

díxitos

Novembro 2010

Novas do Centro de Supercomputación de Galicia

DIRECCIÓN

Javier García Tobío

COORDINACIÓN

Fernando Bouzas Sierra

REDACCIÓN

María Piñeiro González

COLABORACIÓN

Xavier Daura

Vassilios Theofilis

Sugoi Gómez-Iradi

Ángel Piñeiro Guillén

Alexandre Zanchet

Victor L. Cruz

M^{ra} José Rodríguez Malmierca

DESEÑO, GRAFISMO E MAQUETACIÓN

Alba Souto García

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 Vida)

15705 Santiago de Compostela

Tel. 981 569 810

Fax 981 594 616

dxitos@cesga.es

CONTIDOS

Renovación de equipos no CESCA	2
OPEN CIRBUS	3
ICTS	4-5
CENIER	6-7
Usuarios	8
Servicios a usuarios	9
Transferencia á industria do Cloud	10
Os usuarios demandan	11
A Supercomputación no mundo	12-13
Novas	14
A escola rural na nube	15

RENOVACIÓN DE EQUIPOS NO CESCA

Pirineus en fase de probas



O novo supercomputador do Centro de Supercomputación de Cataluña (CESCA) adxudicado no mes de setembro a SGI por 1,6 millóns de euros, xa está en fase de probas.

O que será coñecido como **Pirineus**, é un SGI Altix UV cun total de 224 procesadores de 6 núcleos cada un a 2,67 GHz. (1.344 núcleos), 6,14 TB de memoria principal, 112 TB en disco e un rendemento punta de 14,30 Tflop/s. Vén a substituír ao SGI Altix 3700 Bx2, instalado en 2005 e que sobre todo se adica a traballos con grandes requirimentos de memoria e disco. Unha das razóns para a adxudicación do concurso a SGI foi, precisamente, a súa capacidade de adaptación á maioría das aplicacións empregadas polos usuarios do CESCA.

Ao peche desta edición, **Pirineus** estaba xa en fase de proba, cos proxectos seleccionados na convocatoria extraordinaria do mes de setembro. Tras pasar os benchmarks correspondentes, espérase que o novo supercomputador empece a dar servizo aos usuarios en xaneiro de 2011.

Nos dous últimos anos abríronse novos centros de supercomputación en comunidades autónomas que carecían deles, mostra da necesidade crecente do uso de ferramentas de supercomputación en practicamente todas as ramas da Ciencia. Pero igualmente importante é manter os niveis de calidade de servizo nos centros con máis experiencia do país, en función das demandas, cada vez máis esixentes, da investigación. Así pois, Parabens CESCA e benvido **Pirineus!**.

www.cesca.es

CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ
DE CATALUNYA

CESCA

O CESGA ÚNESE A OPEN CIRRUS



De esq. a der.: Javier García Tobío, Director do CESGA, Ricardo Capilla Pueyo, Presidente do CESGA, e Dejan Milojicic, Senior Research Manager, HP Labs, e director de OPEN CIRRUS, firmando o acordo de colaboración no CESGA.

O CESGA xa é membro de OPEN CIRRUS™, (DIXITOS, xullo 2010) o testbed código aberto con múltiples centros internacionais para potenciar a investigación en computación Cloud. Os patrocinadores HP, Intel Corporation e Yahoo! Inc., en colaboración co National Science Foundation (NSF), a University of Illinois (UIUC), Karlsruhe Institute of Technology, e o Infocomm Development Authority (IDA) de Singapore, anunciaron a incorporación do CESGA, China Mobile Research Institute (CMRI), China Telecom Corporation e a Georgia Tech University's Center for Experimental Research in Computer Systems (CERCS) a finais de setembro, en Pittsburgh, durante o 4º Cumio Open Cirrus.

O PEN CIRRUS creouse no 2008 para promover a colaboración entre industria, Universidade e gobernos. Simula un contorno global a escala Internet ofrecendo aos investigadores unha capacidade sen precedentes para probar aplicacións e medir o rendemento de infraestruturas e servizos construídos para ser executados en sistemas cloud a grande escala. Actualmente estanse levando a cabo máis de 80 proxectos de investigación. A presenza global de OPEN CIRRUS esténdese así a catorce localizacións distintas en varios continentes, incluíndo centros de excelencia en HP Labs, Intel Labs and Yahoo!.

O CESGA EN OPEN CIRRUS

O acordo reconece ao CESGA como Testbed Site Member, que axudará a experimentar e identificar os requirimentos para a Computación de Altas Prestacións (HPC) como servizo cloud. Desenvolverá tecnoloxías de Monitorización (Monitoring) e de Contabilidade (Accounting) para Cloud, e con fins de investigación, proporcionará á Comunidade Open Cirrus un rexistro de uso do centro de probas para monitorización e análise de rendemento. Outra das responsabilidades do CESGA é o Estudo de Viabilidade para Computación de Altas Prestacións (HPC) en Cloud.

O acordo ofrece tamén vantaxes aos usuarios do centro, que poderá colaborar con grupos de investigación das universidades galegas e do CSIC que usen o CESGA e podan beneficiarse dos programas de código aberto e metodoloxías que achega cada unha das partes, como os software Hadoop e Pig (desenvolvidos por Yahoo!), Tashi (propiedade de Intel) ou PRS (creado por HP). O CESGA recibirá a formación necesaria no uso destes software e poderá formar no centro a profesores, estudantes e profesionais de Tecnoloxías da Información (TI).

PROXECTOS MÁIS ALÁ DO CLOUD

Os centros membros poden aceptar propostas dos Membros Investigadores para desenvolver proxectos, como o da Carnegie Mellon University en colaboración con Intel, que están a utilizar Open Cirrus para avanzar na investigación con células nai na procura de avances en enxeñaría de tecidos, medicina rexenerativa e novos fármacos. Destacan tamén as investigacións de HP para avaliar o impacto da sostibilidade global da computación cloud, ou o estudo da "sabiduría das masas" de Yahoo! analizando Wikipedia.

www.cesga.es

ICTS

O Finis Terrae como Instalación Científico Tecnolóxica Singular xestionada polo CESGA, dispón de axudas económicas para financiar o acceso de grupos de investigación ou investigadores individuais ao CESGA, para a adquisición de coñecementos, a formación nas tecnoloxías de uso na instalación ou a realización de traballos de investigación. Durante o 2010 puxéronse a disposición 3.000.000 horas de cálculo, repartidas en dúas convocatorias.

DINÁMICA MOLECULAR COMPUTACIONAL CONTRA O ALZHEIMER DrugsForAgeing

Investigador (Proxecto ICTS-CESGA): Xavier Daura; Oscar Conchillo Solé; [1] Hugo Gutiérrez de Terán.

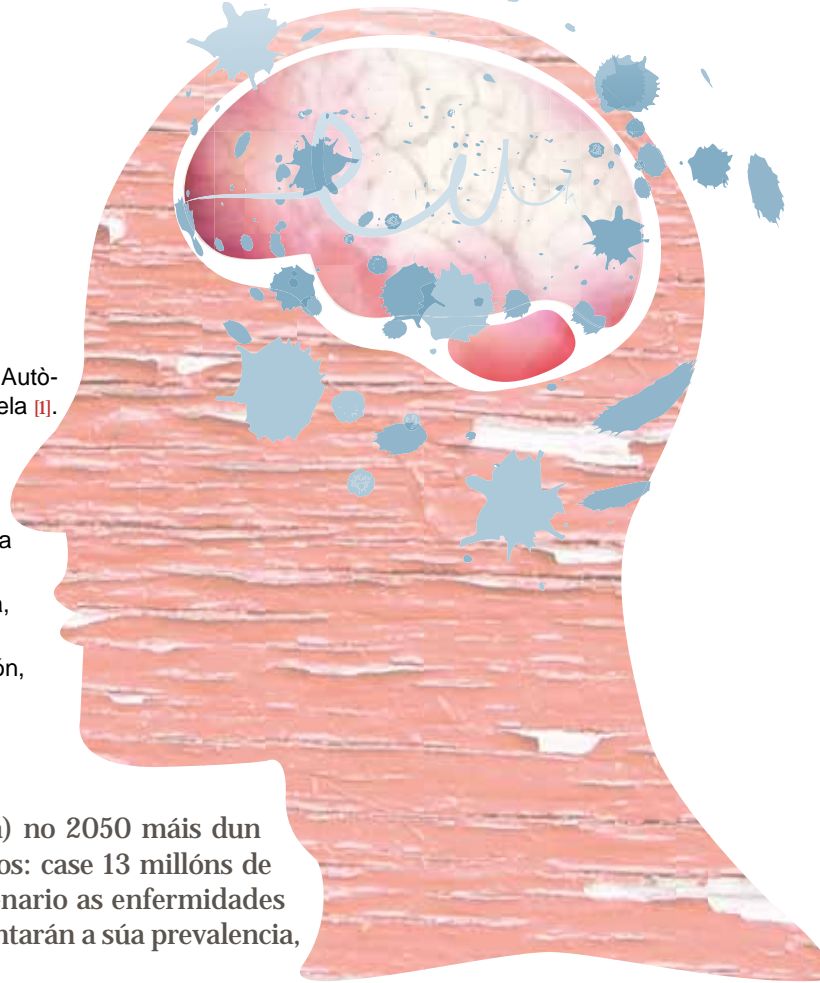
Organización (Proxecto ICTS-CESGA): Universitat Autònoma de Barcelona; Universidade de Santiago de Compostela [1].

Departamento (Proxecto ICTS-CESGA): Instituto de Biotecnoloxía e Medicina; Fundación Pública Galega de Medicina Xenómica [1].

Institucións participantes: Infociencia S. L., Infociencia Clinical Research S. L., Universitat Pompeu Fabra, Institut de Recerca Biomèdica, Universitat Autònoma de Barcelona, Consejo Superior de Investigaciones Científicas.

Axencia financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación, Gobierno de España.

Referencia do proxecto: PSE-010000-2009-8



Segundo o INE (Instituto Nacional de Estadística) no 2050 máis dun 30% da poboación española será maior de 65 anos: case 13 millóns de persoas, na súa maioría octoxenarios. Neste escenario as enfermidades dexenerativas asociadas ao envellecemento aumentarán a súa prevalencia, especialmente a Enfermidade de Alzheimer.

O proxecto *DrugsForAgeing* ten como obxectivo a identificación de novas dianas farmacolóxicas mediante a análise estrutural e funcional de rutas biolóxicas para o tratamento de enfermidades relacionadas co envellecemento, especialmente Alzheimer, e a busca de compostos inhibidores destas proteínas diana que poidan ser utilizados como patrón para o posterior desenvolvemento de fármacos. Nunha das súas fases o proxecto inclúe o cribado virtual dunha librería de compostos para a busca de posibles inhibidores das devanditas dianas. No FinisTerraee realizouse unha parte do proceso de identificación por medios computacionais (utilizando modelos físicos) de posibles inhibidores de dúas das proteínas identificadas como novas posibles dianas farmacolóxicas.

“Contamos coa colaboración do Dr. Hugo Gutiérrez de Terán, da USC, experto na metodoloxía para cálculos de enerxía libre de unión baseados na técnica Linear Interaction Energy (LIE). Hai tempo que el utilizaba o programario necesario para os devanditos cálculos en Finis Terraee, o que facilitou a entrada rápida e efectiva do proxecto á fase de produción,” sinala o investigador principal, Xavier Daura.

Utilizando o programa de predición estrutural de unión entre proteína e composto VINA e partindo dunha librería de 4 millóns de compostos e dun filtrado inicial por farmacóforo, considérase que os 5.000 compostos mellor puntuados por VINA conteñen os principais inhibidores para cada unha das dúas proteínas diana. A enerxía libre de unión destes compostos estimouse posteriormente sobre a base de cálculos LIE no FinisTerraee. A predición de afinidades biolóxicas co método LIE require da mostraxe conformacional a través de simulacións de dinámica molecular de cada unha das moléculas a avaliar (ligandos) en dous estados. Por cada ligando necesitáronse unhas 40 horas de CPU, en total $5.000 * 40 = 200.000$ horas/CPU por proteína.

Ademais do seu interese para a industria farmacolóxica e do beneficio social e sanitario que supón a busca de novas opcións de tratamento para o Alzheimer, o proxecto ten un relevante interese científico no campo da Dinámica Molecular Computacional porque **é a primeira vez que se aplica esta metodoloxía á avaliación dun número tan elevado de compostos**. Ademais este estudo achegará maior coñecemento sobre as **propiedades de unión das dúas proteínas estudadas** que participan en varios procesos fisiolóxicos.

<http://drugsforageing.infociencia.com>

DESENVOLVEMENTO DE FERRAMENTAS NUMÉRICAS DE PREDICIÓN DE INESTABILIDADES HIDRODINÁMICAS E AEROACÚSTICAS

Investigador: Vassilios Theofilis, Daniel Rodríguez Álvarez, José Miguel Pérez Pérez, Rafael Gómez Blanco, [1] Eusebio Valero Sánchez, [1] Javier Vicente Buendía.

Organización: E.T.S.I. Aeronáuticos, U.P. Madrid.

Departamento: Motopropulsión e Termofluidodinámica. Matemática Aplicada e Estadística [1].

Axencia financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación, Gobierno de España.

Referencia do proxecto: TRA2009-13648

O estudo das inestabilidades hidrodinámicas e aeroacústicas ten aplicacións de interese para áreas tan dispares como a investigación da arteroesclerose, o nivel de ruído arredor de aeroportos ou o deseño de aeroxeradores. Este proxecto pretende establecer novos métodos numéricos e computacionais para o estudo destes fenómenos usando as arquitecturas computacionais máis novidasas, como o FinisTerra.

Anivel mundial estanse a desenvolver estudos para entender (e controlar) os mecanismos de xeración e propagación de ruído aerodinámico asociado ao movemento de automóbiles, trens de alta velocidade, pas de aeroxeradores e avións comerciais. O proxecto *Desenvolvemento de ferramentas numéricas para a predición de inestabilidades hidrodinámicas e aeroacústicas* pretende ampliar coñecementos sobre estas inestabilidades do movemento fluído en aplicacións de interese para a saúde e para o medioambiente.

Para a predición e control de inestabilidades de fluxo empréganse simulación numérica directa (DNS) e modelos, pero as dúas metodoloxías esixen gran demanda computacional para seren precisas sobre a xeración de ruído aerodinámico. A fonte de ruído aerodinámico é a interacción do campo fluído ao redor dun obxecto coas discontinuidades xeométricas deste ou ben a modificación do campo aerodinámico ao redor dun obxecto por unha alteración das condicións de contorno. A intensidade do ruído emitido polo vehículo é función da súa velocidade.

PREDICIR A INESTABILIDADE DE FLUXO

Recentemente empregouse unha alternativa baseada nunha análise de estabilidade mediante a resolución de problemas de autovalores de gran tamaño, correspondentes a operacións descritas por $O(10^5-10^6)$ de ecuacións en derivadas parciais acopladas. Os devanditos problemas resultan tanto da linealización das ecuacións de Navier-Stokes para as perturbacións, coma de ecuacións modelo simplificadas do tipo Helmholtz. A solución destes problemas proporciona, ademais, conxuntos de modos propios da radiación de ondas acústicas, permitindo resolver os problemas de estabilidade hidrodinámica e de aeroacústica simultaneamente.

Os códigos numéricos xa existentes, tanto para problemas de autovalores coma para simulación, "necesitan dunha profunda revisión para aumentar a súa eficacia facendo mellor uso das novas arquitecturas computacionais disponibles, afrontando novos retos con garantías de éxito", sinala Vassilios Theofilis, investigador principal.

LIBRARIAS COMBINADAS

A actividade consistiu en estender ferramentas existentes para a resolución do problema de autovalores, aumentando a súa eficacia e eficiencia e desenvolveuse despois un código de simulación numérica directa para fluxo compresible en xeometrías complexas. Substituíronse as librarías de álgebra denso ScaLAPACK e PBLAS e comunicacións MPI, das que se fixo uso en fases anteriores en arquitecturas de memoria distribuída, como Mare Nostrum (www.bsc.es) e Blue Gene/PÁX. (www.fz-juelich.de), por técnicas sparse baseadas na librería MUMPS, que o persoal do CESGA instalou a propósito no FinisTerra, tanto en versión serial coma en paralela. A combinación de ambas as dúas (ScaLAPACK e MUMPS) na mesma máquina facilitou o labor de validación dos algoritmos desenvolvidos. Queda por comprobar o rendemento dun algoritmo alternativo (Jacobi-Davidson), relativo ao rendemento das librarías sparse paralelas.

O desenvolvemento destas ferramentas permitirá a primeira aplicación da teoría de inestabilidade global aos distintos problemas, eliminando as simplificacións necesarias ata a data para a súa análise, e achegando así métodos e procedementos teóricos fundamentados ás aplicacións reais.

<http://webserver.dmt.upm.es/zope/DMT>

<http://matap.dmae.upm.es>

{ Os accesos ao FinisTerra como ICTS están financiados polo Ministerio de Ciencia e Innovación, Gobierno de España. (Referencia: ICTS-2009-40) }



SIMULACIÓN CFD PARA DISEÑO DE NOVOS AEROXERADORES

Hai máis de 8 anos que en Aerodinámica se detectou a necesidade de ferramentas avanzadas para o deseño e simulación de perfis, pas, elementos de control activos ou pasivos en pas e para aeroxeradores completos a diferentes condicións de funcionamento, ou en parada. O grupo de Análise e Deseño de Aeroxeradores (ADA), do CENER, o Centro Nacional de Enerxías Renovables de España, traballa en proxectos comerciais e de investigación desenvolvendo a nova xeración de aeroxeradores.

Dr. Sugoi Gómez-Iradi

Experto en Aerodinámica e CFD

CENER - Centro Nacional de Enerxías Renovables de España.

CENER, o Centro Nacional de Enerxías Renovables de España, é unha fundación privada sen ánimo de lucro na que traballan 200 investigadores e técnicos e na que dende o ano 2002 se investiron 100M€ en laboratorios que o fan único. A súa sede principal está en Sarriguren (Navarra), aínda que tamén está presente en Sevilla, Sangüesa (Navarra) e Madrid. As súas actividades principais divídense en 6 áreas: biomasa, solar térmica, solar fotovoltaica, arquitectura bioclimática, integración en rede de enerxías renovables e eólica. A sección eólica comprende as áreas de Laboratorio de Ensaio de Aeroxeradores (LEA) en Sangüesa, o servizo de Avaliación e Predición Eólica (EPR) e o grupo de Análise e Deseño de Aeroxeradores (ADA).

En ADA traballamos en proxectos comerciais así como en proxectos estatais, europeos e internacionais de investigación e desenvolvemento, relacionados con novos conceptos de aeroxeradores e compoñentes, deseños de pas de nova xeración, plataformas e aeroxeradores offshore. Tamén desenvolvemos e validamos ferramentas con ensaios realizados en laboratorios, en túneles de vento e en campo, no referente á estrutura, os materiais e a aerodinámica.

Unha das ferramentas era o CFD (Fluído-dinámica computacional) xa que permite simular o fluído e o seu comportamento en contacto con superficies, que poden ser fixas ou móbiles. Para iso, necesita unha rede ou malla discretizada en celas, que compoñerán o dominio do cálculo e ao que se aplicarán condicións de contorno axeitadas para cada caso. Isto, xunto ao comezo da migración dos aeroxeradores ao mar, onde as pas poderían ver unha maior velocidade local, fixo que CENER buscase un contrastado código CFD para fluxos compresibles. Unha vez seleccionado o código, colaborouse coa Universidade de Liverpool no desenvolvemento e validación do código para o seu uso en fluxos, menos compresibles, que ven os aeroxeradores. Nótese que o cálculo actual mediante CFD é o máis próximo á realidade, en canto ao comportamento do fluído, pero aínda non é capaz de dar a solución exacta. O noso código de CFD chámase WMB (Wind multi-Block)

e resolve as ecuacións de Navier-Stokes alcanzadas xunto cunha selección de modelos de turbulencia tendo en conta a compresibilidade do fluído. Estas ecuacións resólvese en mallas multi-bloque estruturadas usando un método de volumes finitos baseadas no centro de cela. Dende as súas orixes, o código foi deseñado pensando na execución en paralelo en máquinas de memoria distribuída (particularmente en agrupacións Beowulf).

A validación principal [1,2] do código WMB realizouse cos datos experimentais dos ensaios levados a cabo no túnel de vento de NASA-Ames (24.4 x 36.6 m² de sección) por NREL (EUA) [3] para o estudo de fluxo transitorio. Ensaíouse unha turbina eólica bi-pa real de 10 metros de diámetro a diferentes velocidades de vento incidente e ángulos de desalinhamento medindo a presión en cinco seccións aerodinámicas da pa mediante transdutores.

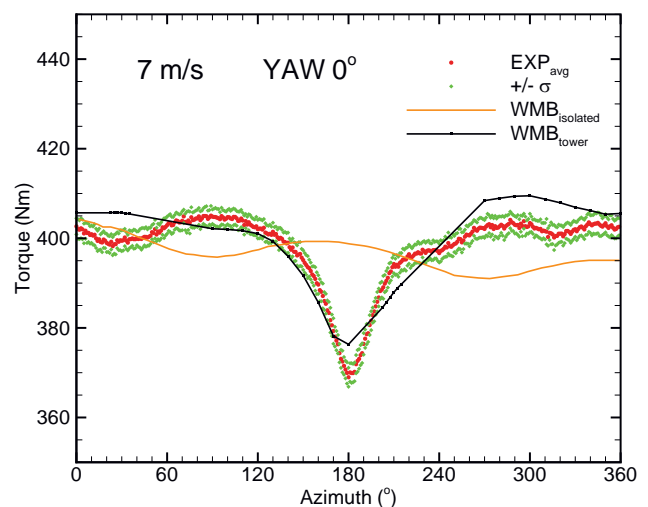


Figura 1

Comparativa da variación do par aerodinámico xerado por unha pa do aeroxerador durante unha revolución entre datos experimentais (puntos) e CFD. A liña laranxa representa o cálculo CFD cando soamente o rotor foi modelado, e a liña negra cando se modelou o aeroxerador completo.

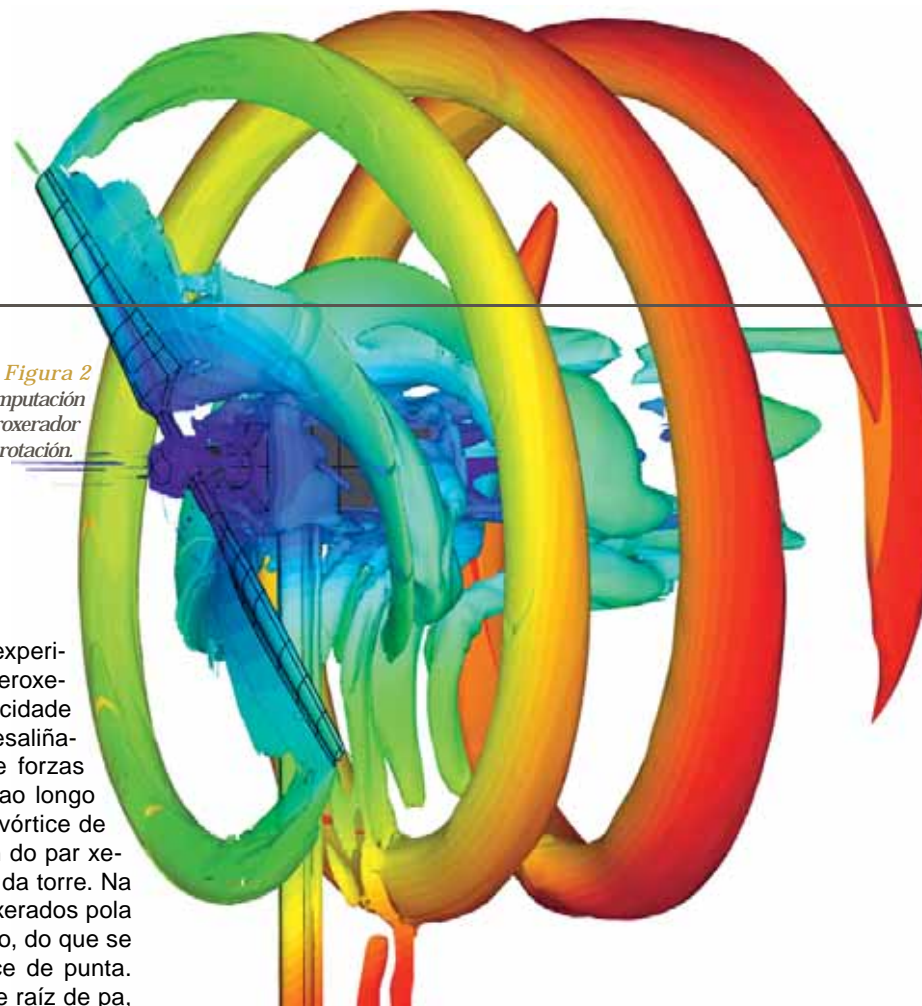


Figura 2
 Vista dos vórtices e vorticidades asociadas á computación na terceira revolución das pas do aeroxerador coloreados coa distancia ao eixe de rotación.

Móstrase un exemplo do caso experimental mencionado onde o aeroxerador rota a 72rpm e a velocidade de vento é de 7 m/s sen desaliñamento. Comparáronse os coeficientes de forzas e momento, así como a súa integración ao longo da pa. Tamén se estudou a evolución do vórtice de punta de pa. Na *figura 1* vese a variación do par xerado polo aeroxerador debido á presenza da torre. Na *figura 2* están representados os vórtices xerados pola interacción dos elementos sólidos co fluído, do que se partiu para estudar a evolución do vórtice de punta. Tamén son moi importantes os vórtices de raíz de pa, xa que interaccionan coa rexión onde normalmente se coloca o anemómetro. A variación de forzas, que sofre a pa cada vez que pasa por diante da torre, é outro parámetro relevante xa que repercute na fatiga da pa, o rodamento da base da pa e noutra medida á torre. Relativo a este ensaio, tamén se investigaron, computaron e compararon os ángulos de ataque locais en varias estacións da pa con éxito [4], así como a influencia da variación xeométrica en raio, na raíz de pa e na forma da punta da pa [2]. O código WMB tamén se validou para perfís, comparando as computacións cos ensaios levados a cabo en diferentes túneles de vento, implementouse a detección de transición e tamén se traballou simulando a rugosidade superficial da sección mediante aproximacións numéricas.

A necesidade de acudir ao FinisTerra veu dun proxecto internacional da IEA Wind, Task 29: MexNext. Neste proxecto estanse a estudar os efectos no aeroxerador e fóra do seu plano de rotación do experimento MEXICO, que se levou a cabo no 2006 no túnel de vento de DNW (9.5 x 9.5 m² de sección). Un dos obxectivos deste grupo é investigar e cuantificar o efecto do túnel de vento na aerodinámica do rotor, e para iso, é necesario computalo a través dunha ferramenta avanzada como é o CFD.

Esta análise ten ademais da complexidade de computar elementos fixos e móbiles no mesmo cálculo, a conversión a condicións de contorno numéricas, a complexa xeometría do túnel de vento e a elevada velocidade de rotación do aeroxerador (100 m/s ou Mach ~0.3 en punta). Por iso, o código CFD debe ser capaz de operar nestas condicións. WMB é capaz de computar fluxos compresibles, polo que a velocidade en punta deixa de ser un obstáculo. O movemento relativo dos sólidos (paredes do túnel e o rotor) reproducense coa técnica de planos deslizantes (sobre-custo do 4% do tempo total de cálculo), polo que a única necesidade que non tiñamos cuberta cando fixemos a petición ao CESGA era a de recursos computacionais. No cluster de ordenadores de CENER non había cabida para as 226k horas distribuídas en computacións paralelizadas en máis de 380 CPUs que se requirían para calcular como transitorio en mallas de máis de 30 millóns de celas. Seguiremos traballando niso ata finais de ano no CESGA e esperamos seguir colaborando nun futuro próximo.

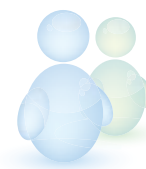
CENER accedeu ao centro de supercomputación CESGA a través do subprograma do MICINN (ICTS-2009-40), obtendo axudas para o acceso presencial e o acceso remoto ao FinisTerra.

<http://www.cener.com>

Bibliografía

- [1] S.Gomez-Iradi, R.Steijl and G.N. Barakos, Development and Validation of a CFD Technique for the Aerodynamic Analysis of HAWT, Journal of Solar Energy Engineering-ASME, 131(3):13 páginas, Agosto 2009. DOI:10/1115/1.3139144.
- [2] S.Gomez-Iradi, and G.N. Barakos, Computational Fluid Dynamics Investigation of Some Wind Turbine Rotor Design Parameters, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy, 222(5):455-470, 2008 DOI:10.1243/09576509JPE526.
- [3] M.M. Hand, D.A. Simms, L.J. Fingersh, D.W. Jager, J.R. Cotrell, S. Schreck, and S.M. Larwood, Unsteady Aerodynamics Experiment Phase VI: Wind Tunnel Test Configurations and Available Data Campaigns, Technical Report TP-500-29955, NREL, Colorado, USA, Diciembre 2001.
- [4] S.Gómez-Iradi, G.N.Barakos and X.Munduete, A CFD Investigation of the Near-Blade 3D Flow for a Complete Wind Turbine Configuration. Presentación y artículo en el EWEC 2010, 20-23 Abril 2010.

Usuarios



DINÁMICA MOLECULAR



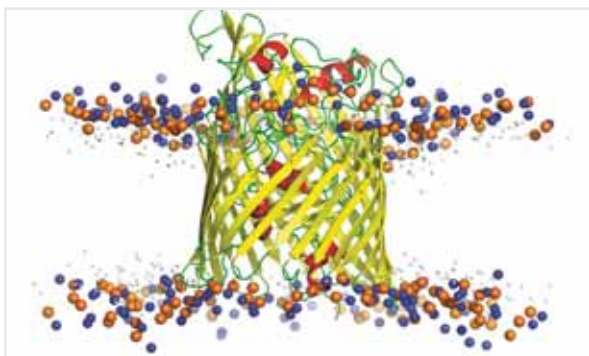
Investigador:

Ángel Piñeiro Guillén

Organización: Grupo de Materia Blanda e Biofísica Molecular (MBBM).

Departamento: Física Aplicada, Fac. Física, USC.

Colaboracións: Facultade de Química (Univ. Nacional Autónoma de México) e School of Chemistry (Univ. Southampton), entre outras.



Liñas de investigación: Desenvolvemento de metodoloxías multiescala (resolución atómica e de átomos unidos) para simulacións computacionais de dinámica molecular de sistemas de interese biolóxico, principalmente proteínas de membrana (de transporte, canles iónicas e receptoras); aplicación das mesmas dende o punto de vista fundamental e aplicado. Obxectivos principais: (i) entender o comportamento dos sistemas estudados no contexto no que realizan a súa función e (ii) desenvolver marcadores ou biosensores baseados nestes sistemas. Por exemplo, a secuenciación de cadeas de ADN a baixo custo baseada na súa electrodifusión a través de proteínas poro.

Relación co CESGA: Dende 1998. Traballamos sobre FinisTerra, para a realización de simulacións masivas en paralelo e almacenamento dos nosos resultados. A realización do noso traballo sería completamente imposible sen a utilización destes recursos. Utilizamos principalmente o paquete de programas GROMACS como motor de cálculo. Desenvolvemos códigos propios para xestión de traballos masivos e análise de resultados.

<http://www.angel.pineiro.sitew.com>

FÍSICA ATÓMICA

Investigador:

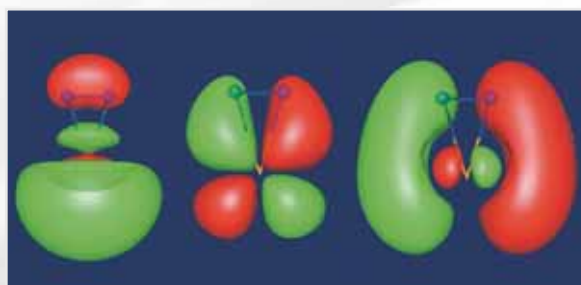
Alexandre Zanchet

Organización: Instituto de Física Fundamental, Consello Superior de Investigacións Científicas (CSIC).



Departamento: Física Atómica, Molecular e de Agregados.

Colaboracións: Universidad Autónoma de Madrid, Université de Rennes1 (Francia), Université de la Franche Comté (Francia).



Liñas de investigación: Simulacións baseadas sobre os primeiros principios da mecánica cuántica, dende a creación do potencial de interacción dos sistemas ao estudo da dinámica da reacción. Estes cálculos serven para entender os procesos que ocorren a escala atómica e molecular.

Relación co CESGA: Estamos a utilizar un programa de dinámica cuántica dependente do tempo (MAD-WAV3) desenvolvido polo noso grupo. Este tipo de cálculos son moi pesados e necesitan recursos computacionais moi importantes. Este programa está paralelizado para permitir unha mellor eficiencia en superordenadores con moitos procesadores como o FinisTerra.

<http://www.iff.csic.es/fama>

Servicios a usuarios

COMPROMETIDOS COA MELLORA DOS SERVIZOS A USUARIOS

CESGA busca satisfacer as demandas actuais dos seus usuarios e adiantarse ás futuras necesidades destes para poder ofrecerlles solucións de valor para o avance da súa actividade en I+D+i. Así, entendemos que a participación dos usuarios é clave.

Este ano 2010 realizouse unha nova edición do *Estudo da Satisfacción e Prospección de Novas Necesidades dos Usuarios e Usuarías dos Servizos do CESGA*. Constituíronse tres Grupos de Análise e Prospección con usuarios de Universidades, CSIC, Centros Tecnolóxicos, Empresas e técnicos do CESGA. Tamén se realizou un Delphi con usuarios estratéxicos e unha Enquisa on-line dirixida a comunidade usuaria de servizos de cómputo e almacenamento. De modo global, os usuarios valoran moi positivamente os servizos de soporte que prestan os técnicos CESGA.

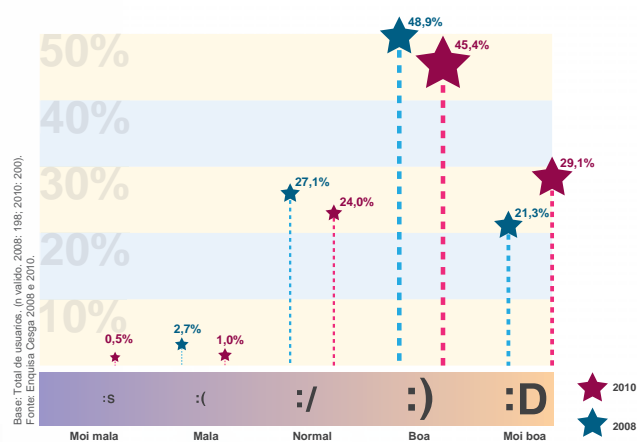
A través deste estudo os usuarios fixeron achegas de gran valor para a identificación das áreas nas que centrar esforzos de mellora no futuro inmediato. Por iso, dende estas páxinas, queremos agradecer a participación, implicación e tempo investido polos usuarios que fixeron achegas a este estudo. O input dos nosos usuarios resulta impagable para deseñar e prover servizos que cada vez acheguen maior valor ás actividades de investigación que os nosos usuarios desempeñan. Dende o CESGA abordamos unha serie de análises dos resultados e determinamos as accións de mellora a implementar ao longo do ano próximo para cumprir co noso compromiso de mellora continua dos servizos.

As seguintes gráficas mostran a distribución dos servizos prestados e o grao de satisfacción con estes en comparación cos resultados do anterior estudo, realizado en 2008.

O resumo executivo e estudo completo pódense consultar na páxina web do Centro

www.cesga.es/usuarios_estudio.es

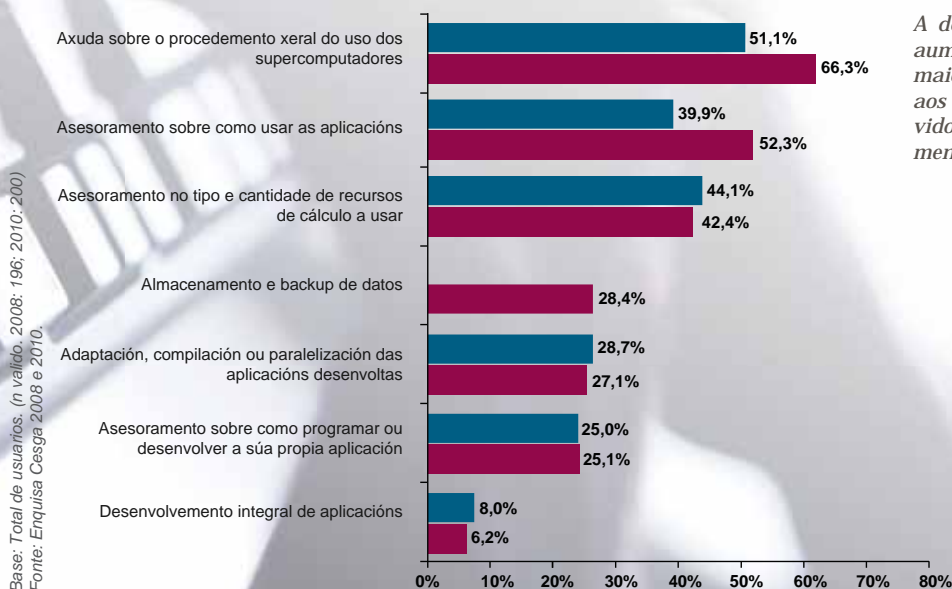
Valoración dos Usuarios do CESGA dos Servizos de Soporte:



Gráfica 1

Valoración dos Usuarios do CESGA dos Servizos de Soporte Os servizos de soporte do CESGA son cada ano mellor valorados polos seus usuarios, considerando gran parte destes como "moi boa" a atención recibida nestes servizos. A gráfica mostra que a consideración con respecto ao ano 2008 mellorou, sendo cada vez máis os investigadores que consideran "moi boa" a atención recibida no CESGA.

Uso de Servizos Complementarios:



Gráfica 2

A demanda de soporte complementario aumenta tamén cada ano. Aínda que o maior número de solicitudes corresponde aos servizos de acceso e soporte dos servidores, non obstante, os servizos complementarios son tamén moi solicitados.

Base: Total de usuarios. (n válido: 2008: 196; 2010: 200)
Fonte: Enquisa Cesga 2008 e 2010.

Transferencia á industria do cloud

De SmartLM a elasticLM

Os modelos de licencias de software actuais non parecen flexibles dabondo para soportar aplicacións comerciais con execución en recursos remotos. ElasticLM, produto final do proxecto SmartLM, ofrece unha xestión eficiente e elástica que xa espertou o interese da industria do software.

O Centro de Supercomputación de Galicia, CESGA, asinou un acordo de transferencia de tecnoloxía con destacadas compañías internacionais do sector informático. O prototipo, que se comercializará co nome de **elasticLM**, é o resultado final do Proxecto **SmartLM**, financiado polo VII Programa Marco da Unión Europea, que ten como obxectivo elaborar mecanismos de xestión e uso de licenzas de software dun xeito máis eficiente e flexibles. O resultado espérase que teña un importante impacto en empresas e institucións xa que os novos modelos de licenza máis alcanzables lles permitirán reducir o investimento, aumentando así a súa competitividade.

No proxecto participaron ata un total de once institucións e empresas de Alemaña, Bélxica, Italia, España, Reino Unido e Suecia. Tras o acordo, os propietarios do prototipo SmartLM e o seu posterior desenvolvemento e comercialización serán **ATOS ORIGIN**, compañía internacional de servizos de tecnoloxías da información, **GRIDCORE**, integrador de sistemas especializado en computación de altas prestacións e o **Fraunhofer Institute for Algorithms and Scientific Computing (SCAI)**, a principal organización de institutos de investigación aplicada e desenvolvemento en Europa.

LICENZAS DE SOFTWARE PARA O CLOUD

O prototipo desenvolvido coa colaboración do CESGA é unha solución aberta para a xestión de licenzas de software, "o primeiro sistema baseado en estándares abertos que permite a xestión elástica e distribuída destas licenzas", segundo sinala Andrés Gómez Tato, responsable de Aplicacións e Proxectos do CESGA.

Os modelos de licenzas de software actuais non son o suficientemente flexibles para soportar aplicacións comerciais que necesiten executarse en recursos remotos; ademais, no novo paradigma de servizos virtuais, resulta moi custoso comprar licenzas de software para cada CPU da infraestrutura. Non obstante as licenzas Elastic LM pódense utilizar sen problemas en ámbitos de cluster locais, así como en ámbitos Grid e Cloud locais ou remotos, privados ou públicos e baixo as circunstancias particulares das Arquitecturas Orientadas a Servizos.

Segundo Gómez Tato, "é un sistema pensado para usar de xeito semellante a outros que empezan a aparecer agora no mercado. O exclusivo do noso sistema é que o usuario pode executar ese software, licenciado para a súa institución, noutra institución. Está pensado para ser totalmente operativo no novo paradigma Cloud". O mercado Cloud é un sector en forte expansión con previsións de crecemento ata o ano 2012 de entre un 23 e un 68%, segundo diferentes fontes.

"é un sistema pensado para usar de xeito semellante a outros que empezan a aparecer agora no mercado. O exclusivo do noso sistema é que o usuario pode executar ese software licenciado para a súa institución noutra institución. Está pensado para ser totalmente operativo no novo paradigma Cloud"

NOVIDADES EXCLUSIVAS

Elastic LM inclúe ademais outras características novidasas como unha seguridade mellorada acorde coas necesidades actuais das aplicacións protexidas por licenzas, mecanismos de autenticación e autorización avanzados para acceso a software en ámbitos Grid, e un portal

de contabilidade e facturación automatizadas 100% fiables, desenvolvido no CESGA, que permite doadamente a adopción de modelos de negocio avanzados como o "Pay-per-Use" en Grid e Cloud. Isto faíno idóneo para industrias como a farmacéutica, as de finanzas ou as de entretemento.

LIBERACIÓN DE CÓDIGO

A natureza do software desenvolvido obriga a protexer a maioría dos seus compoñentes para evitar ataques aos seus mecanismos de seguridade. Pero para beneficio da comunidade investigadora o consorcio SmartLM decidiu liberar un número de compoñentes baixo licenza de código aberto (**Licenza BSD**) que están dispoñibles en:

O marco de SLA > SCAI:

<http://packcs-e0.scai.fraunhofer.de/wsag4j/>

Servicio MetaScheduling > SCAI:

<http://packcs-e0.scai.fraunhofer.de/mss/>

Adopción de MSS por SmartLM > SCAI:

<http://packcs-e0.scai.fraunhofer.de/smartlm-orchestrator/>

Portal de Contabilidade e Facturación > CESGA:

<http://abportal.forge.cesga.es/>

máis información

<http://www.smartlm.eu/>
<http://www.elasticlm.eu/>

<http://www.cesga.es>
<http://www.atosorigin.com>

<http://www.gridcore.es>
<http://www.scai.fraunhofer.de/de/>

Os usuarios demandan

Acceso simplificado ás infraestructuras de cálculo

O pasado 30 de Setembro celebrouse en Madrid o “4th Meeting on High Performance Computing Molecular Simulation”, un punto de encontro ao abeiro do CSIC para usuarios e técnicos de infraestructuras de cálculo, organizado polo Grupo GEMPPPO do Instituto de Estructura da Materia. A disparidade de documentación e protocolos de acceso entre os centros, a falta de unificación nas canles de información, a necesidade de máis apoio técnico e formación específica ou o software a empregar, preocupan a todos.

Victor L. Cruz, Javier Ramos, Juan Francisco Vega e Javier Martínez de Salazar

GEMPPPO

Instituto de Estructura de la Materia, CSIC

É obvio que existen dificultades por parte dos investigadores, na presentación de propostas de solicitude do uso dos centros HPC, debido á variedade de protocolos e documentos a cumprir para as peticións de acceso a cada infraestructura.

DISPARIDADE DE PROTOCOLOS DE ACCESO

Alguns centros de computación esixen a estimación previa dos recursos necesarios, o que, sinalan os usuarios, resulta moi difícil, especialmente no referente ao escalado de procesos paralelizados. Ademais, renovar as propostas en períodos de tempo relativamente curtos pode afectar á continuidade dos proxectos nunha mesma plataforma.

Os centros de computación, conscientes do problema, están a intentar implementar novas versións de protocolos que poidan converxer nun **documento común a todos**. Polo momento e malia a opinión xeral, non hai acordo para a creación dunha plataforma onde unificar as peticións.

O apoio técnico no desenvolvemento de proxectos científicos baseados na computación e/ou simulación vese afectado, segundo recoñecen os propios centros, pola falta de recursos de soporte aos usuarios. Aínda así os representantes dos centros animan aos investigadores a poñerse en contacto co persoal técnico que na maioría das ocasións poden resolver, en cuestión de horas, problemas frecuentes, como os de portabilidade. Non obstante, para problemas complexos, “a colaboración entre o persoal de soporte e os propios investigadores”, conclúen, “é fundamental”. Neste sentido os usuarios consideran que sería bo que os centros de HPC ofrecesen máis formación en computación para investigadores usuarios.

SOFTWARE LICENCIADO/SOFTWARE LIBRE

O uso de software licenciado ou libre é, ao final, elección do usuario, aínda que a opción preferida por investigadores, e recomendada por centros de computación, é o software libre. Esta é a situación ideal porque tendo o código fonte se pode adaptar axeitadamente á aplicación para que corra de xeito eficiente e fiable. Neste sentido o software comercial presenta limitacións como o custo e número de licenzas, as librerías que hai que usar, o sistema operativo, etc.

Finalmente usuarios e técnicos coincidiron en que sería moi desexable ter unha canle de comunicación única e efectiva para o anuncio das distintas iniciativas e convocatorias que se lanzan dende os centros de computación. Aínda que foros como o celebrado axudan a poñer ao alcance do usuario a información, na actualidade está moi dispersa dificultando o poder estar ao tanto do que se ofrece ou acertar en encontrar a convocatoria que mellor se adapte ao proxecto concreto de investigación.

Uns 40 usuarios participaron na reunión que contou na mesa coa presenza e participación de:

Aurelio Herrero (AH) Xefe de Área de Informática Científica, SGAI-CSIC.

Andrés Gómez (AG) Responsable de Aplicacións e Proxectos do CESGA.

Montserrat González (MG) Técnica de Coordinación do Proxecto RES, BSC-CNS, Barcelona.

Sonia Martínez (SM) Responsable de software científico ALTRAN-SGAI, Madrid.

Octavio Roncero (OR) Investigador científico do IFF-CSIC.

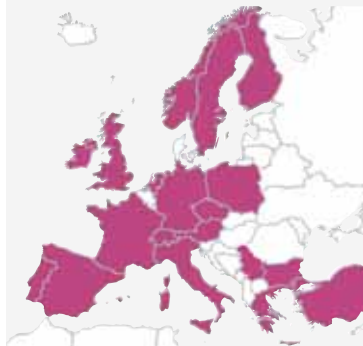
As conclusións completas do evento, así como outros detalles científicos e técnicos pódense atopar en:

<http://www.gemppo.iem.csic.es/gemppo>

A SUPERCOMPUTACIÓN NO MUNDO > Estruturas supraestatais

PRACE

Partnership for Advanced computing in Europe (Consortio para a Computación Avanzada en Europa). Proxecto que ten como obxectivo crear un servizo paneuropeo de supercomputación ao servizo da comunidade científica da UE. O obxectivo de PRACE para o ano 2010 é instalar un sistema petaflop/s, é dicir, con capacidade para realizar mil billóns de operacións por segundo. A nivel xurídico, os seus promotores propuxéronse constituir a infraestrutura de investigación como unha única entidade legal, segundo explicou o representante do consorcio.



EGI

European Grid Initiative (Iniciativa Grid Europea). Trátase dunha rede de iniciativas Grid estatais que conecta os recursos de 42 países. O seu obxectivo é satisfacer os requirimentos das diferentes comunidades científicas en o marco da área Europea de Investigación (ERA), permitindo o uso de recursos de computación distribuídos por todos eses países a través de internet, de forma que usando simplemente o propio ordenador pódese acceder a unha potencia de cálculo case ilimitada. Opera sobre a infraestrutura Enabling Grids for E-science (EGEE), cun software para monitorización e accounting desenvolvido polo CESGA.



DEISA

Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications (Infraestrutura Europea Distribuída para Aplicacións de Supercomputación). Consorcio formado por centros de supercomputación líderes nos seus respectivos países que aspira a dar soporte á ciencia computacional máis avanzada do mundo dende Europa. As súas expectativas están postas en proporcionar a solución operativa para o Ecosistema Europeo de Supercomputación, baseado nunha especie de sistema Grid no que se interconectarán os recursos de supercomputación dos centros mellor dotados do continente, alcanzando así unha potencia de cálculo enorme ao servizo da comunidade científica e a industria.



Ibergrid

Iniciativa conxunta dos Gobernos de España e Portugal posta en marcha en 2007 e que ten como obxectivo promover e implantar un espazo común ibérico de investigación. Considera actividades dirixidas a potenciar a mobilidade de investigadores, desenvolver proxectos de investigación coparticipados por científicos de ambos os dous países e compartir infraestruturas de cálculo de altas prestacións. Nesta iniciativa participan por parte de España a práctica totalidade dos integrantes da Rede e-Ciencia, estando aberto, por parte de Portugal, á totalidade da comunidade académica e científica portuguesa.



EN GALICIA > CESGA Centro de Supercomputación de Galicia

Comezou a súa traxectoria en 1993 dando servizo ás Universidades de Vigo, A Coruña e Santiago de Compostela e aos centros do Consello Superior de Investigacións Científicas (CSIC). En 2008 inaugurou o seu actual supercomputador, o FinisTerra, cunha capacidade 10.000 veces superior á do primeiro, o instalado quince anos antes. O novo supercomputador colocou a CESGA no número 100 do TOP 500 mundial durante o seu primeiro semestre en activo.

EN ESPAÑA

Centros de supercomputación autonómicos que prestan servizo a terceiras institucións

Comunidades autónomas con centros autonómicos

Instalacións Científico-Técnicas Singulares (ICTS) do Estado

Recoñecidas oficialmente como infraestruturas que proporcionan recursos ou servizos que a comunidade científico-tecnolóxica española necesita para desenvolver a súa investigación de vangarda e de máxima calidade.

www.micinn.es

Red Española de supercomputación (RES)

Red promovida polo Ministerio de Ciencia e Innovación

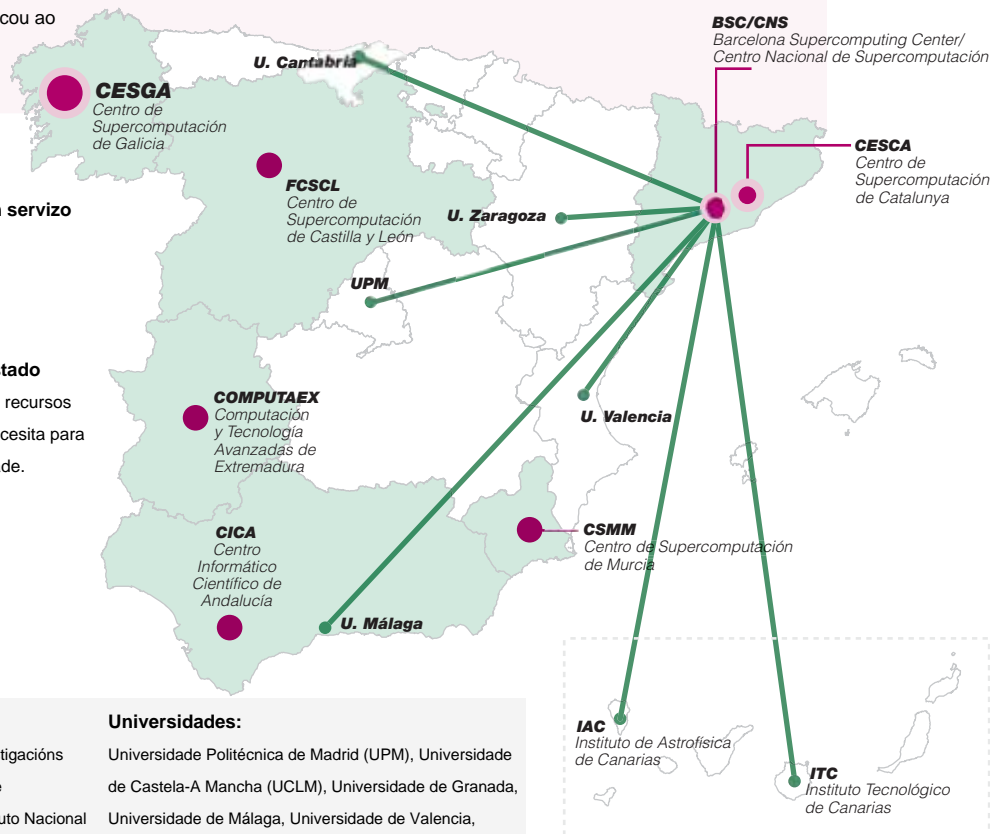
ADEMÁIS

Centros con supercomputadores para servizo propio:

Axencia Estatal de Meteoroloxía (AEMET), Consello Superior de Investigacións Científicas (CSIC), Centro de Investigacións Energéticas, Ambientais e Tecnolóxicas (CIEMAT), Instituto Tecnolóxico de Canarias (ITC), Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial (INTA)...

Universidades:

Universidade Politécnica de Madrid (UPM), Universidade de Castela-A Mancha (UCLM), Universidade de Granada, Universidade de Málaga, Universidade de Valencia, Universidade de Zaragoza...

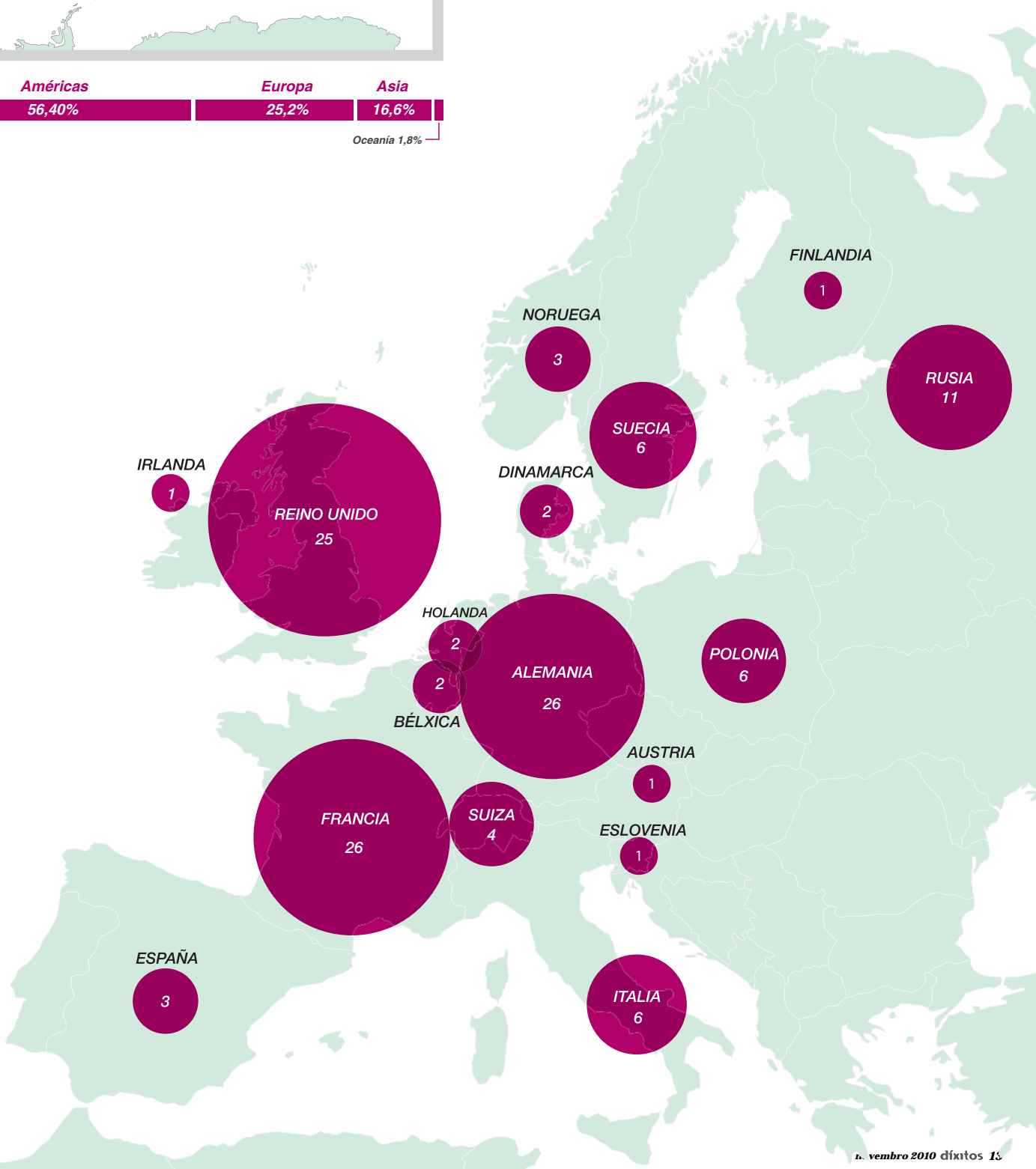
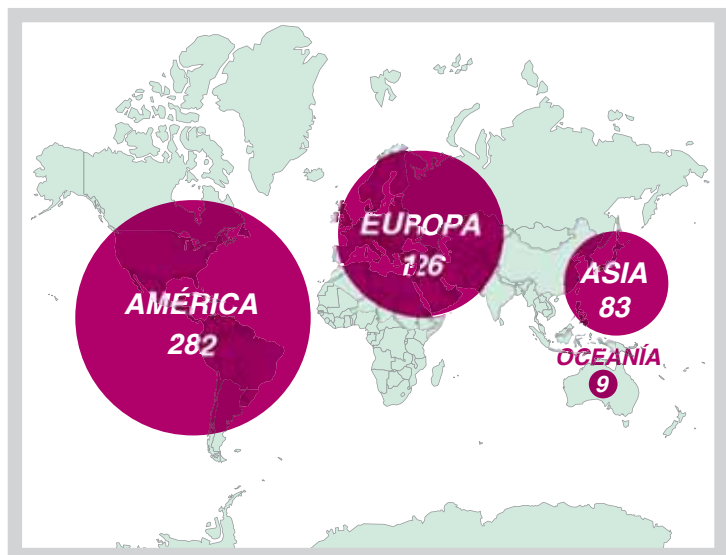


TOP 500 www.top500.org

Distribución por continentes e países europeos

Listado actualizado cada semestre no que figuran os 500 supercomputadores máis potentes do mundo. Elabórase dende 1993 coas contribucións de expertos en supercomputación, científicos usuarios e fabricantes. Os datos refírense a novembro de 2010.

Unha análise dos datos globais sobre os centros recollidos na lista ata 2006 reflectía que a potencia total das máquinas de supercomputación no mundo incrementábase aproximadamente un 90% cada ano.



NOVAS › Máis información › <http://www.cesga.es>

A AULA CESGA MIGRA A CHAMILO

Aposta polo software libre

O pasado mes de agosto o CESGA completou a migración do software base da Aula Cesga, a plataforma decana de e-learning para xestión de cursos e espazos de colaboración online. Aula Cesga presta servizo público á investigación e experimentación no ámbito de educación a distancia online en Galicia dende o ano 2002 e conta na actualidade con máis de 11.000 usuarios repartidos en 700 cursos.

A migración supuxo o cambio da anterior plataforma Dokeos á nova Chamilo.

Chamilo é un novo proxecto que opta de "xeito radical" polo código aberto en dúas presentacións: a actual Chamilo 1.8.6.2, (sucesora de Dokeos) e Chamilo 2.0, un novo sistema de aprendizaxe electrónica xa en fase final, con novas ferramentas creativas. Para velar polo seu futuro, protexer o software e mantelo aberto e libre, creouse Chamilo.org, unha asociación sen ánimo de lucro con base en Bélxica.

<http://www.chamilo.org>

<http://aula.cesga.es>

CESGA HPCN 2010

A reunión científica dos usuarios do CESGA

O 25 de Novembro celébrase de novo o CESGA *High Performace Computing Networking 2010*, no Salón de Graos da Facultade de Matemáticas de Santiago de Compostela. A reunión, dirixida a usuarios habituais e potenciais do CESGA, adicará especial atención ás aplicacións industriais da supercomputación nesta edición.

Mostraranse as novidades en servizos e recursos, contando coa participación de usuarios que presentarán os seus traballos e experiencias no CESGA. Como é tradicional, aproveítase esta ocasión para coñecer as inquietudes e necesidades dos usuarios, e para realizar previsións de futuro da investigación asistida con Supercomputación.

Consulta o programa da xornada en:

<http://www.cesga.es>

EVENTO

4^a Reunión Plenaria da **Red Española de e-Ciencia**

Reunión do e-IRG: **e-Infrastructure Reflection Group**

Workshop on **Numerical Simulation of Buildings Fires**

> **O Prazo de inscrición permanecerá aberto ata o luns 29 de novembro do 2010**

Xonadas **RSME de Transferencia e Matemática Industrial.**

> **O Prazo de inscrición ábrese o 15 de novembro de 2010**

DATAS

02 de decembro 2010
> **09:00-19:10**

16 de decembro 2010
> **09:00-16:00**

02 de decembro 2010

12,13 e 14 de xullo 2011

LUGAR

Bellaterra > **Barcelona**
Port d'Informació Científica (PIC)
<http://www.pic.es>
<http://www.e-ciencia.es/eventos.jsp>

Royal Library of Belgium > **Bruxelas**
<http://www.e-irg.eu>

Santiago de Compostela > **Galicia**
<http://matematica.nodo.cesga.es/incendios>

Santiago de Compostela > **Galicia**
<http://matematica.nodo.cesga.es/RSMEIndustrial>

A escola rural na nube

Co inicio do curso escolar, comezou o Proxecto “Comunidades Rurais Virtuais para Educación na Nube”. Diseñado pola Área de e-Learning do Centro de Supercomputación de Galicia, é un dos tres proxectos internacionais, financiados por Hewlett Packard Labs, no ámbito da “Tecnoloxía Cloud e Educación” no mundo. O experimento avaliará unha solución baseada no cloud, que proporcione servizos de colaboración e aprendizaxe online ás redes de Centros Rurais Agrupados (CRAs).



María José Rodríguez Malmierca

*Coordinadora do Dep. de e-Learning
CESGA*

A utilización de *cloud computing* no ámbito dos CRAs, compostos por un grupo de pequenas escolas unitarias distantes entre elas varios quilómetros, parece inicialmente moi axeitada, ao proporcionar un servizo que facilita o acceso dende calquera punto a ferramentas de traballo, colaboración e comunicación para mellorar as súas propostas educativas e cohesionar a actividade da comunidade educativa (mestres, nenos, pais) no seu conxunto. Todo iso, sen necesidade de ser expertos ou instalar programas específicos nos seus ordenadores individuais, moi diversos en rendemento e que contan con sistemas operativos variados.

Dende que comezou o proxecto traballouse moito. Xa se conta cunha web que presenta as novidades do proxecto: <http://rural.cesga.es> e configurouse unha infraestrutura básica virtualizada que permitirá máis adiante a integración plena do proxecto no ámbito cloud que xestiona o CESGA. O ámbito de traballo utilizado para acceder a recursos, ferramentas e arquivos compartidos está baseada no software de código aberto **EyeOS**, unha solución sinxela e potente que serve como sistema operativo na nube e como espazo común de traballo.

Nas aulas tamén se empezan a ver cambios: Tras a instalación do escritorio virtual que permite aos mestres e mestras do CRA contar cun espazo “na nube”, comezan a compartir recursos educativos, conectarse de forma sinxela, e pronto, “asomarse xunto cos nenos por videoconferencia” a calquera das escolas do CRA para

celebrar aniversarios, participar en contacontos e noutras actividades das 7 escolas que están máis preto que nunca grazas ás posibilidades da computación *na nube*.



A colaboración do profesorado do centro está a ser unha das claves no éxito do proxecto, xa que se trata dun equipo con grande experiencia na integración cotiá da pizarra interactiva en todas as súas aulas, e que acolleu esta proposta con entusiasmo. Nestes meses iniciais están

a recibir formación personalizada por parte do CESGA para coñecer as posibilidades da escola *na nube*, e traballando en común achegan novas ideas e propostas para levalo á práctica no día a día das súas aulas.

Nos próximos meses, preténdese incorporar outros elementos ao proxecto como cámaras web, videocámaras, tablets pcs táctiles, que, en conxunto coa pizarra dixital interactiva coa que xa contan todas estas escolas, permitirán avaliar máis aspectos do aproveitamento das potencialidades do cloud computing e facer realidade un pouco máis esa escola *sen paredes*.

Para ter a información máis actualizada do proxecto, visite:

<http://rural.cesga.es>
<http://www.eyeos.org>

DESCUBRA

todo el potencial
de la virtualización.

Es el momento de conseguir más
con la virtualización mediante la
convergencia de su infraestructura física
y la integración del almacenamiento en
su entorno virtual.

Resultados que marcan la diferencia.

www.hp.es/descubre



www.hp.es/descubre

