Organización en la que se ha implantado el proyecto:
Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura)
Apoyado por: HP

TITULO: CénitS (Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación)

Antecedentes/Problemática
(Breve resumen)

La Fundación COMPUTAEX (Computación y Tecnologías Avanzadas de Extremadura), constituida en Marzo de 2009, tiene encomendadas las siguientes actividades principales: Promover la elaboración de proyectos de investigación y desarrollo tecnológico; Proporcionar capacidad de cálculo, comunicaciones y soporte técnico a sus usuarios; Fomentar y promocionar la cooperación entre empresas e instituciones; Contribuir al desarrollo y fortalecimiento de la capacidad competitiva de las comunidades investigadoras extremeñas, así como del sector empresarial y, especialmente; Impulsar, poner en marcha y gestionar el centro de supercomputación de Extremadura que se ha creado con el nombre de Centro Extremeño de iNvestigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación (CénitS).

CénitS es, por ello, el principal agente del proyecto de la supercomputación en Extremadura que ha dado ya respuesta a más de una treintena de proyectos de investigación, innovación y desarrollo tecnológico, divididos en tres grandes categorías: Ciencias de la Vida, Ciencias de la Tierra y Ciencias Informáticas y de Comunicaciones. En los escasos dos años de existencia de la Fundación y del Centro, se ha dado ya soporte a un buen número de organizaciones y grupos de investigación regionales, nacionales e internacionales, recibiendo varios reconocimientos internacionales como los siguientes: Ganadores del International Itanium Innovations Awards en la Categoría Humanitarian Impact 2010; Finalistas en la Categoría Computationally Intensive Applications de los International Itanium Innovations Awards 2010; Establecimiento de récord mundial en electromagnetismo con la resolución de un sistema de ecuaciones con 620 millones de incógnitas.

Objetivos

Los objetivos generales del proyecto de supercomputación que representa CénitS en la región Extremeña son todos aquellos que promuevan el desarrollo de las tecnologías de la información, el uso del cálculo intensivo y de las comunicaciones avanzadas como instrumentos para el desarrollo socioeconómico sostenible, estimulando la participación de la sociedad civil movilizando sus recursos y dedicando especial atención a las relaciones de cooperación entre los centros de investigación públicos y privados y del sector productivo.

Para alcanzar estos objetivos el proyecto CénitS de la Fundación COMPUTAEX se ha centrado especialmente en dar respuesta a las necesidades de recursos de comunicaciones y de supercomputación detectados entre investigadores, tecnólogos e innovadores.

Con el apoyo y el impulso de la Fundación pública COMPUTAEX, constituida por la Consejería de Economía, Comercio e Innovación de la Junta de Extremadura, se busca, sobre todo, dinamizar un buen número de sectores productivos que encuentran en CénitS unos recursos de cómputo que no pueden obtener en otros ámbitos.

Hasta el momento han sido usuarios del Centro investigadores de las Universidades de Extremadura, Politécnica de Madrid, Complutense, La Coruña, Jaén, Sevilla, Málaga, Computational Electromagnetics Research Center (BiLCEM) Bilkent University de Turquía, CIEMAT, CSIC, Junta de Extremadura, Hospital Infanta Cristina de Badajoz, Hospital de Sevilla y de diversos Centros tecnológicos y empresas (Cetiex, SADIEL, Igo Software, G5, SET, etc.).

Además de dar soporte a usuarios externos al Centro, CénitS ha logrado también acometer sus propios proyectos de investigación conseguidos en convocatorias públicas competitivas regionales, nacionales y europeas.

La Fundación, a través del Centro, tiene también entre sus fines: la transferencia de resultados de investigación en el área de cálculo entre los centros públicos de investigación y las empresas; el fomento y promoción de la cooperación entre empresas e instituciones; y la promoción y colaboración en la organización de cursos seminarios y reuniones. Por todo ello ha establecido convenios de colaboración con diversos centros tecnológicos y organismos; ha organizado cuatro jornadas de supercomputación donde han participado algunos de los mayores expertos nacionales; ha organizado cursos; participa en los másteres TIC de la Universidad de Extremadura y patrocina y promueve actividades propias del sector.

Fases del Proyecto – Recursos empleados

CénitS comenzó sus actividades públicas en Septiembre de 2009 como un proyecto de la Fundación COMPUTAEX que propuso su creación para gestionar el supercomputador LUSITANIA que fue adquirido por la Junta de Extremadura en Diciembre de 2008.

La instalación estuvo operativa en poco más de tres meses, siendo éste uno de los primeros logros del Centro que, en tan corto periodo de tiempo, pudo poner en marcha una infraestructura de la complejidad de un Centro de supercomputación de las características de CénitS.

Realizadas todas las pruebas de rendimiento, monitorización, presión, sobrecarga y consumos, se procedió a la apertura al uso público poniendo a disposición de los sectores investigador y productivo todos los recursos con un servicio 24/7 y atención de 12/5. Desde entonces, se ha dado servicio a más de una treintena de proyectos de investigación y desarrollo, ofreciendo una alta disponibilidad, de modo que, en los últimos 18 meses, sólo se ha interrumpido el servicio durante 180 minutos.

A medida que nos aproximamos a los dos años de funcionamiento del Centro, éste comienza su fase de consolidación que permitirá acometer la potenciación y renovación de los equipos inicialmente adquiridos por un importe de 7,8 Millones de Euros.

Las características técnicas del supercomputador LUSITANIA (cuya topología de red se muestra en la Figura 1) gestionado por CénitS son las siguientes:

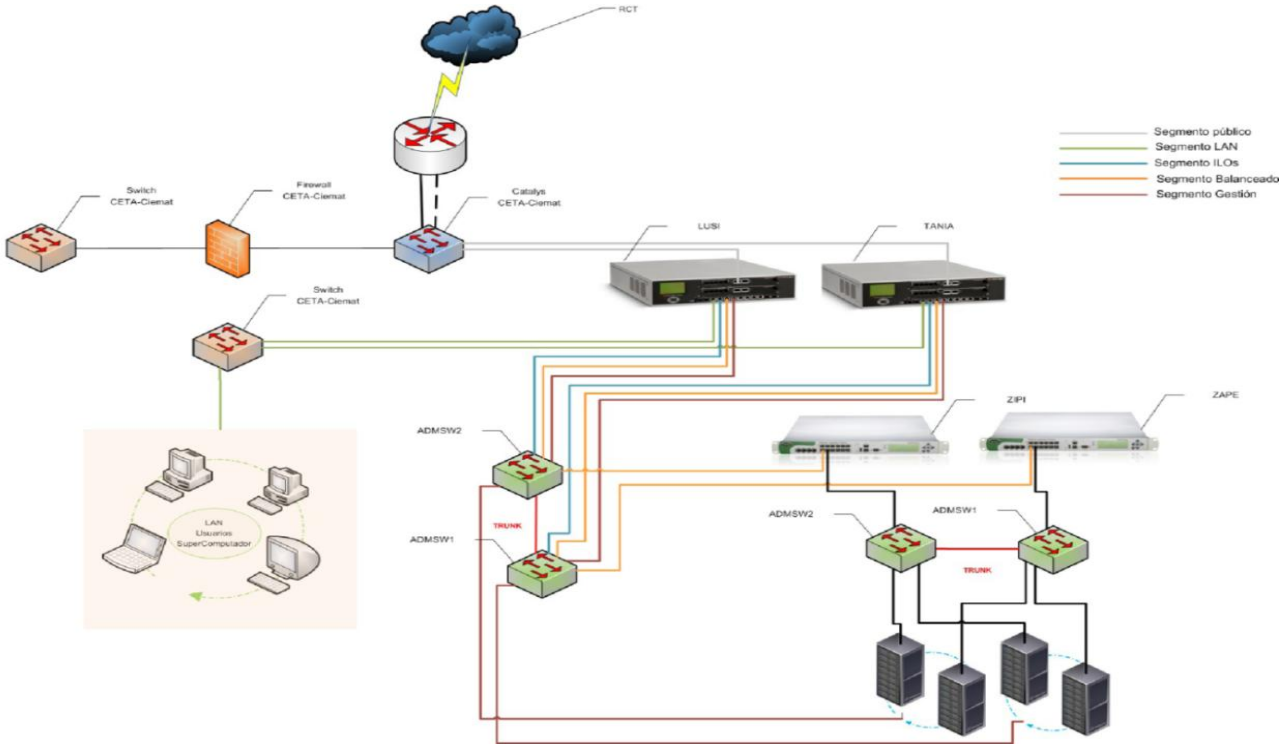

Figura 1: Topología de red del supercomputador LUSITANIA

- Nodos de cómputo (2 HP Integrity SuperDome SX2000):
  - 2x (64 procesadores/128 cores) = 128 procesadores/256 cores.
  - Itanium2 Montvale @ 1.6 GHz, 18 MB cache.
  - 2x 1TB de memoria en una sola imagen = 2TB de memoria.
  - 2x 40x146GB discos SAS = 11,68TB para "scratch".

- Almacenamiento:
  - Red Fiberchannel con multipathing activo-activo (8 puertos x 4 controladoras).
  - 2 EVAs 8100 x [(208 discos FC x 450GB) + (128 discos FATA x 1TB)] = 265,6TB.
  - 4 DL380-G5 servidores NAS ejecutando el sistema de ficheros distribuido HP StorageWorks PolyServe.

- Backup:
  - Sistema de backup basado en la librería de cintas HP Storageworks EML 245e con capacidad para 245 cintas de tecnología LTO-4 Ultrium 1840, lo que ofrece una capacidad de 392 TB en comprimido 2:1. Y software para la gestión y planificación de backups desatendidos HP StorageWorks DataProtector.

- Topología:
  - La infraestructura de servicio, y cálculo se vertebra sobre 2 switches directores ProCurve modelo HP ProCurve 5406ZL cada uno con la siguiente configuración:
    - 6 slots para módulos de ampliación.
    - 8 puertos activos 10Gigabit Ethernet repartidos en dos módulos de 4 puertos, para la conectividad de los Superdomes y nodos de servicio rx2660 vía 10 GBE para cálculo.
    - 24 puertos a 1Gigabit Ethernet activos en un modulo de 24 puertos, para la conectividad GBE de todos los elementos de la solución.
    - Módulos y Switches necesarios para conectar todos los procesadores de consola remota de todos los nodos vía Fast Ethernet/GBE.

- Sistema de climatización.

- Sistema de alimentación ininterrumpida, baterías de almacenamiento y grupo electrógeno.

Cabe destacar como característica más singular del equipo el hecho de contar con una memoria compartida de 2 Tbytes lo que permite enfrentarse a problemas de una gran complejidad con grandes requerimientos de cómputo.

La Figura 2 presenta el diseño de la topología de la arquitectura de comunicaciones de CenitS.net.

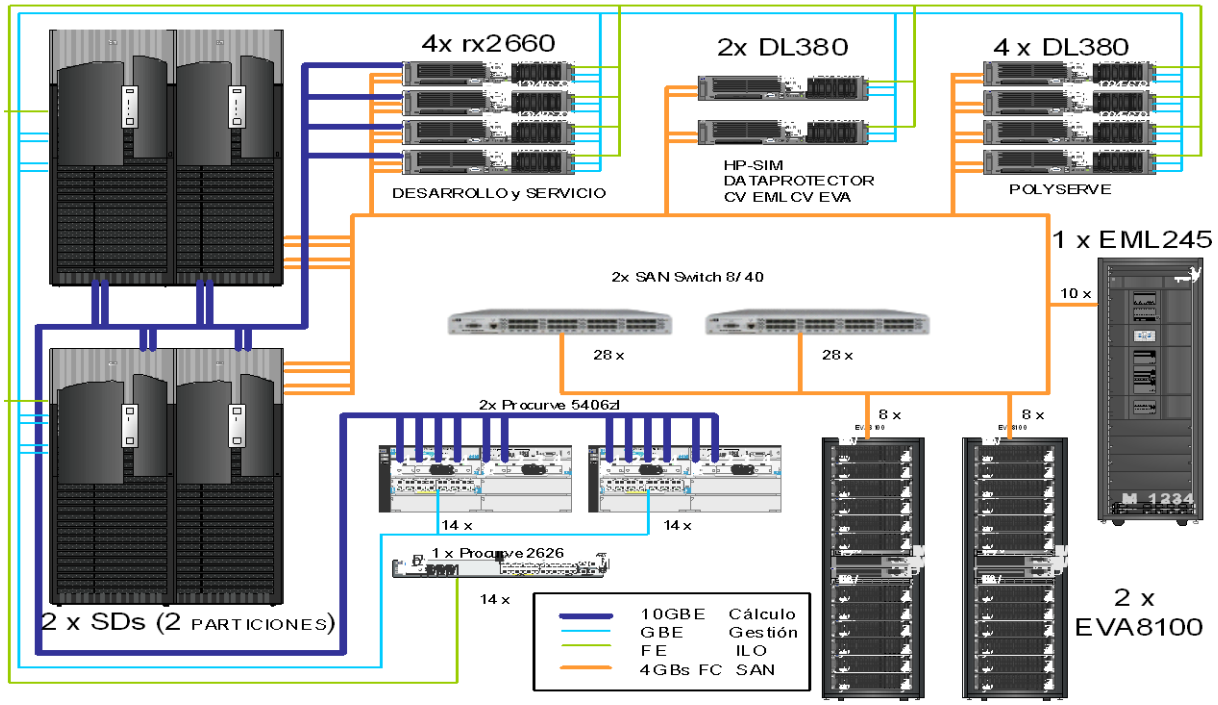

Figura 2: Topología de la arquitectura de comunicaciones de CenitS.net

Resultados - Beneficios (entidad y/o ciudadano)

El Centro de Supercomputación está llevando a cabo actividades en muy diversos campos, especialmente para aportar soluciones en ámbitos como los siguientes:

- Impacto medioambiental (industrias químicas, refinerías, irrigación).
- Biología y Medicina (cáncer, genoma, predicción de enfermedades, biodiversidad).
- Ciencias de la Tierra (estudios geológicos, predicciones de fuegos, etc.).
- Agricultura (nuevas técnicas de reproducción, simulaciones de productos).
- Diseño industrial (estructuras, puentes, aviones, coches).
- Predicción climática (calentamiento global, inundaciones).

Detallar los resultados obtenidos en todos los proyectos ejecutados en LUSITANIA sería una tarea excesivamente extensa y prolija que entendemos no es el objetivo de este documento. Por ello se reseñan a continuación algunos de los más destacables.

- *SIATDECO (Sistema de Información para la Ayuda en la Toma de Decisiones en Energías Ecológicas)*. Este proyecto cofinanciado por la Unión Europea se desarrolla en colaboración entre una Universidad portuguesa, tres centros tecnológicos y una Fundación pública españoles. Los últimos años estamos viendo como el cambio climático puede ser la causa de las variaciones que están ocurriendo en la temperatura del planeta. En el supercomputador LUSITANIA se están analizando diversos modelos climáticos y sus correlaciones con las energías renovables que nos aportan sistemas de información para la toma de decisiones que pueden ser consideradas a corto, medio y largo plazo no sólo para predecir la productividad, sino también para identificar necesidades, carencias y otros factores que pueden ser útiles para la planificación de inversiones logísticas y de infraestructuras.

- *Creación de un ecosistema de negocio en Cloud Computing* es un proyecto desarrollado en CénitS que ha colaborado en el Observatorio Tecnológico entre la Universidad de Extremadura y HP, que ha permitido ofrecer a los usuarios del ecosistema capacidad para configurar y acceder a recursos de infraestructuras, publicados como servicios (IaaS). El ecosistema de negocio en cloud proporciona, según un modelo de pago por uso, acceso bajo demanda por la red a un conjunto compartido de recursos de computación configurables. Se ha construido un portal (front-end) que constituye la interfaz del ecosistema y se ha programado un completo conjunto de plantillas de servicios que son diseñadas por los proveedores de servicios y empleadas por los usuarios para contratar y acceder a los servicios deseados. La Figura 3 muestra la topología de la red corporativa donde se ha instalado la infraestructura de cloud.

- *Visión Unificada de los Mecanismos de Acción sobre la Reacción de Morita -Baylis-Hillman*. En este proyecto se han investigado las propiedades termodinámicas y el mecanismo de reacción de Morita-Baylis-Hillman (MBH) a través de técnicas experimentales y computacionales.

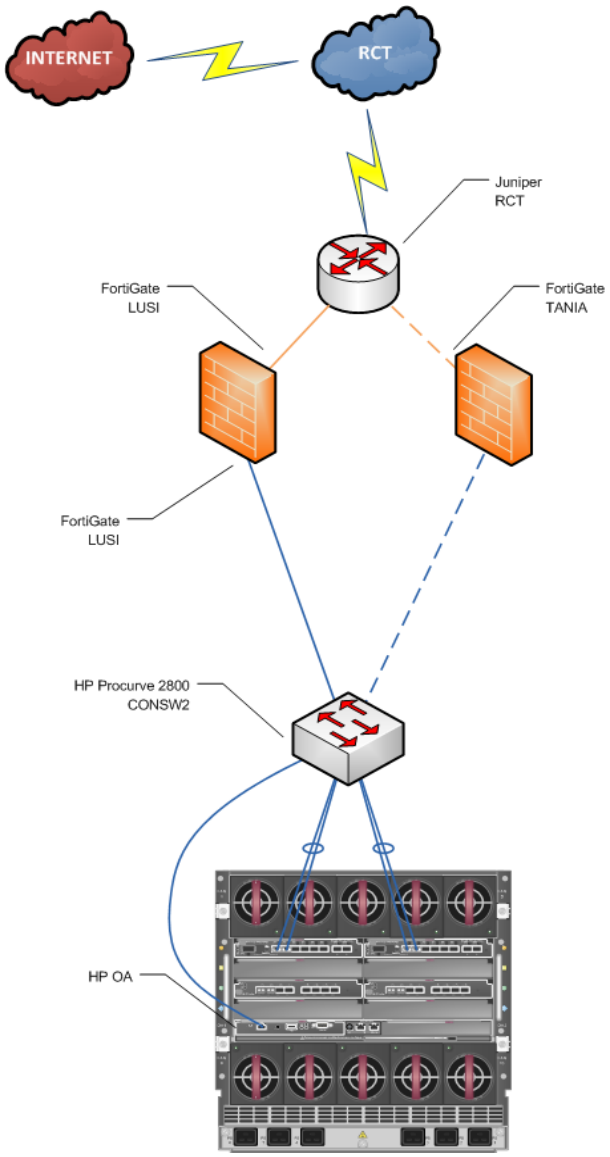

Figura 3: Topología de red corporativa para el ecosistema de negocio cloud

- La imposibilidad de acelerar esta transformación sintéticamente valiosa mediante el aumento de la temperatura de reacción se ha racionalizado por los experimentos de temperatura variable y de cálculos teóricos MP2 de la termodinámica de reacción. Un aumento de la temperatura resulta en un cambio del equilibrio de los reactivos. Estos cambios ocurren incluso en los niveles de temperatura moderada. El mecanismo complejo para la reacción MBH se ha investigado a través de un análisis profundo de las vías alternativas propuestas, utilizando el método de cálculo M06-2X. Los resultados proporcionados por este enfoque teórico están de acuerdo con todas las pruebas experimentales y cinéticas: orden de reacción, la aceleración de las especies próticas (metanol, fenol) y la autocatálisis. En definitiva, se ha conseguido resolver la controversia existente sobre el carácter de la transferencia de protones clave en la reacción MBH (vías Aggarwal contra vías McQuade). Estas investigaciones han dado lugar a interesantes resultados que han sido publicados en parte en la prestigiosa revista [1].

- *Solución de problemas electromagnéticos de grandes dimensiones.* Para la mejora del diseño industrial se usan grandes simulaciones en electromagnetismo. Hasta hace poco, los límites en la escalabilidad de los códigos existentes ha sido una importante barrera. En este proyecto se ha presentado una implementación paralela eficiente del algoritmo MultiLevel Fast Multipole Algorithm (MLFMA) combinado con el algoritmo Fast Multipole Method – Fast Fourier Transform (FMM-FFT). La buena escalabilidad del algoritmo FMM-FFT para la computación distribuida, combinada con la eficiencia computacional del algoritmo MLFMA en configuración de memoria compartida demostró ser muy efectiva cuando se usan supercomputadores de altas prestaciones como LUSITANIA. Se alcanzó un importante reto resolviendo con LUSITANIA un problema con más de 620 millones de incógnitas que hasta aquel momento fue el objeto más grande jamás analizado en electromagnetismo. De este proyecto se han obtenido muy importantes resultados de investigación [2-4] que están siendo aplicados a la industria automovilística y aeronáutica.

- *WACCM (Whole Atmosphere Community Climate Model)*: WACCM es un modelo numérico que analiza el rango de altitudes desde la superficie de la Tierra hasta la troposfera (Figura 4). Las aplicaciones del modelo para estudios científicos incluyen lo siguiente:
  - Investigar las interacciones entre los movimientos dinámicos de la estratosfera y la química para dilucidar el papel de la naturaleza y de otras variables antropogénicas en el ozono durante los últimos 20 años y durante el siglo XXI.
  - Investigar los efectos de la variabilidad solar en la atmósfera superior y media en rangos de escalas de tiempo desde periodos de la rotación solar hasta ciclos solares de 11 años.
  - Estudiar procesos de control en la estratosfera/troposfera.

- *com.info.com*: *Predictibilidad de infoestructuras de comunicaciones mediante supercomputación y su aplicación al despliegue de redes MIPv6 y FTTx*. Este proyecto está siendo desarrollado a través de un convenio de colaboración entre el grupo de investigación GÍTACA (Grupo de Ingeniería Telemática Aplicada y Comunicaciones Avanzadas) de la Universidad de Extremadura y la empresa G5. CénitS aporta su experiencia e infraestructuras para llevarlo a cabo y de entre los ambiciosos objetivos del proyecto destaca el subproyecto *SIM.net Simulaciones de sistemas de comunicaciones bajo supercomputación paralela* cuyo principal objetivo ha sido el estudio y análisis de la arquitectura de supercomputación LUSITANIA y la investigación sobre los procesos y mecanismos de paralelización y simulación. Para ello se han empleado múltiples escenarios de simulación con topologías similares a la mostrada en la Figura 5 obteniéndose muy interesantes resultados y conclusiones sobre la aplicación de la supercomputación y el paralelismo en los simuladores de red.

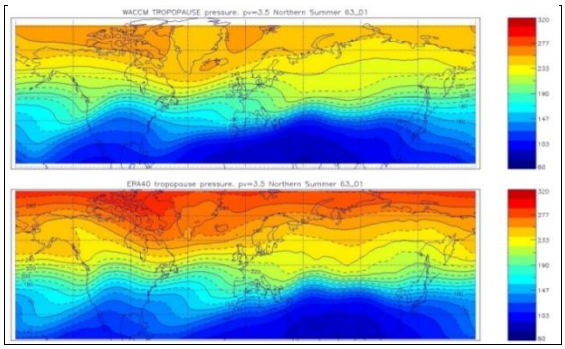

Figura 4: Estudio de la Tropopausa Extratropical

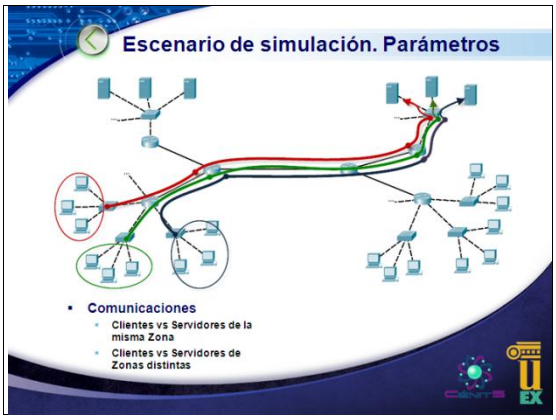

Figura 5: SIM.net simulador de red paralelo.

Figura 6: www.cenits.es

Además de los seis proyectos anteriores, el supercomputador LUSITANIA está ejecutando o ha ejecutado otros trabajos entre los que destacan los siguientes:

- *Electromagnetic scattering from canonical and complicated objects.*
- *Cálculo de la corriente de bootstrap en el stellarator TJ-II.*
- *Medida de dosis neutrónicas en pacientes sometidos a radioterapia.*
- *Dinámica fuera del equilibrio del modelo de Heisenberg tridimensional en presencia de un campo magnético.*
- *Algoritmos paralelos heterogéneos para procesamiento de imágenes multicanal.*
- *Evaluación de AzequiaMPI.*
- *Supercomputing and GRID development.*
- *Supercomputing and e-Science.*
- *Efecto del disolvente sobre la desexcitación radiante y no radiante de estados excitados en moléculas de interés biológico.*
- *Diseño y Simulación de Dispositivos y Sistemas de Comunicaciones Ópticas.*
- *NANOGATHER. Análisis y diseño de nuevos sensores en nanotecnología.*

Los proyectos ejecutados en CénitS han dado lugar a valiosos resultados de investigación, ponencias en congresos [5-7], publicaciones en revistas [1-3,8, 9] y obtención de casos de estudio y de éxito [8,10-11].

El Centro ha establecido también convenios de colaboración con otros centros tecnológicos y participa en la formación de nuevos expertos en supercomputación impartiendo cursos y conferencias, organizando jornadas y participando en másteres universitarios.

Los detalles de la actividad de CénitS pueden ser consultados en www.cenits.es (Figura 6) y más concretamente en la memoria de actividades del ejercicio 2010 [12].

Conclusiones de la Entidad

La Fundación COMPUTAEX en algo menos de dos años ha logrado alcanzar sus metas en el ámbito de la computación y las tecnologías más avanzadas en Extremadura gracias a los esfuerzos realizados desde el Centro Extremeño de Investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación .

CénitS es en realidad el instrumento por el cual el proyecto de la supercomputación está consolidándose en Extremadura logrando una destacable visibilidad en cuanto a los resultados obtenidos, no sólo en España, sino también en el ámbito internacional [13].

El supercomputador LUSITANIA y los técnicos del Centro están colaborando con un buen número de investigadores, científicos, tecnólogos e innovadores regionales, nacionales e internacionales que están usando los recursos del Centro para alcanzar sus objetivos.

CénitS, en la búsqueda de la excelencia y de la sustentabilidad, ha logrado, además, sus propios proyectos y resultados de investigación que están permitiendo realizar importantes aportaciones al campo de la supercomputación, la innovación tecnológica y la investigación.

Para entender este proyecto es necesario considerar las características propias de Extremadura que teniendo un punto de partida bastante desfavorable, ha sido capaz en las dos últimas décadas de realizar importantes esfuerzos en todos los ámbitos de la sociedad de la información y del conocimiento. Extremadura ha sido beneficiaria de los Fondos de Cohesión de la Unión Europea, siendo de las regiones que más rápidamente ha convergido con una apuesta decidida por el sector tecnológico.

Referencias

[1] "*A Unified Mechanistic View on the Morita−Baylis−Hillman Reaction: Computational and Experimental Investigations*". David Cantillo and C. Oliver Kappe. The Journal of Organic Chemistry 2010 75 (24), 8615-8626

[2] M.G.Araújo, J.M.Taboada, F.Obelleiro y J.M.Bértolo, L.Landesa y J.Rivero, J.L.Rodríguez: "*Supercomputer aware approach for the solution of challenging electromagnetic problems*". ISSN: 1070-4698, E-ISSN: 1559-8985. Progress In Electromagnetics Research, PIER 101, 241–256, 2010.

[3] J. M. Taboada, M. G. Araújo and J. M. Bértolo, L. Landesa, F. Obelleiro and J.L. Rodriguez: "*MLFMA-FFT Parallel Algorithm for the solution of large-scale problems in electromagnetics*". ISSN: 1070-4698, E-ISSN: 1559-8985. Progress In Electromagnetics Research, Vol. 105, 15–30, 2010.

[4] *"Récord del Mundo, 620 millones de incógnitas"*. World record on electromagnetics supercomputing. http://recordmundo.blogspot.com/2009/12/record-del-mundo-en-el-supercomputador.html

[5] J. M. Taboada, L. Landesa, J. Rivero, G. Gajardo-Silva, M. Amaya, F. Obelleiro, J. L. Rodríguez, M. G. Araújo, J. M. Bértolo, J. C. Mouriño, A. Gómez, C. Gómez, J. L. González-Sánchez: "*Supercomputing aware electromagnetics*". VII Encuentro Ibérico de Electromagnetismo Computacional. 20-23. Monfragüe, Cáceres. Mayo de 2010 .

[6] César Gómez-Martín, José-Luis González-Sánchez, Javier Corral-García, Ángel Bejarano-Borrega, Javier Lázaro-Jareño: *"Shared Memory Supercomputing as Technique for Computational Electromagnetics"*. VII Encuentro Ibérico de Electromagnetismo Computacional. 29-33. Monfragüe, Cáceres. Mayo de 2010.

[7] César Gómez-Martín, José-Luis González-Sánchez, Javier Corral-García, Ángel Bejarano-Borrega, Javier Lázaro-Jareño: "*Performance Study of Hyper-Threading Technology on the LUSITANIA Supercomputer*". Ibergrid 2010. ISBN 978-84-9745-549-7. 12 páginas. Braga, Portugal. Mayo de 2010.

[8] *"Protección y seguridad perimetral para el supercomputador LUSITANIA"*. Revista SIC: Seguridad en Informática y Comunicaciones. ISSN 1136-0623. SIC, Nº 91, 61, 2010.

[9] *Mechanistic Insights on Azide−Nitrile Cycloadditions: On the Dialkyltin Oxide−Trimethylsilyl Azide Route and a New Vilsmeier−Haack-Type Organocatalyst*. David Cantillo, Bernhard Gutmann, and C. Oliver Kappe. Journal of the American Chemical Society, Article ASAP. March, 2011.

[10] *"COMPUTAEX uses supercomputing to calculate a brighter economic future for Extremadura Region of Spain"*. Itanium Solutions Alliance. http://blog.itaniumsolutions.org/2010/08/computaex-calculates-a-brighter-economic-future-for-spanish-region/

[11] "*Extremadura despunta en supercomputación*". Computerworld, IDG Communications, S.A.U. http://www.idg.es/computerworld/Extremadura-despunta-en-supercomputacion/seccion-actualidad/noticia-107330

[12] *"Fundación COMPUTAEX, Memoria Anual 2010"*. http://www.cenits.es/fundacion/memoria-anual/memoria-computaex-2010

[13] *Humanitarian Impact Winner and Award Finalists Announced*. Itanium Solutions Alliance. http://blog.itaniumsolutions.org/2010/06/humanitarian-impact-winner-and-award-finalists-announced/