Índice

1 Investigación y computación

- 1.1 La computación: una herramienta en la investigación 4
- 1.2 Paradigmas de computación 5
- 1.3 Computación Voluntaria 6

2 Ibercivis: Plataforma de cálculo

- 2.1 Origen e historia 10
- 2.2 Participación 11
- 2.3 Estructura de Ibercivis 12
- 2.4 Investigación en Ibercivis 17

3 Ibercivis: Plataforma de divulgación

- 3.1 Actividades de comunicación 26
- 3.2 Actividades de difusión 27

4 Expansión del proyecto

- 4.1 Ibercivis como institución 30
- 4.2 Portugal 30
- 4.3 Iberoamérica como punto de referencia 32
- 4.4 Proyección europea 32

5 Proyectos y subvenciones

6 Equipo de trabajo

- Centros 35

Edita:

Instituto de Biocomputación y Física de
Sistemas Complejos

Introducción

Desde su lanzamiento en junio de 2008 Ibercivis ha desarrollado una amplia actividad que pretendemos reflejar en esta páginas.

Ibercivis es un proyecto complejo y multidisciplinar que engloba distintas dimensiones de la actividad científica. Es, al mismo tiempo, una plataforma de computación voluntaria basada en BOINC y con una infraestructura distribuida que soporta múltiples aplicaciones; una herramienta de difusión de la ciencia, la tecnología y de la metodología científica; y un lugar de encuentro de investigadores en TIC, Física, Bioquímica, Matemáticas, etc. con objetivos y tareas comunes.

Ibercivis es también un proyecto Hispano-Luso. En 2009 Portugal puso en marcha la plataforma en su territorio y sus investigadores y ciudadanos ya participan activamente en ella.

Durante 2009, Ibercivis ha centrado su actividad en la creación de una infraestructura potente, sólida, tolerante a fallos y escalable. Todo ello con el objetivo de cumplir con los importantes compromisos que se han ido adquiriendo para los próximos meses: extender la plataforma Ibercivis a muchos más ciudadanos, a través de un importante esfuerzo de difusión y exportar el proyecto a Iberoamérica y Europa.

Los ciudadanos aportan de forma creciente y continuada sus recursos, y son ellos ciertamente los protagonistas de este proyecto. Estamos seguros de que gracias a las mejoras y las ampliaciones previstas, los participantes crecerán durante 2010 y los investigadores seguirán encontrando en Ibercivis un importante recurso para afrontar sus necesidades computacionales.

Alfonso Tarancón
Director de Ibercivis

1

Investigación y computación

Muchos de los programas de investigación se basan en simulaciones que necesitan miles, incluso millones de horas calculadas en miles de procesadores

1.1 La computación: una herramienta en la investigación

El desarrollo científico y tecnológico se ha convertido en uno de los pilares fundamentales en la vida cotidiana de las sociedades desarrolladas; sin duda, una apuesta fuerte por su crecimiento reportará en el futuro grandes beneficios. No es de extrañar por tanto que los países considerados más avanzados, sean también los que mayor inversiones en I+D hacen, como es el caso de Suecia, Finlandia o Suiza¹, que son los europeos que más invierten en proporción a su PIB.

Una de las herramientas básicas usadas en la investigación son los ordenadores. Muchos de los programas de investigación se basan en simulaciones que necesitan miles incluso millones de horas calculadas en miles de procesadores. Es por ello que Universidades y centros de Investigación poseen equipos especializados para poder realizar esas simulaciones de forma eficiente. La estadística de los países que poseen las máquinas más potentes del mundo, la llamada lista top500², muestra que el 58.20% de los 500 supercomputadores se encuentran en EEUU, el 8,8% en el Reino Unido, 6% en Alemania, 4.60%Francia y 4,20% China.

¹ http://epp.eurostat.ec.europa.eu/portal/page/portal/science_technology_innovation/introduction a fecha Noviembre de 2009

² <http://www.top500.org/stats/list/33/countries> a fecha Noviembre de 2009

Hoy en día estar en el “top ten” o los 10 primeros de esta lista es un motivo de prestigio para cualquier país y hay una verdadera carrera computacional para ascender a estas posiciones.

1.2 Paradigmas de computación

A pesar del reciente nacimiento de las tecnologías de la información (TIC), la computación ha sufrido una enorme transformación en las últimas décadas. Las necesidades de los avances científicos han necesitado del desarrollo de grandes equipos especializados conectados con redes de alta velocidad para proporcionar una estructura potente a la comunidad científica. Este modelo de computación recibe el nombre de HPC (High Performance Computation ó computación de altas prestaciones) . Algunos ejemplos de supercomputadores son el MareNostrum en el BSC (Barcelona) o el Finisterrae del CESGA (Santiago de Compostela).

En el campo de los Supercomputadores (HPC) es donde los equipos son más potentes, compactos y con mayor capacidad de cálculo, proceso y comunicación, de modo que aunque contengan muchos procesadores individuales funcionan como un todo único.

Existen problemas que pueden ejecutarse en arquitecturas menos sofisticadas, al no demandar ciertos requisitos, como rápida comunicación entre procesadores. Además cada vez hay en el mundo más Centros de Proceso de Datos (CPD) con potencias medias (varios cientos de procesadores) que gracias a Internet pueden ser usadas desde cualquier lugar del mundo y además están conectados todos entre sí para una mayor optimización de los recursos. Han nacido así las tecnologías Grid, donde Europa se sitúa actualmente a la cabeza. La computación en Grid es un paradigma de computación distribuida en el que se unen diversos equipos de diferentes características por una red de alta velocidad. Hasta la fecha, la Unión Europea ha impulsado las tecnologías Grid a través de los Programas Marco (actualmente VII) de investigación. EGEE (Enabling Grids for E-sciencE) va ya por su tercera fase, creando una infraestructura Grid distribuida en la que participan más de 27 países diferentes. Éste es el proyecto más importante de Grid en Europa.

Durante 2010, EGEE está centrado en la transición hacia un modelo de operaciones de la infraestructura sostenible. Los recursos centrales que has-

En la imagen: Gráfica de posicionamiento de los diferentes paradigmas de computación según ancho de banda y cores.

ta ahora eran coordinados desde EGEE, serán ahora gestionados a través de EGI (European Grid Initiative) y cada uno de los países participantes lo serán por las Iniciativas Grid Nacionales (NGI). La NGI española está coordinada desde el Instituto de Física de Cantabria (IFCA) y tiene un importante peso específico dentro de Europa. El BIFI participa en la NGI española aportando recursos y dando soporte a usuarios.

En España disponemos de importantes infraestructuras GRID. Una de ellas es la GRID-CSIC (www.grid.csic.es) a escala nacional. A escala regional ARAGRID (www.aragrid.es) comenzará a funcionar a finales de 2010. Un ejemplo de computación Grid es el proyecto Aragrid, llevado a cabo en el BIFI, en el que 4 nodos distribuidos en Aragón (2 en Zaragoza, 1 en Huesca y 1 en Teruel) están conectados a través de la red RIA (Red de Investigación de Aragón), así como PireGrid, la red transpirenaica de computación para acercar la Grid a la empresas.

Otras infraestructuras altamente eficientes y utilizadas en investigación son los clústers. Un clúster es una agrupación física de varios ordenadores unidos mediante una red de alta velocidad, que en conjunto forma un solo equipo potente y accesible. Los clústers se utilizan en investigación debido a su alto rendimiento y disponibilidad y por la escalabilidad que permite a los centros.

Por último, la computación voluntaria hace referencia a la participación voluntaria de los ciudadanos en diversos proyectos cediendo sus equipos cuando éstos están ociosos. En conjunto todos los equipos que participan a nivel mundial en proyectos de computación voluntaria basados en BOINC proporcionan del orden de millones de núcleos de cálculo (<http://boincstats.com>). Es aquí donde se enmarca IBERCIVIS, por lo que en los próximos apartados se describirá más en detalle el funcionamiento del mismo.

1.3 Computación Voluntaria

El voluntariado nace como la actividad social sin ánimo de lucro, por decisión propia y libre, para el bien de una comunidad o la humanidad en general. Existen voluntarios en muchos ámbitos de la sociedad como voluntarios de acción social, de medio ambiente, de emergencias y cooperación, culturales, deportivos, etc. En la mayoría de estos casos las personas cumplen un papel fundamental con su actividad física, es decir, se necesita su presencia, su disponibilidad para realizar unas tareas asignadas lo que supone un esfuerzo físico encomiable. Pero ¿cómo se puede hacer voluntariado científico sin tener conocimientos de ciencia? Muy sencillo: con la computación voluntaria.

1.3.1 Orígenes de la computación voluntaria: SETI@home

La computación voluntaria tiene su origen en el proyecto SETI@home, Search for ExtraTerrestrial Intelligence (búsqueda de inteligencia extraterrestre), nacido en la Universidad de Berkeley de California. Este proyecto utiliza el radiotelescopio de Arecibo en Puerto Rico, cuya antena principal tiene un diámetro de 305 metros, para escuchar señales de radio provenientes del espacio.

Estas señales contienen principalmente ruido y señales producidas por el ser humano como estaciones de televisión, radares y satélites, pero también recibe señales y ruido de gran parte del Universo, de nuestra galaxia y de otras muchas. Estas señales pueden ser producidas de forma natural por estrellas lejanas, pero también podría ser que seres inteligentes nos enviaran alguna señal de radio para mostrar su existencia. Lo que se pretende es filtrar las señales recibidas en la búsqueda precisamente de algo enviado por seres inteligentes

extraterrestres. Toda esta información se analiza, para lo que es necesario contar con equipos de una alta potencia computacional. Y es así como en mayo de 1999 se lanzó el proyecto SETI@home que invitaba a participar a miles de personas desde los ordenadores de sus casas y, 10 años después, cuenta con más de 1 millón de participantes.

1.3.2 BOINC (Berkeley Open Infrastructure for Network Computing)

Para llevar a cabo el proyecto SETI se utiliza un programa diseñado para ejecutarse en los ordenadores de los ciudadanos llamado BOINC. Aunque BOINC fue diseñado inicialmente para el proyecto SETI, hoy en día es un programa que, instalado en el ordenador, permite participar en diferentes proyectos además de SETI@home. Las áreas de aplicación de estos proyectos son muy diversas: desde física y matemáticas, a biología, climatología o juegos, pero todos tienen una característica común: necesitan una elevada capacidad de cálculo. Además, la mayoría de estos proyectos son investigaciones de Universidades o entidades públicas que no buscan beneficio económico sino avances en la rama en la que aplican su conocimiento.

3 <http://boincstats.com/index.php?list=full&or=0>

En la imagen: Radiotelescopio de Arecibo

Algunos de los proyectos que participan son Einstein@home, Climate Prediction, Rosetta@home e Ibcercivis³, entre muchos otros. BOINC permite elegir a los usuarios en qué proyectos desean participar. Con un simple clic el usuario selecciona de entre todas las aplicaciones que se ejecutan en Ibcercivis aquellas en las que desea colaborar.

En noviembre de 2009, casi 5 millones de usuarios de 267 países diferentes participan en BOINC, con una potencia total equivalente a 2.698 TeraFLOPS. Esto equivale a unos 2 millones de núcleos de cálculo trabajando de forma continuada.

Casi 5 millones de usuarios de 267 países diferentes participan en BOINC

El siguiente esquema muestra el funcionamiento básico una vez que un usuario decide participar con BOINC. Se puede apreciar la transparencia de ejecución y el hecho de que el usuario no ve afectado su trabajo habitual.

En la imagen: Esquema de funcionamiento de BOINC

La computación voluntaria se ha consolidado en todo el mundo como una herramienta eficaz y fiable para el cálculo científico aprovechando los ordenadores de ciudadanos e instituciones cuando están ociosos, es decir, cuando esos ordenadores están encendidos pero no se están utilizando o se usan con recursos computacionales mínimos.

1.3.3 Ventajas e inconvenientes de la computación voluntaria

La computación voluntaria tiene muchas ventajas respecto a otras plataformas de computación.

En primer lugar la computación voluntaria tiene como base la compartición de recursos lo que supone un ahorro en la compra de equipos potentes y en suministro eléctrico. De esta forma se permite a centros que

Ventajas

1. Se comparten recursos con aquellos que no disponen de ellos
2. Es fácilmente escalable
3. Existe un vínculo entre ciencia y ciudadanía

no poseen la última tecnología realizar investigaciones de forma rápida y eficiente.

En segundo lugar es un sistema perfectamente escalable con relativamente poco esfuerzo. El número de usuarios crece continuamente. Además, conforme se añaden nuevas aplicaciones se consiguen a la vez nuevos usuarios, especialmente cuando las nuevas aplicaciones son de otros países ya que se realizan campañas y actos de difusión.

Finalmente la computación voluntaria establece un vínculo entre la ciencia y la ciudadanía de forma que es una eficaz herramienta de divulgación.

Los ordenadores se aprovechan para el cálculo científico cuando están ociosos, es decir, encendidos pero sin utilizar o usados con recursos computacionales mínimos

ción científica. Al fin y al cabo la investigación beneficia a la sociedad en general por lo que es importante que esta sociedad esté informada de los nuevos avances, en especial si han colaborado en esa investigación aunque sea de una forma indirecta.

Sin embargo, también existen inconvenientes en este sistema de computación. Uno de los principales es el ancho de banda, ya que las líneas de los usuarios son conexiones comerciales con una velocidad muy lejos de las obtenidas en centros de investigación, universidades, etc. Esta característica hace que el sistema se tenga que adaptar a los usuarios para no saturar la red, por lo que se consigue una capacidad de computación muy elevada similar a la de los grandes superordenadores pero contrarrestada por el ancho de banda. Otro inconveniente es la disponibilidad del sistema, ya que aunque el número medio de usuarios diarios es más o menos constante, puede haber momentos o situaciones concretas en las que el número de usuarios sea menor, o estén muchos conectados pero con los ordenadores no ociosos. La estabilidad en el número de usuarios no es escalable ni fácilmente predecible.

A pesar de que la computación voluntaria es ampliamente utilizada por diferentes áreas científicas y tecnológicas, no todas las aplicaciones pueden ejecutarse en una infraestructura así: es necesario que puedan partirse en fragmentos cortos, que puedan realizarse cálculos de forma independiente y algunas limitaciones en cuanto a volumen de datos. Estas limitaciones se exponen de forma más precisa en el apartado 2.4.10 Como acceder a Ibercivis como investigadores.

1.4 Importancia de la divulgación científica

Los sucesivos avances científicos, acumulativos y cada vez más complejos, se convierten en muchos casos en incomprensibles para quienes no son expertos en dichos campos, provocando por tanto una paulatina separación entre el ciudadano, la ciencia y el conocimiento.

Por suerte, en este campo de la informática, la distancia entre expertos y no expertos deja de ser tan grande. De hecho, la mayoría de las familias disponen de un ordenador similar al que es utilizado en algunos laboratorios de investigación. Estos ordenadores domésticos, capaces de realizar miles de millones de operaciones por segundo⁴, suelen estar usados sólo en ciertos momentos del día y no aprovechan todo su potencial. Esto supone un conjunto enorme de recursos infrautilizados que unidos se convierten en una herramienta potente y muy solicitada por la comunidad científica.

El ciudadano puede sentirse más cercano a la ciencia, de hecho se consigue un cierto acercamiento al conocimiento científico ya que muestran interés por todo aquello que sucede en sus ordenadores, se sienten partícipes y al mismo tiempo actores de esta ciencia.

Esta plataforma se convierte así en una ventana abierta al usuario, que sin esfuerzo se involucra en investigaciones punteras, poniéndose al día e interesándose por los avances científicos.

EL ciudadano se involucra sin esfuerzo en investigaciones punteras

⁴ Una de las medidas de potencia de un ordenador es la cantidad de multiplicaciones de números decimales que puede hacerse en 1 segundo. 1Gflops significa que puede hacer 1000 millones de multiplicaciones por segundo.

2

Ibercivis: Plataforma de cálculo

Existen dos premisas importantes que hacen que surja el proyecto de computación voluntaria llamado Ibercivis. Por un lado, la necesidad latente de los investigadores de obtener alta potencia de cálculo y por el otro la creciente separación entre la ciencia y la ciudadanía.

Ibercivis se conforma como una plataforma de computación voluntaria que dota a los investigadores de una potente herramienta de cómputo sirviéndose de los ordenadores ociosos de los ciudadanos. Al mismo tiempo Ibercivis sirve de puente entre la ciencia y la sociedad ya que utiliza diferentes medios de difusión y divulgación.

2.1 Origen e historia

Ibercivis nace a partir de Zivis, una iniciativa del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos, el Ayuntamiento de Zaragoza y el Laboratorio Nacional de Fusión del CIEMAT. Su objetivo era crear una plataforma ciudadana de computación para dar servicio a los investigadores de la ciudad de Zaragoza. Para ello se apoyó en el plan municipal de 2004 para el Desarrollo de la Sociedad del Conocimiento el cual pretendía situar la ciudad de Zaragoza en 2010 en un importante puesto europeo como ciudad con gran desarrollo económico basado en las nuevas tecnologías de información y en la gestión del conocimiento.

El proyecto Zivis fue patrocinado por el Ayuntamiento de Zaragoza, Telefónica, Endesa, Ibercaja, la Fundación Zaragoza Ciudad del conocimiento y la Universidad de Zaragoza.

Tras el éxito de Zivis, se extendió esta iniciativa a escala nacional, para lo que se solicitó la participación de otras entidades. La respuesta fue altamente satisfactoria, y así, el día 20 de Junio de 2008, Ibercivis se presentó en sociedad por el entonces Secretario de Estado de Comunicación, D. Carlos Martínez, en la Sede del CSIC en Madrid.

2.2 Participación

2.2.1 Participación de investigadores

Si en 2008 eran tres los proyectos de investigación que participaban en Ibercivis, 2009 incrementó este número hasta 8 aplicaciones: Fusión, Docking, Materiales, Nanoluz, Neurosim, Adsorción, Amiloide y Cuanti-

cables. Además, están en fase de desarrollo 3 nuevas aplicaciones que serán incorporadas en los próximos meses.

2.2.2 Participación de usuarios

A mayo de 2010, se ha conseguido que 17.000 ciudadanos participasen en Ibercivis desde su lanzamiento, aunque hay que decir que el número total de cores que aportaban se situaba en torno a los 70000.

En el **Gráfico 1** pueden verse los totales de usuarios y de cores. Esta función es creciente, pues contabiliza los registros totales, independientemente del grado de participación posterior.

Más relevante que el número total de participantes es el número de quienes se conectan diariamente, pues éstos forman la base más estable de recursos de cálculo. Ésta es la infraestructura base de Ibercivis que hace que a diario se puedan ejecutar las diferentes aplicaciones de forma continuada.

Gráfico1: Evolución de participación total en Ibercivis

Ibercivis en datos

- ▶ 8 aplicaciones en marcha y 3 en fase de desarrollo
- ▶ Más de 17000 usuarios
- ▶ 70000 cores en total desde el comienzo
- ▶ Participación de investigadores de Portugal, Argentina, México y España.

En la actualidad, diariamente se conectan a Ibercivis una media 2.100 personas que aportan alrededor de 8000 cores. Puede apreciarse que el número de este tipo de participantes experimenta un salto cualitativo tras la presentación pública en junio de 2008 y que comienza a crecer de forma continua tras el verano. La competición entre los equipos francés y español que tuvo lugar en octubre de 2008 y el período en el que se establecieron los premios de participación de junio de 2009 supuso un nuevo incremento significativo.

El **Gráfico 2** muestra la evolución de los participantes diarios desde junio de 2008. Todos los fines de semana puede apreciarse que las conexiones bajan del orden del 20%, bien porque los usuarios utilizan más los ordenadores o bien porque son or-

Gráfico 2: Estadísticas de participación diarias en Ibercivis (desde julio 2008 hasta diciembre 2009)

denadores que sólo están encendidos durante la semana.

El número total de horas reales de cálculo que se han llevado a cabo desde el comienzo del proyecto es de unos 12 millones de horas. La media diaria del último periodo ha sido de 30.000 horas de CPU. Así se podría decir que el “cluster diario

equivalente” sería de unos 1500 cores activos todo el día.

2.3 Estructura de Ibercivis

2.3.1 Infraestructura software y hardware

A nivel de software, el proyecto Ibercivis se compone de varios servicios, de los cuales unos forman el núcleo de Ibercivis y otros lo complementan (backup, monitorización, réplicas).

De los servicios que forman el núcleo el más importante es BOINC, que se subdivide en varias partes:

- El scheduler: servicio que se encarga de gestionar los proyectos y de asignar los trabajos a los clientes.

En la imagen: Estadísticas de horas de CPU diarias (desde julio 2008 hasta diciembre 2009)

- Validador: valida cada resultado de la ejecución de una workunit en un cliente.
- Asimilador: crea el resultado final de un proyecto a partir de los resultados validados.
- Transitioner: gestiona los cambios de estado de workunits y resultados.
- Feeder: crea segmentos de memoria compartida para pasar los registros de la base de datos al scheduler.

Los demás servicios que componen el núcleo de Ibercivis son:

- Servidor web: se usa tanto para la bajada de archivos como para la subida. En cuanto a volumen, los proyectos suelen manejar de uno a varios TeraBytes de ficheros de resultados.
- Base de datos: la base de datos de Ibercivis es única. Todas las máquinas y todos los procesos la comparten, a nivel de infraestructura está replicada en varios esclavos y hay dos maestros en los que se puede escribir.

Como servicios fuera del núcleo, en realidad hay decenas y aunque muchos de ellos son servicios estándar de Unix, cabe destacar los siguientes:

- Backup: un sistema de salvaguardia que realiza copias incrementales

Glosario

Cliente Cada uno de los ciudadanos que participa en Ibercivis. También se utiliza para referirse al programa de BOINC que se instala en los ordenadores para la ejecución de los trabajos.

Servidor Máquina en la que se ejecuta una aplicación informática que provee servicios a sus clientes.

Workunit Fragmento de trabajo a realizar de una aplicación.

TeraByte 1TB = 1024GB.

Backbone Esqueleto o estructura principal sobre la que se construye el resto del sistema.

Porting Proceso de adaptación de un programa o aplicación para que pueda ser ejecutada en diferentes entornos o sistemas operativos.

Middleware Software para gestionar la conexión de varios servicios en aplicaciones distribuidas abstraéndose de las redes de comunicación y de los sistemas operativos utilizados.

En la imagen: Esquema de la infraestructura software de Ibercivis

diariamente y las almacena en discos que están replicados en espejo. Tal y como está planteado, se hacen copias diarias de las configuraciones de los servidores y de todos los ficheros que no sean ficheros de sistema ni resultados de proyectos (no tiene sentido hacer backup de los resultados ya que diariamente son procesados y borrados).

- Monitorización: tanto las máquinas como los servicios que componen el proyecto son monitorizados. El sistema envía e-mails con el estatus del proyecto a los administradores de sistemas. También se puede comprobar el estado de los servicios vía web, mostrando tanto el estado de los servicios como las estadísticas de los procesos de Ibercivis.
- Página web: casi como un proyecto aparte está la propia web del proyecto Ibercivis que está disponible en varios idiomas, actualmente en español, portugués (www.ibercivis.pt) e inglés (dependiendo del lenguaje del navegador), y es la principal fuente de información y de novedades relativas al proyecto.

A nivel de **hardware**, actualmente el proyecto Ibercivis se compone de 16 máquinas distribuidas entre España y Portugal conforme a la siguiente estructura:

- 6 Máquinas en Zaragoza, componen el backbone de Ibercivis. Todos los componentes necesarios para el funcionamiento del proyecto se encuentran en éstos servidores. También sirven la página web, la monitorización, los sistemas de backup, servicios para desarrolladores, etc.

- 2 Máquinas en Portugal, desde las cuales se ejecuta un scheduler de BOINC, ejecutan un esclavo de MySQL y sirven la subida, la bajada, la validación y la asimilación de algunos proyectos.

- 5 Máquinas en el Ceta-Ciemat en Trujillo (Extremadura) donde se ejecuta un maestro de MySQL. Sirven subida y bajada de algunos proyectos así como la validación y la asimilación.

- 1 máquina en el CSIC en Madrid.

- 1 máquina en RedIRIS en Madrid. Esta máquina se encuentra en una sala anexa al nodo neutro Hispanix, por donde se enruta todo el tráfico IP del estado. Dada dicha situación, se utiliza la máquina como proxy inverso de http. Todas las bajadas y las subidas

En la imagen: Esquema de la infraestructura hardware de Ibercivis

das pasan por allí, de manera que se optimiza y controla el tráfico web del proyecto.

- 1 máquina en la Universidad de Extremadura, dedicada a la bajada y subida de archivos de un solo proyecto: materiales.

En total el proyecto dispone de 48 CPUs y 64 GB de RAM. Todos los equipos están configurados con OpenSuse GNU-Linux x86-64.

2.3.2 Aplicaciones

Podemos afirmar que el 50% del proyecto Ibercivis consiste en dotar a los investigadores de una plataforma de cálculo donde ejecutar sus aplicaciones científicas. Al igual que otras infraestructuras de cálculo nacionales e internacionales, para que una aplicación sea ejecutada en Ibercivis debe pasar por una serie de procesos y controles, para garantizar la calidad y el correcto funcionamiento de la plataforma.

El proceso de lanzamiento de una aplicación, tal y como puede observarse en el gráfico adjunto, sigue diversas fases desde que es propuesta por un grupo

En la imagen: Distribución de las máquinas en España y Portugal

de investigación científico hasta estar completamente integrada en la infraestructura de Ibercivis:

Fase 1

La primera fase es la fase de Selección. Un comité de expertos científicos de Ibercivis es el encargado de evaluar la solicitud en dos aspectos fundamentales: el científico (objetivos perseguidos, metodología usada...) y el técnico (necesidades de RAM, disco, librerías...) asegurándose que dicha aplicación se adapta a la filosofía

En la imagen: Fase de lanzamiento de una aplicación

de Ibercivis y que es posible portarla a la plataforma BOINC.

Fase 2

En la segunda fase, llamada porting, el equipo de desarrollo de Ibercivis, en continua comunicación con el grupo de investigación científico, portará la aplicación de forma que pueda ejecutarse sobre BOINC en diferentes plataformas (Linux, Windows y MacOSX).

Dos son las subfases por las que pasará la aplicación-BOINC creada tras el porting:

- Porting – Fase ALFA : Una vez creadas, se procede a el test de dichas aplicaciones en una plataforma BOINC a pequeña escala (~10 CPUS). Es también el momento de crear el validador y asimilador encargados de comprobar que los resultados obtenidos son óptimos, y de evaluar qué hacer con ellos.

- Porting – Fase BETA: Si los resultados obtenidos en la fase alfa son los esperados y la tasa de errores es menor de un factor predefinido, la aplicación pasará a fase beta. Aquí ya se utiliza la infraestructura de Ibercivis, enviando los resultados a aquellos clientes que permiten ejecutar aplicaciones en sus ordenadores (~10% de Ibercivis). Si los resultados en fase beta no son los esperados, se pasa de nuevo a fase alfa.

Fase 3

Finalmente, las tercera fase es la de lanzamiento en Ibercivis. Si todo ha ido como se esperaba en fase beta, el proyecto pasa a usar el 100% de los clientes de Ibercivis (aunque un cliente siempre puede elegir si ejecutar o no un proyecto). Si en algún momento, los resultados obtenidos no son los esperados, el proyecto pasa de nuevo a fase beta, con el fin de solucionar los posibles problemas.

Como se ha comentado previamente, durante el porting existe una constante comunicación entre el equipo investigador y el equipo de porting, ya que siempre se tiene en mente que el equipo investigador debe ser quien finalmente sea el encargado de mandar los diferentes jobs y comprobar que estos son correctos.

Para mostrar el ciclo de vida de una aplicación se anexa la siguiente figura:

En la imagen: Esquema del ciclo de vida de una aplicación

Cuando un equipo de investigación quiere que se ejecute un job o trabajo en Ibercivis, envía los diferentes ficheros de entrada para crear las workunits asociadas a dicho job. Normalmente, se espera al menos un resultado asociado a cada una de estas workunits, resultado que se generará por un cliente (en realidad BOINC llama resultado a cada una de las realizaciones de una workunit, pudiendo estar este resultado ejecutado o no). Es posible que cada workunit genere varios resultados (por ejemplo para tener redundancia).

Cuando todos los resultados asociados a las workunits asociadas a un job están completados, se dice que el job está completado. Ibercivis provee

al equipo de investigación de un middleware para poder enviar dichos jobs, comprobar su estado en cada momento, etc...

2.4 Investigación en Ibercivis

2.4.1 Fusión

El desarrollo de la humanidad implica inexorablemente mayores demandas energéticas. Los combustibles fósiles se agotarán relativamente pronto, y las energías renovables difícilmente podrán satisfacer la futura demanda. La fusión, un proceso suficientemente limpio, puede ser en el futuro una fuente energética rentable e inagotable.

La fusión se produce cuando se unen dos núcleos energéticos en uno más pesado, proceso en el cual se desprende una inmensa cantidad de energía. La luminosidad y el calor de las estrellas, por ejemplo, son producidos por la fusión de átomos de hidrógeno. En ellas, la materia se encuentra en estado de plasma -gas casi completamente ionizado-.

Debido a la repulsión eléctrica de los núcleos atómicos -dos cargas

positivas siempre se repelen-, el plasma ha de estar a una temperatura elevadísima para que la fusión ocurra. Aproximadamente, a 100 millones de grados centígrados. Los reactores de fusión son máquinas complejas que mantienen el plasma en una cámara de forma que no toque las paredes. Esto se consigue por medio de potentísimos campos magnéticos y la más avanzada tecnología. Sin embargo, todavía no se han construido reactores que mantengan la fusión controlada de forma rentable.

El próximo paso de la comunidad científica será la construcción del reactor ITER (Reactor Termonuclear Experimental Internacional) en el sur de Francia, promovido por un consorcio internacional que invertirá 10.300 millones de euros. El ITER pretende demostrar la viabilidad de la energía de fusión. Científicos del Centro de Investigaciones Energéticas Medioam-

En la imagen: ITER, dentro del criostato que mantiene las bobinas en estado superconductor y dentro del blindaje que lo aísla del exterior

La fusión puede ser en el futuro una fuente energética rentable e inagotable

bientales y Tecnológicas (CIEMAT), que han trabajado en el cálculo de plasmas para el Stellarator español TJ-II, y del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) de la Universidad de Zaragoza realizan simulaciones de plasmas que se obtendrán en el proyecto ITER. Los ordenadores de los ciudadanos colaboran con ese proyecto a través de Ibercivis calculando las trayectorias de los núcleos que componen el plasma, lo que permite prever su comportamiento como conjunto.

Los resultados obtenidos con la participación de la aplicación de Fusión en Ibercivis son:

CONFERENCIAS

- Comparison between 2D and 3D transport in ITER using a Citizen Supercomputer. A. Bustos, F. Castejón, L.A. Fernández, V. Martín-Mayor, A.Tarancón, J.L. Velasco. 36th EPS Conference, 29 Junio - 3 Julio 2009, Sofía, Bulgaria.
- Comparison between 2D and 3D transport in ITER using a Citizen Supercomputer. A. Bustos, F. Castejón, L.A. Fernández, V. Martín-Mayor, A.Tarancón, J.L. Velasco. Contribución oral a la 32 Bienal de la RSEF, Ciudad Real, Septiembre 2009.

PUBLICACIONES

- Paper en la revista Physics of Plasmas titulado 3D features of 2D Transport in ITER: results from Ibercivis (a Citizen Supercomputer). Autores: Francisco Castejón, Luis Antonio Fernández, Jerónimo García, Víctor Martín Mayor, Alfonso Tarancón, José Luis Velasco.
- Artículo Ibercivis: una infraestructura estable de computación voluntaria o la ciencia en casa. F. Castejón, A.Tarancón. Revista Vértices, marzo 2008.

2.4.2 Docking de Proteínas

Conocer el proceso de unión o docking entre proteínas humanas y pequeñas moléculas es una tarea clave para el desarrollo de fármacos que mejoren el tratamiento de enfermedades como el cáncer. Esas moléculas, denominadas genéricamente **ligandos**, pueden modificar las propiedades de las proteínas con efectos terapéuticos. A través de Ibercivis, científicos del Centro de Biología Molecular Severo Ochoa (CSIC-UAM) simulan el docking de determinadas proteínas con una serie de ligandos para determinar cuáles de ellos resultan más prometedores para ser analizados experimentalmente.

En la imagen: Caracterización del centro activo para interacciones con carbonos. La caja muestra el área donde se van a realizar los estudios de docking

La primera proteína con la que han trabajado ha sido la MGMT, que hace resistentes algunas células cancerígenas a los efectos de los fármacos utilizados en la quimioterapia. El objetivo: encontrar un ligando que logre inhibir la MGMT.

En la imagen: Equipo de investigación de Docking

Hallar un ligando que pueda unirse a una proteína previamente identificada es una labor compleja. Los ligandos disponibles hoy en día forman una auténtica **quimioteca** de varios millones de moléculas. Probar todos ellos con una proteína en el laboratorio resultaría inviable en términos de tiempo y recursos. Por eso, se hace necesario recurrir a un **cribado virtual**.

Un solo proceso de docking (la proteína y un ligando) tarda cerca de cinco minutos. Procesar todos los ligandos de la quimioteca con un único equipo llevaría 40 años. Gracias a los ordenadores de Ibercivis este proceso puede realizarse en un lapso de tiempo mucho más razonable. Desde el lanzamiento del proyecto se han realizado dos cribados virtuales completos. Si alguno de los ligandos seleccionados funciona experimentalmente en un futuro llegará a ser el principio activo de un nuevo fármaco.

Objetivo: encontrar un ligando que logre inhibir la proteína que hace a algunas células cancerígenas resistentes a los efectos de la quimioterapia

2.4.3 Materiales

Físicos teóricos de la Universidad Complutense de Madrid, la Universidad de Extremadura y del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos analizan mediante simulaciones numéricas cómo las impurezas (átomos no magnéticos) en materiales magnéticos modifican las propiedades de la transición de fase.

En algunos materiales, cuando tienen un alto grado de pureza, se observa una transición de primer orden. Este tipo de transiciones se caracterizan por un cambio brusco y la coexistencia durante la transición de los dos estados en los que se encuentra el material. Por ejemplo, el agua a 0°C no cristaliza como un todo, sino que cristalizan grandes regiones (hielo) que coexisten con el agua hasta que se congela por completo.

Sin embargo, sobrepasado cierto nivel de impureza, estos materiales pasan a sufrir una transición de segundo orden, en la que el cambio de fase se hace suavemente de modo que en el punto de transición el sistema no presenta coexistencia entre ambas fases.

Un imán macroscópico contiene del orden de un cuatrillón (10^{24}) de constituyentes. Trabajar con tantos elementos es imposible para cualquier

ordenador. La única manera de alcanzar resultados concluyentes es simular sistemas pequeños y estudiar cómo varían sus propiedades a medida que aumenta su tamaño. Cuanto más aumentamos el tamaño, más nos aproxi-

Materiales: cómo las impurezas (átomos no magnéticos) en materiales magnéticos modifican las propiedades de la transición de fase.

En la imagen: Arriba: Sistema con un 10% de dilución en el que no hay coexistencia de fases. En cambio, se aprecian regiones magnetizadas de todos los tamaños, es el equivalente a una granizada. Abajo: Modelos puros cerca de la transición en los que se muestra una burbuja y una banda magnetizada. La región negra es el equivalente a un iceberg flotando en el mar.

mamos al fenómeno real. Para ello hay que realizar un gran número de cálculos para los que resultan fundamentales los ordenadores de Ibercivis.

Los resultados obtenidos con la participación de la aplicación de materiales en Ibercivis son:

PUBLICACIONES

- Microcanonical Study of the Site-diluted Eight-state Potts Model in 3D. L. A. Fernández, A. Gordillo-Guerrero, V. Martín-Mayor y J. J. Ruiz-Lorenzo.

TESIS GENERADAS

- Phase Transitions in Disordered Systems. Antonio Gordillo Guerrero. Universidad de Extremadura.

2.4.4 Neurosim

Las proteínas están constituidas por aminoácidos, que son moléculas compuestas por unos pocos átomos. En las proteínas, los aminoácidos se encadenan uno tras otro según una determinada secuencia que está codificada en los genes. Esta secuencia se compone de un número variable de aminoácidos (desde unos cientos hasta varias decenas de miles) y recibe el nombre de estructura primaria de la proteína.

Esta secuencia de aminoácidos se pliega de una determinada manera y forma la estructura tridimensional (3D) de la proteína. En la estructura 3D se pueden reconocer algunas subestructuras o motivos muy comunes en las proteínas - α hélices, láminas β , bucles, etc.- constituidos por un número pequeño de aminoácidos. Este conjunto de motivos constituye la denominada estructura secundaria de la proteína.

En la imagen: estructura molecular del aminoácido Alanina. Representación denominada CPK.

Neurosim analiza las propiedades estructurales de los aminoácidos y de pequeños péptidos que actúan en el cerebro y en el Sistema Nervioso e intervienen en los mecanismos nerviosos del aprendizaje y la memoria

El número de proteínas cuya secuencia de aminoácidos se conoce es muy elevado (alcanza varios millones). Sin embargo, con los métodos experimentales existentes hoy día (difracción de rayos X, resonancia magnética nuclear, microscopía electrónica, etc.) sólo se ha logrado determinar la estructura terciaria de un pequeño porcentaje de esas proteínas.

Puesto que la naturaleza de los aminoácidos que componen una proteína y su secuencia predeterminan la estructura final de dicha proteína, uno de los retos más importantes de la Ciencia moderna es conseguir deducir esta estructura 3D a partir de la secuencia de aminoácidos.

Para arrojar luz sobre el proceso de construcción de las proteínas, científicos del Instituto de Estructura de la Materia del CSIC analizan las propiedades estructurales de los aminoácidos y de pequeños péptidos (secuencias de unas cuantas decenas de aminoácidos) conocidos como neuropéptidos. Éstos actúan en el cerebro y en el Sistema Nervioso e intervienen en los mecanismos nerviosos del aprendizaje y la memoria.

2.4.5 Nanoluz

Científicos del Instituto de Óptica Daza Valdés del CSIC investigan el comportamiento de la luz en sistemas estructurados a escala nanométrica. Conocer cómo se mueve la luz a esas escalas de longitud es útil para lograr los siguientes objetivos tecnológicos:

- Explorar el mundo de lo pequeño. Podemos construir sondas de luz con las que modificar y analizar lo

que ocurre en la naturaleza a escala nanométrica, es decir a escala de la millonésima del milímetro.

- Transmitir y procesar información de forma similar a los electrones en un microprocesador. Ya hay dispositivos que utilizan luz para conmutar y procesar señales, como por ejemplo las fibras ópticas a través de las cuales nos llegan a casa datos de Internet y televisión. Estos avances forman parte de la larga carrera por moldear el flujo de la luz en pequeñas estructuras y llegar a fabricar computadores ópticos, un objetivo todavía lejano.

- Mejorar el rendimiento de los paneles solares.

- Producir luz (iluminar) a través de dispositivos sólidos.

El proyecto nanoluz se centra en resolver las ecuaciones de Maxwell para describir el comportamiento de la luz en nanopartículas metálicas. Estas partículas se fabrican en laboratorios avanzados de química coloidal y permiten cambiar el color y las propiedades ópticas de los medios en los que se sitúan.

Se podría llegar a detectar enfermedades en una cantidad ínfima de fluido corporal

El objetivo más inmediato es diseñar estrategias para el uso de estas partículas en biosensores que tengan sensibilidad a moléculas individuales. A través de biosensores nanoscópicos basados en la interacción de la luz con estas moléculas se podría llegar a detectarlas y deducir de

una cantidad ínfima de fluido corporal -por ejemplo, de una lágrima- la presencia de enfermedades. De este modo, muchos análisis médicos ya no tendrían que recurrir a la extracción de cantidades macroscópicas de sangre.

2.4.6 Adsorción

Investigadores del Instituto de Química-Física Rocasolano del CSIC estudian las propiedades de adsorción de las denominadas arcillas PILCS (Pillared clays) que, como otros materiales porosos, tienen una gran importancia industrial como catalizadores, materiales para almacenar gases y materiales utilizados en procesos de separación.

Este tipo de arcillas se emplea en procesos como la producción de biofuel a partir de grasas vegetales, el almacenamiento de gas natural a temperatura ambiente o el almacenamiento de gases de efecto invernadero que producen las industrias.

Las arcillas PILCS están formadas por múltiples láminas separadas por una distancia fija. Entre las láminas se encuentran intercaladas de forma aleatoria unas moléculas denominadas pilares.

En Ibercivis, cada trabajo de Adsorción que se envía a los ordenadores de los ciudadanos ejecuta la simulación de la adsorción de un fluido con unas determinadas condiciones ambientales en una configuración de pilares determinada.

La simulación, utilizada conjuntamente con las leyes de la física y mediciones experimentales, permite hacer construcciones ideales que reproducen aspectos y comportamientos de sistemas físicos reales. Esas construcciones, que reciben el nombre de modelos físicos, nos ayudan a comprender los mecanismos por los que están gobernadas y nos permiten hacer predicciones sobre su comportamiento.

Gracias a las simulaciones realizadas por los ordenadores de los ciudadanos se está obteniendo valiosa información acerca del volumen accesible para las moléculas de los fluidos y las propiedades catalíticas de las arcillas en un tiempo muy inferior al que exigirían los cálculos si se realizaran en un único ordenador.

En la imagen: representación bidimensional de una configuración de pilares (circunferencias azules) que ha sido teselada con triángulos de Delaunay. En rojo se representan las zonas por las que no pueden pasar las moléculas de metano.

Gracias a Ibercivis se está obteniendo valiosa información acerca del volumen accesible para las moléculas de los fluidos y las propiedades catalíticas de las arcillas en un tiempo muy inferior al que exigirían los cálculos si se realizaran en un único ordenador

Los resultados obtenidos con la participación de la aplicación de Nanoluz en Ibercivis son:

CONFERENCIAS

Comunicación en panel, titulada: Modelado y simulación de procesos de adsorción en arcillas con pilares intercalados. Autores: Alberto Gallardo Sanz, Noé G. Almarza, Enrique Lomba, Claudio Martín. XVI Congreso de Física Estadística, celebrado en Septiembre del 2009 en la Universidad de Huelva.

2.4.7 Amiloide

Las enfermedades amiloides neurodegenerativas son un grupo de enfermedades que incluyen entre otras la enfermedad de Alzheimer, la enfermedad de Parkinson, la Polineuropatía amiloide familiar (FAP, también conocida como amiloidosis), e incluso enfermedades como la encefalopatía espongiiforme transmisible (comúnmente conocida como "enfermedad de las Vacas Locas") o de los seres humanos (enfermedad de Creutzfeldt-Jakob). Todas estas enfermedades se caracterizan por la formación de agregados de proteína y fibra (el amiloide), tóxico para las células del sistema nervioso, y por lo tanto responsable de la neurodegeneración observada en los pacientes.

La enfermedad de Alzheimer es una enfermedad degenerativa del sistema nervioso central, caracterizada por la pérdida progresiva de memoria y deterioro de las funciones cognitivas que afecta hoy en día a millones de personas en todo el mundo.

La Polineuropatía amiloide familiar (FAP) es una enfermedad degenerativa del trastorno del sistema nervioso periférico que se caracteriza inicialmente por los cambios en la sensibilidad a la temperatura y dolor en las extremidades inferiores y progresa a un estado de debilidad física de todos los pacientes, con múltiples complicaciones. Hay varias focos de la enfermedad en el mundo, Portugal es uno de los principales. El PAF fue identificado en la década de 1950, por el Profesor Corino de Andrade (1906-2005), y desde entonces los esfuerzos para caracterizar la enfermedad y la búsqueda de soluciones terapéuticas para los científicos portugueses y otros alrededor del mundo han sido constantes.

En la imagen: ttr-estabilizadores

El proyecto Amiloide desarrollado sobre la plataforma de Computación Voluntaria Ibercivis pretende buscar

El objetivo de Amiloide es buscar compuestos que puedan interferir con la formación de agregados y fibrillas de amiloide en enfermedades neurodegenerativas como el PAF y la enfermedad de Alzheimer

compuestos que puedan interferir con la formación de agregados y fibrillas de amiloide en enfermedades neurodegenerativas como el PAF y la enfermedad de Alzheimer . Este proyecto computacional es parte de un esfuerzo continuo de la biología estructural y el Centro de Neurociencia Computacional y Biología Celular (CNC) de la Universidad de Coimbra, en la caracterización de los mecanismos moleculares de la formación de amiloide y de la participación de colaboraciones científicas con varios investigadores y extranjeros.

2.4.8 Cuanticables

Desde hace años, estamos presenciando una creciente miniaturización en los dispositivos electrónicos de uso doméstico. Dicha reducción de tamaño ha sido posible gracias a la correspondiente reducción de las componentes que forman parte de los circuitos y elementos internos de los mismos. Estos avances han sido posibles gracias a la mejora en las técnicas de fabricación y manipulación de materiales semiconductores. Dentro de la comunidad científica, hoy se piensa en dar un salto cualitativo en el proceso de miniaturización, mediante la utilización de cables y componentes que contengan sólo unas pocas partículas dentro del material para fabricar dispositivos de escala nano o micrométrica.

En escalas tan pequeñas, el comportamiento de las partículas está regido por las leyes de la Mecánica Cuántica. De esta manera, en estos pequeños cables y dispositivos, los electrones que transportan las corrientes ponen de manifiesto algunas características espectaculares de la naturaleza cuántica. En particular, como consecuencia de la dualidad partícula-onda, los electrones pueden presentar efectos de interferencias en su movimiento, similares a las que presenta la luz.

El objetivo de cuanticables es el de analizar en qué grado afectan los defectos que contienen los materiales en la capacidad que tiene un cable cuántico para conducir la corriente. Para tal fin, investigadores de la Universidad de Buenos

Cuanticables analiza en qué grado afectan los defectos que contienen los materiales en la capacidad que tiene un cable cuántico para conducir la corriente

En la imagen: Cable cuántico

Aires desarrollan un modelo teórico que simula el cable cuántico, las impurezas y los electrodos a los que se conecta el cable cuántico. Estudian en este marco el comportamiento de la corriente que se genera a través del cable cuando se le aplica un voltaje externo y se centran en entender el rol de las impurezas, ya que este ingrediente siempre está presente en los materiales reales.

2.4.9 Aplicaciones futuras

Además de estas aplicaciones, próximamente se va a lanzar :

- **Criticalidad:** Transporte electrónico en sistemas desordenados en la transición de Anderson, del Instituto de Física de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, México. Este proyecto estudia las propiedades de transporte electrónico del modelo de Anderson unidimensional con acoplamientos de largo alcance en el punto de transición metal-aislante (punto crítico),

descrito por el modelo de matrices aleatorias de banda (modelo PBRM, por sus siglas en inglés). En particular se centra en la distribución de la conductancia como función del ancho de banda b del modelo PBRM, del número de terminales M acopladas al sistema y de la fuerza de acoplamiento α de las mismas.

- **Sanidad:** aplicación desarrollada por el Servicio de Radiofísica y P.R. Hospital Universitario Puerta del Mar de Cádiz. La utilización de técnicas de simulación Monte Carlo del transporte e interacción de partículas (fotones, electrones y positrones) tiene una larga tradición en el campo de la Física Médica. Sin embargo presentan una problemática asociada como es los grandes tiempos de CPU necesarios para la realización de algunas problemas concretos e Ibercivis es una plataforma perfecta para afrontar ese problema.

- **Mamografías:** se trata de una aplicación de entrenamiento y simulación de redes neuronales utilizada para optimizar el espacio de entrada en clasificadores neuronales mediante la selección de características. El objetivo es realizar una selección de características para el problema de la clasificación de clústers de microcalcificaciones en mamografías. Esta aplicación está siendo desarrollada por la Universidad de Extremadura.

2.4.10 Cómo acceder a Ibercivis como investigadores

Ibercivis es una plataforma de computación voluntaria dirigida a investigadores de diferentes áreas cuyas necesidades de cálculo son elevadas. Cualquier instituto de investigación puede entrar en contacto con el equipo de Ibercivis. Sólo es necesario rellenar el documento "Cuestionario nuevas aplicaciones" que se encuentra en la web en Ibercivis → Ibercivis → Lanza tu aplicación y enviarlo a desarrollo@ibercivis.es.

Las aplicaciones apropiadas para ser ejecutadas en Ibercivis son aquellas aplicaciones relacionadas con la ciencia que reúnen las siguientes características:

- Interés científico-tecnológico
- Runs segmentables en periodos cortos, sobre 30-60 minutos cada uno.
- Uso de RAM inferior a 500 Mbytes
- Paralelismo nulo
- Input/output bajo para cada job (del orden 1 Mbyte máximo) para no saturar el ancho de banda comercial
- No necesitan licencias
- Necesidad de ejecutar del orden de millones de jobs.

El equipo de desarrollo de Ibercivis analizará los proyectos que se propongan para su ejecución. Aquéllos que cumplan los requisitos, serán aprobados y se colaborará con el grupo de investigadores para realizar los cambios necesarios en el código para que pueda ser ejecutado eficientemente en la arquitectura de Ibercivis.

2.4.11 Cómo participar en Ibercivis como usuario

En primer lugar se debe acceder a la página www.ibercivis.es y seguir los pasos de instalación de BOINC. Para crear una cuenta en BOINC se debe indicar un nick y una dirección de correo válida. A continuación se debe seleccionar Ibercivis en el cuadro "Elegir un proyecto" de BOINC Manager.

Una vez dentro de Ibercivis se permite la elección de las aplicaciones en las que se desea participar marcando la casilla correspondiente.

Ya está todo listo para colaborar con Ibercivis!

3

Ibercivis: Plataforma de divulgación

3.1 Actividades de comunicación

3.1.2 Ibercivis en la web

Si el dotar de potencia de cálculo a los investigadores es el 50% de Ibercivis, el otro 50% es la divulgación científica.

Desde su nacimiento Ibercivis cuenta con una página web donde se puede obtener información sobre el proyecto. Inicialmente se trataba de una página sencilla, con datos relevantes sobre las distintas aplicaciones. En mayo de 2009 se presentó la nueva página. Se actuali-

En la imagen: Página web de Ibercivis

zó el diseño con nuevos contenidos, blogs, hemeroteca, sala de prensa, descargas o las últimas novedades para despertar el interés de la ciudadanía no sólo en la computación ciudadana sino en los contenidos y resultados de las investigaciones que forman parte de esta plataforma.

El diseño y la interactividad de la nueva web responde así a las necesidades y tendencias de la sociedad actual. Además utiliza un gestor de contenidos para facilitar la redacción de los artículos. La información se puede encontrar en español, inglés y portugués.

Un contenido muy interesante de la web es el mapa de visualización de la actividad de Ibercivis en tiempo real: se puede observar cómo los trabajos son enviados por los servidores a los usuarios y de ellos se devuelven los datos a los servidores de almacenamiento.

3.1.2 Publicaciones

Además de las publicaciones realizadas por cada una de las aplicaciones descritas anteriormente, Ibercivis como proyecto ha aparecido en diferentes publicaciones. El 9 de mayo de 2009 fueron publicados en la prestigiosa revista internacional *Physics of Plasmas* (Vol.16, Issue 5)

En la imagen: Mapa de Ibercivis disponible en la web

los resultados de la investigación sobre fusión llevada a cabo en ZIVIS, antecesor de Ibercivis:

Finite orbit width effect in ion collisional transport in TJ-II es el título de esta investigación llevada a cabo por J.L. Velasco, F.Castejón y A.Tarancón. Más información en: <http://link.aip.org/link/?PHP/16/052303>.

También destaca la aparición en la revista *International Science Grid This Week* con una descripción del proyecto: <http://www.isgtw.org/?pid=1001643>

3.2 Actividades de difusión

Premios Ibercivis. En junio de 2009 se realizó un concurso de participación ciudadana que marcó un crecimiento en el número de usuarios. Estos premios fueron financiados por Ibercaja, Sun Microsystems, el Ayuntamiento de Zaragoza, la Diputación Provincial de Zaragoza y HP, que premiaban a las

personas que más créditos en participación en Ibercivis obtuviesen. Las modalidades para participar eran:

Premio Ibercaja para Ibercivis 2009 con un ordenador portátil modelo HP mini 701 por cada comunidad autónoma, además de otro para Ceuta y Melilla.

Premio Ayuntamiento de Zaragoza para Ibercivis 2009 con un ordenador portátil para el ciudadano de la ciudad de Zaragoza con más créditos.

Premio Diputación Provincial de Zaragoza para Ibercivis 2009 con un ordenador portátil modelo HP mini 701 por cada partido judicial de la provincia de Zaragoza.

Premio Hewlett-Packard 2009, con un ordenador portátil para el participante que más créditos obtuviese.

En la imagen: Organizadores y ganadores en la entrega de premios Ibercivis

Premio Sun Microsystems 2009 para los equipos participantes en Ibercivis, consistente en 2 workstations, para el equipo de participantes en Ibercivis que más créditos obtuviese.

La entrega de premios, acto organizado por el Ayuntamiento de Zaragoza, se celebró en julio de 2009, en el Water Digital Pavillion de Zaragoza. La realización de estos premios supuso la aparición en los medios, tanto antes de realizarse el acto como en la entrega de premios.

Ferias: Ibercivis asistió al Pabellón de la Ciencia en Octubre de 2009 en la Feria de Muestras de Zaragoza con el fin de mostrar a los ciudadanos qué es Ibercivis y cómo se puede participar en la investigación científica desde casa. Para ello se preparó un stand con material informativo y personal cualificado para informar a los asistentes y fomentar la participación.

Unidades didácticas para institutos. Se han repartido unidades didácticas de aplicaciones como Fusión, Docking y Materiales en algunos Centros de Enseñanza Secundaria con el fin de promover la participación de los más jóvenes y de ofrecer diferentes conocimientos científicos. Además estas unidades también están disponibles a través de la web para que cualquier usuario las pueda obtener en las páginas de cada aplicación en la zona de descargas.

Charlas en centros de Enseñanza Secundaria. El C.F. Sansueña o el I.E.S Luis Buñuel han sido dos centros en los que se ha realizado una charla informativa de Ibercivis para mostrar a los alumnos como colaborar con la ciencia y aprovechar para explicar algunas de las aplicaciones ejecutadas en Ibercivis como la aplicación de Fusión o la de Docking de Proteínas. En concreto con el C.F. Sansueña se realizó un póster sobre Ibercivis que más tarde sería llevado al Vaticano.

Aparición en medios. Ibercivis ha aparecido en diferentes medios de comunicación. Los premios de Ibercivis en junio de 2009, o el día de Internet en mayo de 2009 son algunos de los actos con apariciones en prensa. También se han realizado entrevistas sobre Ibercivis en la radio en emisoras nacionales y locales. Cabe destacar el apoyo recibido por la Vicepresidenta del Gobierno M^a Teresa Fernández de la Vega junto con el Secretario de Estado de Investigación, Carlos Martínez en la inauguración del Centro Extremeño de Tecnologías Avanzadas (CETA-CIEMAT), ubicado en Trujillo. Más información:

<http://www.hoy.es/20090329/regional/crisis-oportunidad-para-apostar-20090329.html>

En la imagen: Página de Ibercivis en Facebook

Ibercivis: Caso de éxito en el Club de Innovación. Ibercivis aparece en la página del Club de Innovación como caso de éxito en la categoría de Tecnología Comunicaciones y Administración electrónica. Club de Innovación es el área destinada a compartir información sobre cómo se está aplicando la INNOVACIÓN en las diferentes Administraciones Públicas, los mejores proyectos que se están realizando en las diferentes administraciones y por los diferentes proveedores de productos y servicios, siempre bajo el denominador común de la Innovación.

Finalista en los Premios de Internet. Ibercivis fue finalista en la categoría C4 Mejor iniciativa. Más información:

http://premiosdeinternet.org/index.php?body=categoria_top3&id_rubrique=8&orden=hasard&sentido=0

Candidatura a los premios José María Savirón de divulgación científica.

Ibercivis en Facebook. Ibercivis tiene una página de Facebook que cuenta con más de 500 fans. El muro sirve como medio para publicar nuevos eventos y crear debate entre los usuarios. También dispone de vídeos y fotos de las aplicaciones.

4

Expansión del proyecto

4.1 IberoCivis como institución

La consolidación de IberoCivis como Fundación es un paso clave a nivel estratégico e institucional ya que muchas veces falta un perfil más consolidado para obtener ayudas o para participar en proyectos ambiciosos. Esta es la razón por la que durante 2009 se han redactado los Estatutos de la Fundación IberoCivis y se ha invitado a colaborar entre otros al CIE-MAT, al Ayuntamiento de Zaragoza, a la Dirección General de Aragón, al Ministerio de Ciencia e Innovación, red.es/RedIRIS o al CSIC.

Se está trabajando por lo tanto en crear una Fundación sin ánimo de lucro que asegure la permanencia del proyecto y que conceda a este proyecto una estructura formal y un carácter legal. La fundación IberoCivis otorgará a los participantes diferentes tareas y responsabilidades, según su nivel de implicación.

4.2 Portugal

IberoCivis nació como la iniciativa española de computación voluntaria, pero durante 2009 se ha expandido a Portugal adoptando la denominación de iniciativa española y portuguesa. Esta expansión ha sido a nivel de infraestructura, de aplicaciones y a nivel político.

En infraestructura se ha duplicado al scheduling, teniendo actualmente uno en Zaragoza y otro en Lisboa. También dispone de un servidor de upload y download para aplicaciones y un servidor web para alojar la página de Ibercivis.

A nivel de aplicaciones se ha lanzado la aplicación Amiloide llevada a cabo por el Centro de Neurociencia Computacional y Biología Celular

(CNC) de la Universidad de Coimbra. También se están preparando documentos para la difusión y promoción del proyecto y, en el caso de la web, se han traducido los contenidos. Ibercivis cuenta además con su propio dominio www.ibercivis.pt.

Por último, cabe destacar el apoyo recibido desde diferentes instituciones de Portugal. La charla realizada en Portugal en julio de 2009 contó con la presencia del ministro del MCTES D. José Mariano Rebelo Pires Gago, acompañado por Luis Magallães presidente del UMIC (Agência para a Sociedade do Conhecimento). También participan en el proyecto el LIP, Laboratório de Experimentação e Física de Partículas, el CNC (Centro de Neurociências e Biologia Celular, Universidade de Coimbra), el FCCN (Fundação para a Compu-

En la imagen: Organigrama de funcionamiento propuesto para la Fundación Ibercivis.

tação Científica Nacional) y Ciência Viva, que colabora en materia de comunicación y divulgación. El proyecto Ibercivis se lanzó oficialmente en Portugal el 23 de febrero de 2010.

4.3 Iberoamérica como punto de referencia

Tras la expansión de Ibercivis a Portugal se está preparando una fase de expansión a Iberoamérica, un punto clave en la estrategia del proyecto. En esta fase de expansión se realizarán charlas en diferentes medios de comunicación y presentaciones en Centros de Enseñanza de Secundaria. Para ello se elaborarán y repartirán unidades didácticas y el personal cualificado se desplazará a La Habana y Buenos Aires para coordinar las tareas de comunicación.

Estas tareas se encuentran dentro de los proyectos de Colaboración Hispano-Argentina y Colaboración Hispano-Cubana que en noviembre de 2009 recibieron la aprobación de ayudas del plan Nacional de I+D, Subprograma Fomento de Cooperación Científica Internacional (FCCI) en la modalidad ACI-promociona. También se desarrollará con estas ayudas la creación de un Congreso de carácter internacional en Cuba durante el año 2010 en el que el responsable técnico de Ibercivis hablará de Computación Voluntaria y presentará Ibercivis.

Además de Cuba y Argentina, próximamente se lanzará en Ibercivis una aplicación de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla en México. Ibercivis encuentra aquí una oportunidad excelente para hacer difusión del proyecto en este país, mediante la aparición en los medios o la realización de charlas.

4.4 Proyección europea

Ibercivis participa en 2 importantes propuestas a nivel europeo del VII Programa Marco:

- EDGI: Interconexión de Grids, Desktop Grids y Clouds a nivel Europeo.
- DEGISCO (Desktop Grid for International Scientific Collaboration): Expansión de Desktop Grids.

5

Proyectos y subvenciones

Durante 2009, Ibercivis recibió fondos del Ministerio de Ciencia e Innovación, de la Dirección General de Aragón, de Ibercaja, del Ayuntamiento de Zaragoza y por supuesto de todos los organismos participantes.

Los premios celebrados en junio de 2009 fueron patrocinados por el Ayuntamiento de Zaragoza, Ibercaja, la Diputación Provincial de Zaragoza, HP Y Sun Microsystems, consistentes en varios ordenadores portátiles y workstations para los ciudadanos con mayor participación en Ibercivis. Además el acto de entrega de los premios fue organizado por el Ayuntamiento de Zaragoza en el Water Digital Pavillion con la asistencia de numerosos invitados.

Además, Ibercivis cuenta con estas subvenciones (concedidas en 2009) para realizar diferentes actividades a lo largo de 2010:

- **Acciones complementarias**
Título: IBERCIVIS, la ciencia en casa.
Ref: TIN2009-07010-E/TIN
- **ACI- promocióna**
Titulo: Cooperación Hispano-Cubana en temáticas de Computación Avanzada. Ref: ACI2009-1027
Titulo: Cooperación Hispano-Argentina en temáticas de Computación Avanzada. Ref: ACI2009-1033
- **Convenio de colaboración con la Dirección General de Aragón.**
- **Convenio de patrocinio con Ibercaja.**

6

Equipo de trabajo

El equipo de trabajo de Ibercivis se compone del área de **Dirección, Desarrollo, Investigación y Comunicación**.

Ibercivis es una plataforma impulsada por centros de investigación de toda España procedentes de diversas áreas de conocimiento:

Centro Extremeño de Tecnologías Avanzadas (CETA) - Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT). Ministerio de Ciencia e Innovación.

Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). Ministerio de Ciencia e Innovación.

RedIRIS. Ministerio de Ciencia e Innovación.

Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI) de la Universidad de Zaragoza

Por parte portuguesa participan

LIP, Laboratório de Experimentação e Física de Partículas

CNC, Centro de Neurociências e Biologia Celular, Universidade de Coimbra

FCCN, Fundação para a Computação Científica Nacional

Ciência Viva, Agência Ciência Viva

Además, Ibercivis cuenta con la colaboración de corporaciones locales como el Ayuntamiento de Zaragoza y de diversas instituciones públicas y privadas interesadas en el fomento de la cultura científica y la participación de la ciudadanía en el desarrollo de la investigación española.

En líneas generales, la distribución de tareas entre los organizadores es la siguiente:

BIFI: Coordina el proyecto.

CETA-CIEMAT: Aporta recursos de almacenamiento.

CSIC: Aporta investigadores y desarrolla tareas de difusión.

RedIRIS: Proporciona servicios de redundancia y seguridad.

LIP: aporta recursos de almacenamiento.

CNC, FCCN: Aportan investigadores y coordinan el proyecto en Portugal

Agencia Ciencia Viva: Desarrolla y coordina tareas de difusión en Portugal

El equipo de trabajo de Ibercivis en el BIFI está compuesto por (de izquierda a derecha): Francisco Sanz, Darío Ferrer, Alejandro Rivero, Elisa Cauhé, Fermín Serrano, Jose Félix Saénz, Beatriz Antolí, Alfredo Ferrer, Alfonso Tarancón y Gonzalo Ruiz.

Centros

Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos (BIFI)

El Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos es un instituto de investigación de la Universidad de Zaragoza que promueve la interdisciplinariedad en el desarrollo de investigación competitiva en las áreas de computación aplicadas a la física de sistemas complejos y modelos biológicos. Además de la investigación en ciencia básica, un punto fundamental del instituto es la transferencia de tecnología entre la universidad y el mundo empresarial.

Para llevar a cabo estos objetivos, el BIFI cuenta con el trabajo de investigadores de áreas diferentes cuya colaboración está llevando a sinergias muy significativas. En particular, expertos en supercomputación, físicos trabajando en ciencia de materiales, química cuántica o redes complejas, y biólogos trabajando en problemas estructurales como desarrollo de fármacos y plegamiento de proteínas.

Más información: www.bifi.es

Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

La Agencia Estatal Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) es la mayor institución pública dedicada a la investigación en España y la tercera de Europa. Adscrita al Ministerio de Ciencia e Innovación, a través de la Secretaría de Estado de Investigación, su objetivo fundamental es desarrollar y promover investigaciones en beneficio del progreso científico y tecnológico, para lo cual está abierta a la colaboración con entidades españolas y extranjeras.

El CSIC desempeña un papel central en la política científica y tecnológica, ya que abarca desde la investigación básica a la transferencia del conocimiento al sector productivo. El motor de la investigación lo forman sus centros e institutos, distribuidos por todas las comunidades autónomas, y sus más de 12.000 trabajadores, de los cuales más de 3.000 son investigadores en plantilla y otros tantos doctores y científicos en formación. El CSIC cuenta con el 6 por ciento del personal dedicado a la Investigación y el Desarrollo en España, que genera aproximadamente el 20 por ciento de la producción científica nacional. Además, gestiona un conjunto de importantes infraestructuras, la red más completa y extensa de bibliotecas especializadas y cuenta con unidades mixtas de investigación.

Más información www.csic.es

El equipo de trabajo de Ibercivis en el CSIC. En primera línea y de izquierda a derecha: Aurelio Herrero, Pilar Tígeras (Vicepresidenta Adjunta de Organización y Cultura Científica) y Víctor Castelo, entre otros miembros investigadores y de personal de comunicación.

Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT) y Centro Extremeño de Tecnologías avanzadas

El **CIEMAT**, adscrito al Ministerio de Ciencia e Innovación, es un Organismo Público de Investigación de excelencia en materias de energía y de medio ambiente, así como en múltiples tecnologías de vanguardia y en diversas áreas de investigación básica.

Desde su creación en 1951, entonces JEN, y desde 1986 como CIEMAT, lleva a cabo proyectos de investigación y desarrollo tecnológicos, sirviendo de referencia para representar técnicamente a España en los foros internacionales y para asesorar a las administraciones públicas en materias de su competencia.

El CIEMAT está diversificado tecnológica y geográficamente, para atender las necesidades de I+D en España en general y en sus Comunidades Autónomas en particular. La actividad del CIEMAT se organiza en torno a proyectos de investigación que sirvan de puente entre la I+D y el interés social.

El equipo humano del CIEMAT está formado por, aproximadamente, 1.200 personas, de las que el 47% son titulados universitarios.

Más información: www.ciemat.es

El equipo de trabajo de Ibercivis está compuesto por: (de izquierda a derecha) Ramón Gavela, Begoña Bermejo, Stefano Troiani, Isabel Redondo y Paco Castejón, entre otros miembros investigadores, técnicos de sistemas y de personal de comunicación.

El **Centro Extremeño de Tecnologías Avanzadas (CETA)** es un centro del CIEMAT dedicado a la investigación, desarrollo y servicio en tecnologías de la información y de las comunicaciones en beneficio de la ciencia, la industria y la sociedad en general, en los ámbitos extremeño, español, europeo y latinoamericano.

El núcleo del CETA-CIEMAT es un centro de computación basado en GRID. Forma parte de la red europea de centros GRID (la red EGEE en la actualidad) y es centro impulsor de la red latinoamericana de centros GRID (en particular el proyecto EELA).

En este sentido, el CETA-CIEMAT es impulsor activo de programas de eCiencia, entendida como las actividades científicas a gran escala que se desarrollan mediante colaboraciones globales distribuidas entre instituciones científicas de diversa índole alrededor del mundo.

La misión del Centro es contribuir de manera decisiva a la consolidación y difusión de la eCiencia y de las tecnologías de la información, especialmente GRID, como sustrato tecnológico fundamental para el desarrollo de programas científicos, industriales y sociales a nivel nacional, europeo y latinoamericano, y con los países de la cuenca del mediterráneo.

Red Académica y de Investigación española (RedIRIS)

RedIRIS es la red de comunicación avanzada de la comunidad académica y científica española, fundada en 1988. Cuenta con más de 360 instituciones académicas y de investigación afiliadas, que agrupan a más de 150.000 investigadores y aproximadamente 2 millones de usuarios potenciales. Está financiada por el Ministerio de Ciencia e Innovación, e incluida en su mapa de Instalaciones Científico Tecnológicas Singulares. Se hace cargo de su gestión la entidad pública empresarial red.es, del Ministerio de Industria, Turismo y Comercio.

Más información: <http://www.rediris.es> y <http://www.red.es>

El equipo de trabajo de Ibercivis en RedIRIS está compuesto por: (de izquierda a derecha) Antonio Fuentes, Tomás de Miguel, Cristina Lorenzo.

Laboratorio de Instrumentación y Física Experimental de Partículas (LIP)

El LIP es una asociación científica y técnica de utilidad pública que tiene como objetivos la investigación en el campo de la Física Experimental de Altas Energías y de la Instrumentación Asociada.

Los campos de investigación del LIP han crecido hasta abarcar el Campo Experimental de Altas Energías Física y Astropartículas, Detección de la radiación Instrumentación, Adquisición de Datos y Procesamiento de Datos, Informática Avanzada y aplicaciones en otros campos, en particular la Física Médica.

En sus dos laboratorios en Coimbra y Lisboa, el LIP tiene alrededor de 170 personas, de las cuales más de 70 tienen un doctorado, y muchos son profesores en universidades locales.

Más información: <http://www.coimbra.lip.pt/>

Centro para la Neurociencia y Biología Celular (CNC)

El Instituto de Investigación Centro para la Neurociencia y Biología Celular (CNC), se ha comprometido con la excelencia en la biociencia y la biomedicina. Fue el primer Laboratorio Asociado en Portugal, y es parte de la Red Europea de Institutos de Neurociencias (ENI). El CNC también está involucrado en colaboraciones entre el Gobierno portugués y el Instituto de Tecnología de Massachusetts (MIT) y Harvard Medical School (HMS).

El CNC trae a investigadores de las Facultades de Medicina, Farmacia y Ciencia y Tecnología de la Universidad de Coimbra, así como de los Hospitales Universitarios (HUC) y la Industria Farmacéutica. Los diversos antecedentes científicos han sido cruciales en la promoción de la innovación en la investigación básica y traslacional.

Más información: <http://www.cnbc.pt/>

Fundación para la Computación Científica Nacional (FCCN)

FCCN es una entidad privada sin fines de lucro de carácter público que comenzó a funcionar en enero de 1987. Desde entonces, con el apoyo de varias universidades e instituciones de I + D nacionales, FCCN ha contribuido a la expansión de Internet en Portugal.

La actividad principal del FCCN ha sido la planificación, gestión y funcionamiento de la Red de Ciencia, Tecnología y Sociedad (ECA), una red de alto rendimiento para las instituciones con mayores requerimientos de comunicaciones, lo que constituye una plataforma de experimentación para aplicaciones y servicios avanzados de comunicaciones.

La ECA es una red informática que utiliza protocolos de Internet para proporcionar una plataforma de comunicación y colaboración entre las instituciones de la educación, la ciencia, la tecnología y la cultura.

Aparte de la gestión de la ECA, FCCN es la entidad responsable de gestionar las áreas de servicio de registro .pt.

Más información: <http://www.fccn.pt/>

Ciência Viva - Agência Ciência Viva

Ciencia de Vida fue creado como una dependencia del Ministerio de Ciencia y Tecnología, mediante el Decreto No. 6/MCT/96 de 01.07.1996, teniendo que apoyar las acciones encaminadas a promover la ciencia y la tecnología en la sociedad portuguesa con especial énfasis en los jóvenes y la población escolar de primaria y secundaria.

Mediante escritura pública del 17 de julio de 1998, se formó la Asociación Ciência Viva - Agencia Nacional para la Cultura Científica y Tecnológica, con la publicación en el RD Serie III, N.º 256/98 de 05 de noviembre 1998.

Más información: <http://www.cienciaviva.pt/home/>

Organizadores

Instituto de **L**icomputación
y **f**ísica de sistemas complejos

Ciemat
Centro de Investigaciones
Energéticas, Medioambientales
y Tecnológicas

ibercivis

Patrocinadores

Colaboradores