturas”. Campolargo destacou ademais a importancia estratéxica dos dous países para Europa pola súa capacidade de colaboración con Latinoamérica e as iniciativas Grid dirixidas a ese continente (EELA, etc.)

PARTICIPACIÓN DO CESGA

O Centro de Supercomputación de Galicia, CESGA, presentou máis de seis ponencias e organizou as II Xornadas de Supercomputación, o Workshop de HPC nacido ao abeiro de IBERGRID, unha análise do “state of the art” da supercomputación española no que participan todos os centros nacionais, tratando políticas de acceso, novidades e os retos e proxectos máis emblemáticos do último ano.

“Best student paper award” IBERGRID 2010

Miguel Villaplana Pérez, do Grid Computing Group, do IFIC - Institut de Física Corpuscular, CSIC - UV, foi o gañador, co traballo **First tests with Tier-3 facility for the ATLAS experiment at IFIC** (Valencia). O modelo de computación do experimento ATLAS do LHC está baseado nunha xerarquía que empeza non CERN (Tier0) e remata nos centros (Tier3). O grupo gañador forma parte dun grupo de traballo, dentro dá colaboración ATLAS, que documenta detalladamente os diferentes prototipos para facilitar o traballo ás institucións que aínda non teñen instalado ou seu Tier3. O do IFIC, considérase ou modelo a imitar, e de aí a súa relevancia.



AIMEN, socio tecnolóxico estratéxico para a industria galega

O Centro Tecnolóxico AIMEN, referente nacional na investigación, perfeccionamento e desenvolvemento dos materiais, tecnoloxías de unión e procesado de materiais mediante tecnoloxía láser, presta servizos tecnolóxicos de alto valor engadido á industria galega, contribuíndo ao fomento e execución de actividades de I+D+i e ao fortalecemento da capacidade competitiva das empresas.

Fundado en 1967, AIMEN é hoxe en día unha organización altamente profesionalizada, cunha plantilla de 236 técnicos e investigadores, e dotada de equipamento de última xeración para ensaios de alta tecnoloxía e máxima precisión.

Área de Deseño Industrial e Simulación

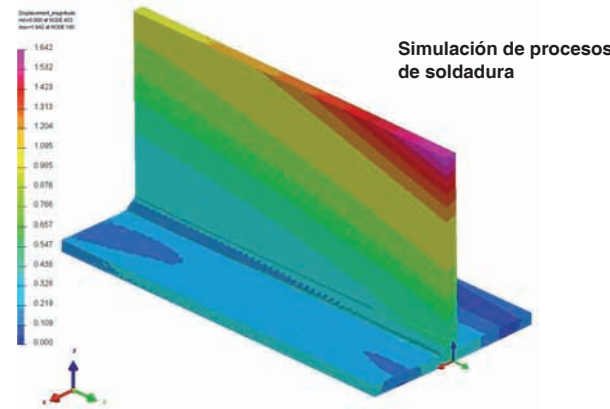
A Área de Deseño Industrial e Simulación ofrece unha gama completa de servizos tecnolóxicos e proxectos de I+D+i ás pemes que dan resposta ás necesidades que demanda ao mercado no campo de desenvolvemento e optimización de produto. Dende esta área tamén se colabora coas empresas para alcanzar solucións que permiten a diferenciación e a obtención de vantaxes competitivas. "Dentro do amplo campo de posibilidades que ofrece o cálculo mediante FEM (Finite Element Method), realízase un esforzo activo por cubrir o conxunto das necesidades que neste campo teñen as empresas en sectores como o metal-mecánico, o naval ou o da automoción, entre outros. Os cálculos lanzados nesta Área realízanse utilizando de xeito exclusivo o equipamento dispoñible no Centro", segundo comenta David Martínez, responsable da área de Deseño Industrial e Simulación de AIMEN.

Nos últimos anos AIMEN realizou traballos de simulación de diferente entidade para case un cento de empresas de maneira simultánea cos que, de forma interna, xera a actividade de investigación do Centro.

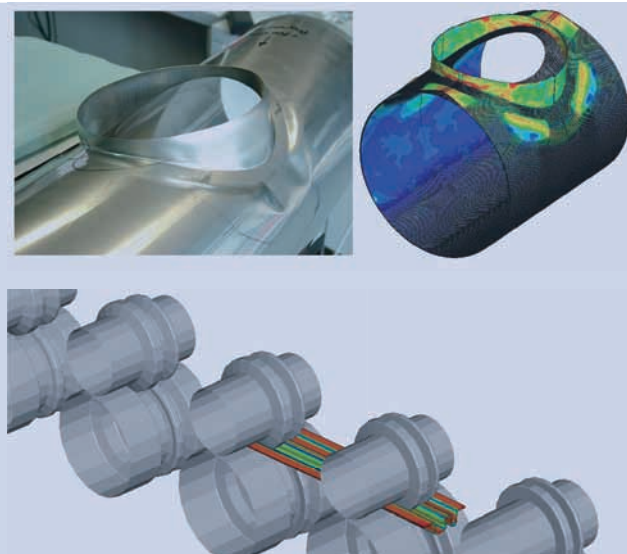
Nesta liña, AIMEN na actualidade cubre tres campos principais para o estudo de materiais metálicos e non metálicos. Dunha banda, a análise estrutural e térmica de todo tipo de conxuntos e compoñentes illados. Unha segunda liña, consistente na simulación de procesos de conformado, soldadura e tratamento térmico mediante análise termo-metalúrxica e mecánica. E por último, estúdase o comportamento a fatiga dos diferentes compoñentes. Para estas análises empréganse, en función da súa idoneidade, procedementos de cálculo lineal e non lineal, estático e dinámico. "A función principal da realización destes cálculos é asistir ao deseño de produtos e procesos cuxas características se escapan do alcance do cálculo clásico ou que, por motivos de optimización ou necesidades de rendemento ou económicas, precisan un grao de detalle maior que o obtido cos métodos tradicionais de cálculo", explica David Martínez.

David Martínez

Responsable da área de Deseño e Simulación de AIMEN



A simulación é unha vantaxe no deseño industrial



AIMEN emprega diferentes ferramentas en función da complexidade e das características dos cálculos a realizar. Deste xeito dispón de software de propósito xeral como CosmosWorks e ABAQUS e software específico como SYSWELD e FORGE3D. Os esixentes requisitos de capacidade de cálculo deste tipo de software nas aplicacións que desde a Área se desenvolven, levaron a AIMEN, dende o decidido apoio a esta liña de traballo, a levar a cabo un esforzo no referente á dispoñibilidade de recursos de computación. Isto conseguiuase sobre a base da utilización de estacións de traballo dedicadas de elevadas prestacións, e a posta en servizo dun servidor de cálculo.

"É no campo do deseño industrial onde en maior medida supón unha vantaxe a utilización destas tecnoloxías, xa que, de forma acelerada, está a diminuír a necesidade de custosos e lentos procesos de comprobación experimental mediante probas sobre prototipos", conclúe David Martínez.

Simulacións climáticas da Tropopausa extratropical realizadas no FinisTerraee por investigadores do grupo EPhysLab da Universidade de Vigo en Ourense, forman parte do informe sobre validación de modelos climáticos "SPARC-CCMVal"(*) publicado en Xuño pola World Meteorological Organization, WMO. O grupo en colaboración co National Center for Atmospheric Research dos EE.UU. (NCAR), asistido por técnicos do CESGA, realizou baixo a coordinación do investigador Juan Antonio Añel Cabanelas o reto computacional "Modelización Atmosférica de Variación Climática da Tropopausa con Alta Resolución" utilizando o modelo de alta resolución WACCM, tendo en conta diferentes balances de radiación así como variacións no vapor de auga.

Os resultados poñeranse a disposición tamén do próximo "UNEP/WMO Ozone Assessment" e no próximo informe do IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change), a través da súa inclusión no Community Earth System Model.

"A tropopausa é unha capa atmosférica moi sensible ao cambio climático, principalmente no que se refire á súa altura e presión. É moi fina en comparación coa troposfera e a estratosfera e pola súa baixa resolución vertical, os modelos numéricos convencionais non son capaces de simulala correctamente. Utilizamos WACCM porque ten a capacidade de aumentar a resolución vertical por vontade", sinala Añel.

Para poder modelizar con precisión os fenómenos que suceden na tropopausa, o equipo realizou diferentes simulacións aumentando a resolución vertical de 66 a 103 niveis, (un 50 por cento máis dos que se usan normalmente con WACCM para modelizar toda a atmosfera), aumentando a resolución horizontal do modelo ao dobre do habitual, ou incluíndo ata 125 especies químicas en lugar das aproximadamente 60 usadas polo resto dos modelos incluídos no informe.

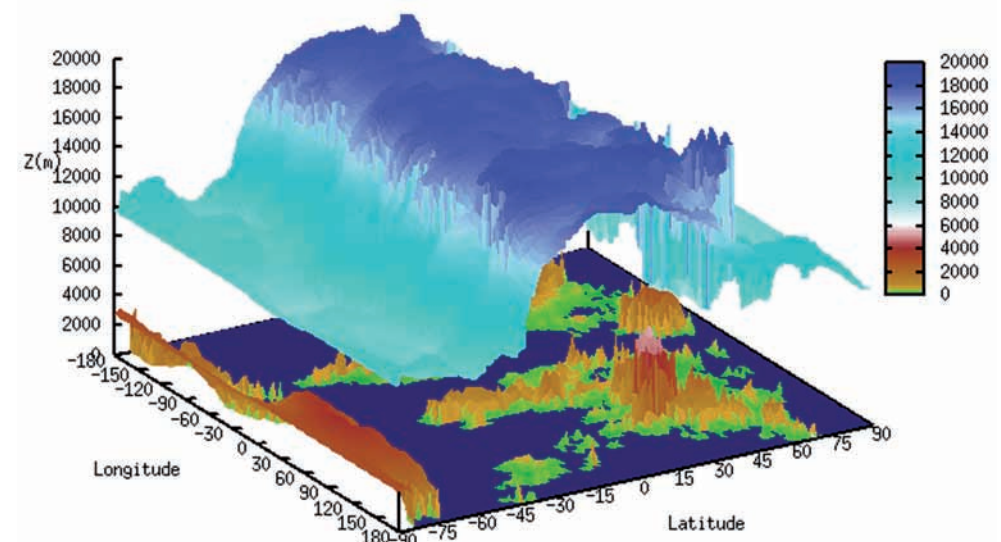
Estes cambios aumentaron considerablemente o custo computacional, chegando a multiplicar por doce o número de recursos necesarios. WACCM executouse con MPI aproveitando a capacidade computacional híbrida do FinisTerraee (memoria distribuída a través de Infiniband/memoria compartida). "Saíunos un modelo moi fiable, con valores moi próximos aos reais medidos con satélites que permite facer estudos de moi alta resolución da tropopausa", asegura Añel, "pero é moi esixente computacionalmente e non se tería podido realizar sen un ordenador como o FinisTerraee e o apoio dos técnicos do CESGA". De feito unha das simulacións, a versión de WACCM con alta resolución vertical na UTLS (alta troposfera-baixa estratosfera) obtivo unha das mellores marcas en simulación do UTLS no informe CCMVal.

O informe SPARC-CCMVal valida e compara o funcionamento dos modelos climáticos cuxos resultados poderán ser usados polo Panel Intergubernamental sobre Cambio Climático. Os modelos validados deben ser capaces de reproducir, entre outras cousas o clima que se observou para o período de referencia 1953-2006, usando para elo as medias de catro simulacións diferentes.

Estudo da Tropopausa

A mediados desta década observouse que a Tropopausa, debido á súa finura e a súa sensibilidade á temperatura, podía servir como un marcador do cambio climático, que reproduce todos os fenómenos da atmosfera en menor espazo. A súa maior altura nas zonas tropicais do noso planeta ademais serve como marcador para medir a expansión das mesmas polo calentamento global. Isto último é de grande interese por exemplo para coñecer a zona de influencia no planeta de enfermidades como a malaria, coñecer a viabilidade de determinados cultivos agrícolas según a zona na que se realicen, ou as variacións das rutas aéreas.

(*) Stratospheric Processes and their Role in Climate Chemistry-Climate Model Validation Activity Group



SIMULACIÓN DE MATERIAIS NANOTECNOLÓXICOS

Investigador: Jordi Faraudo Gener

Organización: Institut de Ciència de Materials de Barcelona do Consejo Superior de Investigaciones Científicas (ICMAB-CSIC)

Departamento: Teoría e Simulación de Materiais (Grupo Soft Matter, 3 membros)

Creación: 2008

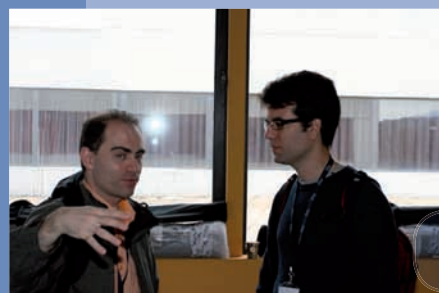
Colaboracións: Univ. Jaume I Castellón, Univ. de Granada, King's College London (UK), Iowa State University (US).

Liñas de investigación: Modelización a escalas atómica e mesoscópica de materiais supramoleculares e coloidais de interés nanotecnolóxico e biotecnolóxico (dispersiones de partículas magnéticas, vesículas e liposomas, membranas, canais nanofluidicos)

Relación co CESGA: A relación co CESGA iniciouse en novembro 2008

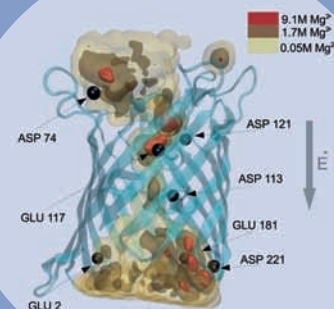
Empregan Códigos "open source" como NAMD2 y LAMMPS, realizando os seus traballos no FinisTerraes

<http://www.icmab.es/icmab/personnel/detail/593.html>



no congreso nanotech insight, discutindo resultados
Jordi Faraudo e Carles Calero

Simulación do transporte de MgCl₂
nun nano canal formado por unha proteína.



SIMULACIÓN DE DISPOSITIVOS ELECTRÓNICOS

Investigador: Raúl Valín Ferreiro

Organización: Universidade de Santiago de Compostela, USC

Departamento: Electrónica e Computación

Creación: 1990

Colaboracións: University of Swansea, University of Glasgow, CESGA e Universidad de Granada

Liñas de investigación: O noso traballo dentro do grupo céntrase no desenvolvemento e optimización de simuladores de Dispositivos Electrónicos, así como a súa adaptación a ámbitos Grid. Outras liñas nas que traballa o grupo son desenvolvemento de software de altas prestacións, aplicacións do paralelismo, computación grid, técnicas de compilación e análise de rendemento de computadores paralelos, hardware e software para procesado de imaxe, computación gráfica, deseño de procesadores e aritmética do computador

Relación co CESGA:

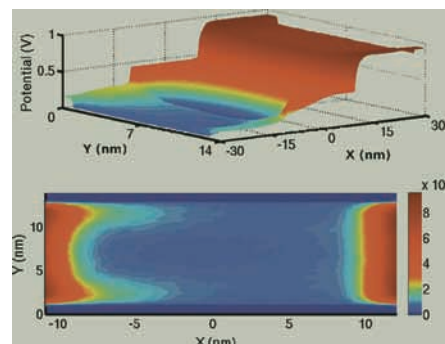
A relación do grupo de Arquitectura de Computadores e o CESGA remontase á data de creación do CESGA.

Utilizamos os servizos de supercomputación, tanto o FinisTerraes coma o SVGD. Ademais o CESGA é o grupo de soporte da VO-Mosfet na NGI-é, organización virtual creada dentro da iniciativa grid española para a simulación de dispositivos electrónicos usando a infraestrutura grid nacional.

Usamos aplicacións propias desenvolvidas en Fortran, C e C++, ademais todos os códigos desenvolvidos están paralelizados con OpenMP ou con MPI.

Co CESGA participamos no proxecto Formiga que rematou o ano pasado e na actualidade participamos no proxecto Formiga-Cloud.

www.ac.usc.es



CICLOS HIDROLÓXICOS

Investigador: Gonzalo Miguez Macho

Área: Universidade de Santiago de Compostela, USC

Departamento: Física da Materia Condensada

Grupo: Grupo de Física Non Lineal.

Colaboracións: Rutgers University, National Center for Atmospheric Research (NCAR)

Liñas de investigación: Estudamos o ciclo hidrolóxico dentro do sistema climático terrestre. Para iso usamos modelos meteorolóxicos e modelos hidrolóxicos desenvolvidos por nós. Tamén adaptamos ambos os dous e realizamos simulacións do clima incluíndo o ciclo terrestre da auga por enteiro, cos seus reservorios da atmosfera, o chan-vegetación e as augas subterráneas e ríos e as interaccións entre eles

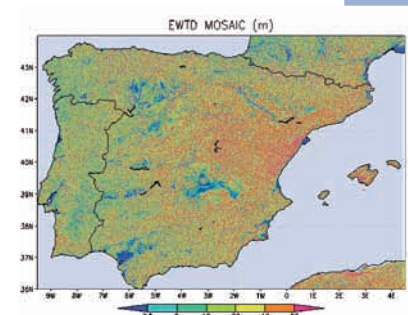
Relación co CESGA:

Traballamos co CESGA dende o ano 2005

Usamos fundamentalmente o Finis Terraes. A nosa investigación non sería posible sen el. Realizamos simulacións que requiren moita memoria ou computación paralela masiva para poder obter resultados nun tempo razoable.

Traballamos con programas estándar e propios. Tamén con programas estándar modificados por nós para incluír novas capacidades.

www.usc.es



QUÍMICA COMPUTACIONAL

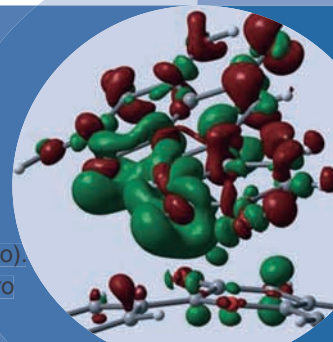
Grupo: Estructura Electrónica e Deseño Molecular
15 investigadores, creado en 1992.

(Depa de Química Física, e profesores de bacharelato).

Investigador responsable: Ricardo Mosquera Castro

Organización: Universidade de Vigo

Departamento: Química Física.



Colaboracións: Colaboracións puntuais con outros do sistema universitario galego e, de xeito máis continuado, con grupos de Química Computacional doutras universidades: Gante, Valencia, Amberes, Oporto, Lund, San Salvador.

Liñas de investigación: Análise de estrutura electrónica molecular e deseño molecular. Traballamos en diferentes proxectos de investigación, nos que interpretar detalladamente distribucións de densidade electrónica, revela información química de interese. Entre eles están: i) A orixe electrónica das interaccións de amoreamento ("stacking"), fundamentais para explicar a estrutura de numerosos sistemas químicos de interese biolóxico; ii) o deseño de pinzas e grúas moleculares: sistemas que permiten a localización e extracción altamente selectiva de moléculas iii) A estrutura e reactividade de antocianidinas, investigación básica para deseñar colorantes e outros aditivos alimentarios saudables; iv) A reinterpretación do efecto anomérico sobre bases fundamentalmente electrostáticas; ou v) A caracterización das limitacións do modelo de resonancia. Parte destes proxectos foron financiados polo Ministerio de Ciencia e Tecnoloxía ou pola Xunta de Galicia. Para levalos a cabo utilizamos diversos métodos de Química Computacional, cuánticos fundamentalmente. As densidades electrónicas calculadas con eles analízanse coa teoría cuántica de átomos en moléculas (QAIM), pero tamén outros métodos, como os de Hirshfeld ou a ELF

Relación co CESGA:

Iniciouse no ano 1994. Servizos de Cálculo científico

Usuarios dos programas estándar de Química Computacional: Gaussian ou GAMESS, e de diversos programas de análise de densidade electrónica e partición da enerxía molecular, algúns deles desenvolvidos polo grupo de investigación.

Nun prazo inferior a un ano esperamos propoñer ao CESGA un primeiro proxecto coordinado.

<http://webs.uvigo.es/quifis/aim1.htm>

OPEN CIRRUS

Por un Cloud de Código Aberto



Os expertos en tecnoloxía opinan que o Cloud, predominará sobre o PC na próxima década. Os modelos de servizo xa se están a definir a través da investigación en computación distribuída. Nunha recente visita ao CESGA falamos diso con DEJAN MILOJICIC, Managing Director de OPEN CIRRUS™, o testbed para investigación en computación distribuída deseñado por HP Labs, Intel e Yahoo! en colaboración con NSF, a University of Illinois (UIUC), Karlsruhe Institute of Technology, e o Infocomm Development Authority (IDA) de Singapore.

OPEN CIRRUS™ é o testbed máis completo dos dispoñibles para a investigación en cloud. Ofrece aos científicos unha serie de oportunidades únicas ata o momento, nunha federación heteroxénea de centros de datos (con máquinas físicas e virtuais e servizos globais), grandes repositorios de datos a disposición e recursos accesibles para a investigación en sistemas e aplicacións.

“A Tecnoloxía é un triángulo: computación, memoria e comunicación, no que o avance de cada un é un obstáculo para os outros. A investigación de sistemas está orientada a solucionar eses obstáculos e é así como a tecnoloxía e a investigación evolucionan” afirma Milojicic. A estrutura de centros federados de OPEN CIRRUS™ permite aos investigadores de sistemas, que desenvolven as técnicas e infraestruturas de software do cloud, o acceso directo a recursos de hardware, algo imprescindible para facer unha investigación fiable, pero que non era posible con ningún outro testbed.

Esta deseñado en código aberto para fomentar a investigación en todos os aspectos do servizo e xestión dun centro de datos, coa intención de ser unha plataforma na que a comunidade de código aberto poida deseñar e implementar códigos en todos os niveis do cloud. Para iso OPEN CIRRUS™ ofrece middleware de código aberto e APIs non propietario. “É importante que a expansión do cloud se soporte sobre unha infraestrutura de software non-propietario e de vendedor neutral, se o cloud vai prevalecer”.

Na súa opinión os grupos de investigación aprenden a funcionar cos tempos da industria e a orientar o seu estudo á transferencia á industria “A combinación industria-universidade é sempre vantaxosa para ambas as dúas partes. Achéganos novas ideas e achega a Universidade aos problemas contemporáneos que interesan ao mercado”.

Malia que en teoría o custo de xestión dunha infraestrutura cloud aumenta co número de sitios, o aforro que xera compartir desenvolvementos de software e métodos operativos reduce o custo total, producindo ademais maior impacto en comunidades de todo o mundo. “A heteroxeneidade dos centros federados permítenos proxectos como Cloud System Ability Dashboard, que controla os custos en todos os centros, para entender canto estas pagando en termos de custo económico, custo social e custo ecolóxico, algo moi importante para segundo que usuarios. Daranos unha mellor comprensión e facilitará a toma de decisións tanto a usuarios como aos donos dos sites”.

OPEN CIRRUS™ pretende ademais fomentar unha comunidade colaboradora arredor deste testbed, proporcionando formas de compartir ferramentas, experiencias e mellores prácticas así como formas de medir e comparar enfoques alternativos para a xestión de servizos a escala de centro de datos.

http://www.hpl.hp.com/personal/Dejan_Milojicic
<https://opencirrus.org>

Dejan Milojicic

Senior Research Manager at HP Labs, Strategy and Innovation Office
Managing Director, OPEN CIRRUS™
Hewlett-Packard Laboratories

TRES MILLÓNS DE HORAS DE CÁLCULO

Carmen Coteló Queijo

Técnico Superior de Aplicacións, CESGA

O CESGA, en calidade de Infraestrutura Científica e Tecnolóxica Singular (ICTS), dispón de axudas para proporcionar acceso gratuito aos seus recursos a grupos de investigación ou investigadores individuais pertencentes a países da UE, do Espazo Económico Europeo e do programa CYTED. Estas axudas están subvencionadas polo Ministerio de Ciencia e Innovación (ref.: ICTS-2009-40).

En 2010 o CESGA abriu 3.000.000 de horas de cálculo do supercomputador Finis Terrae para usuarios ICTS, o 20% das horas totais anuais. O obxectivo do acceso é a adquisición de coñecementos, a formación nas tecnoloxías de uso na instalación ou a realización de traballos de investigación. Os beneficiarios poden ser doutorandos, doutores ou ben investigadores cun mínimo de tres anos de experiencia investigadora, vinculados a un centro de I+D público ou privado, sen ánimo de lucro que formen parte dun grupo de investigación, departamento científico ou unidade similar. O acceso aos recursos realízase de forma priorizada e con garantía de reserva. Os usuarios habituais do CESGA tamén poden optar a estas axudas para obter a devandita priorización ou para realizar accesos presenciais.

Alta calidade das propostas de acceso

Para o primeiro período de 2010 recibíronse 36 propostas de acceso de investigadores de diferentes institucións nacionais e internacionais. Todas as propostas, en opinión do Comité Externo de Acceso e da avaliación realizada por expertos externos, teñen unha alta calidade científico-técnica. A selección de propostas realizouse tendo en conta as horas de cálculo dispoñibles, o número de accesos dispoñibles por modalidade e procedencia do solicitante (acceso presencial), segundo a oferta establecida nas bases da convocatoria. Así, púidose outorgado acceso a 25 propostas pertencentes ás áreas de coñecemento de Astrofísica, Física, Ciencias da Terra e dos Materiais, Ciencias da Computación, Biomedicina, Química, Matemáticas, Tecnoloxía dos Materiais, Enxeñaría Mecánica, Naval e Aeronáutica, Tecnoloxía Electrónica e das Comunicacións e Electromagnetismo. Nove corresponden a accesos presenciais e 16 a accesos telemáticos.

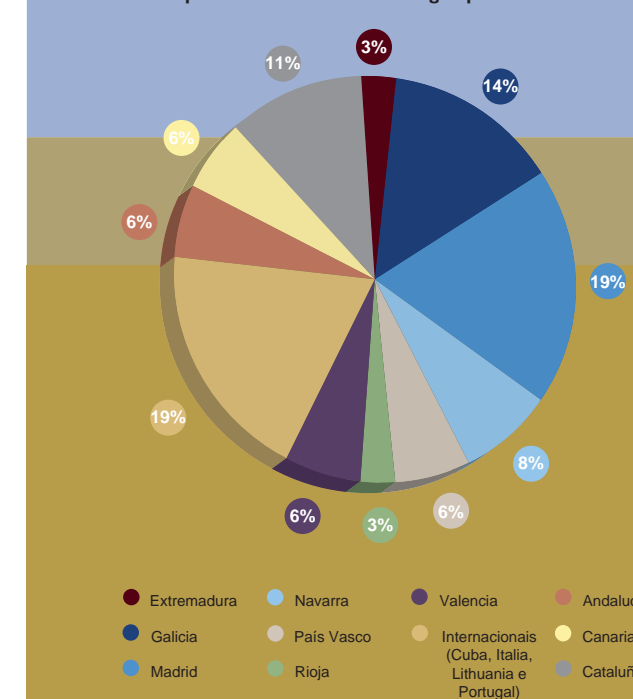
A convocatoria de acceso está aberta de forma continua durante todo o ano, establecéndose períodos de acceso e datas límite de recepción de propostas para cada un. O prazo de presentación de propostas para o segundo período de 2010 finaliza o 19 de Xullo e corresponde a accesos a realizar entre os meses de setembro e decembro.

<http://icts.cesga.es>

Convocatoria CESGA - ICTS



ICTS - CESGA: porcentaxe de solicitudes según procedencia



O Finis Terrae foi cofinanciado pola Xunta de Galicia, o Consello Superior de Investigacións Científicas (CSIC) e o Fondo Europeo para o Desenvolvemento Rexional (FEDER).



Computational Science Summer School

SEGUNDA EDICIÓN DA CESGA COMPUTATIONAL SCIENCE SUMMER SCHOOL

A segunda "CESGA Computational Science Summer School" se celebrará do 21 de xuño ao 15 de setembro de 2010. Dirixida a xoves licenciados, enxeñeiros e investigadores que desexen formarse en técnicas de computación e novas ferramentas de cálculo científico, a Summer School pretende mostrar os usos actuais da ciencia computacional en diversas aplicacións como Matemáticas, Biomedicina, Nanotecnoloxía, etc.

Esta acción conta coa colaboración do Proxecto i-MATH. Un total de 12 alumnos, na súa maioría licenciados en Física e Matemáticas, recibirán cursos de formación en programación, optimización e depurado de aplicacións científicas, tanto secuenciais coma paralelas. Toda a información sobre a CESGA Computational Science Summer School 2010 pode encontrarse en <http://www.cesga.es/SummerSchool2010>

CÉNITS E O LUSITANIA GAÑADORES DO HUMANITARIAN IMPACT

Itanium Innovation Awards

A Fundación Española COMPUTAEX (Computación e Tecnoloxías Avanzadas de Extremadura) e o seu Centro CénitS son os gañadores da categoría Humanitarian Impact dos premios 2010 "Itanium Innovation Awards" que cada ano concede a Itanium(r) Solutions Alliance. Un prestigioso panel de xuíces elixiu ao centro extremeño, sede do supercomputador baseado en Itanium, Lusitania, "polo seu apoio a unha ampla variedade de proxectos sociais, ambientais e de mellora científica da rexión.

A súa entrada foi verdadeiramente de vangarda, e aplaudimos a súa lista considerable de logros e o impacto positivo na rexión dende que completou o seu lanzamento en marzo de 2009". A Fundación foi ademais elixida finalista na modalidade Computationally Intensive Applications xunto con e-Bay e a Universidade de Málaga. COMPUTAEX é unha Fundación pública sen afán de lucro fundada pola Consellaría de Economía Comercio e Innovación da Xunta de Extremadura.

Premios J.L. Lions

PREMIO EN MATEMÁTICAS

O profesor de Matemática Aplicada da USC, José Ramón Fernández García gañou o premio J.L.LIONS 2010, que cada ano concede a European Community on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (Eccomas) a investigadores menores de 40 anos por traballos orixinais en calquera rama

das matemáticas con compoñente computacional. Fernández adicase a investigación do modelado, análise matemático e numérico así como simulación por ordenador de problemas estacionarios de contacto para materiais elásticos, elástico viscoelásticos e viscoelásticos, entre outras liñas.

CNS - BSC

100 MILLÓNS DE EUROS PARA SUPERCOMPUTACIÓN EN 2012

O Ministerio de Ciencia e Innovación e a Generalitat de Cataluña aportarán á infraestrutura europea de PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) 100 millóns de euros para que se instale en 2012 en España un dos cinco supercomputadores máis potentes de Europa.

O novo ordenador se ubicará en Barcelona, preto do rectorado da Universidade Politécnica de Cataluña, UPC, onde na actualidade está o Mare Nostrum.

Aula CESGA

AVALIACIÓN POSITIVA NA ENQUISA A PROFESORES

M^a José Rodríguez Malmierca

Coordinadora da Área de e-Learning, CESGA

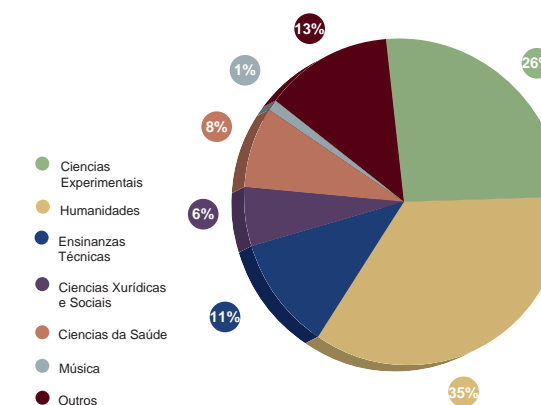
A plataforma de xestión de espazos formativos e colaborativos virtuais, Aula Cesga, que leva en servizo dende o 2002 baixo a xestión da área de e-learning do Cesga, vaise renovar no mes de agosto.

Aula Cesga é un LMS (Learning Management System) baseado na sinxeleza e flexibilidade de uso, o que fai que conte, a data de hoxe, con máis de 11.000 usuarios e casi 700 espazos de traballo formativo e colaborativo activos.

A finais do ano 2009 fíxose unha enquisa aos profesores usuarios de Aula Cesga como parte dun proceso de avaliación da ferramenta, para coñecer a satisfacción dos usuarios coa mesma así como os seus usos e condicións técnica.

Os resultados desta avaliación poden ser consultados na súa totalidade no informe técnico "Cesga 2010-002", dispoñible para a visualización e descarga dende <http://e-learning.cesga.es>. Entre estes resultados, o máis destacable é a ampla satisfacción dos usuarios tanto coas prestacións da ferramenta, como co servizo proporcionado polo CESGA. En canto á evolución do número de usuarios, o crecemento foi moi rechamante. No ano 2006 había en torno a 2800 usuarios, e na actualidade, máis de 11.000. Segundo o noso estudo, un porcentaxe moi elevado destes novos usuarios se achega á ferramenta aconsellado por outros compañeiros xa usuarios da mesma.

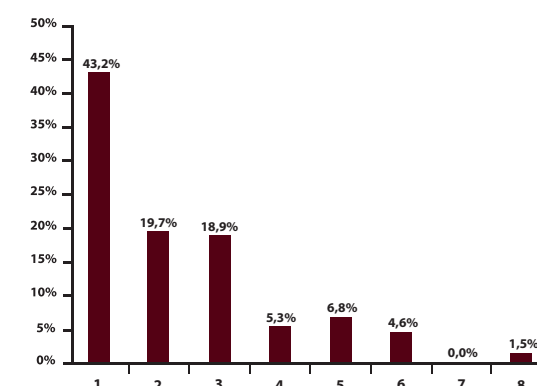
Titulacións dos profesores de Aula CESGA



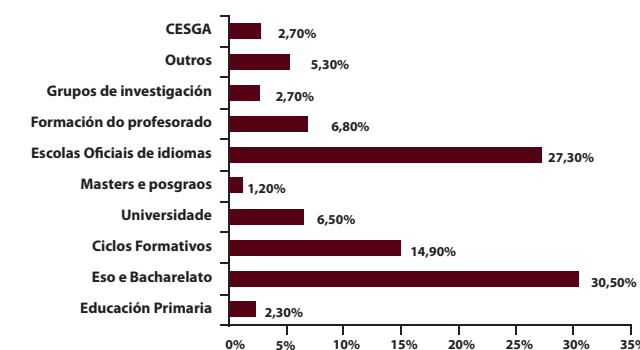
En canto ao nivel de satisfacción coa plataforma segue a ser moi elevado. O 85% dos nosos usuarios din estar "moi" ou "bastante" satisfeitos coa mesma, e case a mesma porcentaxe, 83% o están co soporte recibido polo CESGA neste servizo.

Agora plantexamos a actualización completa da plataforma, baseada no paquete de Software Libre Chamilo <http://www.chamilo.org> unha plataforma de e-learning e colaboración creada recentemente pola comunidade de desenvolvemento de Dokeos, e que continúa coa filosofía de sinxeleza e adaptabilidade desta.

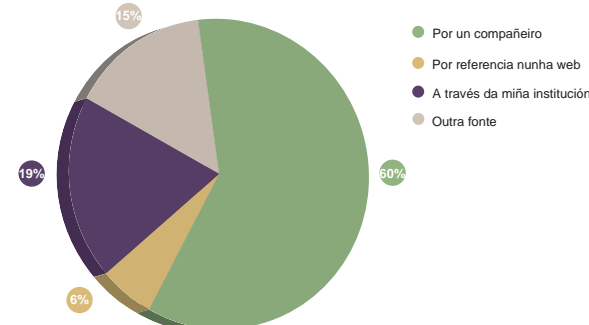
Anos de utilización de Aula CESGA



Tipos de cursos de Aula CESGA



Coñecemento da plataforma Aula - CESGA



A nova versión de Aula Cesga proporcionará múltiples melloras nas funcionalidades existentes, así como novas ferramentas 2.0 a disposición da colaboración e aprendizaxe en rede, que farán que a plataforma evolucione cara a un entorno moito máis interactivo, onde as posibilidades de intercambio de coñecemento entre persoas e grupos dispersos se facilite, no contexto actual de construción de redes sociais, en paralelo ao traballo en grupos máis pequenos dentro dos cursos.

Os espazos de aprendizaxe colaborativo e virtual na Aula Cesga son empregados para soporte de múltiples actividades de aprendizaxe, traballo colaborativo e soporte a grupos de investigación polos nosos usuarios.

un GRAN SALTO para a CIENCIA MARIÑA en España

Enrique Alvarez Fanjul

Jefe de Area de Medio Físico

Marcos García Sotillo

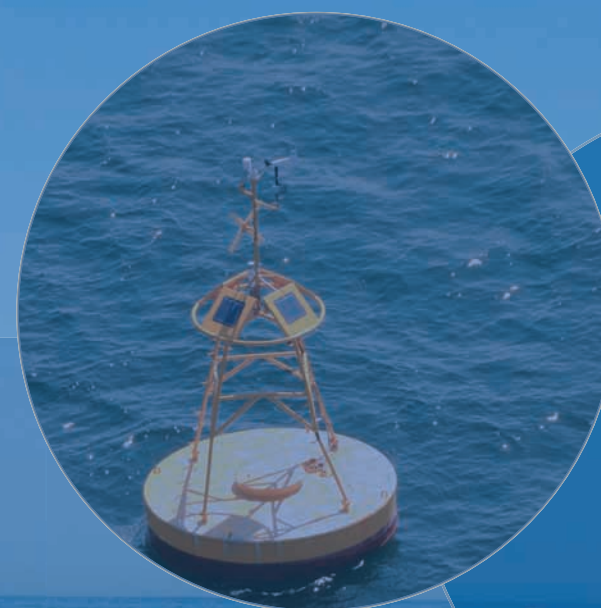
Jefe de División de Dinámica Costera y Portuaria

Puertos del Estado

O pasado mes de febreiro asinou un Convenio de Colaboración entre a Consellería de Medioambiente, Territorio e Infraestruturas de Galicia, a Fundación CESGA e Puertos del Estado (PdE), para a cooperación científico-técnica na simulación e análise do medio físico mariño e o seu impacto no ámbito portuario. No marco do convenio realizaranse traballos de investigación no supercomputador FinisTerra para desenvolvemento e mantemento do novo **Sistema Europeo de Predición Mariña** (correntes, temperatura e salinidade) **na costa Atlántica**, froito do proxecto **MyOcean**. Este é o proxecto océano-meteorolóxico máis importante no que Puertos ten participado e España ten ademais a responsabilidade de operar o denominado "Marine Forecasting Center" de GMES (Global Monitoring for the Environment and Security) para a fachada Atlántica. Este feito

é un enorme salto cualitativo para a ciencia mariña en España. A predición que residirá no ordenador FinisTerra dará servizo a Irlanda, Reino Unido, Francia, España e Portugal e as aplicacións serán moi variadas: axudas á navegación, busca de naufragos, etc.

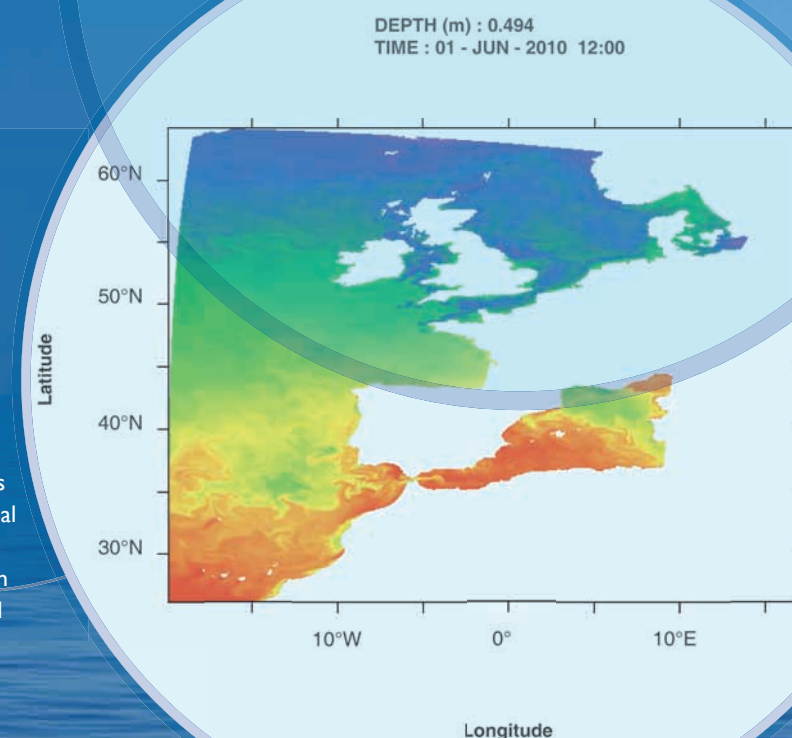
As ferramentas desenvolvidas empregaranse en resolver problemas asociados co respecto ao medio e o desenvolvemento dunha economía sostible. Por exemplo, os sistemas de previsión de correntes (resultado do proxecto MyOcean) permitirán o mellor seguimento de derramos accidentais e aumentar as posibilidades de supervivencia de naufragos; os estudos de cambio climático poden ser unha peza clave á hora de planificar a xestión futura dos recursos mariños (p. ex. extracción do percebe). Ademais realizaranse as simulacións numéricas no estudo de



cambio climático rexionalizado (de alta resolución) financiadas por AEMET no ámbito do Programa de Xeración de Escenarios Rexionalizados de Cambio Climático para España. (Plan Nacional de Adaptación ao Cambio Climático (PNACC)). Os sistemas de previsión a desenvolver en MyOcean permitirán que o noso país se sitúe no núcleo da oceanografía operacional europea, no que constitúe un salto sen precedentes nesta materia.

Este convenio é unha peza fundamental para o devandito salto.

Temperatura Superficial (MyOcean IBI)



SISTEMA DE PREDICIÓN OCEANOGRÁFICO MYOCEAN PARA A ZONA IBI

Puertos del Estado desenvolverá e implementará en operativo unha aplicación de modelado numérico que será o núcleo do **Sistema de Predición Oceanográfico MyOcean para a zona IBI** (fachada Atlántica europea). Esta aplicación IBI-36 basearase nunha aplicación do modelo baroclínico 3-D NEMO (Nucleus for European Modelling of the Ocean, desenvolvido polo Centre National de la Recherche Scientifique, CNRS).

Persoal de PdE, con apoio técnico de CESGA, realizaron as tarefas necesarias para compilar o modelo NEMO en FinisTerra e avaliar a escalabilidade deste (este test de benchmarking realízase cun caso analítico e a configuración estándar NEMO).

Actualmente, PdE esta levando a cabo os traballos de I+D necesarios para configurar unha Aplicación NEMO máis optima que inclúa a contribución dos procesos físicos máis relevantes (p. ex. marea, vento e fluxos de calor superficiais, compoñente baroclínica, forzamentos auga doce, etc.) e necesarios para proporcionar unha predición axeitada das augas anteriormente referidas. Para iso xerouse unha aplicación de modelado numérico sobre a base do código NEMO V3.2 que resolve as ecuacións de Navier Stokes en coordenadas xeopotenciais baixo as aproximacións hidrostáticas e de Boussinesq e cun tratamento de superficie libre.

Así mesmo, a aplicación NEMO usada no sistema IBI-36 usa un esquema de separación temporal de modos barotrópicos e baroclínicos (Griffies and Pacanowski, 2001) que permite resolver pasos temporais moi pequenos (de 3 segundos para procesos barotrópicos mentres que os baroclínicos se resolven cun paso temporal 50 veces superior). A resolución espacial horizontal é de $1/36^\circ$ (da orde de 2 Km) e a discretización vertical fíxose por medio de 50 niveis verticais. Todo iso fai que para cubrir o dominio xeográfico da aplicación IBI-36 (26 N-64 N, 20 W-20W-17E) se traballe sobre unha malla con $1093 \times 1894 \times 50$ puntos de cálculo. A batimetría é derivada das bases de datos batimétricas de alta resolución ETOPO2 e GEBCO. As condicións iniciais e de contorno da aplicación son proporcionadas polo modelo global de MyOcean, mentres que o forzamento atmosférico empregado procede do Centro Europeo de Predición (ECMWF). Actualmente estanse a realizar tests sobre esta aplicación co obxectivo de configurar a aplicación numérica máis axeitada que permita xerar o núcleo do Servizo de Predición Oceanográfica Operacional MyOcean para a fachada Atlántica Europea.

SIMULACIÓNS CLIMÁTICAS OCEÁNICAS

No marco do convenio está previsto realizar simulacións climáticas oceánicas que cubran parte da fachada atlántica nororiental e o mar Mediterráneo, consistentes en reanálise dende 1958 ata 2008 e simulacións de escenario de cambio climático A1B. Para levar a cabo estes experimentos, actualmente utilízanse os modelos baroclínicos rexionais de océano NEMOMED8 e IBIMED12, baseados no modelo global NEMO. Ambos modelos simulan o comportamento do océano en escalas temporais climáticas, discretizando e resolvendo o sistema de ecuacións que rexe a física do fluído.

NEMOMED8 presenta unha malla Arakawa C de 394×160 puntos cunha resolución horizontal de $1/8^\circ$, equivalente a celas cadradas de entre 9 e 12 km de anchura. A malla horizontal de NEMOMED8 modifícase no estreito de Xibraltar co fin de dispoñer de maior número de puntos nesa zona sensible. NEMOMED8 conta con 43 niveis verticais distribuídos de xeito distinto no Mediterráneo e o Atlántico e establece unha zona "buffer" de relaxación de temperatura e salinidade no Atlántico.

En canto a IBIMED12, conta cunha malla regular Arakawa C de 700×399 puntos, a $1/12^\circ$ de resolución horizontal, que permite englobar por completo as costas da península ibérica. Esta configuración ten 50 niveis verticais distribuídos uniformemente no Atlántico e Mediterráneo e, a diferenza de NEMOMED8, non dispón de zona "buffer" senón de fronteiras abertas no Atlántico.

Tanto NEMOMED8 coma IBIMED12 seguen unha configuración tipo "partial steps" para mellorar o axuste á batimetría, un esquema de superficie libre filtrada e un paso temporal de 1200 segundos. En ambos os dous modelos reláxase a SST cun coeficiente equivalente a 8 días de relaxación. Os datos de forzamento atmosféricos utilizados proveñen, por un lado, das reanálises globais ERA40 e ERA-Interim del Centro Europeo de Predición a Medio Prazo (ECMWF), e, por outro lado, dos modelos globais acoplados HadCM3 do Hadley Centre (Reino Unido) e ECHAM5 do Instituto Max Planck para Meteoroloxía (Alemaña), aos que se aplica un descenso de escala (downscaling) dinámico mediante o modelo RCA 3.5 do Rossby Center (Suecia). Xunto con estes forzamentos, utilízanse perfís verticais de temperatura e salinidade do océano procedentes de climatoloxías (DRAKKAR) e de simulacións de escenario de cambio climático de modelos acoplados, así como datos climatolóxicos de escorrentía de concas fluviais.

<http://www.myocean.eu.org>
<http://www.gmes.info>

