

INFORME DE GESTIÓN EJERCICIO 2001

S.A. GESTIÓN CENTRO DE SUPERCOMPUTACIÓN DE GALICIA

1.- Utilización de recursos y eventos durante el año 2001

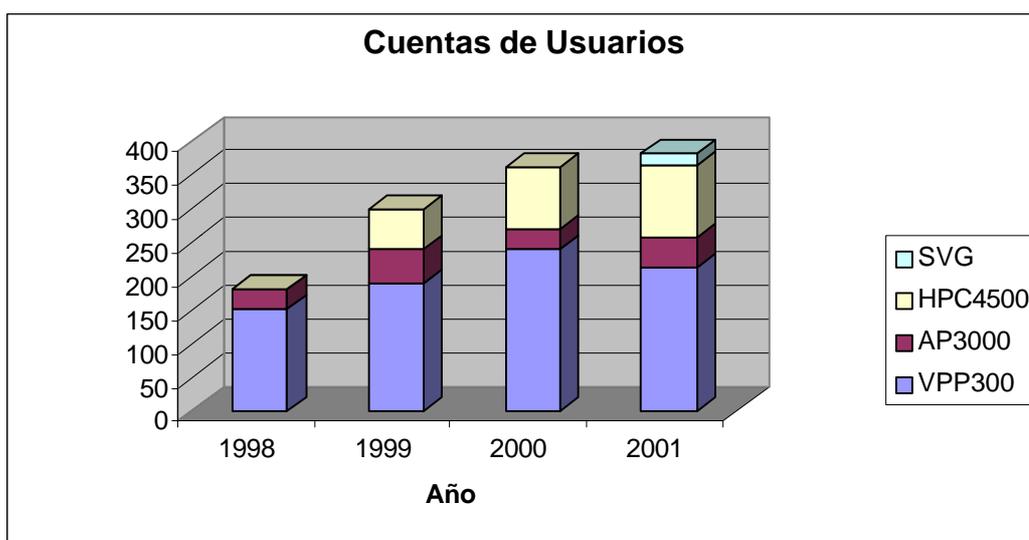
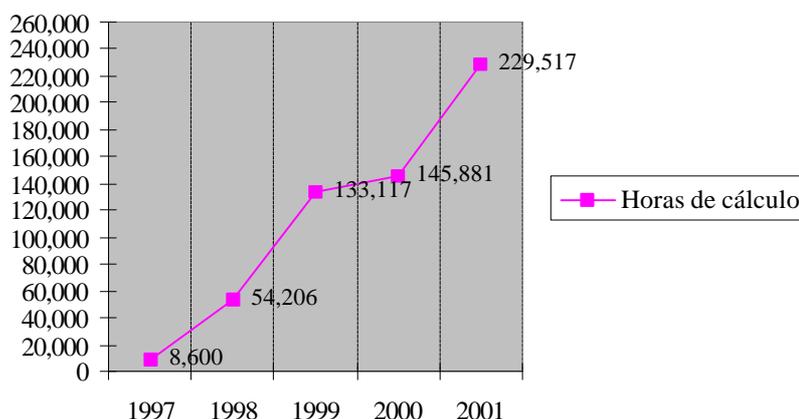
1.1.- Servidores de cálculo

El CESGA cuenta con tres servidores de cálculo de altas prestaciones, disponibles para la comunidad de usuarios. Dependiendo de los algoritmos de cálculo, el usuario opta por la arquitectura informática más adecuada.

En el siguiente gráfico se indica la evolución de las horas de cálculo utilizadas por los usuarios, así como el incremento de cuentas de usuario.

Adicionalmente, en enero del 2001, el SVG (clusters distribuidos de PC's) se incorporó al proceso productivo del CESGA.

El SVG incluido en la estadística corresponde exclusivamente al nodo del CESGA.



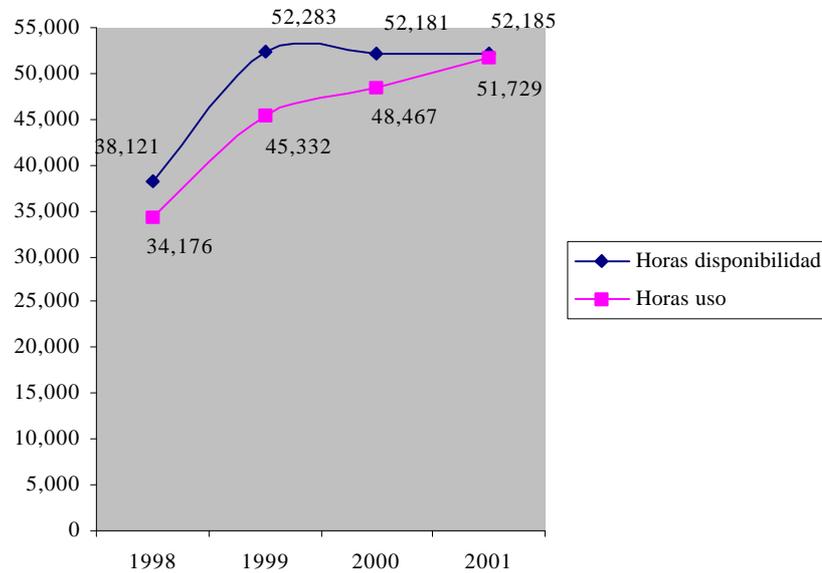
1.1.1.- Superordenador Vectorial VPP300E

El superordenador VPP300E tuvo un funcionamiento regular, con una disponibilidad del 99'3% y una ocupación media del 99'1%.

Los índices de evolución del uso del superordenador durante el año 2001, comparados con el año 2000 son como siguen:

- 1.- Aumento de uso en un 6'7%.
- 2.- Disponibilidad similar a la del año pasado.
- 3.- Incremento de la ocupación media en un 6'2%.

	Año 2000	Año 2001	% evolución
Horas de uso	48.467	51.729	+6'7%
Horas de disponibilidad	52.181	52.185	+ 0%
% disponibilidad	99	99'3	+0'3%
% ocupación	92'9	99'1	+6'2%



1.1.2.- Superordenador AP3000

El superordenador AP3000 incorpora una arquitectura paralela con memoria distribuida, mediante la cual la comunidad científica está llevando a cabo experiencias relativas al diseño y uso de algoritmos de paralelización.

La obsolescencia tecnológica del AP3000 hace que sus prestaciones se vean fácilmente superadas por granjas de PC's de bajo coste localizados en los Departamentos de los usuarios. Por esta razón, el uso de este sistema es reducido.

Complementariamente a lo anteriormente expuesto, este sistema no se orienta a la producción de cálculo sino a la investigación de algoritmos de paralelización, por lo que el nivel de ocupación media de las CPU's fue del 20'4% con una disponibilidad del 99'4%.

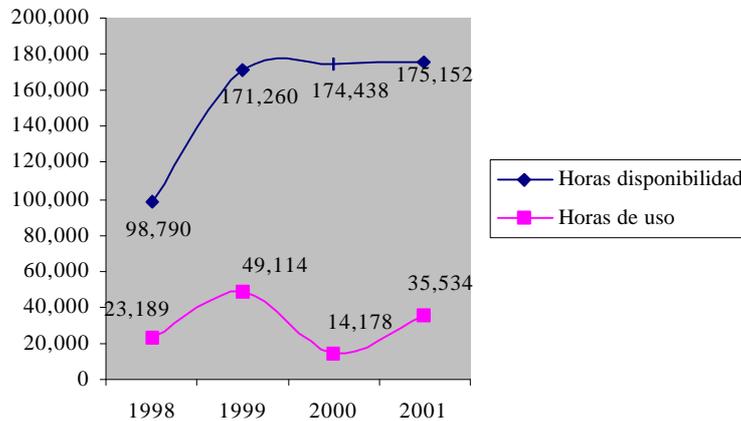
El incremento de uso de este sistema vino determinado por las siguientes razones:

- Nuevos proyectos de paralelización.
- Disponibilidad para su uso en procesos no paralelizables.

Los índices de evolución del uso del superordenador durante el año 2001 comparados con el año 2000, son como siguen:

- 1.- Aumento en horas de uso en un 150'6%
- 2.- Disponibilidad similar a la del año pasado.
- 3.- Aumento del nivel de ocupación en un 12'3%

	Año 2000	Año 2001	% evolución
Horas de uso	14.178	35.534	150'6%
Horas de disponibilidad	174.438	175.152	+0'4%
% disponibilidad	99'3	99'9	+0'6%
% ocupación	8'1	20'4	12'3%



1.1.3.- Servidor de cálculo HPC4500

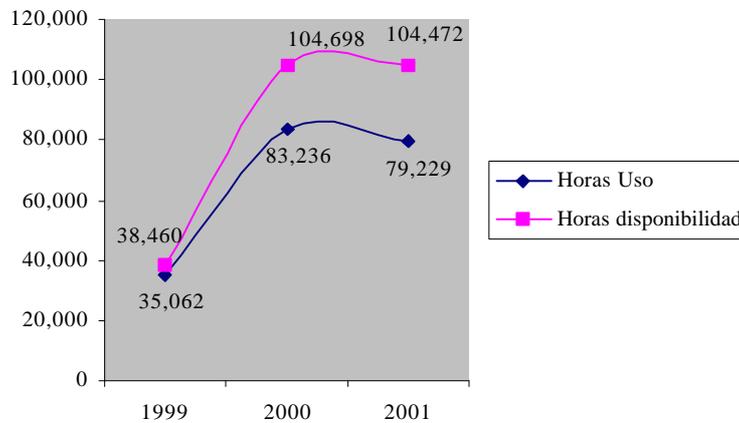
El servidor HPC4500 incorpora una arquitectura SMP (multiprocesador con memoria compartida) el cual se utiliza, en aplicaciones de cálculo escalar, siendo reducido el uso en prueba de algoritmos de paralelización.

El servidor HPC4500 tuvo un funcionamiento regular durante el año 2001, con una disponibilidad del 99'3% y una ocupación media del 75'8%. Los índices de evolución del uso de este servidor durante el año 2001, comparados con el año 2000 son como siguen:

- 1- Disminución de uso en un 4'8% debido fundamentalmente al uso del AP3000 en aplicaciones no paralelizables.
- 2- Disponibilidad similar a la del año pasado.
- 3- Reducción del porcentaje de ocupación debido al menor número de horas consumidas.

Los índices de uso de evolución del servidor durante el año 2001 comparados con el 2000, son como siguen:

	Año 2000	Año 2001	% evolución
Horas de uso	83.236	79.229	-4'8%
Horas de disponibilidad	104.698	104.472	+0'4%
% disponibilidad	99'3	99'3%	0%
% ocupación	79'5	75'8%	-3'7%



1.1.4.- Servidor de cálculo SVG (Superordenador Virtual Gallego)

Este sistema se compone de 3 nodos interconectados con la red de banda ancha RECETGA disponiendo en cada nodo de las siguientes configuraciones:

Nodo CESGA : Cluster de 9 nodos con 2 cpu's por nodo.
 Nodo UDC : Cluster de 11 nodos con 1 cpu por nodo.
 Nodo CIS : Cluster de 9 nodos con 2 cpu's por nodo.

Estos Cluster se gestionan desde el Nodo Central del CESGA.

El SVG se utiliza básicamente en procesos de renderización, algoritmia genética y paralelización.

Los índices de uso del sistema (Cluster CESGA) es el siguiente:

	Año 2001
Horas de uso	63.025
Horas de disponibilidad	156.420
% disponibilidad	99'2
% ocupación	40'8

1.2.- Aplicaciones de cálculo

Las aplicaciones de cálculo disponibles en los servidores del CESGA a 31 de diciembre de 2001, eran las siguientes:

<u>Temas</u>	<u>Programas y Aplicaciones</u>	<u>Instalados en</u>
Análisis Científico	PAW, PAW++, ROOT	HPC4500, AP3000

Bases de Datos Científicas	CSD, CRYSTMET ZENTRALBLATT MATH	db.cesga.es zmath.cesga.es
Bioinformática	GeneHunter MUMmer Clustalw GlimmerM Combiner BLAST Phylip	HPC4500, AP3000 SVG HPC4500, AP3000 SVG SVG HPC4500, AP3000 HPC4500
Cálculo Estructural Fluídos y Magnetismo	ANSYS Multiphysics GENESIS	HPC4500, AP3000 HPC4500
Simulación	MATLAB GEANT 3.21 EGSnrc GEANT 4.3.2	HPC4500, VPP300 HPC4500, AP3000 HPC4500, AP3000 HPC4500, AP3000, SVG
Elementos Finitos	MODULEF	VPP300
Información Geográfica	ARC-INFO / ARC-VIEW	PCGIS, PCGIS2, FGIS
Librerías Matemáticas	CERNLIB BLAS/VP DASSL DSS/2 IMSL LAPACK/VP SSLII/VP-VPP	HPC4500, AP3000 VPP300 VPP300 VPP300
Química Molecular	AMBER GAMESS GAUSSIAN MOPAC93 GAMESS NWChem MOLDEN	VPP300 VPP300 HPC4500 HPC4500, AP3000
Visualización Científica y animación	AVS-Express MAYA NCAR Graphics	HPC4500 ani.cesga.es HPC4500, AP3000
Gestión de software	CMZ, CVS	HPC4500, AP3000

Durante el año 2001, para cubrir necesidades de los usuarios fueron instaladas las siguientes aplicaciones nuevas:

Aplicaciones Nuevas añadidas en el año 2001

Nombre	Clase	Descripción
NWChem	Química Molecular	NWChem es un paquete de química computacional diseñado para su ejecución sobre superordenadores paralelos de altas prestaciones al igual que sobre clusters de estaciones de trabajo

		convencionales. Pretende ser escalable tanto en su capacidad para tratar grandes problemas se una forma diferente como en su uso de los recursos de computación paralelos disponibles.
ROOT	Análisis científico	ROOT proporciona una serie de paquetes Orientados a Objetos con todas las funcionalidades necesarias para tratar y analizar grandes cantidades de datos de forma eficiente
CERNLIB	Librerías científicas	Librerías de cálculo científico del CERN necesarias para varias de las aplicaciones instaladas.
GEANT	Simulación	Describe el paso de las partículas elementales a través de la materia. Originalmente fue diseñado para experimentos de Física de Altas Energías, pero hoy en día tiene aplicaciones también en áreas de Medicina y Biología, protección radiológica y astronáutica.
EGSnrc	Simulación	Este programa es un Monte Carlo para la simulación del transporte de electrones y fotones. La utilidad del mismo es variada aunque se está utilizando para el cálculo de dosimetrías en tratamientos médicos.
Phylip	Bioinformática	Programa para la realización de árboles filogenéticos
ClustalW	Bioinformática	Programa de alineamiento de secuencias de genes o proteínas y la realización de árboles filogenéticos
GeneHunter	Bioinformática	Esta aplicación da solución a problemas de optimización que utilizan las metodologías más avanzadas de algoritmia genética (multipoint analysis of pedigree data including: non-parametric linkage analysis, LOD-score computation, information-content mapping, haplotype reconstruction)
BLAST	Bioinformática	BLAST® (Basic Local Alignment Search Tool) es un conjunto de programas diseñados para explorar las bases de datos de secuencias disponibles independientemente de si es un fragmento de DNA o de proteína.
PAW,PAW++	Análisis científico	PAW es un instrumento de ayuda a los físicos en el análisis y representación de sus datos. Proporciona representación gráfica interactiva y análisis estadístico o matemático. Forma parte de un paquete más general: las librerías de cálculo científico del CERN, también instaladas
MUMmer	Bioinformática	<i>Es un sistema de alineamiento de secuencias que permite alinear secuencias de millones de nucleótidos.</i>
Glimmer/GlimmerM	Bioinformática	<i>Es un buscador de genes. Está basado en los algoritmos de programación dinámica que consideran todas las combinaciones de exones para incluirlas en el modelo de gen.</i>
Combiner	Bioinformática	<i>Permite la combinación de las salidas de varios programas de búsqueda de genes.</i>
CMZ	Gestión de Software	CMZ es un gestor de código fuente, interactivo, rápido, con función de autodocumentación, personalizable e independiente tanto de la plataforma como del gestor de documentos del sistema
CVS	Gestión de Software	Concurrent Versions System es el sistema de control de versiones dominante en la actualidad en el desarrollo de software no comercial. Permite tanto la gestión del software de pequeños proyectos individuales como grandes proyectos distribuidos entre muchas localizaciones, gracias a su arquitectura cliente-

		servidor. Permite el acceso al código desde cualquier parte a través de Internet, evitando conflictos en el desarrollo de software. CVS es empleado por conocidos proyectos de código abierto como Mozilla, GIMP, XEmacs, KDE, e GNOME
--	--	--

Las acciones de actualización de aplicaciones realizadas durante el año 2001, fueron las siguientes:

Aplicación	Descripción
Gaussian	Migración a la última versión en el VPP: Gaussian 98
GameSS	Migración de la aplicación al HPC4500
ANSYS	Se añadió una nueva licencia y se adquirió la actualización de versión (en espera de la llegada de la nueva máquina).
MATLAB	Se instaló la última versión y se han añadido nuevos módulos
ZentralBlatt	Se actualizó a la última versión de software, separando en un WEB independiente. Además se han realizado diversas actualizaciones de la bases de datos
CSD	Se ha instalado una nueva versión, además de actualizar las bases de datos.
ARC-INFO	Actualización a la última versión

1.3.- Subsistema de Almacenamiento

Este sistema se compone de 1 Terabyte en disco y 8 Terabytes en el sistema robotizado de cintas.

Este equipo realiza tres funciones fundamentales:

- Soporte de archivos de trabajo de los sistemas de cálculo
- Almacenamiento de archivos de usuario
- Backup automático de los sistemas del CESGA



El total de capacidad ocupada fue de 6 TB, incluyendo 1'6 TB dedicados a Backup de sistemas y archivos de usuario.

1.4.- Laboratorio de Visualización y GIS

Se ha seguido dando apoyo a los usuarios en la utilización de los recursos del laboratorio. En lo referente a visualización este apoyo ha consistido en la generación de videos, diapositivas y material impreso para presentación de resultados.

En cuanto a los servicios GIS el soporte, básicamente, consistió en el análisis y presentación de información georeferenciada. En el año 2001 se incorporó el nuevo servidor cartográfico Arc IMS3.

1.5.- Comunicaciones

La Red de Ciencia y Tecnología de Galicia ha prestado su servicio de forma satisfactoria a todos los puntos de acceso de la misma, los cuales a 31 de diciembre de 2001 eran los siguientes:

- CESGA
- Campus Coruña
- Campus Ferrol
- Campus Vigo
- Campus Lugo
- Campus Pontevedra
- Campus Santiago
- Campus Orense
- Hospital Xeral Cíes – Vigo
- Hospital Xeral – Santiago
- Hospital Juan Canelejo – A Coruña
- Hospital Meixoeiro – Vigo
- Hospital Cristal Piñor – Ourense
- Centro de Investigaciones Lingüísticas Ramón Piñeiro
- Instituto Español de Oceanográfico – A Coruña
- Instituto Español Oceanográfico – Vigo
- ANFACO – Vigo
- Centro Superior Bibliográfico de Galicia - Santiago
- Misión Biológica de Galicia– CSIC
- Centro de Investigaciones Forestales de Lourizán - Pontevedra
- Instituto de Investigaciones Agrobiológicas (CSIC) - Santiago
- Instituto de Investigaciones Marinas (CSIC) - Vigo
- Instituto de Estudios Gallegos Padre Sarmiento – CSIC
- Parque Tecnológico de Galicia - Ourense
- Centro de Experimentación en Acuicultura (Aguíño)
- Estación de Viticultura e Enoloxía (Leiro)
- Centro de Cultivos Mariños (Ribadeo)
- Centro de Información e Tecnoloxía Ambiental
- Centro de Investigacións Agrarias (Mabegondo)
- Centro de Control de Calidade do Medio Mariño (Vilaxoán)

- Centro de Investigaciones Mariñas (Corón)
- Novo Seminario de Estudos Galegos
- Dirección Xeral de Universidades
- Palacio de Exposiciones y Congresos de Santiago de Compostela
- FEUGA en Vigo
- FEUGA en Santiago de Compostela
- Aula de Productos Lácteos en Lugo
- CIS en Ferrol
- Secretaría Xeral de Investigación e Desenvolvemento
- Delegación del CSIC en Galicia
- Acceso a Red IRIS de Galicia
- Acceso a Infovía plus

Al objeto de asegurar la continuidad, seguridad y calidad del servicio de comunicaciones, se llevaron a cabo las siguientes acciones:

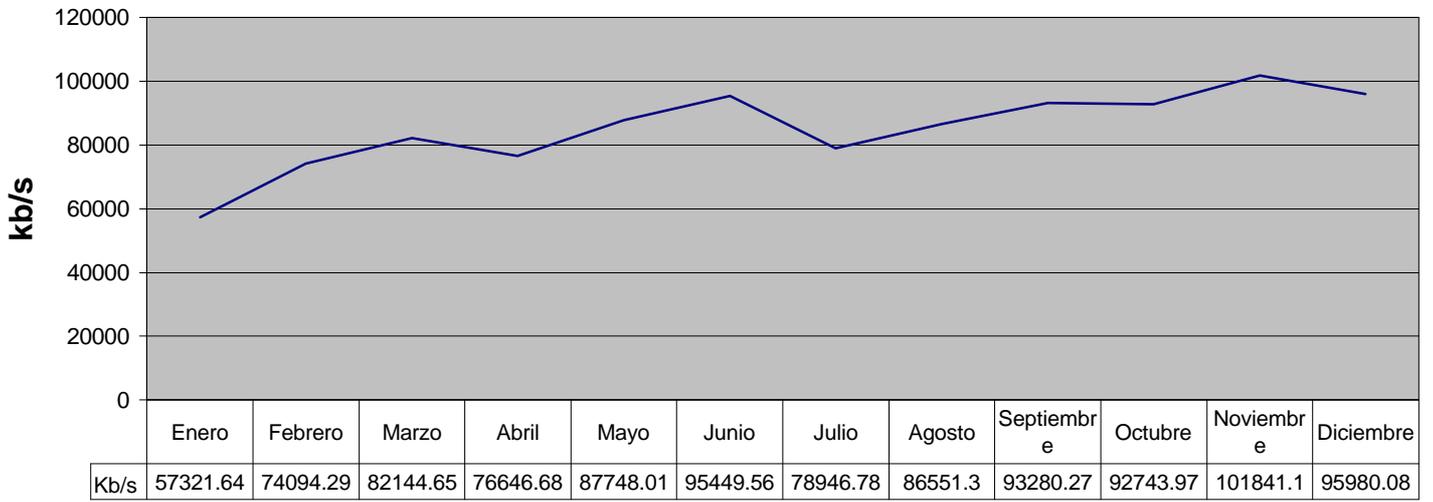
- Mejora del sistema de estadísticas incluyendo índice de disponibilidad.
- Mejora del sistema de seguridad antivirus del CESGA mediante instalación de antivirus en servidor de ofimática interno.
- Implantación de MCU IP para videoconferencia
- Actualización tecnológica de los sistemas que soportan los servicios de Internet:
 - Ampliación servidores News y Proxy-cache
 - Establecimiento de mirrors para contenidos solicitados por usuarios.
 - Sustitución de servidores de web y estadísticas.
- Instalación de sistemas de videoconferencia en los Vicerrectorados de Investigación, Secretaría Xeral de I+D y centros del CSIC en Galicia.
- Actualización de infraestructura informática de los centros del CSIC en Galicia (servidores, terminales y redes internas)
- Planificación y replanteamiento de RECETGA para inclusión de los siguientes puntos de acceso en el año 2002:
 - Consorcio Zona Franca de Vigo
 - Instituto de Estudios Gallegos Padre Sarmiento (Pazo de San Roque) mediante banda ancha.
 - Asociación de Empresarios do Deza.
 - Instituto Español de Oceanografía – Vigo mediante banda ancha.
 - CETMAR
 - Hospital Cristal-Piñor mediante banda ancha.
- Ampliación del ancho de banda de conexión a RedIRIS de 18 Mbps a 42 Mbps.

La actividad de RECETGA se incrementó notablemente durante el año 2001 debido, entre otras, a las siguientes razones: ampliación del ancho de banda de RedIRIS, aumento del número de usuarios y mayor intercambio de información entre centros.

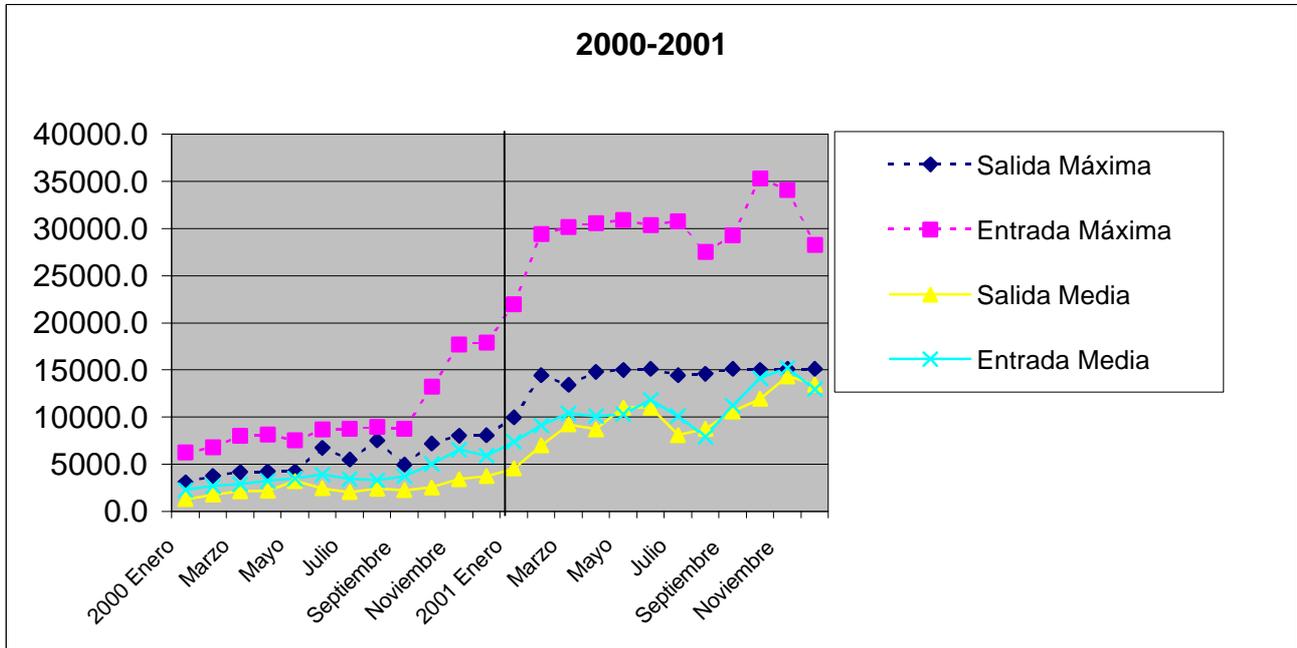
Como hechos significativos cabe destacar:

- Tráfico intercambiado en RECETGA: incremento de un 60%
- Ancho de banda acceso a RedIRIS: incremento de un 230%

**Trafico intercambiado en RECETGA
TOTAL**



Intercambio de Tráfico RECETGA-RedIRIS 2000-2001



2.- Contratos y Proyectos

Durante el año 2001 se han realizado tareas de soporte a la investigación y desarrollo a través de proyectos y contratos de servicios, enumerando a continuación la facturación habida en el ejercicio 2001:

- Consorcio de Bibliotecas Universitarias de Galicia (Universidades, Secretaría Xeral I+D)	Importe:	244.400.000.- Ptas
- Registro de Investigadores (Secretaría Xeral I+D)	Importe:	7.500.000.- Ptas
- A PONTE (ESPRIT). (Unión Europea)	Importe:	6.252.145.- Ptas
- Modelo de predicción meteorológica (Consellería de Medio Ambiente)	Importe:	6.005.414.- Ptas
- Optimización de rutas de transporte (SOGAMA)	Importe:	3.000.000.- Ptas
- Congreso HPCN (Green Data)	Importe:	1.551.724.- Ptas
- Curso e-Galego : Consellería de Educación e O. U. Fundación Caixa Galicia	Importe: Importe:	3.600.000.- Ptas 7.241.379.- Ptas
- GIS CIMA (Consellería de Pesca, Marisqueo e A.)	Importe:	1.505.517.- Ptas
- GIS Centros de Investigación (Consellería de Pesca, Marisqueo e A.)	Importe:	973.500.- Ptas
- e-canned (Unión Europea VPM)	Importe:	13.623.852.- Ptas
- METAFOR (Unión Europea VPM)	Importe:	6.237.517.- Ptas
- GIS Yacimientos arqueológicos (Consellería de Cultura, Comunicación Social e T.)	Importe:	1.440.000.- Ptas
- Convenio becas para soporte CESGA (Secretaría Xeral I+D)	Importe:	2.354.458.- Ptas
- Proyecto UE VPM: e-minder (Secretaría Xeral de I+D)	Importe:	6.347.833.- Ptas
- Otros Proyectos (Lab. Visualización, formación, etc.) (Usuarios diversos)	Importe:	1.958.223.- Ptas
	TOTAL FACTURADO:	313.991.562.- Ptas

3.- Seminarios y cursos para usuarios:

Durante el año se realizaron los siguientes seminarios y cursos:

4.1.- Seminarios:

- Workshop HPCN (HIGH PERFORMANCE COMPUTING AND NETWORKING) CESGA 2001:

31 mayo de 2001. Organizado por el Centro de Supercomputación de Galicia y patrocinado por GreenData, S.L. Dirigido a investigadores y estudiantes interesados en la Simulación y Modelización empleando recursos de cálculo de altas prestaciones.

- Oportunidades para Investigación Bioinformática en Galicia:

5 julio de 2001. Organizado por el CESGA y financiado por el Foro Científico Tecnológico de la Secretaría Xeral de Investigación e Desenvolvemento. Dirigido a Biólogos Moleculares, Genetistas, Químicos e investigadores en el campo de la Genómica, la Proteómica y la Biología Molecular y la Informática de altas prestaciones.

- Jornada “Investigación Bioinformática en Galicia: Proyectos y Acciones”:

27 de septiembre de 2001. Organizado por el CESGA y financiado por el Foro Científico Tecnológico de la S.X. de Investigación e Desenvolvemento. Dirigido a investigadores interesados en la Bioinformática, con el objetivo de facilitar el establecimiento de colaboraciones concretas entre los grupos de investigación más involucrados en la parte “Bio...” y los grupos más cercanos a la parte “...informática” de esta disciplina.

4.2. Cursos:

- Curso Modelado 3 D utilizando el programa Rhinoceros 1.1.

22 al 26 de Enero. Simultáneamente en tres Aulas de Teleensino: en el CESGA, en el Campus de Lugo y en el Campus de A Zapateira (Coruña)

- Curso GIS Arc View

26 febrero al 2 de Marzo. Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA)

26 al 30 de Marzo. Centro de Supercomputación de Galicia. (CESGA) dirigido a alumnos de Geografía e Historia de la USC.

- Curso LINUX - Usuario

12, 13 y 14 de Marzo. Sala Teleenseñanza CESGA

- Curso LINUX – Administrador

19,20 y 21 de Marzo. Sala Teleenseñanza CESGA

- Curso Apache

2, 3 y 4 de Abril. Sala Teleenseñanza CESGA

- Curso “Introducción ás Aplicacións dos GIS e Tecnoloxías de detección en Ecoloxía”.

Del 16 al 27 de Abril, organizado por el Colegio Oficial de Biólogos.

- Curso Perl

2 y 3 de Mayo. Sala Teleenseñanza CESGA

- Patrones de diseño y Programación Java

4 al 13 de setiembre de 2001. Aulas teleformación de Vigo, Coruña, Lugo y Santiago. Dirigido a miembros de la Comunidad Universitaria, personas tituladas y profesionales.

- Programa de Formación para Usuarios de los Servidores de Cálculo del CESGA 2001.

Utilizando las Aulas de Tele-enseñanza instaladas en el CESGA y en el Edificio de departamentos de la E.T.S. de Arquitectura (Universidade da Coruña), se realizaron los cursos que a continuación se detallan y que estaban orientados al uso óptimo de los sistemas de supercomputación instalados en el CESGA en lo referente a programas desarrollados por los propios usuarios.

- ✓ Introducción a la Programación de los Supercomputadores (06/Nov/2001)
- ✓ Introducción a la Programación Paralela (26-30/Nov/2001)

5.- Otras actividades:

- Edición de la revista trimestral “dixitos” en papel y formato electrónico.
- Edición del Anuario del 2001, en un número especial de “dixitos”.
- Presentación resultados Proyecto “Simulación Numérica en Elastoacústica mediante elementos finitos sobre arquitecturas paralelas aplicado al control activo del ruido” el 21 de Febrero: CESGA – Universidade de Santiago de Compostela – Universidade da Coruña.
- Presentación Proyecto RIGA a Vicerrectores de las Universidades el 26 de Marzo en el CESGA.
- Presentación Proyecto A PONTE a profesores de enseñanza secundaria del Proyecto SÓCRATES. 24 de Abril.
- Presentación ponencia: “Soporte de servicios comunes a la Comunidad Investigadora” en la Jornada sobre “La Administración ante la Sociedad de la Información” organizada por SUN el 26 de abril en Las Palmas de Gran Canaria.
- Presentación BUGALICIA, 12 de Junio en CESGA.
- Forum Sociedad de la Información, Julio en CESGA.
- Workshop Proyecto Metafor, 13 y 14 de Septiembre en Uppsala (Suecia).
- Kick-off Meeting e-minder, 24 y 25 de Septiembre en CESGA.
- Workshop Proyecto e-canned, 24 y 25 de Octubre en CESGA.
- Constitución da Rede Galega de Bioinformática, 8 de Noviembre en CESGA.
- Edición prospectos sobre eventos del CESGA.
- Visita del Comisario de Política Regional y Responsable de la Reforma de las Instituciones de la Comisión Europea, Mr. Michel Barnier al CESGA, el 26 de abril.
- Visitas al CESGA de colegios y centros educativos.
- Incremento del número de visitas a la web del CESGA (867 visitas/día). En la siguiente gráfica se puede observar la evolución en los tres últimos años.

Promedio diario de sesiones de usuario en www.cesga.es

Media diarias en: 2001 -- 867

Media diarias en: 2000 -- 479

Media diarias en: 1999 -- 178

