

La supercomputadora más poderosa de AL

KanBalam sitúa a México en la frontera del conocimiento

• En menos de cinco meses ha otorgado más de dos millones de horas de servicio a la ciencia • Ya ha logrado repatriar al país varios proyectos

⇒ 3

TESTIMONIOS

- Es un privilegio trabajar con la supermáquina
- Incrementa la capacidad de investigación
- Abre horizontes cualitativamente diferentes
- Permite operaciones que antes eran impensables

⇒ 4-5



Ciudad Universitaria
11 de junio de 2007
Número 3,991
ISSN 0188-5138

UNAM
ideas en Libertad

Gaceta

ÓRGANO INFORMATIVO DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO



► El simulador matemático opera en tiempo real y ahorra distancias y recursos económicos

Crean un *software* tridimensional para monitorear la presa El Cajón

► Desarrollo de investigadores y alumnos de la Facultad de Ingeniería ► Utilizaron el *Ixtli*, la tecnología más avanzada de realidad virtual ► Puede anticipar situaciones de riesgo en la hidroeléctrica nayarita

⇒ 8-9



El *software* permite una visión en 3D del conjunto y prueba funcionamientos más seguros. Asimismo analiza el comportamiento real de la estructura en diversas condiciones de escurrimiento.

COMUNIDAD

Acredita
Contaduría
sus tres
programas
de licenciatura

Contaduría, Administración e Informática fueron avaladas por cinco años más

⇒ 6

VOCES ACADÉMICAS

Francisco Fernández

Cómo las neuronas liberan serotonina

⇒ 11

Trabajar con la supermáquina, un privilegio que abre horizontes



Luis Antonio Pérez. Foto: Justo Suárez.



Lenin Domínguez y Daniel Adriano Silva. Foto: Víctor Hugo Sánchez.

LAURA ROMERO

Luca Ferrari, del Centro de Geociencias, campus Juriquilla, realiza modelados tridimensionales del interior de la Tierra, en lo que se conoce como geodinámica computacional.- Como si fuera una máquina del tiempo, la supercomputadora me permite ir mucho más atrás, modelar numéricamente lo que ha ocurrido en el pasado y entender la situación actual. Tal información contribuye al conocimiento de procesos globales del planeta.

Daniel Adriano Silva, estudiante de la Facultad de Medicina, revisa dinámicas moleculares de proteínas que requieren procesos intensivos de cómputo.- Con la llegada del nuevo equipo nuestra capacidad de investigación se incrementó fuertemente. Antes contábamos con sólo ocho procesadores y ahora tenemos acceso a 150. Eso significa reducir 20 veces el tiempo para la obtención de resultados y en sólo tres meses hemos hecho el equivalente a seis años de trabajo con un solo procesador.

Como estudiante, es un privilegio trabajar con KanBalam. Cuando comencé mi proyecto de maestría nunca pensé que podría hacer uno de tal dimensión; imaginé hacer algunas simulaciones y obtener algunos datos de cómo se realiza el proceso dinámico de una proteína en específico, de 238 aminoácidos. Usando la supermáquina pude hacer un estudio detallado.

Pedro Colín Almazán, del Centro de Radioastronomía y Astrofísica, con sede en Morelia, hace simulaciones de formación de estructura cósmica a gran escala y analiza las inestabilidades en discos estelares.- En los últimos meses he corrido todos los días en KanBalam dos clases de trabajos, uno de simulaciones de formación de estructura cósmica a gran escala, en un código paralelizado con memoria compartida, que utiliza un nodo de cálculo regular de los 337 que posee la supercomputadora. Algunos de estos procesos, como el estudio de un halo cósmico formado por 16 millones de partículas, utilizan más de ocho gigas de RAM; entonces se emplea uno de los cinco nodos especiales.

En el otro caso se hacen comparaciones —mediante simulaciones con este equipo— cuyo estudio es más cercano a la dinámica que a la cosmología.

Chumin Wang Chen, del Instituto de Investigaciones en Materiales, realiza cálculos cuánticos de un material nanoestructurado luminescente llamado silicio poroso.- La KanBalam me ha abierto horizontes cualitativamente diferentes, que me permiten abordar cuestiones que antiguamente no era posible tratar. Un centímetro cúbico de cualquier material tiene 10^{23} átomos, cantidad que implica plantear el mismo número de ecuaciones diferenciales acopladas. Para ese problema no hay solución

analítica ni numérica; sólo se hacen aproximaciones. Con este nuevo instrumento es posible realizar esos estudios de manera más precisa y cercana a los resultados experimentales.

Marcela Regina Beltrán Sánchez, también de Investigaciones en Materiales, se dedica a hacer cálculos de simulaciones de nanomateriales, en específico, nanocúmulos metálicos.- Hace dos años y medio inicié un trabajo relativo a cúmulos de agua con oro. Una partícula metálica es capaz de atraer a muchísimas moléculas del vital líquido y cambiar la naturaleza de enlace entre éstas, haciéndolo dos veces más intenso. Dicho resultado, sofisticado e imposible de hacer antes de la puesta en marcha de la supercomputadora, hoy por fin fue obtenido. Gracias a KanBalam hemos hecho el trabajo de un par de años en un mes. En periodos, se han usado 480 procesadores de la máquina a la vez, día y noche, todos los días, al ciento por ciento.

Lenin Domínguez, estudiante posdoctoral que realiza su estancia en la Facultad de Medicina.- La experiencia con esta supermáquina ha sido interesante. He podido integrar la parte experimental, que toma minutos, con la teórica o de cómputo, que implicaría semanas. Ahora no sólo tengo la experiencia en el laboratorio, sino también una herramienta de predicción computacional. Eso me ha permitido plantear preguntas complejas y resolverlas, así como establecer nuevas.

Ya no pienso en lo que no puede hacerse, sino qué voy a hacer ahora. Se abre el horizonte de investigación. Antes de la supercomputadora nos ocupábamos de mantener nuestros pequeños clusters en buen estado y administrar personalmente los trabajos, es decir, en aspectos que ahora están automatizados o atendidos por personal especializado. Eso es otra ganancia.

Javier Ballesteros Paredes, del Centro de Radioastronomía y Astrofísica, busca, entre otros trabajos, entender cómo se forman las estrellas.- Me he apoyado en la supermáquina para hacer simulaciones de alta resolución—con mil millones de elementos—con la meta de comprender cómo se forman las estrellas desde que son nubes. De ese modo, he simulado un fragmento de galaxia, de aproximadamente tres mil años luz alrededor del Sol.

Para realizar la investigación he usado 128 de los procesadores de KanBalam, ya que se trata de cálculos complejos y sofisticados. Sin ella no podría hacerse esta investigación. Esto nos da independencia en cuanto al tipo de labor que queremos desarrollar y nos permite competir con el resto de colegas en Estados Unidos, Europa y Asia.

El medio interestelar y la galaxia son turbulentos. Éste es un parámetro importante en las simulaciones y se quiere entender su papel en promover o evitar la formación estelar. Creo que la turbulencia tiene un papel destacado en definir la masa final de las estrellas. De no existir KanBalam no podríamos probar esta idea.

Miguel Alcubierre, del Instituto de Ciencias Nucleares, estudia la colisión de dos agujeros negros con diferentes configuraciones orbitales, de masa y de espín.- Recuerdo que hace seis meses sólo podían realizarse las simulaciones en supercomputadoras de otros países. Esta situación ha cambiado radicalmente por la KanBalam, ya que con ella pueden obtenerse resultados en un par de días, en vez de tener que aguardar semanas en las listas de espera de máquinas extranjeras.

Juan Raúl Álvarez Idaboy, de la Facultad de Química, realiza estudios químico-cuánticos.- Gracias al equipo de supercómputo, en un tiempo relativamente corto he podido establecer el mecanismo de la reacción Baeyer-Villiger, de gran importancia en la síntesis orgánica.

Se han realizado operaciones de alto nivel, impensables sin la computadora. La correspondencia entre esos cálculos y los resultados experimentales permiten asegurar que el mecanismo propuesto es correcto. Ningún otro grupo de investigación mexicano se ha ocupado del tema y al parecer sólo hay estudios recientes al respecto en Japón, Canadá y Finlandia.

Ángel Piñero, de la misma facultad, estudia el comportamiento dinámico/estructural de diversos sistemas moleculares a escala atómica.- Las simulaciones permiten



Alejandro Sosa. Foto: Justo Suárez.

visualizar el movimiento de macromoléculas en la pantalla de la computadora como si fuese una película, además de cuantificar parámetros energéticos y estructurales que, muchas veces, no son accesibles de otra forma.

Con la supercomputadora se ha mejorado significativamente la capacidad de cómputo, porque no sólo se puede ir 2.5 veces más rápido en cada simulación, sino también lanzar más procesos de forma paralela. Esto repercute positivamente en la productividad y en la calidad de los trabajos.

Alejandro Sosa Pinado, de Medicina, analiza la interacción entre proteínas y sus ligandos.- Con KanBalam se simula la interacción de una proteína de unión de aminoácidos que se encuentra en el periplasma de bacterias, y que mantiene su estructura en muchos tipos de organismos, con sus ligandos. En tres meses de trabajos con el equipo he reproducido el comportamiento de esa proteína. Con la supercomputadora se busca entender cómo rediseñar proteínas para que adquieran nuevas propiedades. Tal es el objetivo a largo plazo.

Luis Antonio Pérez, del Instituto de Física, estudia las propiedades electrónicas y



Chumin Wang. Foto: Fernando Velázquez.

estructurales de nanocúmulos metálicos y bimetálicos, y desarrolla una teoría unificada de la superconductividad.- Como becario he empleado el supercómputo desde sus inicios en la UNAM. Con la KanBalam hay una mejoría notable y por eso recorro a ella constantemente. El cómputo paralelo de la nueva máquina deriva en una rapidez sorprendente para obtener resultados.

Carlos Bunge, del Instituto de Física, analiza la estructura electrónica de los átomos y de las moléculas.- Con KanBalam puedo hacer cálculos que antes eran inimaginables, para analizar las diferentes configuraciones que pueden adquirir diversos tipos de moléculas, sobre todo las que no se conocen; es decir, se determinan nuevas especies, tanto estables como de corta vida.

Por su memoria RAM y en disco, así como por el número de procesadores, es posible entender y predecir mecanismos de reacciones químicas. Gracias a eso, trabajos que hubieran llevado años, ahora se hacen en semanas. La uso desde que entró en operación y todo el tiempo hay uno o varios programas míos corriendo en la máquina. *g*



Marcela Beltrán. Foto: Fernando Velázquez.