



# Universidad Nacional Autónoma de México

## Facultad de Estudios Cuautitlán

### Servicios de Cómputo Avanzado para e - Ciencia

**Jesús Cruz Guzmán**  
CUDI/CLARA-TT / UNAM  
[cruz@unam.mx](mailto:cruz@unam.mx)



# *Antecedentes*

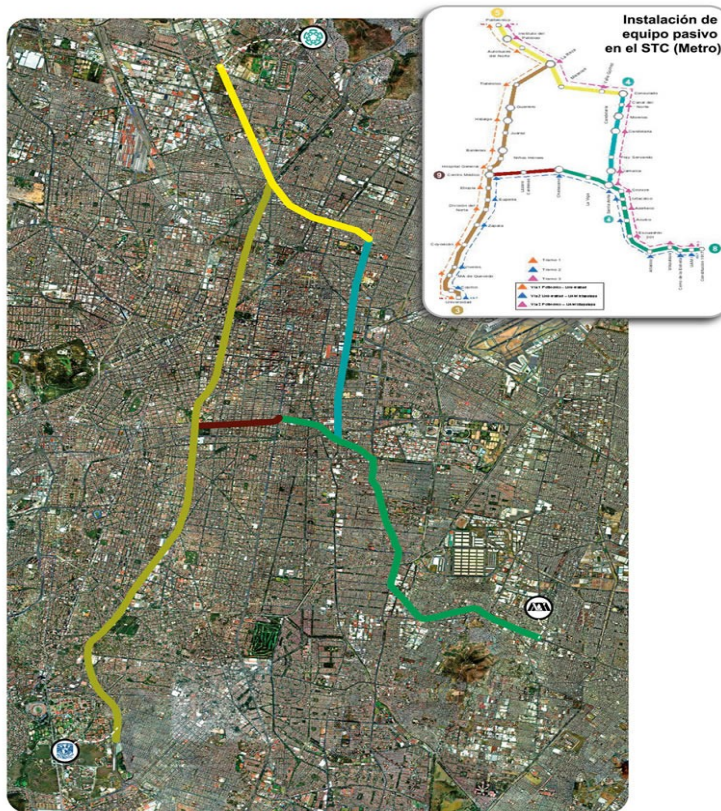
- Proyecto GRAMA (Grid experimental en México)
  - Participación en el proyecto PRAGMA
  - Formación de un equipo de respuesta a emergencias de seguridad en cómputo
  - Comunidad CUDI de Grid's
  - Laboratorio Nacional de Grids de Supercómputo
- 
-

# Laboratorio Nacional de Cómputo de Alto Desempeño de Alto Desempeño

LANC  
CAD



## Tramos de última milla



Cinvestav  
(4.6 km)

UAM  
(1.2 km)



UNAM  
(1.3 km)

# Grid service evolution



9/2010 - 8/2012

4/2008-3/2010

7/2006-12/2007

## Formación de Recursos Humanos

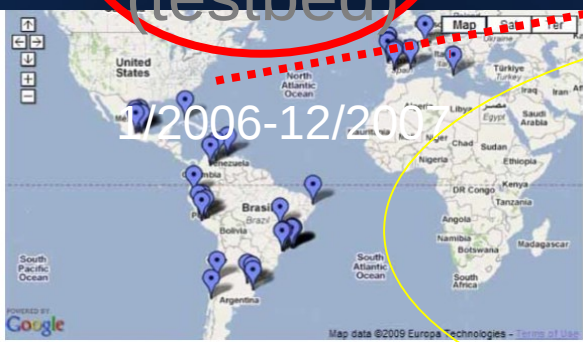
**EPIKH**  
Exchange Programme to advance e-Infrastructure Know-How

HOME DOCUMENTS EVENTS TOOLS & FACILITIES NEWS & GRANTS

**PARTNERS**

One of the biggest strengths of EPIKH is just its "inclusiveness". Indeed, the consortium of members gathers 23 renowned Institutions from 18 countries of 4 continents.

No. 1	CORNET	No. 2	MTA&ITAKI	No. 3	CIEMAT	No. 4	UFRNS
No. 5	ERS	No. 6	CSIR	No. 7	BHEP	No. 8	CESTN
No. 9	CEPET-RIJ	No. 10	ISI	No. 11	JUNET	No. 12	CESTN
No. 13	UTIC	No. 14	PRU	No. 15	SCS-TAU	No. 16	CHRIST
No. 17	RIJKA	No. 18	CHRS	No. 19	UPRJ	No. 20	UNAM
No. 21	INFN	No. 22	GRNET	No. 23	UCT		



# JRU-MX (2009)



C000/136/09



**DIRECCIÓN ADJUNTA DE DESARROLLO  
CIENTÍFICO Y ACADÉMICO**

"2009, Año de la Reforma Liberal"

México D. F., a 4 de junio de 2009

**Consortio JRU- MX para el desarrollo GRID (Mexican Joint Research Unit)  
PRESENTE**

El Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT), reconoce al Consortio JRU-MX para el desarrollo GRID (Mexican Joint Research Unit), conformado por: Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Corporación Universitaria para el Desarrollo de Internet, A. C., Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey, Instituto Politécnico Nacional, Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Universidad de Sonora, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo y Universidad Nacional Autónoma de México, como órgano para promover el desarrollo de una infraestructura de e-ciencia y GRID en México.

El CONACYT apoya las iniciativas y actividades del Consortio a nivel nacional e internacional, en particular esfuerzos y proyectos de investigación, innovación y desarrollo orientados hacia la conformación de tal infraestructura de e-ciencia; apoya asimismo su firme intención de extender y consolidar el consorcio hacia una iniciativa nacional de GRID (National GRID Initiative, NGI) que deberá integrarse a corto/mediano plazo a la iniciativa regional de GRID (Latin American GRID Initiative).

**Atentamente,  
El Director Adjunto**

A handwritten signature in black ink, appearing to read "José Antonio de la Peña", is written over a horizontal line.

**Dr. José Antonio de la Peña**

# *JRU-MX, Instituciones integrantes*

- Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada,
- Corporación Universitaria para el Desarrollo de Internet, A.C.,
- Instituto Tecnológico de Veracruz,
- Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey,
- Instituto Politécnico Nacional,
- Universidad Politécnica del Estado de Morelos\*
- Universidad Autónoma del Estado de Morelos,
- Universidad de Sonora,
- Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo,
- Universidad Nacional Autónoma de México
- Universidad Autónoma de Aguascalientes\*
- Universidad Juárez Autónoma de Tabasco\*

\* en proceso de incorporación

# Plan de Actividades

## - Administración y Desarrollo de Servicios

### Servicios operando

- *Servicios de Red*
- *Grid*

### Incorporación de nuevos servicios

- *Cloud*
- *Cómputo de alto desempeño HPC*
- *Servicios de instrumentación remota RIS*

### Desarrollo de nuevos servicios

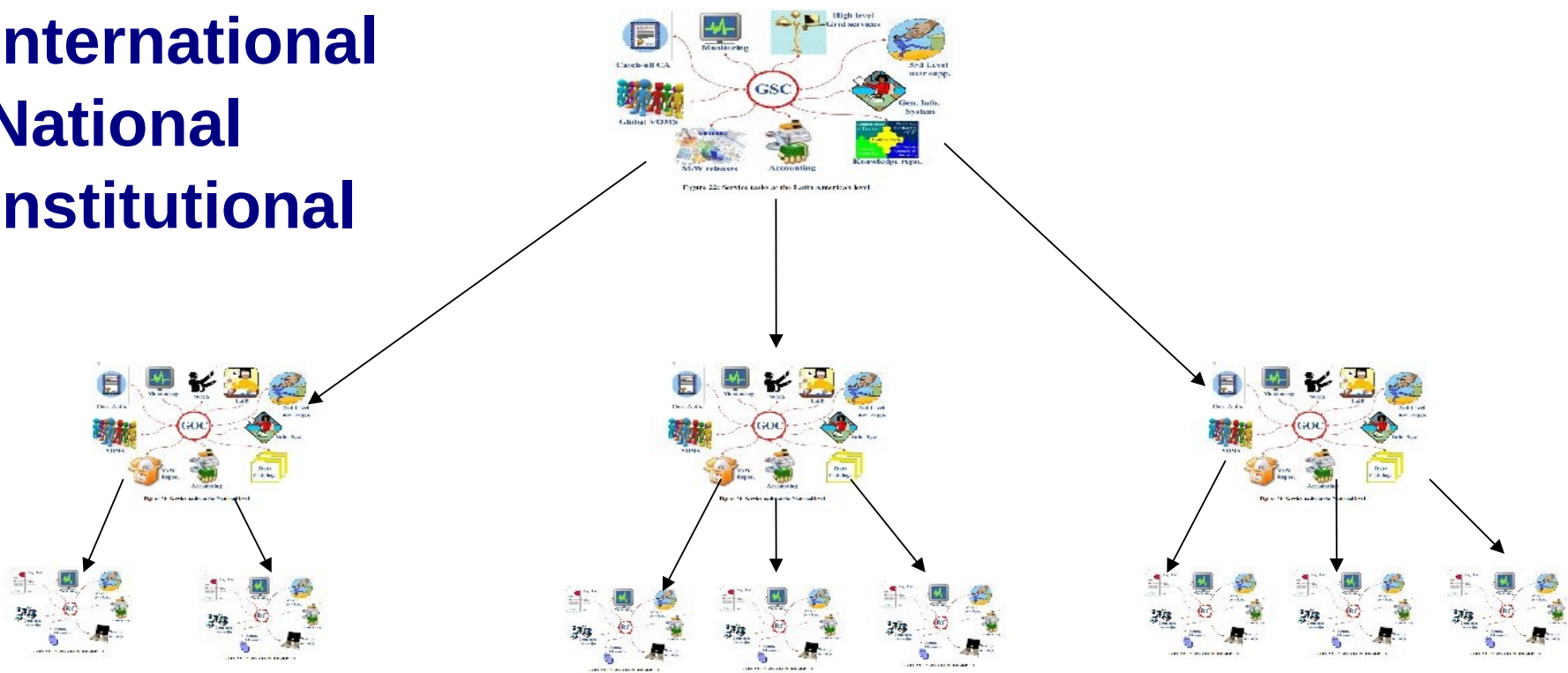
- *Nuevas aplicaciones por campo de especialidad*
- *Integración de Aplicaciones: meta aplicaciones*
- *Tecnologías para móviles*

# Servicios de Grid



# Modelo de servicios de Grid de tres capas

**International  
National  
Institutional**



# Resource Operation Center for Latin America ROC - LA



Iniciativa de:

Universidad Nacional Autónoma de México,

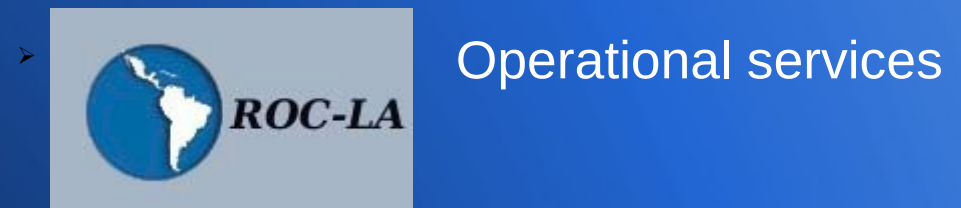
Universidad de los Andes de Colombia y

Centro Brasileiro de Investigaciones Físicas,

# Soporte Internacional de e-Infraestructura



## Infraestructura de Grid interoperable con EGI



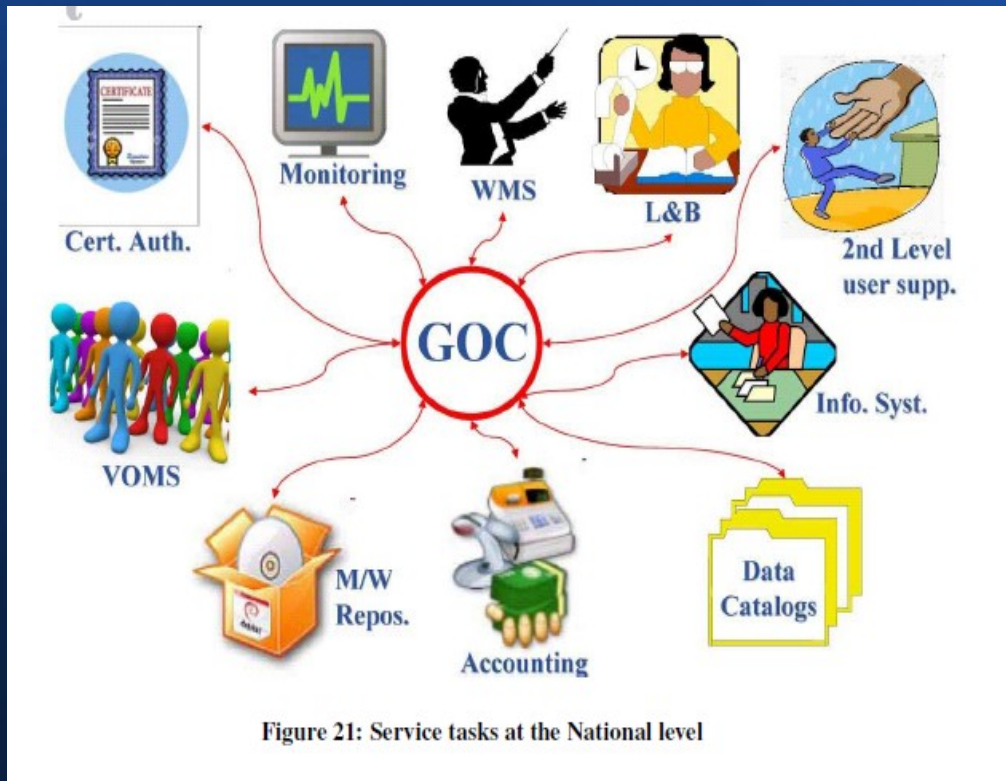
Universidad Nacional Autónoma de México,  
Universidad de los Andes de Colombia y  
Centro Brasileiro de Investigaciones Físicas.

GISELA VO: [prod.vo.eu-eela.eu](http://prod.vo.eu-eela.eu)

➤ Soporte a servicios centrales:  
VOMS, MyProxy, BDII-TOP, WMS-LB, LFC, AMGA, UI, CREAM-CE, SE

➤ [grid-unam@googlegroups.com](mailto:grid-unam@googlegroups.com)

# GOC-MX



Equipo para administración de recursos

Equipo para soporte a usuarios

Equipo para soporte de aplicaciones

Equipo para capacitación y entrenamiento

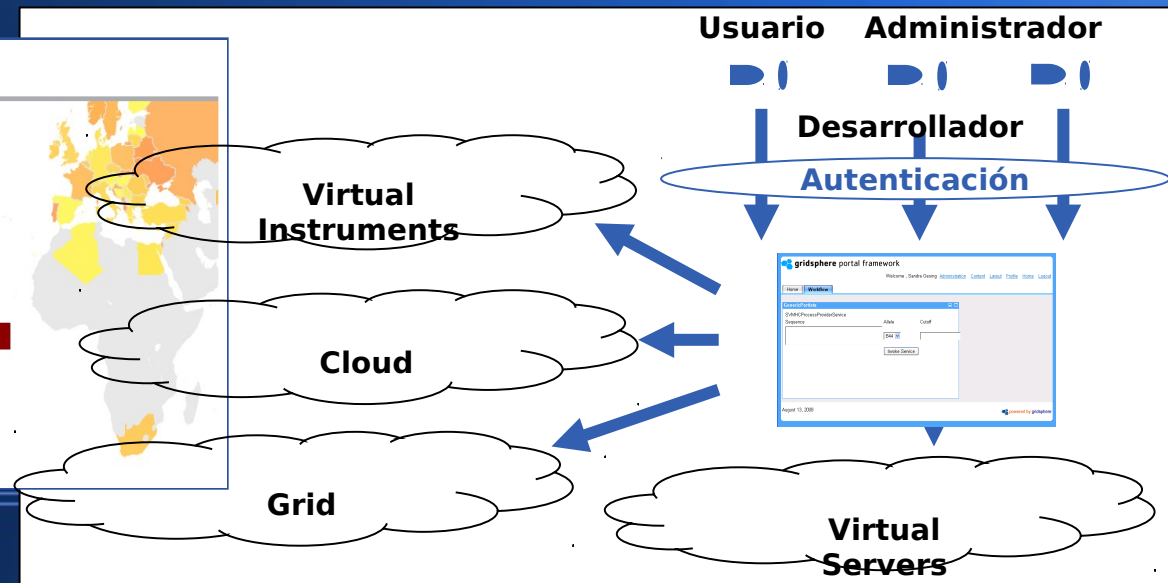
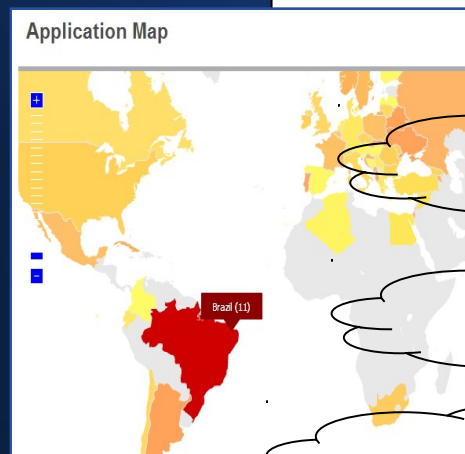
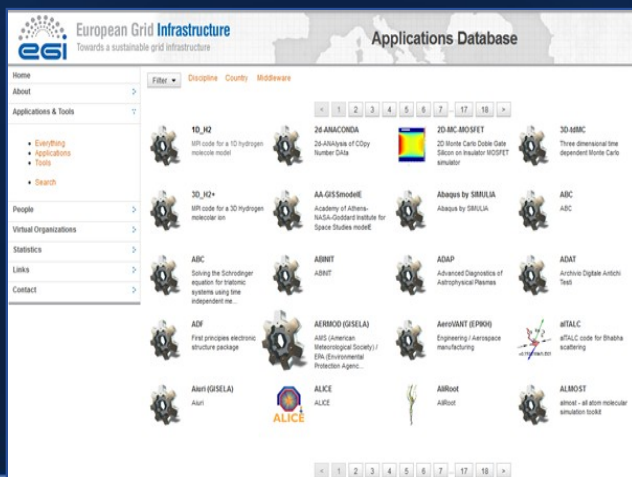
Creación de RA's

# Science Gateway

# Un acceso para e-Ciencia

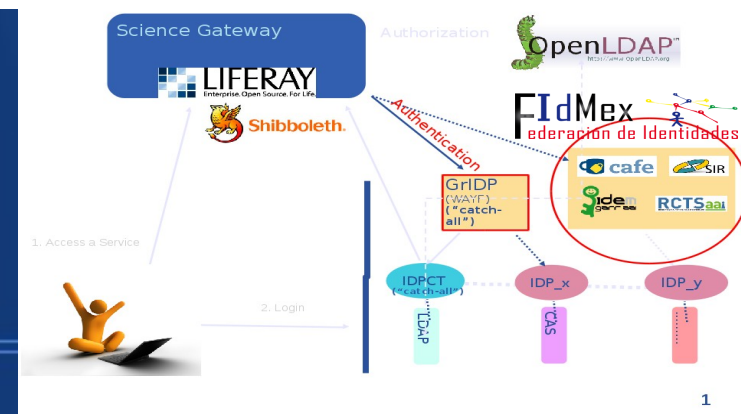
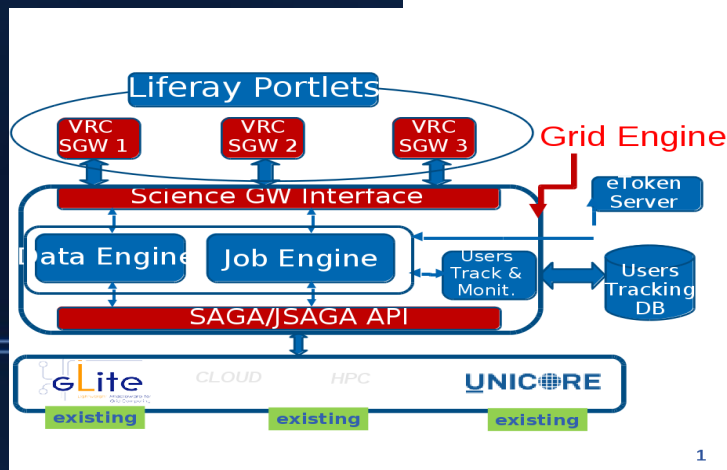
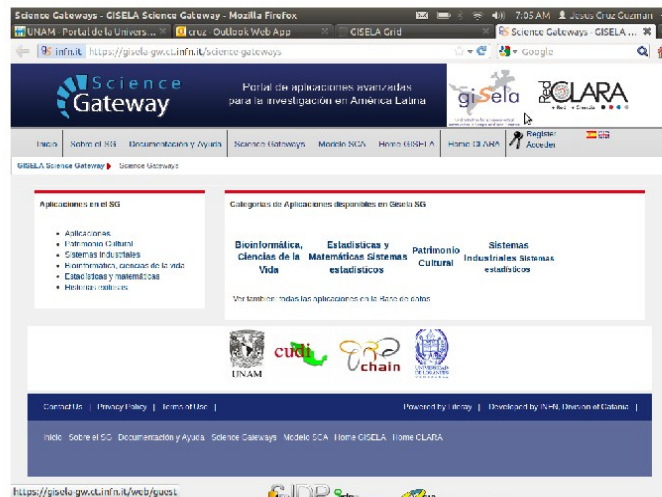


<https://gisela-gw.ct.infn.it>



# Arquitectura de los Servicios del Science Gateway

- The GISELA SG is a Web site that allows users to fully exploit the e-Infrastructure through a normal web browser.



# Transferencia del SGW para LA: Status

SG in EGI application data base

SG Infrastructure for LA+C in progress:

IdP, SP, LDAP, e-Token, Glassfish, Liferay, Grid Engine,  
applications.



# Incorporación de nuevos servicios

## Embedded Applications



Standard-based (SAGA)  
middleware-independent  
Grid Engine



Administrator  
Power User  
Basic User



Users from  
different  
organisations  
having different  
roles and  
privileges

# Nuevos servicios

## HPC

Maqueta de pruebas en entorno de virtualización

Pruebas de acceso en cluster de producción

Desarrollo de portlets para aplicaciones HPC

## Cloud

Maqueta de pruebas

Desarrollo de portlets para aplicaciones

# Comunidades Virtuales de Investigación

# Comunidades Virtuales de Investigación

## Comunidades de Usuarios Identificadas

Bioinformatics

Industry

Earth Science

Cultural heritage

## Nuevas Comunidades de Usuarios

# The VRC-driven GISELA Science Gateway: Life Science Gateway



Portal de aplicaciones avanzadas  
para la investigación en América Latina



Grid Initiatives for e-infrastructure virtual  
communities in Europe and Latin America

Home

Sobre el SG

Documentación y Ayuda

Modelo SCA

Science Gateways

Project Home



GISELA Science Gateway ▶ Science Gateways ▶ Life Sciences

Science Gateways - +

Home

Cultural Heritage

Industry

**Life Sciences**

- ClustalW
- GATE
- Phylogenetics

Mathematics

Success Stories

My Workspace MYWORK



Jobs



JobsMap



Data



Help

Life Sciences Gateway - +

The Life Sciences Gateway is the access point to submit Life Sciences applications on the GISELA e-Infrastructure.

Currently the Life Sciences Gateway allows to submit the following applications:

**ClustalW:** it is a tool for aligning multiple protein or nucleotide sequences. The alignment is achieved via three steps: pairwise alignment, guide-tree generation and progressive alignment.

**GATE:** GATE (Simulations of Preclinical and Clinical Scans in Emission Tomography) is an advanced opensource software developed by the international OpenGATE collaboration and dedicated to the numerical simulations in medical imaging. It currently supports simulations of Emission Tomography (Positron Emission Tomography - PET and Single Photon Emission Computed Tomography - SPECT), and Computed Tomography (CT) (see GATE web site for more information).

**Phylogenetics (MrBayes):** it is a program for the Bayesian estimation of phylogeny. Bayesian inference of phylogeny is based upon a quantity called the posterior probability distribution of trees, which is the probability of a tree conditioned on the observations. The conditioning is accomplished using Bayes's theorem.



# The VRC-driven GISELA Science Gateway: Phylogenetics (MrBayes)

## Input Parameters

Science Gateways > Science Gateways > Life Sciences > Phylogenetics > Run

Science Gateways **+** **-** **x**

- Home
- Cultural Heritage
- Industry
- Life Sciences
  - ClustalW
  - GATE
  - Phylogenetics
  - Run**
- Mathematics
- Success Stories

My Workspace **+** MYWORK

- Jobs
- JobsMap
- Data
- Help

### MrBayes - Set Parameters

Input Parameters

Alignment File (Nexus Format):   Description: results

Likelihood model (Iset) number of substitution types (nst): 6 (GTR)

	A	C	G	T
A		$\gamma_1$	$\alpha_1$	$\beta_1$
C	$\gamma_1$		$\beta_2$	$\alpha_2$
G	$\alpha_1$	$\beta_2$		$\gamma_2$
T	$\beta_1$	$\alpha_2$	$\gamma_2$	

form of the nucleotide substitution model: 4by4 (standard model of DNA substitution) (nucmodel)

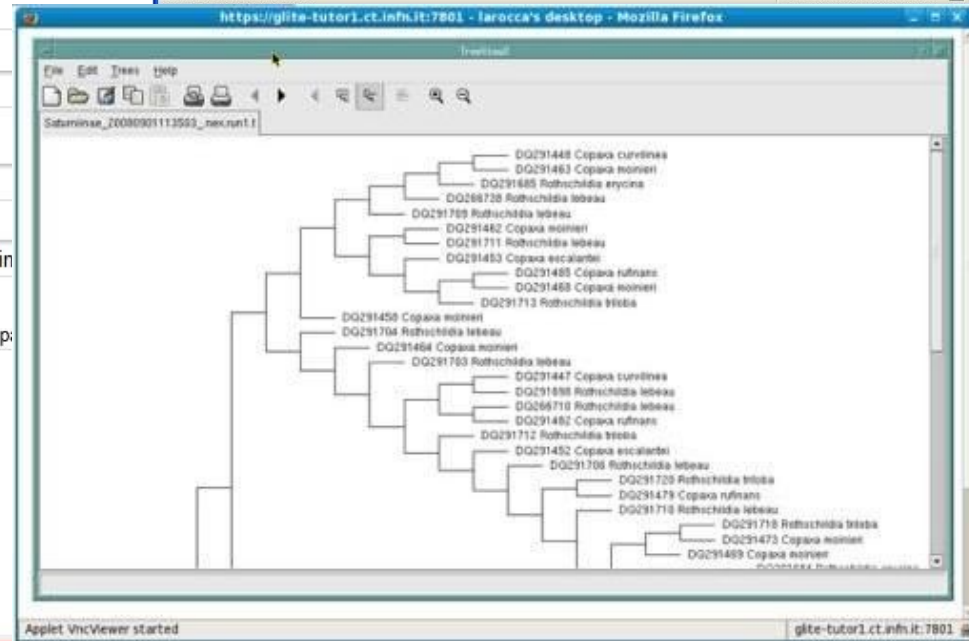
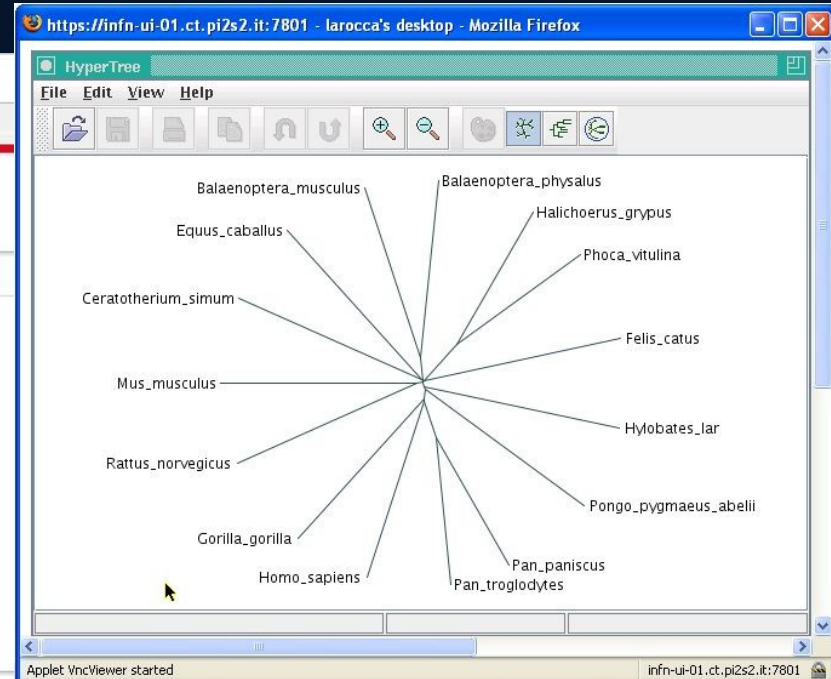
enforces use of a particular genetic code: universal code (code)

rate variation across sites (rates): gamma-distributed rates across sites

rate number of gamma rate categories: do a reasonable job of approximating the continuous (ngammacat)

consensus tree type (contype): majority rule with all compatible tips

should tree probabilities print to screen? (showtreeprobs): no



# The VRC-driven GISELA Science Gateway: GATE


Science Gateways

- Home
- Cultural Heritage
- Industry
- Life Sciences
  - o ClustalW
  - o GATE
    - o Run
  - o Phylogenetics
- Mathematics
- Success Stories

My Workspace

- Jobs
- JobsMap
- Data
- Help

**GATE**



Please fill the following form and then press 'SUBMIT' button to launch GATE application. Requested inputs are:

- GATE Macro file (.mac)
- GATE Material Database (.db)
- ROOT C source code for post processing data analysis

Pressing the 'Demo' Button input fields will be filled with Demo values.  
Pressing the 'Reset' Button all input fields will be initialized.

GATE Macro file

```
#####
# Visualisation #
#####

#####
# Mandatory fGate #
#####

/gate/geometry/setMaterialData

/gate/world/geometry/setXLength
/gate/world/geometry/setYLength
/gate/world/geometry/setZLength
/gate/world/setMaterial Vacuum
```

```
{
float energy;
float x, y, z;
float dx, dy, dz;
float weight;
char volumeName[64];
char particleName[64];
char procName[64];

TChain * T = new TChain("PhaseSpace");

T->Add("phsp.root");

T->SetBranchAddresses("ParticleName",&particleName);
T->SetBranchAddresses("ProductionVolume",&volumeName);
T->SetBranchAddresses("ProductionProcess",&procName);
T->SetBranchAddresses("Ekine",&energy);
T->SetBranchAddresses("X",&x);
T->SetBranchAddresses("Y",&y);
T->SetBranchAddresses("Z",&z);
T->SetBranchAddresses("dX",&dx);
```



Insert below your experiment identifier

GATE DEMO Simulation of: 8/10/2011 - 14:37:59



*Gracias*

?

