

CECALCULA
Centro Nacional de Cálculo Científico,
Universidad de Los Andes
e-Laboratorio para e-Investigación

L. A. Núñez*

*Centro Nacional de Cálculo Científico, Universidad de Los Andes, CECALCULA,
Corporación Parque Tecnológico de Mérida, Mérida 5101, Venezuela* **

Versión β 1.0 Mayo 2007

Índice

1. Justificación	2
2. Objetivos	2
2.1. Objetivos Generales	2
2.2. Objetivos Específicos	3
3. Actividades y Líneas de Trabajo	4
3.1. Transferencia Tecnológica	4
3.1.1. Tecnología Grid	4
3.1.2. Desarrollo de interfaces de aplicaciones científicas	4
3.2. Adiestramiento	5
4. Productos y Servicios	5
5. Costos	6

* e-mail: nunez@ula.ve Web: <http://webdelprofesor.ula.ve/ciencias/nunez/>

** <http://www.cecalc.ula.ve>

1. Justificación

A partir de la década de los 70 se produjo un cambio en el modo de producción del sistema capitalista. Estamos en el tránsito de una economía industrial a una informacional. Las Tecnologías de Información y Comunicación (TIC) se hacen cada vez más ubicuas, omnipresentes, de uso intuitivo y, en el futuro cercano, apuntan a desempeñar el papel que hoy juegan los servicios de agua y electricidad.

Los términos “ciberinfraestructura”, “e-ciencia” y más recientemente uno más amplio, “e-investigación”, han sido acuñados para describir nuevas formas de producción y diseminación del conocimiento. Uno de los retos que habremos de enfrentar en esta nueva manera de hacer ciencia es: manejar, administrar, analizar y preservar el “diluvio de datos”. Es tal la cantidad de información a la cual tienen acceso nuestros estudiantes, que debemos plantearnos una reflexión en torno a los contenidos y a las metodologías que utilizamos cotidianamente en la formación de estos futuros profesionales.

El Centro Nacional de Cálculo Científico, Universidad de Los Andes (CECALCULA) surge en 1997 como un esfuerzo mancomunado entre la Universidad de Los Andes, el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas (hoy Fondo Nacional de Ciencia y Tecnología *FONACIT*), y la Corporación Parque Tecnológico de Mérida (*CPTM*) para la transferencia tecnológica en el uso intensivo del computador como herramienta de experimentación en las Ciencias y las Ingenierías computacionales. En esta década de fructífera labor este CENTRO ha provisto servicios y entrenamiento de personal en técnicas y aplicaciones de tecnologías de información, computación de alto rendimiento y ofrece ambientes y facilidades (equipamiento, aplicaciones, adiestramiento y consultoría), los cuales por su costo y complejidad de operación, no tendría sentido que fueran utilizado por una sola institución. Ha servido de observatorio tecnológico y participa en proyectos de cooperación internacional para la transferencia de experiencias en *e-ciencia*¹

Esta propuesta tiene por objetivo, remozar el equipamiento del CENTRO para seguir cumpliendo sus objetivos.

2. Objetivos

2.1. Objetivos Generales

CECALCULA tiene como misión transferir a la comunidad académica, técnicas, destrezas y metodologías para el desarrollo de la e-investigación. Esto es para el manejo e interpretación de grandes volúmenes de datos producidos por sistemas de registro automático, de forma que nuestros centros, grupos de investigación y desarrollo (I&D) e investigadores individuales, puedan abordar líneas y proyectos que apunten a la solución de problemas nacionales.

¹proyecto de cooperación con la Unión Europea (UE), EELA (E-infrastructure shared between Europe and Latin America, <http://www.eu-eela.org>), el cual tiene por objeto para compartir experiencias en el desarrollo de la e-investigación entre Europa y América Latina. Participan, instituciones de 7 países de América Latina y 3 de la UE

2.2. Objetivos Específicos

El CENTRO tiene por objetivos:

■ **Garantizar un Servicio de Cálculo Científico de alcance Nacional.**

Proveer servicios descentralizados de Cálculo Científico a fin de atender las necesidades de los centros, grupos de investigación y desarrollo (I&D) e investigadores individuales, con demanda de facilidades de cómputo de alto rendimiento. Estos servicios son:

- Cómputo secuencial, paralelo y Grid de alto rendimiento,
- *Software* especializado para la solución de problemas en ciencias e ingenierías. Esto comprende, Sistemas de procesamiento, Herramientas de desarrollo para interfaces de aplicaciones
- Albergue y Custodia de Datos,
- Tecnologías de Información para la cooperación electrónica.

■ **Fomentar I&D Orientada, Transdisciplinaria.**

Mediante servicios de cómputo, entrenamiento, consultoría, albergue y custodia de datos, CECALCULA apoya el desarrollo de proyectos transdisciplinarios. Para tales efectos el CENTRO dispone de un personal de soporte técnico altamente calificado proveniente de distintas disciplinas tales como Matemáticas, Físicas, Químicas, Ingeniería y Computación y nuclea de manera natural a expertos investigadores provenientes de la Universidad de Los Andes y otras instituciones de comprobada y productiva tradición en I&D.

■ **Transferir/Desarrollar Pericias en la Gestión Técnica de Servicios.**

A través de talleres de adiestramiento y consultorías el CENTRO transfiere a instituciones nacionales, la experiencia organizativa y de gestión para proveer servicios de computación de alto rendimiento, asimilada de otros centros de Europa y los Estados Unidos y-o generada de forma endógena.

■ **Formar Recursos Humanos en Ciencias Computacionales**

La programación anual de talleres, pasantías, cursos y seminarios, CECALCULA transfiere conocimiento tecnológico y forma aceleradamente de RR.HH. en ciencias e ingeniería computacionales. Entre los tópicos de estas actividades están: configuración y administración de sistemas distribuidos y paralelos, desarrollo y optimización de códigos y aplicaciones científicas, paralelismo, visualización de datos, manejo de herramientas específicas en Bioinformática, Física, Química Mecánica de Sólidos Computacional ; uso de herramientas en tecnologías de información para la investigación colaborativa y publicación electrónica. A mediano plazo, apoyaremos estudios formales de un postgrado nacional (especialización, maestría y doctorado) en Ciencias e Ingeniería Computacionales con escala nacional. Organización Operativa y Gerencial.

3. Actividades y Líneas de Trabajo

3.1. Transferencia Tecnológica

3.1.1. Tecnología Grid

Para desarrollar proyectos de E-Investigación nos hemos embarcado en realizar una transferencia tecnológica de Centros en Norteamérica y Europa. En particular hemos participado en proyectos de colaboración con el Texas Advanced Computing Center (TACC) en EE.UU.², con el Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas de España³ y Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Laboratori Nazionali del Sud, Catania Italia⁴. Con el TACC colaboramos en la transferencia en el desarrollo de portales Grid mediante Portal Toolkit⁵. Con esos dos centros europeos colaboramos mediante el proyecto EELA (E-infrastructure shared between Europe and Latin America)⁶. Este proyecto ha permitido compartir experiencias y aprender de la organización y operación de la infraestructura Grid y la adaptación de aplicaciones en el área de biomedicina. Finalmente, personal de CECALCULA también ha colaborado en la adaptación de aplicaciones de Física de Altas Energías y Grid con el Laboratoire de Physique Nucléaire et de Hautes Energies⁷, de París Francia y el Centre de Calcul de l'IN2P3/CNRS en Lyon, Francia⁸.

3.1.2. Desarrollo de interfaces de aplicaciones científicas

La prestación de servicios a grupos nacionales ha motivado el desarrollo de interfaces, herramientas de cálculo y colaboración para facilitar la apropiación tecnológico con estos grupos.

- **Apoyo a Infraestructura de Biomedicina** Durante estos, en cooperación con el Centro de Ecología del Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas se ha hecho un énfasis especial en la transferencias de experiencias y destrezas informáticas a grupos de investigación de Biosalud. El apoyo a la Red Nacional de Análisis Genético Poblacional, Sistemática Molecular y Biología Integrativa (G-97000634), los Talleres de Herramientas para Análisis de Secuencias (THAS)⁹ así lo demuestran. CECALCULA ha sido pionero en el área de Bioinformática a escala nacional y regional. Se han creado los siguientes portales que reúnen una intensa actividad en el área

- Servidor de Bioinformática ¹⁰
- Biotutor, uno de los primeros portales en bioinformática en español ¹¹

²<http://www.tacc.utexas.edu/>

³<http://www.ciemat.es/>

⁴<http://www.lns.infn.it/>

⁵<http://www.tacc.utexas.edu/projects/gridport.php>

⁶http://www.eu-eela.org/eela_executive_summary.php

⁷<http://www-lpnhep.in2p3.fr/>

⁸<http://cc.in2p3.fr>

⁹<http://www.cecalc.ula.ve/bioinformatica/thas/index.html>

¹⁰ <http://www.cecalc.ula.ve/BIOINFO/>

¹¹ <http://www.cecalc.ula.ve/bioinformatica/BIOTUTOR/bioinformatica.html>

- El Portal Iberoamericano de Bioinformática ¹²
- Portal de Epidemiología Molecular ¹³
- **Apoyo a Infraestructura de Química - Física** A partir del apoyo al Grupo Nacional de Catálisis Computacional se adelantó la idea de construir un portal de química cuántica que permitiera el acceso a herramientas computacionales sofisticadas de la forma más simple para los usuarios. Así se construyó el portal de Química Computacional ¹⁴
- **Apoyo a Infraestructura de Ingeniería y Ciencias de Materiales Computacional** A partir de la creación del grupo nacional de análisis de estructuras se apoyó el desarrollo del Portal de Pórticos. Este es un programa basado en la Web que permite la simulación numérica del comportamiento sísmico de replicas virtuales de edificios apórticos. Como resultado de la simulación, el programa determina la magnitud y localización de los daños que podrían ocurrir en la edificación y en casos extremos, el colapso de la edificación. ¹⁵
- **Apoyo Preservación y disseminación de Data Medioambiental.** Con el desarrollo de uno de los proyectos vinculado con los productores de plátano del sur del lago de Maracaibo, se creó un repositorio de datos de medioambiente. Este repositorio mantiene los datos recolectados por La Red de Estaciones Bioclimáticas del Estado Mérida (REDBC) ¹⁶. La intención de este tipo de repositorios es garantizar el acceso a data científica a los distintos investigadores.

3.2. Adiestramiento

Durante estos 10 años CECALCULA ha impulsado el adiestramiento casi dos millares de profesionales en distintas áreas a través de más de 50 talleres y eventos. Son particularmente importante mencionar Las seis Escuelas Latinoamericanas de Computación de Alto Rendimiento y Grid, así como también los casi 15 talleres de Herramientas Computacionales en Bioinformática. Más información se puede consultar en <http://www.cecalc.ula.ve/>

4. Productos y Servicios

Los productos que se proponen son

- **Observatorio en e-Investigación** Nos proponemos seguir orientando a la comunidad académica en la utilización de las TIC para desarrollar proyectos de investigación. En particular servir de vínculo con los centros en Europa y EE.UU.
- **Tranferencia Tecnológica.** A través de proyectos de cooperación e intercambio, conjuntamente con talleres y escuelas de verano, nos proponemos transferir y adaptar la experiencia,

¹²<http://portal-bio.ula.ve/>

¹³<http://epidemiologiamolecular.ula.ve/>

¹⁴<http://quantum.cecalc.ula.ve/espanol/index.html>

¹⁵<http://portaldeporticos.ula.ve/>

¹⁶<http://www.cecalc.ula.ve/redbc/>

que en proyectos de Grid, vienen desarrollándose en Europa y los EE.UU. con el objeto de ayudar a resolver problemas nacionales.

- **Servicios de Grid.** El equipamiento que solicitamos, estará orientado a permitir que la comunidad académica nacional, en particular los grupos de investigación e instituciones académicas emergentes, puedan disponer de capacidades de almacenamiento y cómputo de forma remota. Estas capacidades les permitirán desarrollar proyectos de investigación orientados a resolver problemas de su entorno.

5. Costos

- **Equipamiento de Cálculo**

Para reforzar la capacidad de Cálculo de CECALCULA, se plantea un arreglo 64 nodos duales (AMD x86-64 o INTEL EM64T) de 4 MB RAM/Nodo y 100 GB de Disco local. Interconexión, redundante Gigabit Ethernet entre los nodos.

- **Equipamiento de Almacenamiento**

Igualmente para reforzar el almacenamiento local se requieren de un arreglo de discos 15 TB

- **Equipamiento de comunicaciones, respaldo y UPS.**

2 UPS 25 KVA, Un nuevo enrutador de borde, 4 switches Gigabit Ethernet de 48 puertos; un conjunto de 12 unidades lectoras de cintas

- **Equipamiento de Estaciones de Trabajo y de Visualización**

Ocho estaciones de trabajo y 2 especializadas para Visualización

- **Licencias de Software Científico.** Compiladores de Fortran, C++, manipuladores simbólicos, ambientes de desarrollo y bibliotecas matemáticas.

Concepto	Costo (Miles US\$)
<i>Cálculo</i>	650 - 700
<i>Almacenamiento</i>	250 - 350
<i>Comunicaciones, Respaldo, UPS</i>	120 - 150
<i>Estaciones de Trabajo</i>	32 - 40
<i>Licencias de Software</i>	100 - 120

Cuadro 1: Rango de costos estimados. El rango varía dependiendo de la configuración específica