

Tema 1: Introducción a la eCiencia

Conceptos de la Computación en Grid y Cloud

Objetivos



- Justificar la Necesidad de Sistemas de Cálculo Avanzado.
- Describir Algunos de los Problemas de Mayor Envergadura en el Ámbito de la Investigación.
- Introducir el Concepto de la "e-Ciencia".
- Presentar los Computadores Más Potentes en la Actualidad.

Contenido



- E-Ciencia y conceptos asociados
- Panorama Europeo
 - Infraestructuras Computacionales: EGI, PRACE, GEANT, HelixNebula
 - Marco Horizonte 2020
- Posición Española
 - E-Infraestructuras: IBERGRID, RES, RedIRIS, Centros Autonómicos.
 - Usuarios: La Red de e-Ciencia
- Conclusiones

El cuarto paradigma

El Concepto de la e-Ciencia

- Red Española de e - Ciencia

- En el milenio pasado, la ciencia era empírica:
 - Descripción de fenómenos naturales.
- Hace unos pocos siglos se inicia la aproximación teórica
 - Uso de modelos, fórmulas y generalizaciones.
- En las últimas décadas aparece la rama computacional
 - Simulación de fenómenos complejos
- En la actualidad se centra en la exploración de los datos: (e-Ciencia)
 - Unificación de teoría, experimentación y simulación
 - Captura masiva de datos mediante instrumentos o generada mediante simulación y Procesada por computador.
 - Conocimiento e información almacenada digitalmente.
 - Científicos analizando bases de datos y ficheros en infraestructuras de datos.

De los Datos al Conocimiento



- Muchas áreas científicas producen grandes cantidades de datos que son comunes y relevantes a otras disciplinas.
- La e-Ciencia se puede entender como un paradigma para cohesionar toda esa información.
- Importante tendencia en el uso de e-Infraestructuras para los Datos.
- Objetivo puesto en acelerar la producción científica y mejorar su calidad.

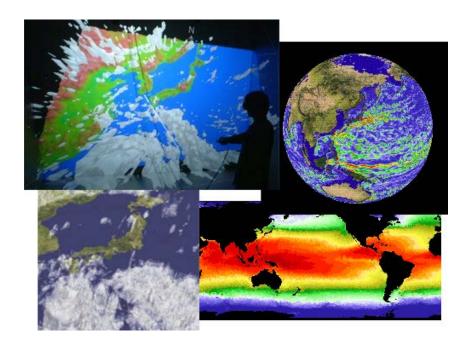


Introducción



Grandes Retos: Simulación

- La Simulación es una Herramienta Científica Capaz de Abrir Nuevos Horizontes Científicos y Tecnológicos No Alcanzados Anteriormente Mediante el Uso del Análisis Matemático.
- La Simulación es la Única Herramienta que Permite Predecir la Evolución el Resultado Futuro de Procesos Basados en Leyes y Principios Científicos.



Virtual Physiological Human



- La simulación del comportamiento fisiológico de órganos, tejidos y células (VPH: Virtual Physiological Human).
- Visión a largo plazo: Simular el completo comportamiento fisiológico de un cuerpo humano.
- Ejemplo: Alya-Red es un simulador computacional del corazón que modela el comportamiento eléctrico, visco-elástico, de dinámica de fluidos y

físico-químico de un corazón completo.

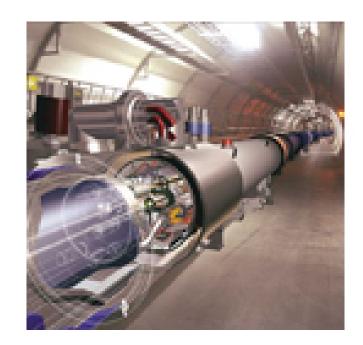
- Ha recibido el primer premio de videos científicos divulgativos de la National Science Foundation en 2012.
 - www.youtube.com/watch?v=tKD2hfF27rM

Introducción



Grandes Retos: Análisis

- El Estudio de Disciplinas como la Física de Altas Energías, la Astrofísica o la Biotecnología Implica la Captación, Almacenamiento y Proceso de Grandes Cantidades de Datos.
- Datos como los Procedentes de Radiotelescópios, Aceleradores de Partículas o el Genoma Humano.



Grandes Retos Científicos



Física de Altas Energías

- Desde hace un Siglo se Está Buscando la Partícula Elemental de la que Rayos X, Rayos Catódicos, Rayos Alfa y Beta, etc, se Compone.
- Esta Partícula fue Formulada Teóricamente y se Denomina el Bosson de Higgs.
- Buscada por los Físicos desde hace Años de Forma Experimental: Large Hadron Collider, Capaz de Detectar Energías Miles de Veces





El concepto de e-Ciencia

Dos visiones

E-Science as "enhanced" Science

El Concepto de la e-Ciencia





- "e-Science is about global collaboration in key areas of science, and the next generation of infrastructure that will enable it."
- "e-Science will change the dynamic of the way science is undertaken."

John Taylor Director General of Research Councils Office of Science and Technology

e-Ciencia como una nueva visión de la Ciencia

El Concepto de la e-Ciencia



networking grids instrumentation computing data curation...

revolution in science & engineering, research & education

value added of distributed collaborative research (virtual communities)

Application pull

- Large challenges with large social impact
- The famous "Data deluge"
- Interdisciplinarity.
- Virtual Research
 Communities.

Source: Mario Campolargo, Former Head of Unit on e-Infrastructures, European Commission



Las e-Infraestructuras

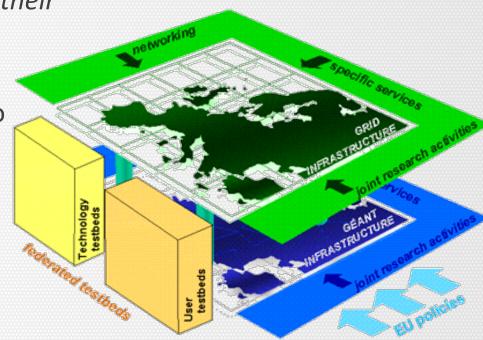
Conceptos Asociados



 Según el e-IRG: "The term e-Infrastructure refers to this new research environment in which all researchers - whether working in the context of their home institutions or in national or multinational scientific initiatives - have shared access to unique or distributed scientific facilities (including data, instruments, computing and communications), regardless of their

type and location in the world."

 En este modelo encontramos sistemas para el descubrimiento de recursos, la gestión de datos distribuida, la monitorización de recursos y aplicaciones, la gestión eficiente de los recursos y la seguridad.



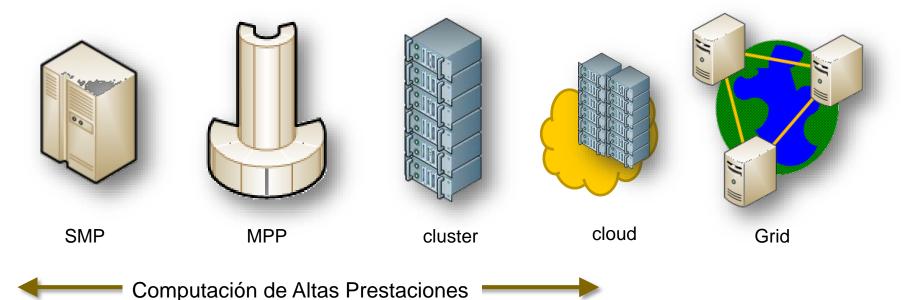
Plataformas Computacionales



Centralizada y Acoplada

- Redes de Interconexión
- Administración
- Homogeneidad

Descentralizada y Desacoplada



Computación de Alta Productividad

Cambio de Perspectiva







- Los grupos de investigación gestionaban infraestructuras con unos pocos servidores
 - Nos pasabamos días eligiendo el nombre.
 - Un fallo paralizaba la actividad.
 - Se reparaba cada pieza individual.
- Teníamos "Gatitos"





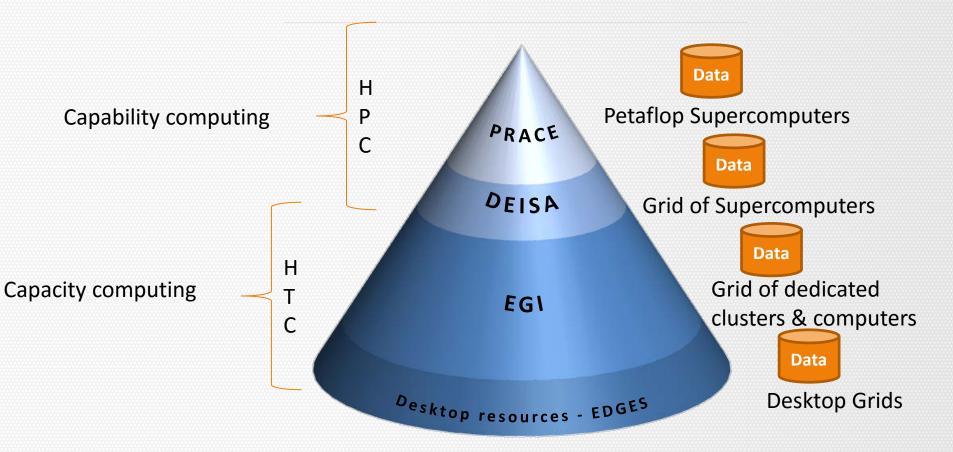
- Los investigadores usan miles de recursos
 - Nombres secuenciales o dinámicos.
 - Normalmente nunca alcanzan el 100% de operación.
 - Se reemplazan equipos completos.
- Tenemos granjas de Pollos

Las e-Infraestructuras

Conceptos Asociados



• Diferenciación de infraestructuras en e-ciencia

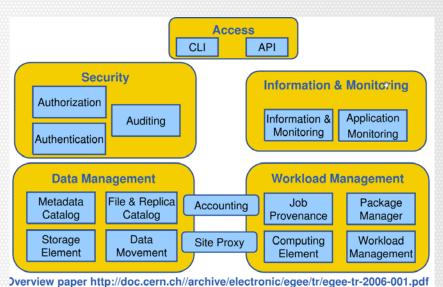


Middleware

Conceptos Asociados



- Conjunto de aplicaciones y servicios que permiten utilizar de forma coordinada y eficiente las e-Infraestructuras
 - Se sitúa entre el sistema operativo y las aplicaciones.
 - Federa identidades
 - Gestiona el acceso remoto
 - Equilibra la carga
 - Indexa los datos
 - Federa los recursos
 - Monitoriza el sistema
 - Virtualiza los recursos
 - Autoriza el acceso
 - Facilita la programación de aplicaciones



Scientific Gateways

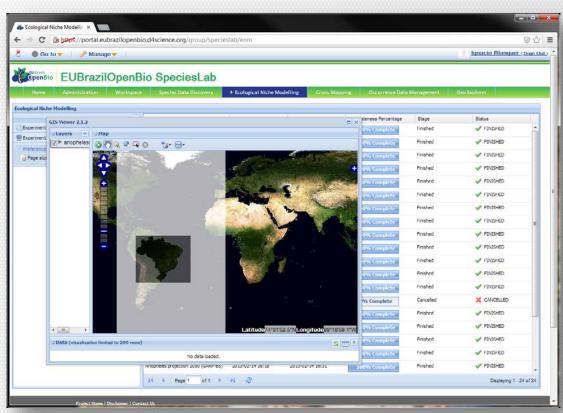
Conceptos Asociados



 Las e-Infraestructuras a veces ofrecen interfaces complejos o poco amigables

 La adaptación de las aplicaciones requiere un conocimiento de los recursos y del middleware.

- Los Scientific
 Gateways facilitan
 el acceso y uso de
 las e-infraestructuras
 automatizando
 procesos y ofreciendo
 interfaces amigables
 - Como consecuencia se puede perder flexibilidad.

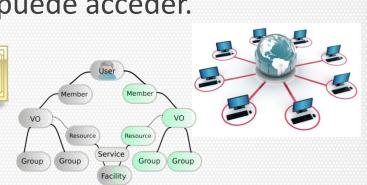


Organizaciones Virtuales - Virtual Organizations

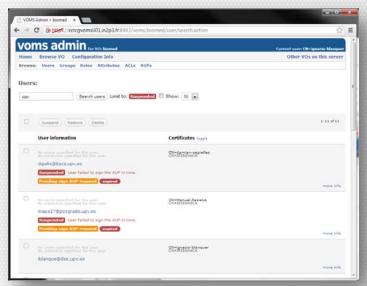
Conceptos Asociados

Red Española de e - Ciencia

- Conjunto de usuarios de diferentes organizaciones reales que colaboran
 - Técnicamente son listados de identificadores de usuarios y los roles asociados.
- La pertenencia a una VO define grosso modo los recursos a los que un usuario puede acceder.



- Internacionales
 - Atlas, biomed, embrace, compchem, auger, planck,...
- Nacionales
 - ict.vo.ibergrid.eu, life.vo.ibergrid.eu, earth.vo.ibergrid.eu,...





Breve Análisis de la e-ciencia en Europa

La e-Ciencia como una apuesta internacional

Situación en Europa



- El Consejo de Liubliana de 2008 definió una nueva visión del Espacio Europeo de Investigación (ERA -http://ec.europa.eu/research/era) basada en la libre circulación del conocimiento (la «quinta libertad»).
- El informe Aho de mayo de 2008 subrayaba la importancia de desarrollar unas infraestructuras que permitan divulgar la ciencia por medios electrónicos (la e-ciencia).
- Infraestructuras y retos científicos a gran escala que transcienden la capacidad individual de los países
- En 2008 se crea el e-IRG (e-Infrastructure Reflection Group http://www.e-irg.eu), para crear un marco político, tecnológico y
 administrativo para el uso compartido y eficiente de
 infraestructuras electrónicas distribuidas en Europa
 - A finales de 2012 publica la 4º versión de su roadmap.

Marco Estratégico

Situación en Europa



- La "Communication from the European Commission on ICT Infrastructures for e-Science (COM (2009)" de la Unión Europea define un plan para alcanzar el liderazgo en e-Ciencia a través del desarrollo de un conjunto de e-Infraestructuras y su explotación para promover la innovación.
 - La inversión en infraestructuras electrónicas representa una oportunidad para fomentar el crecimiento y el empleo, así como para impulsar un nuevo renacimiento científico.
 - El crecimiento en el rendimiento de los equipos informáticos permite responder a las nuevas necesidades de modelización y simulación informáticas de ciertos sectores, tales como la investigación sobre el cambio climático o la asistencia sanitaria selectiva.

Sus conclusiones fueron:

- GÉANT debe seguir aumentando su rendimiento,
- Se anima a las empresas a que utilicen los Grids de e-ciencia europeos.
- Impulso de las iniciativas Grid nacionales creadas por los estados miembros e interacción a nivel internacional.
- Mejora del acceso a la información científica.
- Nueva generación de servicios de supercomputación en la escala exa en 2020.
- Impulsar la explotación de las infraestructuras por los Estados Miembros con el objetivo de alojar a las comunidades científicas virtuales mundiales.

Computación en Internet: Tecnologías Grid



- Unión de los Computadores de Diferentes Centros / Usuarios Conectados a Través de Internet Como si se Tratara de Un Ordenador Único.
- Factor de Escala: Miles de Computadores Distantes Hasta Miles de Kilómetros.
- Se Establece el Concepto de Organización Virtual, como la Comunidad de Usuarios que Dispone de Estos Recursos en su Conjunto y los Utiliza Para la Resolución de un Problema Común.
- Recursos Informáticos Bajo Demanda.



Grid Computing – Iniciativa Europea de Grid (EGI)

Situación en Europa



- Participan 332 Organizaciones de 58 Países.
- Alcanza los 320.000 Cores y 152 PBytes.
 - VOs para la Resolución de Grandes Problemas en las Áreas de Física de Altas Energías, Biocomputación, Geofísica, Astrofísica.
- 1.700.000 trabajos diarios y 20.000 usuarios registrados.
- España participa a través de la Iniciativa nacional de Grid.



PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe)

Situación en Europa

- PRACE es una iniciativa dirigida a fortalecer el uso de infraestructuras de supercomputación para alcanzar un impacto importante en la investigación básica y aplicada.
- PRACE se estructura en varios niveles (tiers) siendo el tier 0 el que aporta los recursos de mayor envergadura.
- En PRACE participan 25 países miembros y el tier 0 está formado por 4 países y seis equipos.
 - BSC (España), CINECA (Italia), GCS (Alemania)
 y GENCI (Francia).
- Conjuntamente aportan una potencia sostenida de más de 14,7 Pflops y casi 1M de cores (990.736) mediante 6 computadores en las posiciones 9 (Juqueen), 20 (SuperMUC), 23 (Hornet), 32 (Fermi), 44 (Curie) y 77 (Mare Nostrum) de la lista TOP500.

La Supercomputación



Existe la Lista TOP500
 Donde Se Encuentran
 los 500 Computadores
 Más Potentes del
 Mundo.



- www.top500.org
- Se Actualiza 2 Veces al Año.
- Los Computadores se Clasifican Atendiendo a Su Potencia Sostenida.

\sim 1 (
	1141	
		Grid v Computación

Ran k	Rank 2013	Site	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	1	National University of Defense Technology China	<u>Tianhe-2 (MilkyWay-2)</u> - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P NUDT	3120000	33862.7	54902.4	17808
2	2	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	Titan - Cray XK7 , Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x Cray Inc.	560640	17590.0	27112.5	8209
3	3	DOE/NNSA/LLNL United States	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom IBM	1572864	17173.2	20132.7	7890
4	4	RIKEN AICS) Japan	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect Fujitsu	705024	10510.0	11280.4	12660
5	5	DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom IBM	786432	8586.6	10066.3	3945
6	New	Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland	Piz Daint - Cray XC30, Xeon E5-2670 8C 2.600GHz, Aries interconnect , NVIDIA K20x Cray Inc.	115984	6271.0	7788.9	2325
7	6	Texas Advanced Computing Center/Univ. of Texas United States	Stampede - PowerEdge C8220, Xeon E5-2680 8C 2.700GHz, Infiniband FDR, Intel Xeon Phi SE10P Dell	462462	5168.1	8520.1	4510
8	7	Forschungszentrum Juelich (FZJ) Germany	JUQUEEN - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.600GHz, Custom Interconnect IBM	458752	5008.9	5872.0	2301
9		DOE/NNSA/LLNL United States	Vulcan - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.600GHz, Custom Interconnect IBM	393216	4293.3	5033.2	1972
10		Government United States	Cray XC30, Intel Xeon E5-2697v2 12C 2.7GHz, Aries interconnect	225984	3143.5	4881.3	

Cray Inc.

Top 10 (2014)

#	2013	Site	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	1	National Super Computer Center in Guangzhou China	Tianhe-2 (MilkyWay-2) - TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P NUDT	3,120,000	33,862.7	54,902.4	17,808
2	2	DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	<u>Titan - Cray XK7 , Opteron 6274 16C 2.200GHz, Cray Gemini interconnect, NVIDIA K20x Cray Inc.</u>	560,640	17,590.0	27,112.5	8,209
3	3	DOE/NNSA/LLNL United States	Sequoia - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60 GHz, Custom IBM	1,572,864	17,173.2	20,132.7	7,890
4	4	RIKEN Advanced Institute for Computational Science (AICS) Japan	K computer, SPARC64 VIIIfx 2.0GHz, Tofu interconnect Fujitsu	705,024	10,510.0	11,280.4	12,660
5	5	DOE/SC/Argonne National Laboratory United States	Mira - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.60GHz, Custom IBM	786,432	8,586.6	10,066.3	3,945
6	6	Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) Switzerland	Piz Daint - Cray XC30, Xeon E5-2670 8C 2.600GHz, Aries interconnect , NVIDIA K20x Cray Inc.	115,984	6,271.0	7,788.9	2,325
7	Nuevo	King Abdullah University of Science and Technology Saudi Arabia	Shaheen II - Cray XC40, Xeon E5-2698v3 16C 2.3GHz, Aries interconnect Cray Inc.	196,608	5,537.0	7,235.2	2,834
8	7	Texas Advanced Computing Center/Univ. of Texas United States	Stampede - PowerEdge C8220, Xeon E5-2680 8C 2.700GHz, Infiniband FDR, Intel Xeon Phi SE10P Dell	462,462	5,168.1	8,520.1	4,510
9	8	Forschungszentrum Juelich (FZJ) Germany	JUQUEEN - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.600GHz, Custom Interconnect IBM	458,752	5,008.9	5,872.0	2,301
10	10	DOE/NNSA/LLNL United States	Vulcan - BlueGene/Q, Power BQC 16C 1.600GHz, Custom Interconnect IBM	393,216	4,293.3	5,033.2	1,972

#1 Thiane-2, National University of Defense Technology



- Tianhe-2 (MilkyWay-2) es una máquina que integra 16000 nodos basados en Intel Xeon E5-2692 de 12C y 3 aceleradores Intel Xeon Phi 31S1P por nodo unidos mediante una red propietaria llamada TH Express-2.
- Alcanza un total de 3.120.000 cores y 1PB de RAM, capaces de alcanzar más de 30 Pflops sostenidos (casi 55TFlops de pico).

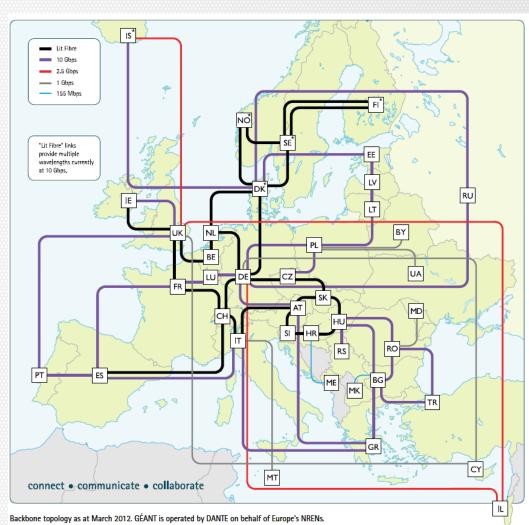


Redes de Comunicaciones - GEANT

Situación en Europa



- GÉANT es la red de investigación y educación paneuropea que conecta las redes nacionales europeas de investigación y educación (NRENs).
- GEANT une más de 40 millones de investigadores y estudiantes en Europa y permite el acceso de banda ancha a diferentes recursos singulares para física de altas energías, radio astronomía, biomedicina, cambio climático, observación de la tierra, arte, etc.
- GÉANT está parcialmente fundada por la Comisión Europea.



Un ecosistema de soluciones

Situación en Europa



Grids

Entorno Colaborativo

Recursos Distribuidos (político/sociológico)

Commodity hardware

Gestión de Datos

Interfaces complejos

Supercomputers

Escasos

Redes de interconexión de baja latencia

Admisión bajo revisión científica

Aplicaciones altamente acopladas

Interfaces de acceso tradicionales

No existe una única solución para todos los problemas

Clouds

Gestión basada en la economía de escala Commodity hardware Virtualización para la previsión de servicios Detalles de la infraestructura física ocultos Interfaces simplificados

Computación Voluntaria

Acceso simplificado a millones de CPUs
Problemas de latencia y transmisión de datos
Entornos difícilmente controlables
Implica una participación activa
Interfaces complejos

La interoperabilidad entre las infraestructuras podrían permitir el desarrollo de aplicaciones heterogéneas que aprovechen lo mejor de cada una

Fuente: Ian Bird, CERN



La situación española de la eciencia

Visión, Misión y Objetivos

ES-NGI: Infraestructura Nacional de Grid



- ES-NGI es la Infraestructura Nacional de Grid en España (<u>www.es-ngi.es</u>).
- La componen actualmente 28 centros, aportando 17.690 cores y con más de 100 usuarios registrados.
- La NGI española opera desde 2010
 - Misión
 - Dar soporte a los investigadores a través a infraestructuras de computación distribuídas, y que provea de acceso uniforme a recursos de computación, almacenamiento y datos.
 - Objetivo
 - Conectar a investigadores de todas las disciplinas con servicios ICT innovativos que les ayuden a llevar a cabo sus proyectos de investigación.
 - Promueve la internacionalización
 - Formando parte de una Federación Europea de recursos digitales, EGI, formada por más de 350 centros de recursos.
 - Opera de forma federada con la iniciativa Portuguesa de Grid.

IBERGRID



 IBERGRID es la federación de las iniciativas de grid nacionales Española y Portuguesa.

EN IBERGRID HAY MÁS DE

24,000 CORES DE EJECUCIÓN Y

20 PETABYTES DE

ALMACENAMIENTO ONLINE

DEDICADOS A DAR SOPORTE A

COMUNIDADES DE USUARIOS EN
EL GRID







- Sistema Bullx R424 con 2 chasis que integran 8 procesadores Intel E5 2683V3 cada uno.
- En total 224 cores y 512 GB RAM.
- Interconexión con 10GBit.

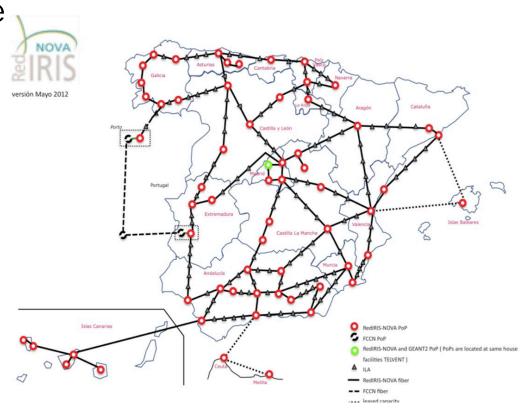


Red IRIS RIO AST NAV CAB GAL PAV UVA UNIZAR (CYL) (ARA) CAT CIEMAT **TELMAD** UV UIB (VAL) (BAL) (MAD) (MAD) CLM EXT CICA (AND) MUR ULPGC (CAN) < IAC (CAN)

RedIRIS-Nova



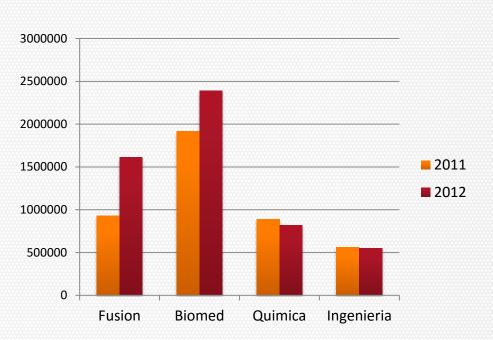
- 10.000 Km de fibra Oscura (G.652) que puede configurarse para soportar diferentes anchos de banda
 - 80x10G, 60x40G, 60x100G...
- Se alquila directamente la fibra en lugar de los circuitos.
- No hay circuitos prefijados y pueden definirse varias topologías implícitas.

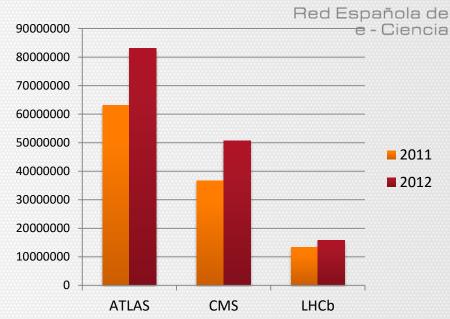


Utilización: Areas Genéricas

ES-NGI







- 177 Millones de horas de CPU en el año 2012
 - 18% en soporte a áreas de investigación ajenas al LHC
- Equivalente a 20,000 CPUs constantemente ejecutando durante todo el 2012
 - 65% de la infraestructura está provista por centros Tier del LHC
 - 35% es infraestructura genérica.

Acceso a la Infraestructura

ES-NGI



- Usuarios de colaboraciones en VOs internacionales
 - Acceso a través de su propio mecanismo de acceso a la VO
 - ATLAS, CMS, COMPCHEM, FUSION, BIOMED,...
- Usuarios nacionales
 - Formulario de acceso a recursos con descripción de necesidades
 - Información en: http://www.es-ngi.es/usuarios acceso ngi.php
 - Acceso automático para proyectos de investigación financiados en convocatorias competitivas.
 - En otro caso, se evalúa según los recursos existentes
 - Con el objetivo de hacer seguimiento más que limitar el acceso de usuarios (no se ha denegado el acceso a nadie).





La Red Española de Supercomputación y los Centros Autonómicos

BSC - Mare Nostrum III

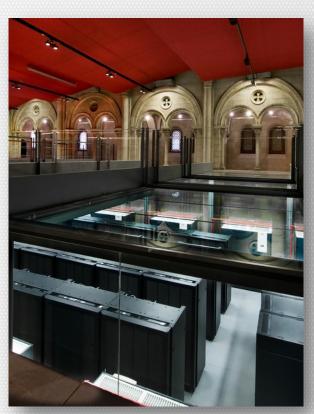
Supercomputación en España



- Peak Performance of 1 Petaflops.
- 48,448 Intel SandyBridge-EP E5-2670 cores at 2.6

GHz (3,028 compute nodes).

- 94.625 TB of main memory (32 GB/node).
- 1.9 PB of disk storage.
- Interconnection networks:
 - Infiniband and Gigabit Ethernet.
- Operating System: Linux SuSe Distribution.



El Resto de la RES

Altamira

3840 procesadores x86 (Intel E5-2670) y 15TB de RAM con un rendimiento de 74 TFlops

Marguerit2

3920 Procesadores PC64 (IBM POWER7) y 7840 GB RAM, con un rendimiento de 72 Tflops

LaPalma

512 procesadores 970) y 1TB de RAM y un rendimiento de 3Tflops

Atlante

336 procesadores PPC64 (IBM PowerPC PPC64 (IBM PowerPC 970) y 672 GB RAM, con un rendimiento de 2 Tflops.

Caesaraugusta

512 procesadores PPC64 (IBM PowerPC 970) y 1TB de RAM y com um rendimiento de 3Tflops

Tirant

2048 procesadores PPC64 (IBM PowerPC 970MP) y 4086 GB de RAM con un rendimiento de 13 TFlops

Red Española de

e - Ciencia

Picasso

512 procesadores PPC64 (IBM PowerPC 970) y 1TB de RAM y com um rendimiento de 3Tflops

Centros Autonómicos de Supercomputación



- CESGA, Centro de Supercomputación de Galicia.
 - Finis Terrae: 2,580 Procesadores Itanium, con una Sostenida de 16 Tflop/s en 147 Nodos NUMA con 20 TB de Memoria Compartida.



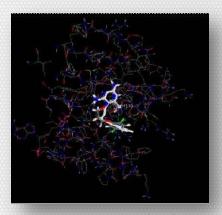
- CESCA, Centro de Supercomputación de Cataluña.
 - Diversos equipos hasta 5 Tflops.
- FCSCL, Fundación Centro de Supercomputación de Castilla y León
 - Caléndula, 304 nodos blade bi Xeon Qcore y 33TF.
- CénitS, Centro Extremeño de investigación, Innovación Tecnológica y Supercomputación
 - Lusitania, 128 procesadores Itanium dual-core.
- FPCMUR, Fundación Parque Científico de Murcia
 - Ben Arabi, 192 nodos blade Xeon quad-core y 18 Tflops

Ciencias de la Vida

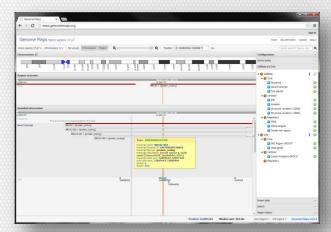
Usuarios de e-Ciencia en España



- Gran impacto en el análisis genómico y proteómico y la simulación bioquímica
 - Colaboración en la iniciativa WISDOM (Wide in Silico Docking in Malaria)
 - 80 años de CPU en 6 semanas.
- Clave en la Bioinformática moderna
 - P.e. ELIXIR ESFRI
 - Compuesto por actores clave en el análisis de datos (CNIO, CRG, CIPF, IRB, UMA, BSC, CNB, IMIM, UPF, CNAG)
 - Interés en el desarrollo y transferencia a la comunidad de servicios de alto nivel MoDEL, CellBase, CentrosomeDB, ABS, HCAD, etc. y en el alojamiento del European Genome-phenome Archive.



WISDOM



cellBase / genomemaps - CIPF

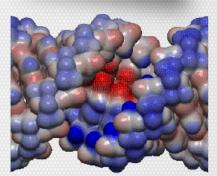
Química Computacional

Usuarios de e-Ciencia en España



- La comunidad Virtual "compchem" supone el 5% de toda la actividad no LHC de EGI (con 13.000M de horas normalizadas SI2K).
 - 7% se ha ejecutado en España y Portugal.
- Grid Empowered Molecular Simulator (GEMS)
 - Toolkit desarrollado en la EHU, con un uso sostenido de 5M de horas anuales.
- Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousand of Atoms (SIESTA)
 - Método y código para resolver numéricamente las ecuaciones mecanocuánticas que gobiernan el comportamiento de los electrones.
 - Diseñado para explotar recursos HPC.
 - The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation (3608 citas)





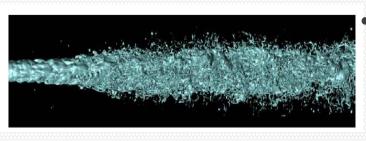
Ingeniería - Mecánica

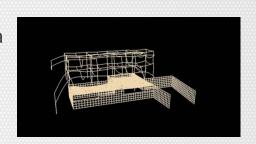
Usuarios de e-Ciencia en España



- Modelado de flujos turbulentos
 - Base de datos de Turbulencia de la UPM.
- Aplicaciones aerospaciales y en motores
- Simulación de inyección en motores diesel (CMT)
 - OpenFOAM, openWAN
 - En 2D, 98% tiempo de cálculo es la química.

- Simulación del campo electromagnético de gran escala
 - PRACE Award 2009 "High scalability multipole method.
 Solving half billion of unknowns".
 - CESGA UEX UVIGO.
- Análisis estático y dinámico en la simulación de estructuras de edificación
- Integración en un código existente (Architrave) de servicios Grid y cloud:
 - Reducción en 25 veces del tiempo de proceso.
 - Decremento del coste constructivo.
- Innovación:
 - Se transfiere el servicio a una plataforma cloud pública
 - Un análisis completo supone un coste de 3.38 €.





Conclusiones



- España se encuentra excelentemente posicionada en la e-Ciencia a nivel internacional tanto en infraestructuras como en aplicaciones
 - Existe una gran comunidad de técnicos y usuarios dispuestos a apoyar a nuevos usuarios.
- El acceso está abierto en todos los casos
 - Convocatorias RES y propias de los centros de Supercomputación Autonómicos.
 - A través de ES-NGI.
 - A través de PRACE.
- El acceso a infraestructuras internacionales es una oportunidad para el desarrollo especialmente en la situación actual.