

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Motivación . . . . .	1
1.2. Objetivos y Principales Aportaciones . . . . .	4
1.3. Estructura de la Tesis . . . . .	6
<b>2. La Simulación de la Actividad Eléctrica Cardíaca</b>	<b>7</b>
2.1. Introducción . . . . .	7
2.1.1. Modelos Celulares Cardíacos . . . . .	10
2.2. Modelos de la Simulación Eléctrica Cardíaca . . . . .	11
2.3. Aproximación Computacional al Problema Matemático . . . . .	14
2.3.1. Casos de Estudio Cardíacos . . . . .	16
2.4. Estado del Arte . . . . .	17
2.5. Conclusiones . . . . .	18
<b>3. El Diseño de Proteínas de Propósito Específico</b>	<b>21</b>
3.1. Introducción . . . . .	21
3.2. Protocolo de Optimización de Proteínas . . . . .	24
3.3. Objetivos de Mejora del Proceso de Diseño de Proteínas . . . . .	27
3.4. Estado del Arte . . . . .	27
3.5. Conclusiones . . . . .	29
<b>4. La Computación de Altas Prestaciones</b>	<b>31</b>
4.1. Introducción . . . . .	31
4.2. Computación Paralela . . . . .	33
4.2.1. Paradigmas de Programación Paralela . . . . .	33
4.2.2. Principales Arquitecturas Paralelas . . . . .	34
4.2.3. Librerías de Soporte a la Computación Paralela . . . . .	36
4.3. Librerías de Cálculo Científico . . . . .	38

4.3.1.	Los Núcleos Computacionales BLAS y LAPACK . . . . .	38
4.3.2.	La librería PETSc . . . . .	40
4.3.3.	La librería MUMPS . . . . .	42
4.3.4.	La librería CVODE . . . . .	43
4.4.	Conclusiones . . . . .	44
<b>5.</b>	<b>El Sistema de Simulación Cardíaca CAMAEC</b>	<b>45</b>
5.1.	Introducción . . . . .	45
5.2.	Resolución del Problema Computacional . . . . .	48
5.2.1.	Estrategia de Paralelización . . . . .	49
5.2.2.	Sistema de Ecuaciones Lineales . . . . .	51
5.2.3.	Resolución Empleando Métodos Iterativos . . . . .	55
5.2.4.	Resolución Empleando Métodos Directos . . . . .	58
5.3.	Modelos Iónicos Celulares . . . . .	61
5.3.1.	Aceleración de Modelos: Tablas de Lookup . . . . .	62
5.4.	Integración de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias . . . . .	63
5.4.1.	Comportamiento de las Variables a Integrar . . . . .	65
5.4.2.	Métodos de Integración Empleados . . . . .	66
5.4.3.	El Método de Euler Implícito . . . . .	71
5.5.	Sistema de Grabación de Datos . . . . .	74
5.5.1.	Grabación de Datos Mediante E/S Paralela . . . . .	78
5.6.	Extensión a Geometrías 3D . . . . .	81
5.7.	Evaluación de Prestaciones del Sistema de Simulación . . . . .	82
5.7.1.	Tejido Bidimensional . . . . .	83
5.7.2.	Tejido Tridimensional . . . . .	85
5.8.	Estado Actual del Sistema de Simulación: Áreas de Investigación . . . . .	86
5.9.	Conclusiones . . . . .	89
<b>6.</b>	<b>La Optimización y Paralelización del Diseño de Proteínas</b>	<b>91</b>
6.1.	Introducción . . . . .	91
6.1.1.	Matrices de Energía . . . . .	93
6.2.	Optimización Secuencial . . . . .	94
6.2.1.	Comparativa de Prestaciones: Secuencial Optimizado . . . . .	96
6.3.	Aproximación Paralela: Reducción Dimensional . . . . .	97
6.3.1.	Formato de Matriz de Energías Distribuida . . . . .	99
6.4.	Fases de la Aproximación Distribuida . . . . .	100
6.4.1.	Fase Inicial . . . . .	101

6.4.2.	Optimización Local . . . . .	101
6.4.3.	Comunicación de Estadísticas con Procesos . . . . .	102
6.4.4.	Cálculo de la Nueva Distribución de Rotámetros . . . . .	103
6.5.	Validación Experimental . . . . .	104
6.6.	Conclusiones . . . . .	105
<b>7.</b>	<b>La Computación Basada en Grid</b>	<b>107</b>
7.1.	Antecedentes y Precursores . . . . .	107
7.2.	Objetivos Principales . . . . .	108
7.3.	Estado del Arte en Computación en Grid . . . . .	110
7.4.	La Alianza Globus y el Middleware Globus Toolkit . . . . .	114
7.4.1.	Componentes Principales de Globus Toolkit . . . . .	115
7.4.2.	Mecanismos de Seguridad Basados en Globus: GSI . . . . .	116
7.5.	Infraestructuras Grid de Producción: LCG-2 . . . . .	121
7.6.	Perspectiva de las Tecnologías Grid . . . . .	125
7.7.	Conclusiones . . . . .	126
<b>8.</b>	<b>El Sistema de Computación en Grid GMarte</b>	<b>127</b>
8.1.	Introducción . . . . .	127
8.2.	Generalidades y Componentes Principales . . . . .	130
8.2.1.	Abstracción del Acceso a los Sistemas de Información . . . . .	132
8.2.2.	Abstracción en la Definición de Tareas . . . . .	136
8.2.3.	Abstracción de la Ejecución Remota de una Aplicación . . . . .	138
8.2.4.	Ejecución en Recursos LCG-2 vía Delegación . . . . .	141
8.2.5.	Abstracción del Proceso de Metaplanificación . . . . .	142
8.3.	El metaplanificador OrchestratorScheduler . . . . .	144
8.3.1.	Selección de Recursos . . . . .	146
8.3.2.	Tolerancia a Fallos . . . . .	149
8.4.	Ejemplos Prácticos de Utilización de GMarte . . . . .	150
8.4.1.	Ejemplo de Ejecución Remota Simple . . . . .	150
8.4.2.	Ejemplo de Metaplanificación . . . . .	152
8.5.	Áreas de Aplicación de GMarte . . . . .	153
8.6.	Trabajos Relacionados . . . . .	154
8.7.	Conclusiones . . . . .	156
<b>9.</b>	<b>El Servicio Grid de Metaplanificación GMarteGS</b>	<b>159</b>
9.1.	Introducción . . . . .	159

9.2. Funcionalidad e Interacción . . . . .	162
9.3. Arquitectura e Implementación . . . . .	165
9.3.1. Especificaciones WSRF . . . . .	166
9.4. Infraestructura y Esquema de Seguridad Empleado . . . . .	168
9.5. Cliente del Servicio Grid de Metaplanificación . . . . .	169
9.5.1. Java Web Start: Desarrollo de Componentes Ubicuos . . . . .	170
9.5.2. Utilización del Cliente Gráfico . . . . .	171
9.6. Tolerancia a Fallos . . . . .	174
9.7. Trabajos Relacionados . . . . .	175
9.8. Conclusiones . . . . .	176
<b>10. Aplicación de las Tecnologías Grid a la Simulación Cardíaca</b>	<b>177</b>
10.1. Adaptación del Simulador a Entornos Grid . . . . .	177
10.1.1. Simulador Autocontenido . . . . .	178
10.1.2. Optimizaciones Dependientes de la Arquitectura . . . . .	180
10.1.3. Diversificando para Diferentes Arquitecturas . . . . .	180
10.1.4. Prestaciones del Simulador Adaptado . . . . .	181
10.1.5. Análisis Post-Mortem . . . . .	183
10.2. Ejecución de Casos de Estudio Cardíacos en Grid . . . . .	186
10.2.1. Ventana Vulnerable: Ejecución en Grid Local . . . . .	186
10.2.2. Isquemia de Miocardio: Ejecución en Grid Regional . . . . .	193
10.2.3. Isquemia de Miocardio: Ejecución en Grid Global . . . . .	196
10.3. Discusión Sobre los Resultados . . . . .	199
10.4. Utilización Transparente del Grid . . . . .	201
10.5. Conclusiones . . . . .	202
<b>11. Aplicación de las Tecnologías Grid al Diseño de Proteínas</b>	<b>203</b>
11.1. Introducción . . . . .	203
11.2. Requisitos de Ejecución Eficiente de gBiObj . . . . .	204
11.2.1. El Despliegue y Ejecución Remota de Aplicaciones Paralelas . . . . .	204
11.2.2. Gestión de Ficheros Compartidos . . . . .	206
11.3. Caso de Estudio: Ejecución Delegada en EGEE . . . . .	207
11.3.1. Infraestructura Grid . . . . .	208
11.3.2. Resultados de Ejecución . . . . .	209
11.4. Conclusiones . . . . .	210

<b>12. Conclusiones y Trabajos Futuros</b>	<b>211</b>
12.1. Resumen y Contribuciones Principales . . . . .	211
12.2. Proyectos y Producción Científica . . . . .	213
12.2.1. Publicaciones de Investigación . . . . .	215
12.3. Trabajos Futuros . . . . .	220
<b>A. Descripción de los Recursos Computacionales Utilizados</b>	<b>223</b>
A.1. Máquinas del GRyCAP . . . . .	223
A.1.1. El Cluster Ramses . . . . .	223
A.1.2. El Cluster Kefren . . . . .	224
A.1.3. El Cluster Odin . . . . .	224
A.1.4. La Estación de Trabajo Bastet . . . . .	225
A.2. Máquinas del Grupo ASDS . . . . .	225
<b>B. Descripción de un Caso de Estudio con el API de GMarte</b>	<b>227</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>231</b>
<b>Acrónimos</b>	<b>249</b>