



Año 5 no. 26, febrero de 2015

spinor

Dos facetas, información y divulgación
un sólo objetivo, comunicar

Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México (LNS)

- ▶ Simulación molecular a gran escala
- ▶ Supercómputo para resolver el problema de ensamblado de ADN
- ▶ Supercomputadoras
- ▶ Nanofotónica en medios discretos
- ▶ Investigación de frontera en el IFUAP
- ▶ Entrevista Dr. Humberto Salazar Ibargüen
- ▶ Efemérides Científicas



« SI EL CEREBRO HUMANO FUESE TAN SIMPLE QUE PUDIÉSEMOS ENTENDERLO, ENTONCES SERÍAMOS TAN SIMPLES QUE NO PODRÍAMOS ENTENDERLO » (ANÓNIMO)

DÉCIMA SEMANA DEL CEREBRO



Que se llevará a cabo del **9 AL 12 DE MARZO DE 2015** en la Unidad de Seminarios de Ciudad Universitaria **ENTRADA LIBRE**

Conferencias a las 10:00 y 11:00 AM

Dra. Carmen Cortés / tel 229.55.00 ext 5621 / Correo-e: carmen.cortes@correo.buap.mx
<https://www.facebook.com/semanadelcerebrobuap>
<https://www.viep.buap.mx>

MAESTRÍA EN OPINIÓN PÚBLICA Y MARKETING POLÍTICO

PROCESO DE SELECCIÓN DE ASPIRANTES

1 octubre de 2014 al 28 de febrero 2015

Entrevista con el Coordinador del Programa

1 al 15 de marzo de 2015

Entrega de documentos

(Título, Cédula, IFE, Certificado con promedio mínimo de 8.0)

1 al 15 de marzo de 2015

Pago de inscripción al Seminario de Selección

4 al 29 de Mayo de 2015

Seminario de Selección

Mayo 2015

Aplicar Examen EXANI-III

1 al 10 de junio 2015

Entrevista de los candidatos seleccionados
con el Comité Académico de Posgrado

15 de junio 2015

Publicación de la lista de aceptados

16 al 30 de junio 2015

Proceso de admisión

INFORMES:

Lic. María del Rayo García Téllez

Asistente del Posgrado

rayo.garcia@correo.buap.mx

Av. Cómulo de Virgo s/n. Acceso A, CCU, Puebla, Puebla
C.P. 72810. Tel: +52 (222) 229 5500 Ext. 3463



icgde.buap.mx · fb y twitter /ICGDE

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Medicina

Secretaría de Investigación y Estudios de Posgrado

convocan a la

"MAESTRÍA EN CIENCIAS MÉDICAS E INVESTIGACIÓN"

Incorporada al Padrón Nacional de Posgrado de Alta Calidad del CONACyT.
(PROGRAMA CONSOLIDADO)

Clasificada en Nivel I de CIEES (Comités Interinstitucionales para la Evaluación de la Educación Superior).

Características

Es un programa actualizado y flexible que se ha impartido en forma consecutiva durante 20 años, formando profesionales altamente capacitados y éticos que contribuyen de forma importante al desarrollo de las ciencias médicas y la investigación clínica en diversas instituciones educativas y del sector salud.

Objetivos

Formar Investigadores de alta calidad orientados a resolver los problemas técnicos y científicos que influyen en la salud de la población.

Perfil de Ingreso

Tener capacidad creativa, capacidad para razonar lógicamente y habilidad para identificar, plantear y solucionar problemas. Tener disposición para trabajar en equipo y habilidad para comunicarse verbalmente y por escrito.

Perfil de egreso:

Integra los conocimientos, habilidades, actitudes y competencias adquiridas para realizar investigación en salud, con base en los ejes programáticos del proceso formativo. Es competente en enfoques teóricos y epistemologías, método científico y epidemiología clínica, lectura crítica de trabajos y elaboración de protocolos con diseños metodológicos apropiados para realizar trabajos de investigación con rigor metodológico y apego bioético, culminarlos, y redactar los escritos médicos para publicaciones periódicas, así como llevar a cabo actividades educativas en este campo.

Costos

Curso propedéutico y exámenes de selección.

\$5,000 (Cinco Mil Pesos 00/100m.n)

Inscripción al primer semestre.

\$15,000 (Quince Mil Pesos 00/100m.n)

Depósito en Banco HSBC

A través de pago referenciado en página

<http://webserver.siaa.siu.buap.mx/pls/PAGQS/pagos.inicio>

PAGOS REFERENCIADOS

(www.facmed.buap.mx)

Los alumnos aceptados

podrán concursar para obtener beca CONACyT

CALENDARIO INSCRIPCIONES

Del 15 de diciembre de 2014
al 07 de marzo del 2015

Curso Propedéutico

Del 7 de marzo al 16 de mayo de 2015
los días sábados de 8:00 a 14:00hrs.

Proceso de Selección

Del 16 al 29 de mayo 2015.

Publicación de Resultados

12 de junio de 2015.

Inicio de actividades

3 de agosto de 2015.

Requisitos:

- Licenciatura en el área de la salud o afines con promedio mínimo de 8.0
- Título, Cédula Profesional (en original y copia).
- Carta o constancia promedio (en original y copia).
- Curriculum vitae Resumen.
- Constancia de examen TOEFL con 450 pts. Mínimo.
- Carta compromiso del alumno de dedicación de tiempo completo a la maestría.
- Aprobar el curso propedéutico y exámenes de selección.
- Dos fotografías tamaño infantil.
- Pago del curso propedéutico.

INFORMES E INSCRIPCIONES.

Facultad de Medicina
Secretaría de Investigación y Estudios de Posgrado

Calle 13 # 2702, Col. Volcanes.

Puebla, Pue. C.P. 72400

Tel. 01 (222) 229 55 00 ext. 6301 y 6303

Horario: 8:30 a 19:30 hrs. lunes a viernes

y sábados 8:30 a 14:00hrs.

En las páginas:

<https://facmed.buap.mx/cms/?q=maestrias#MCM>

www.facmed.buap.mx

(Posgrado)

COORDINADORA DE LA MAESTRIA

D.C. Irma del Carmen Zamora Ginez

zamoragezi@yahoo.es



spinor

Dos facetas, información y divulgación
un sólo objetivo, comunicar

Revista de la Vicerrectoría de Investigación
y Estudios de Posgrado

Año 5 no. 26, febrero de 2015

Dirección de Divulgación Científica
Vicerrectoría de Investigación
y Estudios de Posgrado
Calle 4 Sur. No. 303, Centro Histórico
C.P. 72000, Puebla Pue. México
Teléfono: (222)2295500 ext. 5729 y 5730
Fax: (222)2295500 ext. 5631
Correo: revistaspinor@gmail.com
Web: www.viep.buap.mx
ISSN: En trámite

Mtro. José Alfonso Esparza Ortiz
Rector

Dr. René Valdiviezo Sandoval
Secretario General

D. C. Ygnacio Martínez Laguna
Vicerrector de Investigación y Estudios de Posgrado

**Dra. Ma. Verónica del Rosario
Hernández Huesca**
Directora General de Estudios de Posgrado

Dr. José Ramón Eguibar Cuenca
Director General de Investigación

Dr. José Eduardo Espinosa Rosales
Director General de Divulgación Científica

Investigación y revisión:

David Chávez Huerta
Eréndira Aragón Sánchez
Heccari Bello Martínez
Laura I. Álvarez González

Dirección de la revista:

Dr. José Eduardo Espinosa Rosales

Consejo Editorial:

Dr. Jaime Cid Monjaraz, Dr. Miguel Ángel León Chávez,
Dra. Ma. de Lourdes Herrera Fera, Dr. Guillermo Muñoz
Zurita, Dr. Efraín Rubio Rosas, Dr. Óscar Martínez Bravo,
Dra. Olga Félix Beltrán

Impreso en los talleres de
El Errante Editor.

Diseño: Israel Hernández / El Errante Editor
El tiraje consta de 3000 ejemplares
Distribución gratuita

Editorial

Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México

Este número de *Spinor* está dedicado al Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México (LNS) con sede en la BUAP: El LNS será un equipo de cómputo de alto rendimiento con una gran capacidad de almacenamiento en un sistema de archivos altamente paralelizable y conectado internamente mediante una red de comunicaciones de alta velocidad de 56 Gb/s, de manera que el conjunto es visto como una supercomputadora que hace cálculos con velocidades de miles de millones de veces más grandes que las computadoras comunes. Además, cuenta con *software* optimizado para atender proyectos que demandan esta capacidad de procesamiento; el *software* atenderá demandas de los proyectos de investigación y desarrollo en Física, Química, Ingeniería y áreas afines. El *software* comercial con el que se contará por el momento es: Gaussian, Molpro, vasp, Wien2K, TeraChem, Crystal, Orca, Quantum Espresso, Comsol Multiphysics, Lumerical, Silvaco, Synopsys y Cadence.

Contaremos con una de las tecnologías más avanzadas de cálculo numérico que existe actualmente. Basada en un enfoque de gestión centralizado que hace que los nodos disponibles funcionen como servidores compartidos. Cada uno de estos nodos contiene procesadores multi-core (procesadores de múltiples núcleos). En particular, el Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste contará con 204 nodos con 24 núcleos de procesamiento de última generación cada uno, que trabajan a una frecuencia de 2.5 GHz, con 128 GB de memoria RAM por nodo con la más nueva tecnología DDR4, en conjunto tienen la capacidad de realizar aproximadamente 170 billones de operaciones por segundo (170 teraflops). Esto colocará a la BUAP como el centro líder en capacidad de procesamiento en el país. Para los usuarios, contará además con aplicaciones altamente paralelizables, con dos nodos de cómputo con coprocesadores Xeon Phi de última generación 7120P que cuentan con 61 núcleos que trabajan a 1,238 GHz junto con 16 GB de memoria, estas tecnologías convierten a los nodos en un verdadero acelerador de tareas a nivel empresarial / profesional y los 61 núcleos a 1,238 GHz que pueden funcionar a mayores frecuencias según el tipo de carga a la que se vea sometida gracias a Turbo Boost dynamic overclocking; también contará con dos nodos de cómputo con dos GPU NVIDIA K40 cada uno. Se adquirieron además, dos nodos de altísima memoria RAM (1 TB cada uno) para usuarios que requieren alta capacidad de memoria local (por nodo).

En una primera etapa el LNS se enfocará su investigación y en una segunda etapa se brindarán servicios a otros sectores como la industria, las empresas y el gobierno. Estos servicios estarán principalmente enfocados en tareas de almacenamiento de grandes cantidades de datos y procesamiento de información.

En este número presentamos también algunos de los proyectos que investigadores de nuestra universidad han propuesto para la utilización de este equipo.



Simulación molecular a gran escala

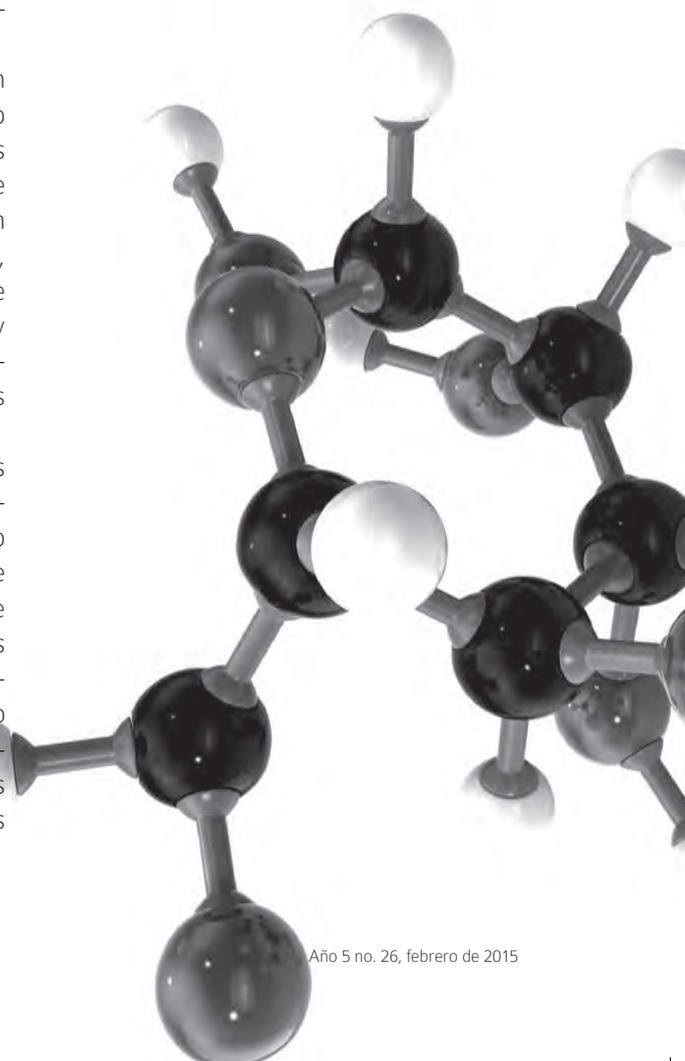
Minerva González Melchor
Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas", BUAP

Ya son 57 años desde que la primera simulación de dinámica molecular fue publicada en la literatura con el trabajo pionero de Alder y Wainwright para un fluido de esferas duras, y 37 años desde que el método se aplicó al estudio de una macromolécula de interés biológico realizada por McCammon, Gelin y Karplus. Desde entonces esta nueva manera de realizar investigación ha influenciado todas las áreas de las ciencias exactas y naturales.

Hoy en día los métodos de simulación molecular se han consolidado como herramientas útiles y eficientes en el estudio de líquidos, fluidos complejos, nanoestructuras, proteínas, virus y materiales. Este hecho se debe en buena parte a la constante evolución de las computadoras. Tal es el impacto que la simulación molecular ha tenido en la física, química, industria farmacéutica, medicina y biología, que no fue sorpresa que el Premio Nobel de Química 2013, fuera otorgado a Martin Karplus, Michael Levitt y Arieh Warshel, por su contribución en el desarrollo de los componentes fundamentales que estos métodos requieren, como son los denominados campos de fuerza.

Así, estos métodos han revolucionado la manera en que nos acercamos a la solución de problemas de interés práctico, como podría ser el diseño de un fármaco o la función de un sitio específico en una proteína. En dinámica molecular usamos las ecuaciones de movimiento de Newton, una de las ecuaciones básicas en física que aprendemos en la educación media superior. Usando estas simples ecuaciones podemos entender aspectos más complicados de la naturaleza. Es muy satisfactorio cuando cosas o fenómenos que no podemos ver —aun realizando experimentos apropiados de laboratorio— se convierten en visibles con este método, ayudándonos a entender, descubrir y predecir nuevos fenómenos, porque nos abren una ventana al mundo microscópico.

» En dinámica molecular usamos las ecuaciones de movimiento de Newton, una de las ecuaciones básicas en física que aprendemos en la educación media superior.

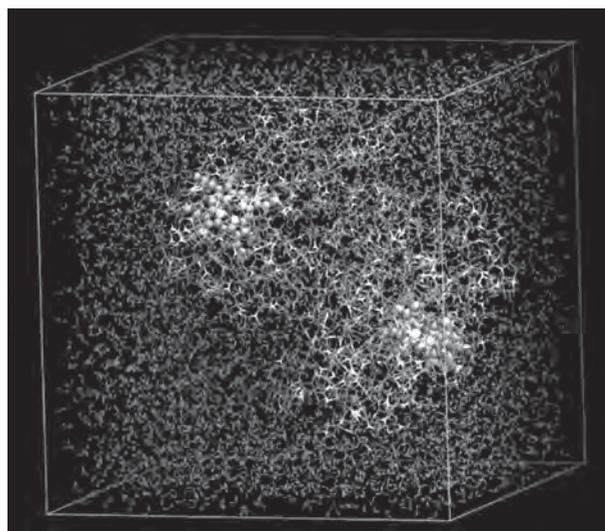


En las simulaciones hacemos uso de los métodos mecánico-cuánticos sobre unos pocos átomos, o la combinación de elementos cuánticos y clásicos en simulaciones de dinámica molecular, donde el número de átomos puede variar entre miles y millones de partículas en escalas de tiempos de entre picosegundos (la billonésima parte de un segundo) y milisegundos.

Cuando llevamos a cabo un experimento real, preparamos una muestra del material que deseamos estudiar, la ponemos en contacto con un instrumento de medición y registramos la propiedad de interés durante un determinado intervalo de tiempo. La mayoría de las mediciones son susceptibles al ruido estadístico y a la precisión del instrumento, por lo que necesitamos registrar un número grande de datos para calcular el promedio y así tener una medición más precisa. En dinámica molecular aplicamos una idea similar: primero preparamos una muestra, diseñamos un modelo del sistema de N partículas interactuantes y resolvemos las ecuaciones de movimiento hasta que el sistema alcance el equilibrio, es decir que sus propiedades ya no cambien con el tiempo. Después de esta etapa, realizamos las mediciones de interés.

Existen hoy en día diferentes métodos computacionales, entre los esquemas dinámicos se encuentran los cálculos *ab initio* en su versión dependiente del tiempo, la dinámica molecular clásica a nivel atómico y a nivel mesoscópico (escala en la que se pueden discutir razonablemente las propiedades de un material o fenómeno, sin hablar de los átomos individuales). En la descripción mesoscópica algunos grados de libertad internos de las moléculas se promedian para alcanzar escalas de longitud y tiempo mayores que en la simulación atómica. Además existen los cálculos de docking y Monte Carlo. La elección de un método específico depende de varios factores, como son el sistema de interés, las propiedades a calcular así como de factores externos como pueden ser las capacidades en equipo de cómputo, etcétera.

Actualmente las aplicaciones de simulación molecular de mayor impacto para la sociedad se logran con la unión de varios factores. Uno fundamental e ineludible es el acceso a equipo de supercómputo combinado con un programa de simulación que ejecute en paralelo, o que esté adaptado para hacer uso de arquitecturas de última generación, como son las tarjetas gráficas. Por citar un ejemplo concreto, la simulación realista de una proteína requiere de la inclusión del medio ambiente en el que típicamente encuentra y



por ende, de las moléculas de agua, lo que conduce a que el número de ecuaciones de movimiento a resolver esté entre diez mil y un millón, y el tiempo de simulación deseable varíe entre nano y microsegundos, dependiendo del fenómeno a estudiar.

Lo que definitivamente para nosotros aún es un reto, es realizar simulación molecular a gran escala, es decir, partiendo de una visión atómica queremos describir fenómenos cuyos efectos percibimos en la escala macroscópica, en especial en sistemas biológicos de interés e impacto en la salud de los mexicanos. La figura muestra una proteína en agua a temperatura ambiente, donde el tamaño de nuestro sistema es del orden de 20 000 átomos.

En el Instituto de Física de la BUAP trabajamos en la línea de investigación Simulación molecular de líquidos, dentro del Cuerpo Académico Física Computacional de la Materia Condensada. Una característica sobresaliente de nuestra investigación es que también desarrollamos nuestros códigos. Esta cualidad nos ha permitido, no sólo ser usuarios de programas, sino también proponer métodos que posteriormente pueden ser incluidos en paquetes de simulación accesibles a la comunidad internacional, como el tratamiento de interacciones electrostáticas en simulaciones mesoscópicas. Hemos desarrollado y aplicado diferentes metodologías por alrededor de ocho años para estudiar fluidos iónicos, polielectrolitos, coloides, etcétera, con estudiantes de diferentes programas de licenciatura y posgrado de la universidad. Alcanzar la gran escala es indudablemente el mayor desafío que enfrentamos y estamos convencidos que el Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México será de gran ayuda. ■

SÚPER CÓMPUTO ADN

para resolver el problema de
ensamblado de fragmentos de

Lourdes Sandoval Solís, Marcela Rivera Martínez,
Luis René Marcial Castillo
Facultad de Ciencias de la Computación-BUAP

Introducción

El ácido desoxirribonucleico (ADN) es una molécula que transmite información suficiente para que los descendientes de una especie puedan desarrollar todas las funciones biológicas. Se encuentra formado por las moléculas adenina, citosina, guanina y timina que llamamos A, C, G y T respectivamente. El ensamblado de fragmentos de ADN es la parte final de la lectura de ADN, y dicha lectura es parte de la investigación del genoma humano, que es clave para el logro de avances médicos en genómica. El ensamblado de fragmentos es una técnica que reconstruye la secuencia original de ADN a partir de una colección de varios fragmentos. Para comprender de una forma simple a qué se refiere el problema del ensamblado de fragmentos se tomará como base un libro. El libro representará al ADN, éste es destrozado en pedazos muy pequeños, los cuales simulan ser los fragmentos del ADN, una vez destrozado el libro es revuelto. Se busca volver a formar el libro y dejarlo ordenado en el caso del ADN, éste se denomina ensamblado de fragmentos.

El ensamblado de fragmentos se divide en tres fases, las cuales son: cálculo del solapamiento, ordenación de los fragmentos y construcción del consenso. Es en la fase de construcción del consenso donde se debe encontrar el orden de los fragmentos.

» El ensamblado de fragmentos de ADN es la parte final de la lectura de ADN, y dicha lectura es parte de la investigación del genoma humano, que es clave para el logro de avances médicos en genómica.



» Actualmente la construcción de la secuencia de genes es un proceso costoso y tardado. Se realizaron diversas pruebas con problemas sintéticos, debido a que para realizar pruebas con las bases de datos reales se necesita de un equipo de supercómputo.

Los fragmentos son pequeñas secuencias de ADN, cuya longitud varía entre 200 y 1000 bases. La razón por la que es necesario este proceso es que la tecnología actual no permite secuenciar con precisión moléculas de ADN más grandes que 500 o 700 bases. Sin embargo, la mayoría de los organismos tienen genomas más largos que esas 500-700 bases. Por ejemplo, el ADN humano está compuesto por unos tres billones de nucleótidos que no pueden ser leídos de una vez.

Definición del problema

El proceso empieza con la fragmentación de la secuencia de ADN en trozos. Esto se hace mediante la duplicación de la cadena original y el posterior corte aleatorio de cada copia.

Después de obtener los fragmentos se aplica el proceso tradicional de ensamblado:

- Calcular solapamiento.
- Calcular orden de los fragmentos.
- Calcular la secuencia de consenso.

Cálculo de solapamiento: Esta fase consiste en encontrar el mejor solapamiento común entre el sufijo de una secuencia y el prefijo de otra. Para ello, se comparan todos los pares de fragmentos para determinar su similitud. La idea intuitiva detrás de este cálculo, es que fragmentos que tengan un solapamiento muy grande entre ellos, tienden a estar juntos o muy cerca en la secuencia destino.

Ordenación de los fragmentos: En este paso se procede a ordenar los fragmentos, según el solapamiento existente entre ellos, que se calculó en el paso anterior.

En el problema de ensamblado de ADN se tiene una colección de fragmentos (subcadenas de algunos de los dos hilos de varias moléculas idénticas de ADN que se han roto en diferentes formas).

Construcción del consenso: Tras obtener el orden anterior, ahora se debe reconstruir la cadena de ADN consenso final. Para ello se sigue la regla del mayor consenso para decidir qué base poner en cada posición de la secuencia final.

En este problema, se busca encontrar la cadena más corta que contenga cada fragmento como subcadena, es decir, se desea encontrar la súper-cadena co-

» El proceso empieza con la fragmentación de la secuencia de ADN en trozos. Esto se hace mediante la duplicación de la cadena original y el posterior corte aleatorio de cada copia.

mún más corta. El problema de la súper-cadena común más corta es un problema no polinomial (NP), es decir, un problema cuya solución tardaría miles de años para unos cuantos datos.

Solución del problema

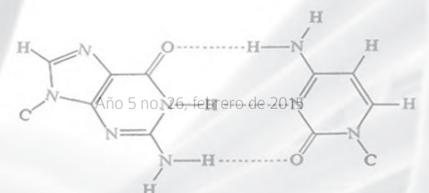
Existen varias meta-heurísticas que podrían aplicarse para resolver este problema, como por ejemplo los algoritmos genéticos, los cuales fueron desarrollados por John Holland y sus colaboradores en los años 60 y 70, el algoritmo genético es un modelo de la evolución biológica basado en la teoría de la evolución de Charles Darwin. Los algoritmos genéticos involucran la codificación de los parámetros que representan a los cromosomas, la selección de acuerdo a su aptitud y el ciclo de evolución de acuerdo a cruza y mutación.

Pruebas

Actualmente la construcción de la secuencia de genes es un proceso costoso y tardado. Se realizaron diversas pruebas con problemas sintéticos, debido a que para realizar pruebas con las bases de datos reales se necesita de un equipo de supercómputo. El algoritmo genético que se programó para resolver el problema obtuvo los resultados óptimos en todos los casos, se probó con problemas de hasta 300 fragmentos.

Conclusión

En todas las pruebas que se realizaron siempre se llegó al valor óptimo. Como trabajo futuro se planea utilizar problemas reales y realizar las pruebas con el equipo de *Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México*. ■





Fotografía 1. Nodos de la Stampede [2]

Súper computadoras

Elizeth Escudero Álvarez¹, Marcos R. Machorro Pérez²,
Leonardo Jiménez Montiel³ y Elsa Chavira Martínez⁴

Facultad de Ciencias de la Computación, BUAP

¹ Correo-e: elizethescudero@gmail.com

² Correo-e: marcos_advance555@hotmail.com

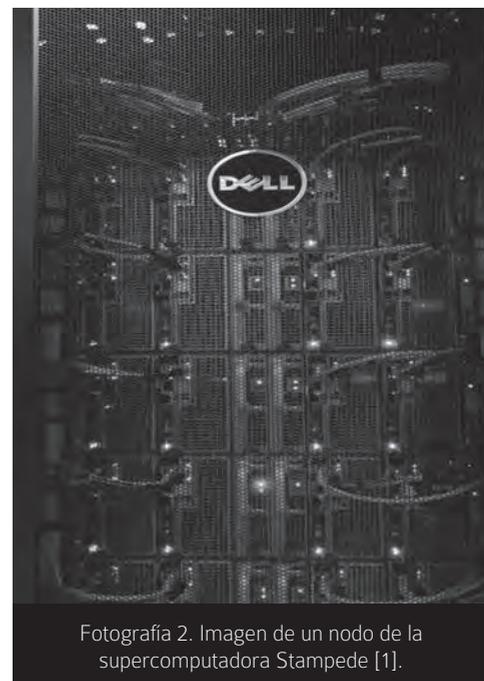
³ Correo-e: musssgo@gmail.com

⁴ Correo-e: elsachavira56@hotmail.com

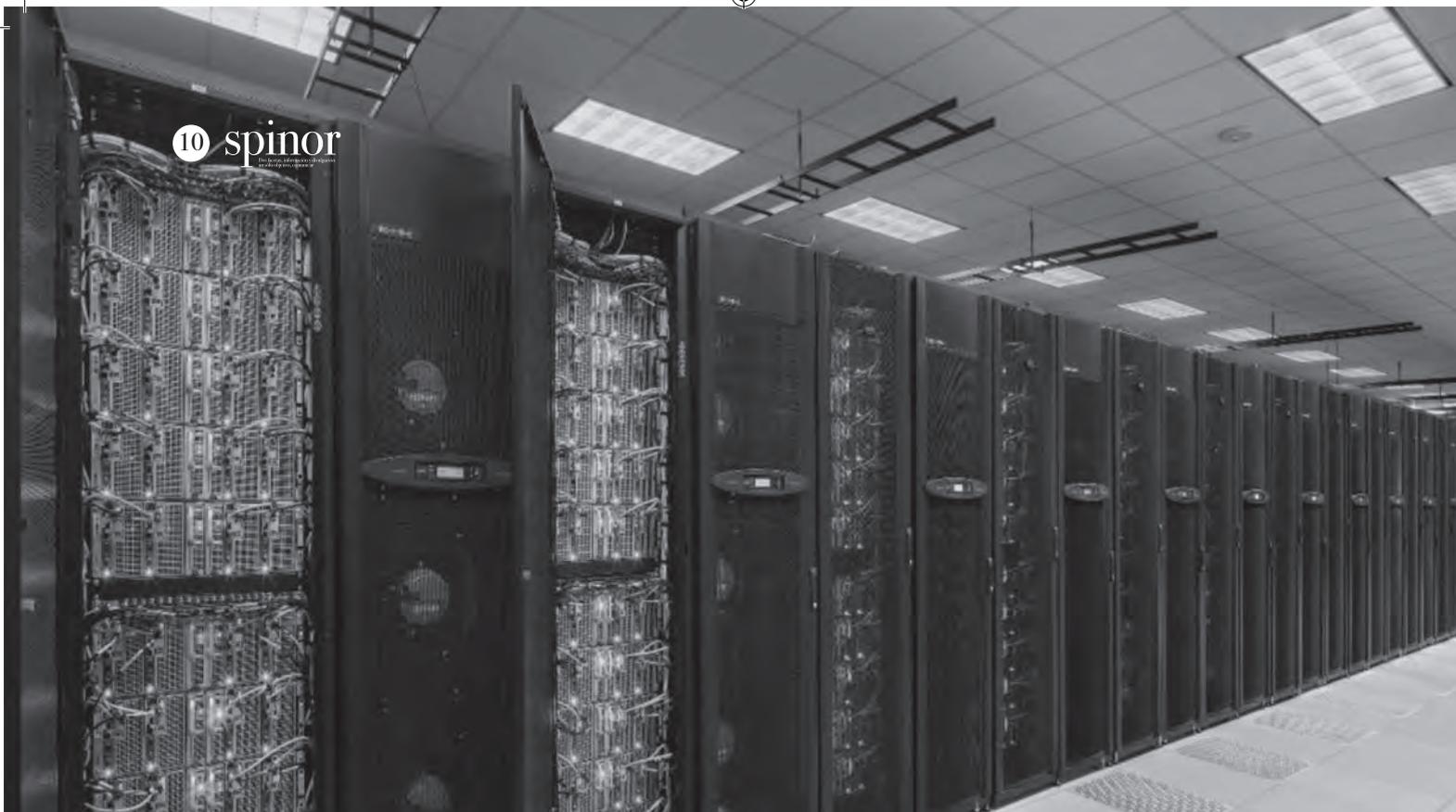
Simulaciones, prediciendo el futuro

Hoy en día, sin darnos cuenta, las supercomputadoras forman parte de nuestra vida cotidiana, en todo el mundo estas máquinas se ponen a prueba para analizar grandes cantidades de información y darnos una mejor perspectiva acerca del tipo de clima que nos aguarda. Por citar algunas aplicaciones de estas supercomputadoras, ayudan a planificar los vuelos de una forma eficiente, así como, pueden identificar las tormentas más peligrosas antes de que se ponga en riesgo a los pasajeros y la tripulación en vuelos aéreos. Otra aplicación muy conocida es la animación por computadora, por ejemplo: las películas de *Toy's Story*, *Tron*, *Avatar*, entre otras. Aunque no parece que requieran de gran ayuda, todos estos procesos necesitan de grandes cálculos que un humano con ayuda de una computadora común no podría lograr en un tiempo factible. En el ámbito científico, se usan para tratar de revelar algunos de los más grandes secretos del universo, como: el origen del mismo, la particularidad de los agujeros negros, agujeros de gusano, y fenómenos astronómicos tan extraños como la materia oscura.

El rendimiento de estas supercomputadoras tan complicadas se mide en FLOPS, (*Floating Point Operations per Second*, por sus siglas en inglés) que significa Operaciones de Punto Flotante por segundo. Esto es, en la década de 1970; a GIPS/GFLOPS (G, giga, 1 000 000 000) a mediados del decenio de 1980; a TIPS/TFLOPS (T, tera, 1



Fotografía 2. Imagen de un nodo de la supercomputadora Stampede [1].



Fotografía 3. Conexión de nodos de Stampede [4].

000 000 000 000) a finales del siglo xx y ahora la supercomputadora más rápida del planeta, en junio de 2014, es Tianhe-2, una computadora desarrollada por la Universidad Nacional de Tecnología de Defensa de China (NУDT) y ubicada en el Centro Nacional de Supercomputación en Guangzho, República Popular China, tiene un rendimiento de 33,86 petaflops (33 860 000 000 000 000 cálculos de punto flotante por segundo) superando en casi el doble a la supercomputadora Cray Titan, del Oak Ridge National Laboratory de Estados Unidos, que desde noviembre de 2012 mantenía el primer lugar.

Las computadoras así como las conocemos actualmente, aparecieron en 1941 con la Z3 de Konrad Zuse, seguida por la ABC computer que usaba tubos al vacío o bulbos para realizar operaciones aritméticas. Sin embargo, las computadoras no tuvieron el prefijo súper sino hasta 1965, con la aparición de CDC 6600; esta computadora era capaz de realizar diez tareas más rápidamente, ya que reunía muchas razones para ser llamada la supercomputadora. Mientras tanto los ingenieros soviéticos daban sus últimos toques a la BESM-6 con su procesador de 48 bits y una velocidad de 10 MHz (un megahercio, MHz equivale a un millón de hercios). Se utiliza muy frecuentemente como unidad de medida de la frecuencia de trabajo de un dispositivo de *hardware*. Esta producía un megaflop por segundo.

En 1974 Seymour Cray dio a conocer públicamente la primera supercomputadora que lleva su nombre y

desde entonces es considerado el padre de las supercomputadoras en Occidente.

En nuestros días, solo algunos países producen computadoras realmente súper potentes, Estados Unidos ha sido, y en el futuro próximo podría seguir siendo, el líder en esta clasificación.

Los sistemas más poderosos en el mundo son sistemas petaescala, donde un número masivo de las computadoras trabajan en paralelo para resolver el mismo problema. Dada la velocidad actual de progreso, los expertos de la industria estiman que las supercomputadoras alcanzarán una exaflop (un trillón de operaciones por segundo) para el año 2018.

Uno de los equipos más recientes y poderosos se encuentra en el Centro de Computación Avanzada de Austin, Texas, EUA con Stampede [1], es fabricado por la empresa Dell. Esta supercomputadora tiene instalado un sistema operativo GNU/Linux (CentOS 6.3) se encuentra en el séptimo lugar a nivel mundial como una de las más veloces, es capaz de producir 9.6 petaflop o nueve mil seiscientos billones de cálculos por segundo. Tiene 6400 nodos [1], cada nodo de Stampede es como una computadora de escritorio potente. Con los procesadores de alto rendimiento, la memoria RAM y el almacenamiento, Stampede combina versiones de gama alta de componentes habituales de cálculos científicos. [4]. Contiene 522 080 núcleos de procesamientos o procesadores. Una computadora de escrito-

rio típica tiene dos o cuatro núcleos de procesamiento o un microprocesador de dos o cuatro núcleos, y también puede incluir un acelerador para aumentar el rendimiento de gráficos. Con tantos núcleos de procesamiento disponibles, Stampede es capaz de ejecutar procesos de gran magnitud a gran velocidad, que no es posible en una computadora común.

Además posee una memoria total de 270 terabyte (un byte son ocho bits). Cada nodo de Stampede tiene 250 GB de memoria, o RAM, y cada uno de los nodos de gran memoria tiene un terabyte. Una computadora de escritorio típica tiene 4, 8, o tal vez 16 GB de RAM. Más memoria RAM significa que los investigadores pueden trabajar en tamaños de problemas mucho más grandes de lo que de otro modo podrían utilizar una computadora de escritorio [3].

Este tipo de supercomputadoras al procesar demasiada información empiezan a generar mucho calor, por lo que requieren de un enfriamiento especial. Algunas utilizan un sistema de enfriamiento sumergiendo los componentes en líquido dieléctrico (este material no conduce electricidad y no afecta los circuitos) [4].

Glosario:

GNU/Linux: es uno de los términos para referirse a la combinación del núcleo o kernel libre similar a Unix denominado Linux con el sistema GNU.

FLOPS: Floating-point Operations Per Second (operaciones de punto flotante por segundo).

RAM: Random-access memory (memoria de acceso aleatorio).

Byte: un byte equivale a 8 bits.

Kilobyte: un byte equivale a 1024 bytes.

Giga: Sistema Internacional de Unidades que indica un factor de 10^9 , o 1 000 000 000 (mil millones).

Tera: Sistema Internacional de Unidades que indica un factor de 10^{12} , o 1 000 000 000 000 (un billón).

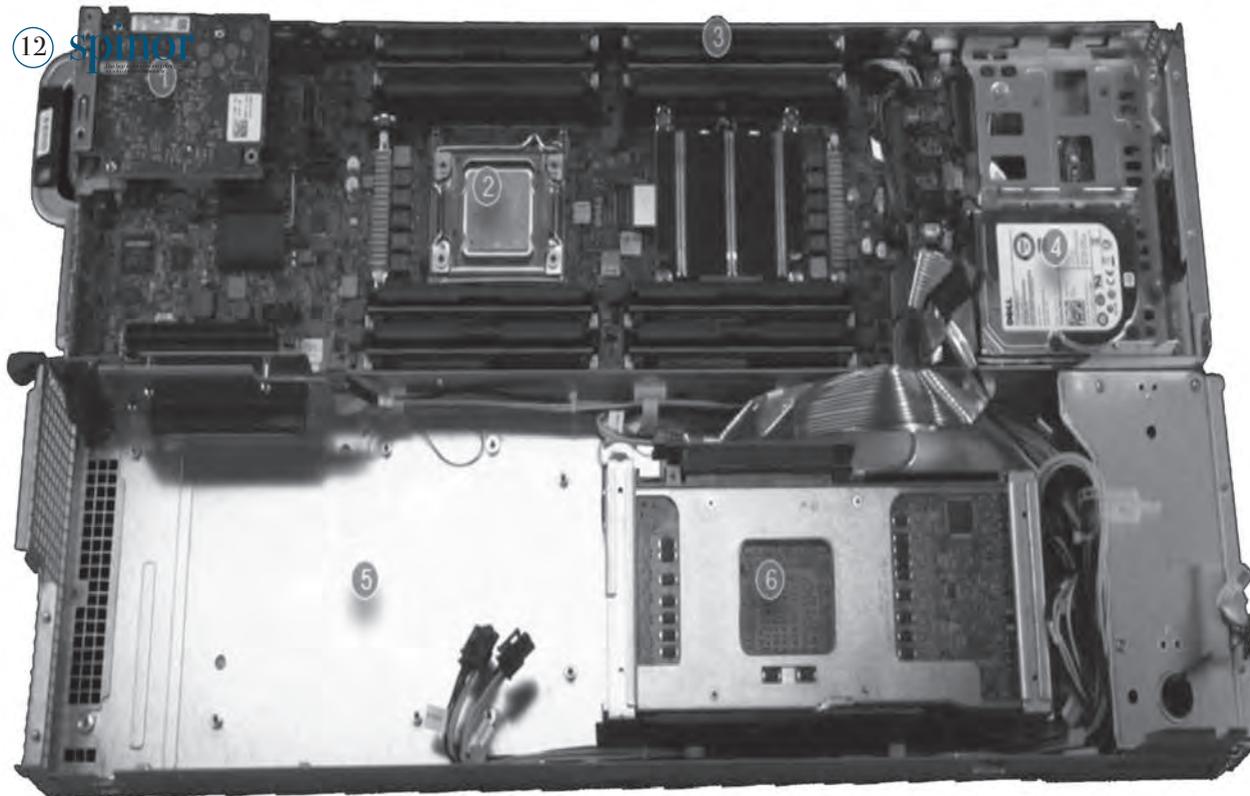
Peta: Sistema Internacional de Unidades que indica un factor de 10^{15} , equivalente a 1 000 000 000 000 000 (mil billones).

EXA: Sistema Internacional de Unidades que indica un factor de 10^{18} 1 000 000 000 000 000 000 (un trillón).

Hertz: unidad de frecuencia, 1/segundos, s^{-1} .

Fotografía 4. Sistema de enfriamiento de Stampede [5].





Fotografía 5. Estructura de un nodo de Stampede [3]

Actualmente en México contamos con una supercomputadora que se llama Kan Balam está ubicada en la ciudad de México, en el campus principal de la Universidad Nacional Autónoma de México en el edificio de la Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación (DG TIC) y su costo supera los tres millones de dólares.

El 17 de junio de 2013 en la Conferencia Internacional de Supercomputación celebrada en Leipzig, Alemania, se anunció la lista de las quinientas mejores supercomputadoras, donde aparece Tianhe-2. Tianhe-2, es una supercomputadora desarrollada por la Universidad Nacional de Tecnología de Defensa de China (NUDT) y la empresa china Inspur, ubicándose en el Centro Nacional de Supercómputo en Guangzh. Tiene un rendimiento de 33.86 petaflops, es decir 33 860 000 000 000 000 000 operaciones de punto flotante por segundo, con un pico teórico de 54.9 petaflops que la convierte en la supercomputadora más rápida del mundo, hasta hoy en día mantiene su puesto como la mejor.

Con el creciente número de datos los científicos siempre necesitan más y más recursos para procesarlos, por lo que se esperan desarrollos de nuevas y mejores tecnologías para mejorar el supercómputo. ■

Referencias bibliográficas:

- [1] "An introduction to the TACC Stampede Supercomputer". Recuperado de <https://www.tacc.utexas.edu/stampede/>, 18/10/2014.
- [2] "Guía del usuario", portal TACC. Recuperado de <https://portal.tacc.utexas.edu/user-guides/stampede>, 18/10/2014.
- [3] "Supercomputadora". Recuperado de <http://es.wikipedia.org/wiki/Supercomputadora>
- [4] "BUAP, UDLAP e INAOE presentan proyecto del laboratorio nacional de supercómputo". Recuperado de <http://blog.udlap.mx/blog/2014/06/buapudlapeinaoe-presentan/>, 3/06/2014.
- [5] "La BUAP instalará el tercer Laboratorio de Supercómputo en México". Recuperado de <http://www.sexenio.com.mx/puebla/articulo.php?id=30891>, 3/06/2014.
- [6] "BUAP construye Laboratorio Nacional de Supercómputo." Recuperado de http://www.milenio.com/cultura/BUAP-construye-Laboratorio-Nacional-Supercomputo_0_311368874.html, 04/06/2014.
- [7] "Supercómputadora del sureste comercializará servicios en 2016." Recuperado de <http://www.poblanerías.com/2014/07/supercómputadora-del-sureste-comercializara-servicios-en-2016/>, 16/07/2014.
- [8] "Laboratorio Nacional de Supercómputo en la BUAP." Recuperado de <http://mejoresuniversidadesdemexico.mx/?q=Laboratorio-Nacional-Superc%C3%B3mputo-BUAP%20>, María Rivas, 04/06/2014.
- [9] "Para qué servirá la supercomputadora de la BUAP." Recuperado de <http://ladobe.com.mx/2014/10/para-que-servira-la-supercomputadora-de-la-buap/>, Josué Cantorán, 5/10/2014.
- [10] "Impulsa la BUAP proyecto de Laboratorio de Supercómputo." Recuperado de <http://www.laopinionpuebla.com/impulsa-la-buap-proyecto-de-laboratorio-de-supercomputo/>
- [11] "El sistema HP Cluster Platform 4000, KanBalam' es una de las supercomputadoras". Recuperado de <http://132.248.202.29/index.php/home/120-kan-balam>, octubre de 2014.
- [12] "Congreso Súper Cómputo." Recuperado de <http://sc14.supercomputing.org/>, octubre de 2014.

Nanofotónica en medios discretos

Erwin A. Martí P.
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

I. Introducción

En las últimas décadas, los sistemas físicos de bajas dimensiones han despertado un fuerte interés en la comunidad científica debido a nuevos fenómenos que se manifiestan, únicamente, en estructuras de escalas nanométricas. Estos sistemas físicos pueden llevar al desarrollo de dispositivos ópticos o electrónicos integrados. La física de las interacciones a escalas nanométricas se enriquece al considerar que estas pueden ser no lineales, lo que permite hablar de control de la luz por luz, con potenciales aplicaciones para resolver problemas como son la conmutación lógica óptica.

Sin embargo, no siempre los parámetros no lineales de los materiales provocan una respuesta óptica no lineal que nos sea de utilidad. Por esta razón, una de las líneas de trabajo que permite explotar las interacciones no lineales son los procesos que se dan en materiales hechos por el hombre. Estos se conforman a partir de la integración a nanoescala de materiales de diferentes propiedades ópticas, obteniéndose otro con propiedades totalmente diferentes. Por ejemplo, mediante la inserción de partículas en un medio homogéneo; es decir, tenemos cierta cantidad de un material puro y lo contaminamos con

una pequeñísima cantidad de otra sustancia. Otro método es la estructuración de un medio a través de la superposición de películas de espesores nanométricos, como si fuéramos armando un sándwich con capas delgadísimas de material.

Otra forma de fabricar un medio discreto a nanoescala es mediante la fabricación de arreglos de guías de onda de sección transversal menor que la longitud de onda a propagar. En nuestro proyecto en una primera etapa nos centraremos en el estudio de estos sistemas.

II. Nanofotónica

Una parte fundamental para el estudio de los nuevos fenómenos a escala nanométrica es la propagación de campos electromagnéticos como portadores de información a través de estructuras con estas dimensiones, principalmente el llamado campo cercano, que presenta un comportamiento complejo y tiene contribuciones de los campos evanescentes, que no propagan energía, y por tanto no satisfacen el principio de conservación, al que otros campos están sometidos. Todo esto significa que la luz se comporta de manera muy particular cuando la analizamos en escalas pequeñísimas.

Para el estudio de la interacción radiación-materia a escala nanométrica, existe una nueva disciplina, conocida como nanofotónica. Ésta tiene por objeto el estudio de la generación, propagación, control y detección de luz en componentes de dimensiones similares o menores que su propia longitud de onda, una forma de ver esta situación es pensar en la luz como una infinidad de pequeñísimos —de escala nanoscópica— paquetes individuales cuyas características dependen en buena medida de su tamaño; en nanofotónica trabajamos con objetos y estructuras de tamaño parecido a los paquetes de luz. La nanofotónica afecta en gran medida en áreas como la biología, la química y la nanotecnología que se encarga de la fabricación de material nanoestructurado que permite procesar ondas de luz.

La nanofotónica es la fusión de la nanotecnología y la fotónica, donde las nanopartículas o nanoestructuras pueden ser integradas de manera operativa. A diferencia de la óptica, nanofotónica considera materiales semiconductores, dieléctricos o metálicos como elementos naturales de las nanocomponentes. Cada uno de los materiales mencionados produce fenómenos de especial interés cuando interactúan con una señal óptica, pudiendo así ser aplicadas en diferentes áreas.

En la primera etapa de nuestro proyecto nos centramos en el estudio de la interacción de la luz con medios dieléctricos. Y como puntualizaremos más adelante el objetivo es la búsqueda de regularidades que permitan establecer componentes en los cuales se desarrollen operaciones lógicas con luz.

III. Ley de Moore y nanofotónica

La importancia de poder proyectar luz con detalle en áreas cada vez más pequeñas, ha llevado al desarrollo de las técnicas de litografía nanométrica. Gordon E. Moore, cofundador de Intel, estableció en 1965 una ley que lleva su nombre, en la cual establece que la cantidad de transistores de un chip se duplica cada 18 meses, lo que supone un incremento de rendimiento y reducción de costos por transistor. En esta línea, dicha empresa ha presentado su nueva tecnología 3D, en donde propone transistores de 19 nm (nanómetros) para procesadores, el cual ofrece un rendimiento de 37% mejor que los transistores actuales de 32 nm planos. Con esto se pretende reducir el consumo de energía y brindar un rendimiento constante. Se menciona —no sin discusión— que el límite teórico del tamaño del transistor en los microprocesadores es 7 nm.

La nanofotónica es la fusión de la nanotecnología y la fotónica, donde las nanopartículas o nanoestructuras pueden ser integradas de manera operativa. A diferencia de la óptica, nanofotónica considera materiales semiconductores, dieléctricos o metálicos como elementos naturales de las nanocomponentes.

Mientras tanto la ley de Moore se ha cumplido. El número de transistores en un chip ha crecido desde 1971 con el procesador Intel 4004 (2300 transistores, velocidad de reloj 108 kHz y tecnología de 10 micrómetros) al procesador Haswell recientemente liberado (1400 millones de transistores, 2.5 GHz como velocidad de reloj y 22 nm). ¿Hasta dónde es posible llegar con esta ley de crecimiento? Las compañías fabricantes de chips confían que siga vigente por quince o veinte años más, en ese entonces, llegará a su fin por limitantes físicas. Los aislantes de los transistores tendrán sólo unos átomos de espesor, con lo cual es probable que se pierda el control sobre la estabilidad de los electrones (efecto túnel) y no se podrá reducir más el tamaño, ni se podrá aumentar más la velocidad de procesamiento.

Si bien la tecnología CMOS nos acompañará por un par de décadas más, la realidad es que en este momento no hay un paradigma real para la creación de los nuevos procesadores. Encontramos enormes esfuerzos de la comunidad científica por demostrar la versatilidad de nuevas tecnologías. Se habla con insistencia en la computación cuántica, sin embargo, aparte de los notables resultados teóricos, pasarán algunas décadas antes de tener un prototipo y quizá un siglo antes de pensar en producción industrial.

A nuestro criterio una opción real para la nueva familia de procesadores, que satisfagan las futuras demandas en comunicación y procesamiento, son los ópticos a escalas submicrométricas. Es decir procesadores nanofotónicos. La computación óptica presenta una serie de ventajas sobre la electrónica: mayor rapidez de procesamiento (velocidades de reloj medidas en terahertz), menor disipación de calor (crítico en supercómputo, por ejemplo), menos ruido, inmunes a la interferencia electromagnética, alto paralelismo, etcétera.

Al momento hay ya varios prototipos de procesadores ópticos funcionando. Con la principal desventaja

del tamaño: decenas de decímetros cúbicos de volumen. Por lo que uno de los esfuerzos es la miniaturización de los prototipos. Sin embargo, es necesario puntualizar que al momento no existe un modelo único de transistor óptico, el cual sea realmente perspectivo. Actualmente se está estudiando una variedad de métodos tendentes a realizar operaciones lógicas con luz. Siendo el método más viable el que conlleva la interacción no lineal de luz con el medio material, el cual a su vez modifica las propiedades de la luz. Esto ha permitido la creación de compuertas todo-óptico tipo AND, OR, NAND, XOR, etc., y combinaciones de las mismas. Hay que mencionar que la existencia de materiales con las adecuadas propiedades no lineales no es siempre posible. Por lo que se debe recurrir a su fabricación, pero más que una tarea química es física, ya que se parte de materiales existentes y se busca la estructuración de los mismos. Organizar, por ejemplo, nanocables por autoensamblaje no implica necesariamente aumentar los costos de fabricación que normalmente se requieren para producir los dispositivos del tamaño de los nanocables, como son los transistores que actualmente empleamos en los chips de nuestras computadoras, teléfonos celulares, *tablets*, etcétera.

Con la creación de dispositivos fotónicos a escalas nanométricas será posible pensar en el desarrollo del sueño anhelado por la comunidad científica: el desarrollo de la computadora óptica. En este sentido va orientado nuestro proyecto de supercómputo.

IV. Compuertas ópticas no lineales basadas en arreglos de nanoguías de onda

El proyecto Nanofotónica en Medios Discretos instrumenta las técnicas del experimento numérico para es-

tudiar la propagación e interacción de la luz en medios discretos, cuyas dimensiones características son menores que la longitud de onda de la luz que se propaga. Las condiciones mencionadas imponen restricciones muy estrictas a la forma como se realizan los cálculos. En primer lugar, no es posible realizar aproximaciones al análisis del campo electromagnético. Debiendo integrarse numéricamente las ecuaciones de Maxwell directamente (sea en el dominio temporal, espectral o bien empleando elemento finito), lo que implica la solución de un sistema de seis ecuaciones diferenciales parciales y acopladas de manera simultánea. A lo que hay que agregar, las relaciones constitutivas de la interacción radiación materia, más las condiciones de frontera. En segundo lugar mencionamos que el malla del medio, condición básica para la estabilidad de los métodos numéricos, implica tamaños de paso que van desde centésimas a diezmilésimas de longitud de onda. En este mismo sentido, el manejo de las escalas temporales está normalizado por la duración del período de oscilación óptico. Por lo que el tamaño en el incremento temporal es de centésimas de femtosegundo. Estos parámetros nos indican que la cantidad de iteraciones que hay que realizar en una simulación es enorme. Cosa imposible realizar en computadoras convencionales. De ahí la necesidad de realizarla en supercomputadoras.

Nuestro proyecto de trabajo se desarrolla en la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y nuestra labor involucra a las licenciaturas en Física y Física Aplicada, así como el Posgrado en Física Aplicada. A la vez que mantenemos relaciones de colaboración con centros como las Universidades de Twente, Harvard, Complutense de Madrid, entre otras. ■

Investigación de frontera en el IFUAP con el apoyo del Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México

Ana L. González

Instituto de Física de la Universidad Autónoma de Puebla, IFUAP

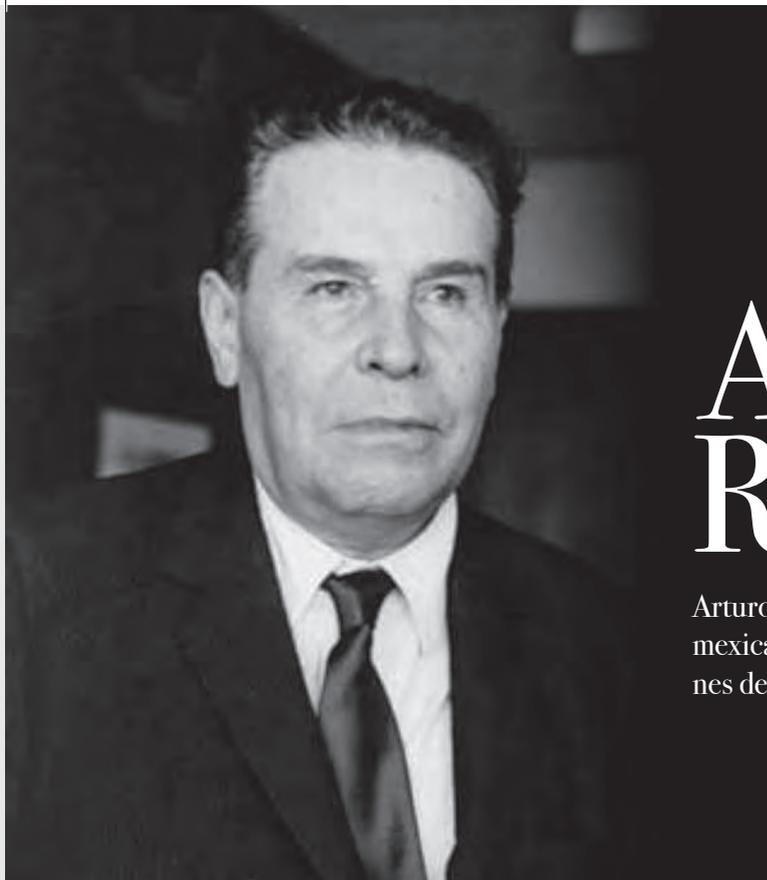
Con un ambicioso proyecto, aprobado por Conacyt y respaldado por instituciones de reconocido prestigio, como la BUAP, la UDLAP y el INAOE, se ha dado paso a la creación del Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México (LNS). Con esto, investigadores del Instituto de Física de la BUAP (IFUAP), dedicados al estudio teórico y numérico de propiedades físicas de materiales, se verán ampliamente beneficiados. En el IFUAP se cuenta con investigadores reconocidos a nivel nacional e internacional en diferentes temas de investigación. Algunos están relacionados con propiedades físicas de materiales.

En el caso de nanociencia, se han realizado cálculos numéricos relacionados con la interacción luz-materia a escala nanométrica. En particular —con las herramientas de cómputo con que actualmente cuenta el IFUAP—, se han estudiado las eficiencias de absorción, dispersión y extinción de una sola nanopartícula, utilizando modelos que bajo ciertas aproximaciones, reproducen resultados experimentales. Sin embargo, un tema de frontera en nanociencia es el ensamblado de nanopartículas, donde un conjunto de éstas, con di-

ferentes tamaños y formas, se deposita en sustratos de diferentes materiales. Este tipo de arreglos puede ser bidimensional o tridimensional. Para generar un enlace entre nanociencia y nanotecnología es muy importante complementar el conocimiento obtenido de fuentes experimentales con teorías y simulación numérica para un mejor entendimiento de los fenómenos observados. El aumento de dimensión en los sistemas tiene como consecuencia mayor demanda de recursos computacionales, ya sea velocidad, capacidad de almacenamiento o ambas. Con la puesta en marcha del LNS será posible abordar el estudio numérico de sistemas ensamblados y con ello, extender teorías, hasta ahora enfocadas en sistemas en 1D, a 2D y 3D. Con esto se espera poner en la vanguardia del conocimiento a nuestra máxima casa de estudios.

Por último, vale la pena mencionar que no solo la nanociencia se verá beneficiada con el LNS: otras áreas de investigación que se desarrollan en el IFUAP y que involucran propiedades físicas de materiales fonónicos, fotónicos, metamateriales, superconductores, sistemas aperiódicos, etc., también se verán beneficiadas. ■





Arturo Rosenblueth

Arturo Rosenblueth Sterns fue un investigador mexicano, médico y fisiólogo autor de investigaciones de vanguardia en el área de la cibernética.

Nació en Ciudad Guerrero, Chihuahua, el 2 de octubre de 1900, y estudió a medicina en México (1918-1921), Berlín (1923) y Francia, donde se gradúa en la Escuela de Medicina de París (1927). Al mismo tiempo aprendió a tocar el piano, con el que se ayuda económicamente, tocando para películas mudas y en restaurantes. Regresa a la ciudad de México en 1927, donde se desempeñó como investigador y profesor de fisiología. En 1930 obtiene la beca Guggenheim para trabajar en el departamento de fisiología de la Universidad de Harvard, entonces dirigido por Walter Cannon, con quien estudió la naturaleza química de la homeostásis (habilidad de los seres vivos para mantenerse estables en su interior frente a un medio ambiente cambiante).

Se casa con Virginia Thompson en Estados Unidos en 1931 y Harvard le asigna una segunda beca que ejerce entre 1932 y 1933 y es nombrado, este último año, instructor de fisiología. Entre los años 1931 y 1945 trabajó con destacados investigadores, entre ellos, Efrén del Pozo, H.G. Schwartz y Norbert Wiener, con quien colaboró para escribir *Behavior, Purpose and Teleology*, que según el mismo Wiener, fijó las bases para la nueva ciencia de la cibernética, habrían de colaborar hasta la década del cincuenta financiados por la fundación Rockefeller.

Regresa a México y se desempeña como jefe del Laboratorio de Fisiología del Instituto Nacional de

» Se dedicó a investigar el funcionamiento del sistema nervioso y en particular los procesos de transmisión de impulsos, la transmisión neuromuscular y sináptica

Cardiología hasta 1960 y más tarde como jefe del Departamento de Fisiología del Cinvestav, centro del que fue fundador. Se dedicó a investigar el funcionamiento del sistema nervioso y en particular los procesos de transmisión de impulsos, la transmisión neuromuscular y sináptica, el control de la circulación sanguínea y las leyes que rigen el aleteo auricular así como la fisiología de la corteza cerebral. Además, contribuyó a establecer la noción de la acción específica de la acetilcolina liberada (neurotransmisor específico en el proceso sináptico) como causa inmediata de la transmisión de los impulsos nerviosos en los músculos estriados e intentó sentar las bases de una matemática biológica. Sin embargo, también enseñó varios cursos de matemáticas e incluso de musicología.

Murió en la ciudad de México el 20 de septiembre de 1970. Sus restos descansan en la Rotonda de los Hombres Ilustres del Panteón Civil de Dolores de México, D.F. ■

Febrero

EFEMÉRIDES CIENTÍFICAS

1 1771- Se publica la primera edición de la *Encyclopaedia Britannica* en Londres.

2004- Científicos rusos y estadounidenses dan a conocer dos nuevos elementos químicos: ununtrio y ununpentio.

2 1935- Leonard Keeler utiliza por primera vez el detector de mentiras en un juicio en la ciudad de Portage, Estados Unidos de América.

3 1468- Muere Johannes Gutenberg, inventor de la imprenta de tipos móviles.

1966- La sonda soviética Luna 9 llega a la Luna de forma suave y controlada, la cámara estuvo enviando fotografías hasta que se agotó su batería y se perdió contacto con ella.

4 1841- Nace Clement Ader, ingeniero francés creador de un micrófono y perfeccionador del teléfono.

5 1987- La URSS lanza la astronave Soyuz TM-2 con dos tripulantes a bordo para poner en marcha una estación espacial.

6 1944- John Rock y Miriam Menkin fertilizan por primera vez un óvulo humano en un tubo de ensayo.

7 1932- James Chadwick denomina por primera vez neutrones a las partículas sin carga eléctrica en el núcleo del átomo en un artículo publicado en la revista *Nature*.

8 1834- Nace Dimitri Ivanovich Mendeleev, químico que formuló el sistema periódico de los elementos en 1869.

2 de febrero de 1935

Leonard Keeler utiliza por primera vez el detector de mentiras en un juicio en la ciudad de Portage, Estados Unidos de América.



25 de febrero de 1969

Es lanzada la sonda espacial Mariner VI para realizar un análisis de la atmósfera y superficie de Marte.



9 1986- El cometa Halley pasa por primera vez en el siglo xx.

11 1847- Nace Thomas Alva Edison, inventor estadounidense que desarrolló el foco eléctrico, un generador de electricidad, un proyector de películas y un aparato para grabar sonido.

12 1809- Nace Charles Darwin, naturalista británico que planteó la teoría evolutiva.

13 1946- El primer ordenador electrónico es activado en la Escuela de Ingeniería Eléctrica Moore de la Universidad de Pennsylvania.

14 1990- Se recibe por primera vez una imagen real del Sol a través de la sonda Voyager I.

15 1564- Nace Galileo Galilei, astrónomo y matemático italiano quien realizó

importantes descubrimientos en física y astronomía aplicando el método científico.

17 1600- Muere Giordano Bruno, astrónomo italiano que concibió un cosmos infinito poblado por Soles circundados de planetas. 1917- Nace Guillermo González Camarena, pionero de la televisión en México e inventor de la transmisión en color de señales de televisión.

18 1930- Clyde Tombaugh descubre Plutón.

19 1626- Nace Francesco Redi, médico italiano que desautorizó la hipótesis de la generación espontánea.

20 1986- Es puesta en órbita la estación espacial MIR, se mantuvo en órbita durante quince años.

21 1953- Desvelan la estructura del ADN en Cambridge por los investigadores del laboratorio Cavendish: Francis Crick y J. Watson.

23 1997- Se anuncia la clonación de la oveja Dolly por científicos británicos.

24 1968- La revista *Nature* anuncia el descubrimiento de señales de radio pulsantes provenientes de estrellas de neutrones en rotación.

25 1969- Es lanzada la sonda espacial Mariner VI para realizar un análisis de la atmósfera y superficie de Marte.

26 1935- Se prueba el radar por primera vez, un sistema de detección y telemetría por radio ideado por Robert Watson-Watt.

27 1989- Muere Konrad Lorenz, zoólogo austriaco fundador de la etología moderna o estudio científico del comportamiento animal.

28 1561- Ambroise Paré publica el primer tratado de cirugía: *El tratamiento curativo de heridas y fracturas en la cabeza humana*. ■



Entrevista

Doctor Humberto Salazar Ibargüen

Director del Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste

Spinor (S): ¿Por qué la BUAP decidió emprender el proyecto del LNS?

Dr. Humberto Salazar Ibargüen: La BUAP es una institución de educación superior que se ha caracterizado por contar con una amplia base de investigadores. Actualmente cuenta con cerca de quinientos investigadores en el Sistema Nacional de Investigadores del Conacyt. De este total, un número considerable usan como soporte de sus investigaciones herramientas computacionales para modelar, verificar o predecir resultados. Cuenta además con más de veinte posgrados en el padrón de posgrado de calidad del Conacyt, cuyos estudiantes regularmente requieren también de herramientas computacionales para el desarrollo de sus trabajos de tesis. En los años recientes se han realizado esfuerzos por contar con pequeños clústeres de cómputo (Pollux, Popocatepetl y Fénix) que operan con rendimientos de entre dos y cinco teraflops, pero son insuficientes para atender las demandas de un grupo tan numeroso de investigadores y estudiantes.

Atendiendo la convocatoria del Conacyt "Apoyos Complementarios para el establecimiento y consolidación de laboratorios nacionales" se presentó el proyecto Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México, solicitando al Conacyt un apoyo de veinte millones de pesos, mientras que se comprometía apoyo en forma de fondos concurrentes por treinta millones de pesos por parte de la BUAP y cuatro millones de pesos por dos instituciones asociadas, el INAOE (tres millones de pesos) y la UDLA (un millón de pesos).

El proyecto fue aprobado, con fondos del Conacyt, por dieciocho millones cuatrocientos mil pesos. De esta manera, por primera vez la BUAP contará con un laboratorio nacional reconocido y podrá dar soporte computacional a sus grupos de investigación y sus posgrados.

(S): ¿Nos podría explicar qué es exactamente el LNS del sureste de México?

Dr. H: El LNS será un equipo de cómputo de alto rendimiento con acceso a una capacidad de almacenamiento sin precedentes y conectado internamente mediante una red de comunicaciones de alta velocidad, de manera que el conjunto es visto como una supercomputadora que hace cálculos a velocidades de miles de millones de veces más grandes que las computadoras comunes. Además, cuenta con un *software* propio y optimizado para atender proyectos que demandan esta capacidad de procesamiento y un sistema de colas que permita atender a un gran número de usuarios.

En una primera etapa el LNS se enfocará a la investigación del consorcio que integran la BUAP, la Universidad de las Américas campus Puebla (UDLAP) y el Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica (INAOE), así como de otras instituciones de educación superior del país, con las cuales existan alianzas. En una segunda etapa se brindarán servicios a otros sectores como la industria, las empresas y el gobierno. Estos servicios estarán principalmente enfocados a tareas de almacenamiento de grandes cantidades de datos y procesamiento de información. Esperamos que la venta de



tiempo de cómputo y almacenamiento haga posible hacer del LNS del Sureste un proyecto autosustentable, pues el equipo que estamos proyectando —tal como cualquier otro equipo de supercómputo— tiene una vida útil limitada por el avance tecnológico. Por esta razón es necesario que el laboratorio pueda generar recursos que nos permitan actualizar nuestros equipos y mantener la relevancia del proyecto.

(S): ¿Cuáles son las características del equipo que se piensa adquirir para el LNS?

Dr. H: Será una de las tecnologías más avanzadas de cálculo numérico que existe actualmente. Se basa en un enfoque de gestión centralizada que hace que los nodos disponibles funcionen como servidores compartidos. Cada uno de estos nodos contiene procesadores multi-core (procesadores de múltiples núcleos como los encontrados en un *smartphone*, tableta, ordenador portátil, etcétera) de alto rendimiento. El uso de procesadores multi-core combinado con la centralización es una tendencia emergente; uno puede pensar en esto como un pequeño grupo que depende y contribuye a un todo,

como los músicos de una orquesta. En particular, el Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste contará con 204 nodos con 24 núcleos de procesamiento de última generación cada uno, que tienen la capacidad de realizar aproximadamente 170 billones de operaciones por segundo (170 teraflops) y de acceder a un petabyte de almacenamiento de datos a una velocidad de intercomunicación de 56 gigabytes por segundo. Esto colocará a la BUAP como el centro líder en capacidad de procesamiento en el país. Contará además, para usuarios con aplicaciones altamente paralelizables, con dos nodos de cómputo con coprocesadores Xeon Phi de última generación, y dos nodos de cómputo con dos GPUs NVIDIA K40 cada uno. Se adquirieron además, dos nodos de altísima memoria RAM (un TB cada uno) para usuarios que requieren alta capacidad de memoria local (por nodo).

El equipo se ha recibido ya en las instalaciones del Centro de Datos del Sistema de Información Universitario (SIU) en Ciudad Universitaria y está siendo probado, configurado y puesto en marcha. Formalmente será dado de alta el próximo 15 de febrero.

(S): En el foro de usuarios del LNS se hizo énfasis en las capacidades de conectividad del equipo. ¿Nos podría explicar por qué es tan importante esta característica?

Dr. H: En primer lugar, para gran parte de la investigación que queremos realizar en el LNS, va a hacer falta transmitir grandes cantidades de datos desde las instituciones y centros donde estos son producidos. Por ejemplo, si quisiéramos colaborar en las investigaciones que realiza el Consejo Europeo para la Investigación Nuclear (CERN) a través del Gran Colisionador de Hadrones (LHC) necesitaríamos ser capaces de recibir enormes cantidades de datos a gran velocidad desde sus instalaciones en Europa. Por otra parte, en la segunda etapa que he mencionado, si se ofrece a los clientes del LNS servicios de almacenamiento y procesamiento de información en muchas situaciones es impensable que dichos clientes lleven físicamente sus datos hasta nuestro laboratorio: es necesario contar con infraestructura de comunicación de alta velocidad, segura, confiable y robusta.

(S): ¿Quiénes serán los usuarios dentro de la universidad del laboratorio?

Dr. H: El 26 y 27 de junio del 2014, se llevó a cabo el primer Foro de Usuarios del Laboratorio Nacional de

Supercómputo del Sureste de México (LNS), la primera actividad pública de este proyecto, en el auditorio del Centro de Química del Instituto de Ciencias de la Universidad Autónoma de Puebla.

El objetivo de este encuentro académico fue definir las perspectivas de los proyectos que forman parte del LNS, integrar nuevos proyectos, difundir su uso en posgrados y otros programas académicos, y aprender de los invitados especiales de otros centros de supercómputo del país.

A partir de las presentaciones en este foro, se identificaron las siguientes áreas de usuarios dentro de la BUAP:

Bioinformática:

Abarca grupos de investigación de disciplinas tales como: Biología molecular, Biología celular, Microbiología, Bioquímica, Biofísica, Biomedicina, Ingeniería genética y Farmacología.

El objetivo principal es el desarrollo de herramientas bioinformáticas para la visualización de datos correspondientes a información genética, que no se limita a genomas bacterianos, sino también es factible de utilizar en genomas víricos y organismos eucariontes. Un ejemplo es la proyección lineal del material genético bacteriano en un círculo, ya sea cromosoma o plásmido, y en una segunda dimensión tantos replicones como queramos. Esto facilita su comparación en forma visual.

Química:

Abarca grupos de investigación de disciplinas tales como: Polímeros; Química de coordinación y organometálica; Química cuántica y estructura molecular; síntesis, caracterización y análisis teórico de compuestos químicos; ciencias de materiales; materiales optoelectrónicos; nanociencia y nanotecnología; síntesis y caracterización de materiales nanoestructurados; dispositivos orgánicos electro-activos y celdas solares; materiales magnéticos; modelado de fenómenos nanoscópicos entre otros.

El objetivo de la química computacional consiste en obtener cada vez una mejor descripción de la geometría, la estructura electrónica y la energía de los sistemas químicos, y a partir de ahí obtener una buena predicción de sus propiedades moleculares. La caracterización de la estructura química así como de las propiedades (ópticas, electrónicas, polimorfismo, propiedades inhibitorias, catalíticas, mecanismos ácido-

base, etcétera) de los diferentes compuestos se realiza mediante espectroscopia (IR, RMN, ultravioleta/visible) y voltametría cíclica; mientras que a nivel teórico se requiere en la actualidad de cálculos basados en métodos *ab initio* y en la teoría de funcionales de la densidad (DFT) para obtener los espectros teóricos, así como las energías de los orbitales moleculares HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) y LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) y demás propiedades de interés de las moléculas en estudio.

Ingeniería:

Abarca grupos de investigación de disciplinas tales como: Ingeniería en materiales, Ingeniería aeroespacial, Ingeniería automotriz, investigación en propiedades mecánicas, electrónicas y estructurales de materiales, entre otras.

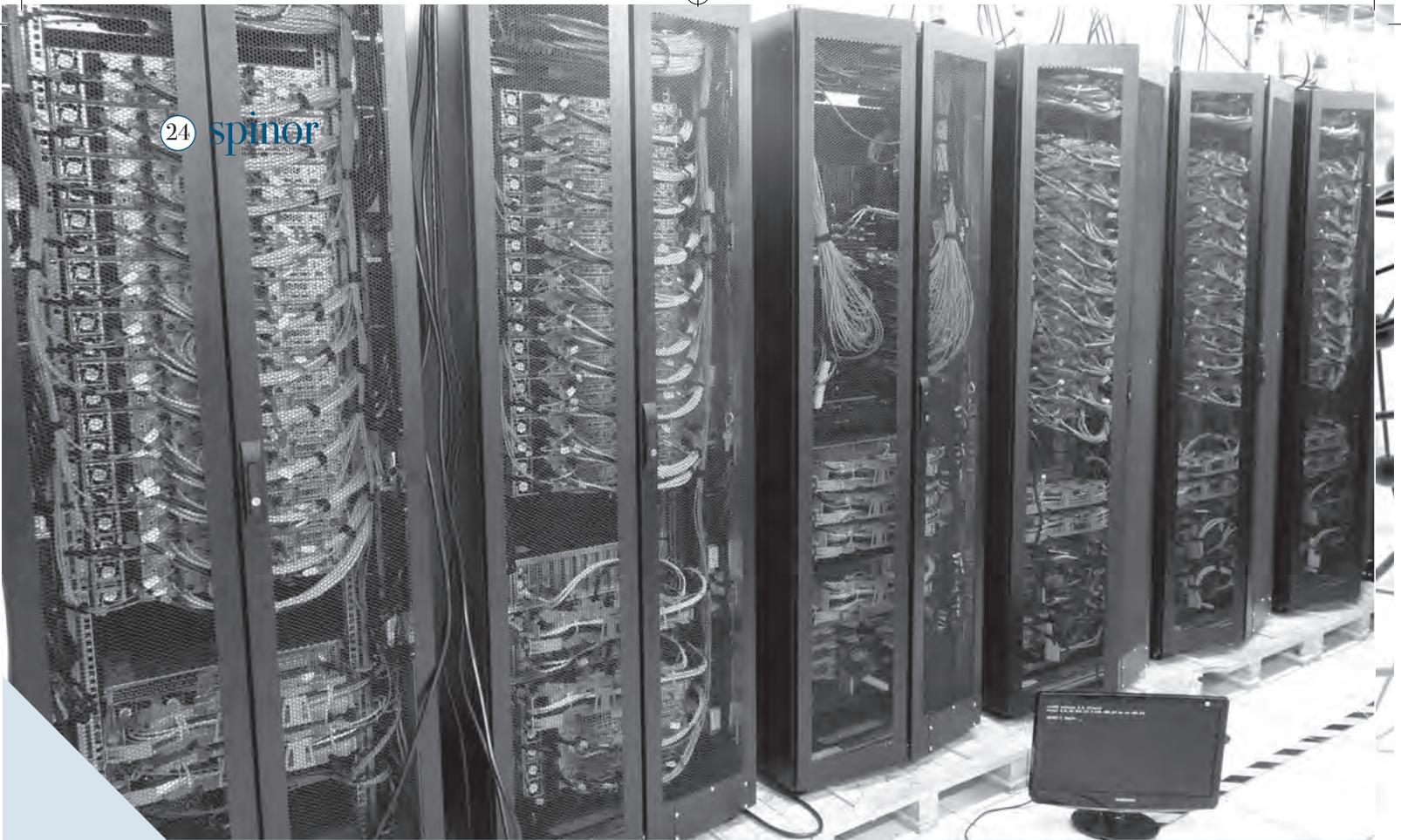
El objetivo principal en el área de ingeniería es el análisis de temperaturas, deformaciones, y demás propiedades sobre estructuras (puentes, piezas de coches, tornillos, etcétera.); esto se logra con el método de elementos finitos (FEA, Finite Element Analysis), que es una técnica de simulación por computador usada en ingeniería. Esta investigación tiene múltiples aplicaciones en el análisis y diseño para distintos campos de la ingeniería, tales como en construcciones metálicas, maquinaria industrial e hidráulica, aeronáutica, automoción, entre otros. El desarrollo de elementos finitos en estructuras suele basarse en análisis energéticos como el principio de los trabajos virtuales.

Física:

En física algunas áreas en las cuales se requiere cómputo de alto rendimiento son: Física médica, Física de aceleradores, Astropartículas, etcétera, pero en general cualquier área relacionada con Física de altas energías (HEP) demanda el uso de cómputo de alto rendimiento. Un claro ejemplo es el LHC: cada choque de partículas que se efectúa en este colisionador produce millones y millones de datos en cada uno de los detectores que se encuentran a lo largo de su camino, es necesaria una gran capacidad de cómputo y almacenamiento de datos para poder hacer frente a este tipo de tareas.

Matemáticas:

La matemática computacional abarca la investigación matemática en amplio espectro de áreas donde la infor-



mática juega un papel esencial, haciendo hincapié en los algoritmos, métodos numéricos y métodos simbólicos.

Software adquirido:

Para atender las demandas antes mencionadas se han adquirido las siguientes licencias de *software* para Física, Química, Ingeniería y áreas afines: Gaussian, Molpro, Vasp, Wien2K, TeraChem, Crystal, OrcaRCA, Quantum Espresso, Comsol Multiphysics, Lumerical, Silvaco, Synopsys y Cadence.

(S): ¿Quiénes serían los usuarios académicos del laboratorio al exterior de la universidad?

Dr. H: En una primera etapa, los usuarios académicos del LNS al exterior serán los investigadores y estudiantes de posgrado de la Universidad de las Américas campus Puebla (UDLAP) y del Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica (INAOE), quienes con la BUAP conformaron un consorcio para la operación del LNS. Sin embargo, se deberá atender la demanda de cualquier investigador a nivel nacional, de acuerdo al reglamento de uso que el consorcio establezca.

(S): ¿Cuál será el impacto del Laboratorio a nivel estatal y regional? ¿Se tiene

contemplada la colaboración con universidades de otros países de la región?

Dr. H: El impacto inicial esperado, consiste en el reforzamiento de los grupos de investigación y los posgrados de las instituciones que conforman el consorcio, dado que el equipo estará optimizado para atender sus necesidades.

Se espera un incremento en sus publicaciones y propuestas de patentes, así como una reducción en los tiempos de graduación. También, se espera poder atender en una siguiente etapa de crecimiento, las demandas de otros estados, del sureste de México y naturalmente de Centroamérica y el Caribe, ya que la conectividad de la red académica, define naturalmente áreas geográficas en México, que favorecen su aglutinamiento.

(S): ¿Está proyectado el uso del laboratorio para fines no académicos, por ejemplo, por parte de la industria?

Dr. H: Se ha planeado una segunda etapa del LNS en el que se brindarán servicios a otros sectores como la industria, el sector de servicios y el gobierno. Esto no sólo con el fin de promover el desarrollo económico y social, sino como una estrategia para el pago de mantenimiento y renovación del equipo, ya que tiene una alta tasa de depreciación. ■

Cinco tipos de tareas

que podemos realizar con el equipo de supercómputo del LNS

Manuel Martín Ortíz

Facultad Ciencias de la Computación – BUAP
mmartin@cs.buap.mx

Como se ha anunciado en los últimos medios se ha adquirido un equipo de supercómputo y se encuentra instalado en la BUAP, esta plataforma es el eje del Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México. Este equipo se ubica en Ciudad Universitaria y se están realizando las pruebas de funcionamiento y puesta a punto del mismo. La pregunta que surge sobre éste es ¿qué se puede hacer con él? A continuación explicaremos algunas de las cosas que es posible realizar en sus módulos principales. Con esto debemos entender que no se trata de una máquina de cálculo monolítica, sino de un conjunto de secciones

que permiten realizar varias tareas específicas con un gran poder de cómputo y velocidad.

El módulo más importante del equipo del LNS es la parte de HPC (High Performance Computing), éste se estructura como un clúster conformado por 4896 cores en 204 nodos de cómputo con una memoria distribuida de 25.5 terabytes. En ésta sección de HPC es posible ejecutar aplicaciones y programas que sean capaces de explotar su arquitectura paralela. Los problemas que se puedan dividir en tareas independientes mayoritariamente son excelentes candidatos para aprovechar dicho entorno. Algunos problemas clásicos de éste tipo son las simulaciones, modelos en representación matricial y vectorial,

modelos de ecuaciones diferenciales incluyendo al tiempo como variable; y problemas de optimización lineal y no lineal entre los más destacados.

El segundo módulo corresponde a dos nodos gordos (fat nodes) o de alta memoria, éstos no tienen muchos cores, solo 60, pero tienen un terabyte de memoria RAM (1024 gigabytes), esto permite tratar con problemas que requieran manejar gran cantidad de información o código en memoria, lo cual de manera local aumenta el rendimiento. Las soluciones a esta clase de problemas tratan de no utilizar comunicación entre nodos y centralizar el cálculo en un solo computador. Algunos de los problemas que se pueden atacar en estos módulos son cálculos teóricos de la estructura de bandas de semiconductores —base de la electrónica moderna—, así como modelado y simulación en ingeniería en sus ramas de grandes obras, estructuras antisísmicas y corrosión.

El tercer grupo lo componen dos máquinas de alta densidad de procesadores, éstas utilizan dos aceleradores de cálculo Xeon Phi 7120P —cada acelerador tiene 61 cores—, esto hace que cada una de éstas máquinas tenga onboard 146 cores. En particular debemos decir que en memoria no son las mejores —128 + 2x16 gigabytes—, pero en poder local de cómputo están en el segundo lugar considerando que éste se concentra en una misma máquina. Para aprovechar sus recursos se requiere diseñar programas o utilizar aplicaciones que exploten los 146 cores disponibles. Podemos decir que estos módulos se pueden aprovechar en soluciones que no demanden gran capacidad de memoria, pero sí gran poder de cómputo local, es decir velocidad de procesamiento paralelo con memoria compartida. Algunos de los problemas que se pueden resolver en este tipo de nodos son cálculos computacionales en mecánica de fluidos orientados a la aeronáutica, modelos climáticos, meteorología, estudios en finanzas y econometría.

El cuarto elemento lo componen dos nodos con aceleradores de cálculo de muy alta densidad de co-

res, cada equipo tiene dos aceleradores K40 de Nvidia con 2880 cores de arquitectura circular CUDA cada uno, lo cual ofrece 5760 GPGPU en cada máquina. Estos nodos están orientados a implementar soluciones donde se requieran muchos procesadores que trabajen en paralelo con diferentes juegos de datos. Las bibliotecas disponibles permiten resolver problemas que requieran cálculo intensivo en modelos matriciales y vectoriales, transformadas rápidas de Fourier, procesamiento de imágenes de gran tamaño —satelitales y de muy alta resolución—, procesamiento de señales, química cuántica; y producción de video y animaciones. Para ésta sección existen muchos programas gratuitos y comerciales que pueden explotar sus servicios.

Finalmente debemos destacar el sistema de almacenamiento externo de disco de la plataforma completa. La capacidad de almacenamiento total es de alrededor 700 terabytes reales. Este consiste en varios arreglos de discos duros que ofrecen redundancia para evitar las pérdidas de información. Este sistema de almacenamiento permite resolver problemas que requieran de mucho espacio en disco duro para ser ejecutados. Algunos temas son el conocido Big Data, la genómica, estudios de ADN y minería de datos.

Se debe resaltar que todos los módulos —incluyendo el de almacenamiento externo— se comunican mediante una red local de fibra óptica que opera a 56 gigabits por segundo. Cada máquina también se conecta con las demás a ésta velocidad.

Finalmente podemos decir que además de la plataforma de *hardware* —equipos— se ha adquirido una serie de programas especializados que unidos a los de *software* libre apoyarán a los investigadores, alumnos de posgrado y demás miembros de la comunidad a realizar sus proyectos en tiempos más cortos y que puedan atacar problemas más grandes.

Nuestro reto ahora es apropiarnos de los conocimientos que se requieran para utilizar el equipo con que ahora contamos. ■



BUAP

La Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

a través del

Programa de Maestría y Doctorado en Ciencias Matemáticas y Física Aplicada

CONVOCA

A los aspirantes que estén titulados de licenciatura y/o graduados de estudios de Maestría en Matemáticas, Física o carreras afines, a ingresar en el semestre 2015-2, el cual inicia el 03 de agosto de 2015, a los siguientes planes de estudio:

- Maestría en Ciencias Matemáticas (MCM)
- Doctorado en Ciencias Matemáticas (DCM)
- Maestría en Ciencias Física Aplicada (MCFA)
- Doctorado en Ciencias Física Aplicada (DCFA)

Los programas están Acreditados en el Padrón Nacional de Posgrados de Calidad del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología en la Categoría **CONSOLIDA-**

DOS y las maestrías en Ciencias Matemáticas y Física Aplicada con el **NIVEL INTERNACIONAL**.

Los aspirantes deberán cumplir con los requisitos de ingreso establecidos en el plan de estudios y descritos en la convocatoria de ingreso, publicada en la dirección electrónica:

<http://www.fcfm.buap.mx/posgrados/>

Información y entrega de documentos en la Secretaría de Investigación y Estudios de Posgrado. Facultad de Ciencias Físico Matemáticas.

Av. San Claudio y 18 Sur, Col. San Manuel, Ciudad Universitaria, Puebla, Pue. C.P. 72570, México. Tels.: (01222)2295500 Ext.: 7555.

Fechas importantes:	MCM	DCM	MCFA	DCFM
Registro de aspirantes*	Del 6 de mayo al 12 de junio			
Entrega de documentos	1 al 12 de junio			
Exámenes de admisión**	24 de junio		22 y 23 de junio	
Entrevista con el Comité de Admisión	30 de junio		2 de julio	
Publicación de resultados	3 de julio			
Entrega de documentos para la solicitud de beca y preinscripción	6 al 7 de julio			
Inscripción de cursos	10 de julio			
Inicio de cursos	3 de agosto			

*Horario de atención de 10:00 a 14:00 hrs, en el Edificio 111A-112 1er piso, Secretaría de Investigación y Estudios de Posgrado, Ciudad Universitaria, Av. San Claudio y 18 Sur, Col. San Manuel, Puebla, Pue. C.P. 72570, México. Tels.: (01222)2295500 Ext.: 7555.

****Resultados de la prueba escrita: 26 de junio.**



BUAP / *lp*

Subdirección de Enseñanza, Investigación y
Capacitación en Salud
Sesiones Generales 2015

6 Marzo
Oftalmología
Tema: Glaucoma

13 Marzo
Ginecología y obstetricia
Tema: Osteoporosis.

20 Marzo
Neumología.
Tema: Tuberculosis.

27 Marzo
Nutrición.
Tema: Agua y Salud.

3 Abril
Semana Santa

10 Abril
Dirección General.
Tema: Día Mundial de la Salud.

17 Abril
Congreso Sociedad Latinoamericana De Oncología Pediátrica.

24 Abril
Alergia e inmunología
Tema: Inmunizaciones.

8 Mayo
Reumatología
Tema: Lupus

15 Mayo
Reumatología
Tema: Fibromialgia y síndrome de fatiga crónica.

22 Mayo
Medicina Interna
Tema: HAS.

29 Mayo
Neurología
Tema: Esclerosis múltiple.

5 Junio
Dirección
Tema: Programa de donación de órganos

12 Junio
Banco de Sangre
Tema: Manejo de las reacciones transfusionales.

19 Junio
Otorrinolaringología
Diagnóstico y tratamiento de la otitis media supurativa y no supurativa.

26 Junio
Psicología
Tema: Adicciones.

03 Julio
Pediatria
Tema: Diagnóstico y tratamiento del sobrepeso y obesidad en niños y adolescentes.

10 Julio
Neurología
Tema: Enfermedad de Parkinson

17 Julio
Ginecología y obstetricia
Tema: Cáncer cervico uterino.

24 Julio
Enfermería
Tema: El autocuidado y su papel en la promoción de la Salud.

31 Julio
Gastroenterología
Tema: Hepatitis B y C.

07 Agosto
Pediatria
Tema: Lactancia al seno materno

14 Agosto
Subdirección de innovación y calidad.
Tema: Interculturalidad.

21 Agosto
Subdirección de innovación y calidad.
Tema: Asistencia humanitaria y caravanas de la salud.

28 Agosto
Epidemiología
Tema: Infecciones nosocomiales.

4 Septiembre
Oncología
Tema: Cáncer pulmonar.

11 Septiembre
Hematología
Tema: Linfoma.

18 Septiembre
Urología
Tema: Cáncer de próstata.

25 Septiembre
Cardiología
Tema: SICA.

02 Octubre
Cirugía General
Tema: Trasplante renal.

09 Octubre
Reumatología
Artritis Reumatoide.

16 Octubre
Epidemiología
Tema: Lavado de manos.

23 Octubre/Día del médico
09:00 hrs Oncología.
Tema: Cáncer de mama.
10:00 Hrs. Anestesiología
Tema: manejo del Dolor
12:00 Actividad Cultural
12:00 Entrega de reconocimientos

30 Octubre
anestesiología
Tema: Abordaje de la vía aérea difícil.

27 Noviembre
Neumología
Tema: EPOC

06 Noviembre
Radiología
Tema: Cómo entender el informe de monograma : categorías BI-RADS

13 Noviembre
Medicina Interna
Tema: Diabetes mellitus.

4 Diciembre
Epidemiología
Tema: VIH SIDA

11 Diciembre
Dirección General
Derechos humanos sistemas de salud

18 Diciembre
Sesión Cultural

