

TERAFLOP

CESCA

REVISTA DEL CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA

Núm. 30 • Març 1998

Memòria d'activitats 1997





Consell de Govern

President

Xavier Trias

Vicepresident

Joan Albaigés

Vocals

David Serrat

Antoni Giró

Antoni Gurguí

Antoni Caparrós

Carles Solà

Jaume Pagès

Enric Argullol

Josep M. Nadal

Joan Martí

Jaume Porta

Jaume Josa

Secretari

Josep A. Plana

El Patronat de la Fundació Catalana per a la Recerca va visitar el CESCA el passat 15 de gener, coincidint amb la primera reunió del Consell de Govern al 1998, per tal de fer balanç de les activitats realitzades i debatre els plans de futur del Centre.

En la mateixa reunió del Consell de Govern es va aprovar l'entrada de la UOC al Consorci que, ara per ara, ja incorpora totes les universitats públiques catalanes.



Presentació

L'any 1997 ha estat enriquidor per al CESCA. D'una banda s'han acabat les reformes iniciades a finals de 1995 per l'anterior president, l'Honorable Senyor Macià Alavedra, que han reforçat el Centre i l'han dotat d'una estructura més àgil i flexible, i, d'altra banda, s'han consolidat els serveis que s'ofereixen des de tres eixos diferents d'activitat: el càlcul d'altres prestacions, les comunicacions i la promoció científicotècnica.

Aquesta edició especial del TERAFLUP presenta les tasques desenvolupades, les millores introduïdes i els beneficis obtinguts. El creixement de més d'un 60% en l'ús d'aquests serveis, tant els de càlcul com els de comunicacions, demostra l'encert de compartir aquests recursos de ràpida obsolescència tecnològica per tal de rendibilitzar les inversions realitzades.



Amb vista a l'any 1998, el CESCA té dues fites a aconseguir.

Primer, respecte a les comunicacions, el proper 1 de maig l'Anella Científica renovarà la seva tecnologia ATM i augmentarà la seva velocitat d'acord amb el creixement del tràfic experimentat. La significativa reducció de costos que suposarà la nova Anella, permetrà, si hi ha el consens necessari, millorar els serveis Internet en les institucions consorciades per entrar més favorablement en la nova Era de la Informació. En segon lloc, i respecte als serveis de supercomputació, es planteja la renovació tecnològica del maquinari per augmentar la seva potència de càlcul i substituir el Cray Y-MP. A més, de la mateixa manera que aquest aprofitament compartit de recursos beneficia a la comunitat universitària i a diferents organismes de l'Administració de la Generalitat, és necessari fer accessibles aquests recursos a d'altres institucions.

Per aconseguir ambdues fites caldrà la voluntat política de totes les entitats consorciades per continuar cooperant, buscant el consens necessari per avançar junts, tal com es va fer en el moment de la creació del CESCA, i d'aquesta manera podrem continuar contribuint a millorar el rendiment de les institucions beneficiàries dels serveis del CESCA.

Xavier Trias

President de la FCR i del CESCA

Barcelona, 13 de febrer de 1998



Les reformes impulsades per la CIRIT l'any 1995 s'han consolidat al llarg de 1997 per assentar una infraestructura bàsica al servei de la comunitat científicotècnica que necessita càlcul d'altres prestacions per desenvolupar els projectes tant de recerca bàsica en diverses àrees de coneixement, com de transferència de tecnologia a la indústria.

Aquestes reformes han modernitzat i dinamitzat l'estructura i la funcionalitat del Centre apropant-lo a les necessitats de l'usuari final; han augmentat la seva competitivitat compartint els seus recursos per rendibilitzar les inversions realitzades; han forçat la renovació de tot l'Equip Directiu; i han centrat els serveis del Consorci en tres grans àrees d'actuació: el càlcul d'altres prestacions, la gestió de l'Anella Científica i del nus de RedIRIS a Catalunya, i la promoció de l'ús i els beneficis d'aquestes tecnologies per a la nostra comunitat.

La col·laboració amb el Centre Europeu de Paral·lelisme de Barcelona (CEPBA), sota la coordinació del Centre de Computació i Comunicacions de Catalunya (C⁴), ha augmentat la potència punta disponible per als nostres usuaris des dels 19,88 Gflop/s propis a 44,96 Gflop/s, per facilitar-los un total de 443.864 hores de càlcul, un 64% més que l'any 1996.

L'Anella Científica, patrocinada per la Fundació Catalana per a la Recerca (FCR), ha transmès 7.041 GB, un 66% més que l'any 1996 i, per primera vegada des de la seva creació a l'abril de 1993, s'ha congestionat en el nostre punt d'accés pocs mesos abans de la seva renovació (el proper mes de maig). A més, la incorporació de tres institucions noves a la xarxa estatal RedIRIS, patrocinada per la CICYT, ha augmentat a 51 el nombre total d'institucions catalanes connectades a l'Anella.

Gràcies als programes d'accés a Grans Instal·lacions Europees, finançats íntegrament per la Comissió Europea, 35 investigadors han vingut

Constitució de la Comissió Permanent del CESCA



La Comissió Permanent del CESCA va constituir-se el 13 de març de 1997 i, des de llavors, ha assumit les funcions que li ha delegat el Consell de Govern. A la fotografia apareixen els membres de la Comissió el dia de la seva constitució (d'esquerra a dreta): M. T. Espinal (vocal), A. Giró (president), J. Carrera (vocal), J. A. Plana (vicepresident), M. Huguet (secretari), M. Barranco (vocal) i M. Valero. El dia 2 de setembre, el Dr. Giró va ser substituït per Dr. David Serrat, que és l'actual president.

Xavier Trias assumeix la presidència del Centre



El conseller de Presidència, Xavier Trias, va ser elegit president de la FCR el 23 d'octubre de 1997. Segons els estatuts del Centre, el senyor Trias va passar a ser automàticament el president del CESCA en substitució del senyor Macià Alavedra. El nostre president va visitar el Centre el passat 20 de novembre. Un moment d'aquesta visita es mostra a la foto. D'esquerra a dreta: Mateo Valero (director del C⁴), Josep A. Plana (director de la FCR), Xavier Trias, Jordi Martí (cap del gabinet del conseller de Presidència) i Miquel Huguet (director del CESCA).

durant 1997 a usar les màquines del CESCA i del CEPBA, convidats per 15 grups de recerca. Per difondre l'ús i els beneficis d'aquestes tecnologies, el CESCA ha organitzat dues aules de supercomputació, dues jornades i un seminari, ha publicat vuit números de la revista TERAFLUP i ha participat en quatre projectes addicionals.

És sobre aquests tres eixos que el CESCA basa la seva oferta de serveis a la comunitat científicotècnica: unes eines de càlcul potents a l'abast de tothom, una tecnologia de comunicacions avançada per poder accedir-hi i una difusió dels beneficis que tot això aporta per al progrés del país.

El maquinari

Durant la constitució del CESCA l'any 1991, la FCR va signar un acord marc de cooperació amb IBM i Cray, llavors líders en maquinari científicotècnic basat en tecnologia vectorial. Aquest acord inicial va perdurar fins al 1996 i ha permès que el maquinari evolucionés d'acord amb el creixement del mercat de supercomputació. Les ampliacions realitzades l'any 1997 han estat les últimes operacions realitzades com a fruit d'aquest acord:

■ El Cray Y-MP ha augmentat la seva capacitat en disc de 40 a 72 GB.

■ L'IBM SP2 ha incrementat la potència punta d'11,70 a 18,55 Gflop/s, la memòria d'11 a 12 GB i l'espai en disc de 359 a 431 GB.



L'IBM SP2 va actualitzar-se el 5 de maig de 1997 i va incrementar la potència punta d'11,70 a 18,55 Gflop/s, la memòria de 11 a 12 GB i l'espai en disc de 359 a 431 GB.

L'SP2 ha continuat estant present a la llista TOP500 del rànquing mundial de supercomputadors: a la posició 382 al juny i a la 284 al novembre. Malauradament, l'actualització tecnològica de l'SP2 que es va produir a l'abril no va ser tinguda en compte per la primera llista publicada; si ho hagués estat, el CESCA hauria estat a la posició 195.

La potència disponible per als nostres usuaris s'ha duplicat respecte a la de l'any passat gràcies a la continuïtat de l'acord de col·laboració amb el CEPBA, que ha permès accedir al seu Origin 2000 de 64 processadors, 8 GB de memòria principal, 288 GB en disc i una potència punta de 25,08 Gflop/s. Aquesta màquina, patrocinada per la CICYT, la CIRIT i la UPC, és la més potent de tot l'Estat i ocupa la posició 173 a la llista TOP500 del novembre passat.

Així, la potència total disponible a finals de 1997 era de 44,96 Gflop/s i va disminuir a 43,63 Gflop/s el 19 de desembre com a conseqüència del tancament del Cray Y-MP que havia estat en funcionament des del febrer de 1993.

Per als projectes acadèmics, tant de recerca bàsica com de transferència de tecnologia, el cost de l'hora de càlcul ha estat per a l'SP2 i l'O2000 de 120 PTA/h i per al Cray Y-MP de 400 PTA/h durant el primer semestre i de 160 durant el segon. Aquesta diferència de preu es va establir per forçar la migració de les aplicacions del Cray cap a les altres màquines. Un cop aconseguida aquesta fita, el preu es va poder reduir per fer-lo més competitiu d'acord amb el seu rendiment i el cost d'operació.

La compartició dels recursos entre ambdós centres, coordinats pel C⁴, ha permès obtenir el màxim rendiment en l'ús dels respectius recursos per optimitzar les inversions realitzades. El factor d'utilització de l'SP2 i l'O2000 ha estat del 57% i del 62% respectivament, xifres que corresponen al rendiment esperat en una màquina paral·lela (~60%). El Cray, en canvi, ha tingut un rendiment del 39%, molt inferior a l'esperat d'una màquina vectorial (~90%), com a conseqüència de la seva obsolescència tecnològica.



L'Origin 2000 del CEPBA (a la dreta) amb 64 processadors és la màquina més potent de l'Estat i ocupa la posició 173 del TOP500 del novembre passat.



El programari

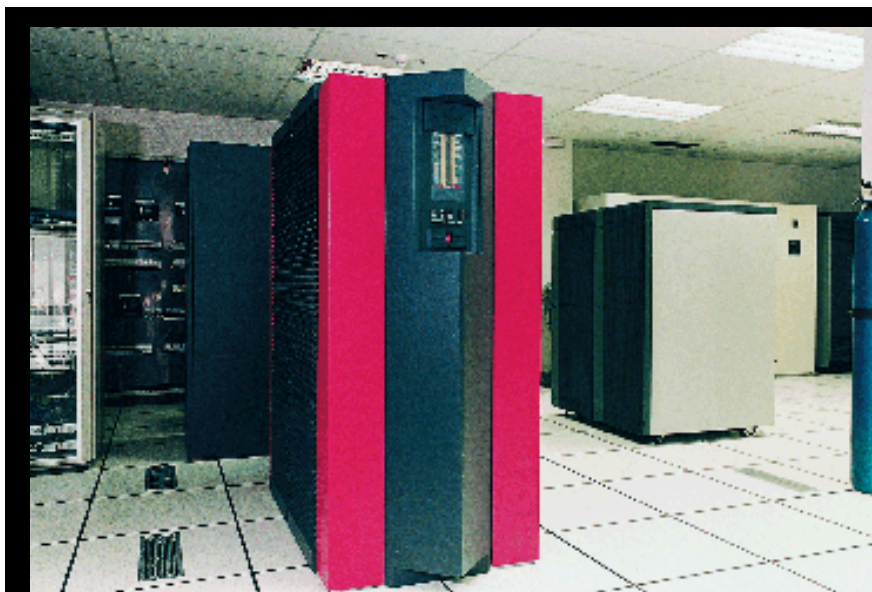
El CESCA posa a disposició dels seus usuaris un programari de supercomputació molt especialitzat que respon a llurs necessitats de càlcul. Es poden distingir dues grans categories: programari de base i aplicacions.

El programari de base és homogeni per a totes les màquines i el constitueixien els diferents compiladors (FORTRAN, C, C++,...), les llibreries de càlcul numèric (ESSL, NAG, LAPACK, BLAS...) i les llibreries de paral·lelització (MPI, PVM, PARMACS...). El 1997 es va ampliar aquesta gamma instal·lant a l'SP2 el GCC (el compilador de C del GNU project). Amb el tancament del Cray es va donar de baixa la llibreria de càlcul numèric IMSL que, per altra

banda, ningú ja no feia servir.

També, només amb propòsit d'avaluació durant el primer semestre, es va instal·lar temporalment el High Performance FORTRAN i el Portland FORTRAN. La manca d'interès en aquestes noves eines ha fet desestimar la seva compra de moment.

Pel que fa a la segona categoria, el CESCA disposa actualment de 21 aplicacions. El 1997 va reforçar la seva oferta de programari de química computacional amb l'adquisició de l'ADF (Amsterdam Density Functional) i del paquet de programes UniChem per a l'SP2. Aquest programa està format per un conjunt de codis (CADPAC, DGAUSS, MNDO) de diferents metodologies de càlcul amb una interfície



El Cray Y-MP deixa de funcionar

El Cray Y-MP (a la foto) que fins fa pocs mesos estava en funcionament al CESCA va desconectar-se el passat 19 de desembre. Aquest fet va provocar que algunes aplicacions que fins ara s'executaven en aquesta màquina passessin a funcionar en l'SP2. El Cray Y-MP va tenir l'any 1997 un rendiment del 39%, una xifra molt inferior a l'esperada d'una màquina vectorial, com a conseqüència de la seva obsolescència tecnològica.

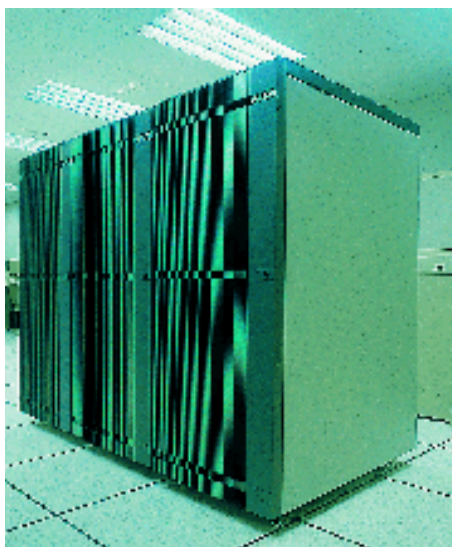


Història de la fórmula de consum: De les UC a les HC

gràfica que funciona sobre una estació de treball. Com a complement, s'han actualitzat els programes Gaussian (versió 94, revisió E1) i GAMESS (versió abril 97).

També s'ha fet èmfasi en el programari de bases de dades paral·leles per experimentar en noves tecnologies, actualitzant l'Oracle (versió 8) i instal·lant tot el conjunt d'eines associades per facilitar l'accés a tota la seva funcionalitat.

Gràcies a l'acord de col·laboració amb IBM s'han instal·lat a l'SP2 eines de mineria de dades (Intelligent Miner) i el gestor de bases de dades DB2 que han permès continuar en aquesta línia de tractament de grans conjunts de dades.



El Cray Y-MP ha augmentat la seva capacitat en disc de 40 a 72 GB el 1997.

A mesura que han anat augmentant els recursos disponibles a l'usuari, s'ha simplificat el càlcul del consum realitzat per fer-lo més proper i entenedor.

$$\mathbf{1995: UC = (2 * cpu_int + cpu_batch) * preu * tarifa + 10 * MB_disc + temps_connexió + 120 * treballs}$$

La Unitat CESCO (UC) del 95 es calculava per a cada usuari segons les hores de CPU usades en mode interactiu i batch, l'espai de disc ocupat per dia, el temps de connexió en minuts, el nombre de treballs executats i la institució a la qual pertanyia l'usuari: universitat del Consorci (tarifa=1), altres universitats (2), altres institucions públiques (1,5) i empreses (5). El preu era de 18.000 PTA/h per al Cray Y-MP i de 9.000 PTA/h per a l'IBM SP2.

En principi, cada UC corresponia a una PTA, un 80% finançat per la FCR i un 20% per la institució de l'usuari. Per exemple, un investigador del Consorci que durant un mes s'hagués connectat a l'SP2 durant 10 hores, que hagués executat 100 treballs en batch, que hagués tingut una mitjana d'ocupació diària de disc de 50 MB i si hagués usat un total de 300 hores de CPU, hagués consumit 2.727.600 UC, de les quals se li carregarien únicament 545.520 PTA (IVA no inclòs).

$$\mathbf{1996: UC = hores_proc * preu * tarifa + 10 * max(0, MB_disc - 100)}$$

L'any 1996, les Unitats CESCO per usuari es van convertir en Unitats Computacionals (UC) per projecte on es comptabilitzava únicament el temps de processador usat i l'espai de disc ocupat quan aquest sobrepassava la quota donada de 100 MB per projecte. La tarifa es reduïa a tres possibles valors: universitats del Consorci (1), altres universitats (1,25) i empreses (2). El preu era de 6.000 PTA/h per al Cray i de 3.000 PTA/h per a l'SP2.

Així, doncs, a l'usuari anterior amb el mateix consum se li hagués comptabilitzat 900.000 UC, de les quals se li carregarien 180.000 PTA. No obstant això, en la nova etapa es va optar per deixar "barra lliure" als projectes acadèmics.

$$\mathbf{1997: UC = hores_proc * preu + 3 * max(0, MB_disc - 100)}$$

L'any 1997 es va eliminar el concepte de tarifa de la fórmula, es va reduir a un terç el preu del disc i es va disminuir el preu a 3.000 PTA/h per al Cray i a 750 PTA/h per a l'SP2. Llavors, una Hora Computacional (HC) era:

$$\mathbf{1 HC = 1 hora CPU SP2 = 15 minuts CPU Cray}$$

A partir del juliol de 1997, un cop augmentada la capacitat de disc tant del Cray com de l'SP2, es va eliminar aquest concepte de la fórmula i es va reduir el preu del Cray a 1.000 PTA/h. Per tant,

$$\mathbf{1 HC = 1 hora CPU SP2 = 45 minuts CPU Cray}$$

No obstant això, el cost dels projectes acadèmics per a les universitats del Consorci era de 120 PTA/h i per a les altres institucions públiques, 200 PTA/h. Així doncs, per al projecte mencionat prèviament, la Universitat hauria subvencionat al CESCO 36.000 PTA.

$$\mathbf{1998: HC = hores_proc}$$

Enguany, tots els projectes són comptabilitzats per les hores de processador consumides de manera que el concepte d'UC és ja història. El preu per hora computacional es manté sense inflació i es revaloritzarà al llarg de l'any quan es renovi el maquinari.

Millores per una utilització eficaç dels nostres recursos

El Departament d'Assistència Tècnica gestiona i manté el maquinari i el programari de supercomputació per tal de garantir als usuaris el funcionament correcte dels recursos propis i els del CEPBA, sota la coordinació del C⁴. A més, també assessora als usuaris tant en la utilització eficaç dels recursos disponibles com en els problemes que puguin aparèixer en el dia a dia i elabora la documentació on-line sobre aquests i la millor manera d'usar-los.

Mentre que el nombre d'usuaris durant l'any 1997 ha augmentat respecte a l'any anterior de 363 a 579, el de projectes ha disminuït, de 179 a 112, com a conseqüència de l'agrupament dels usuaris afins.

El nombre total d'hores computacionals usades ha estat de 443.864, les quals han sobrepassat amb escreix les 210.183 HC de 1996. Com és tradicional en els centres de supercomputació, el gran consum es concentra en uns pocs projectes: els 10 primers consumeixen el 51% d'hores i els 20 primers, el 71%.

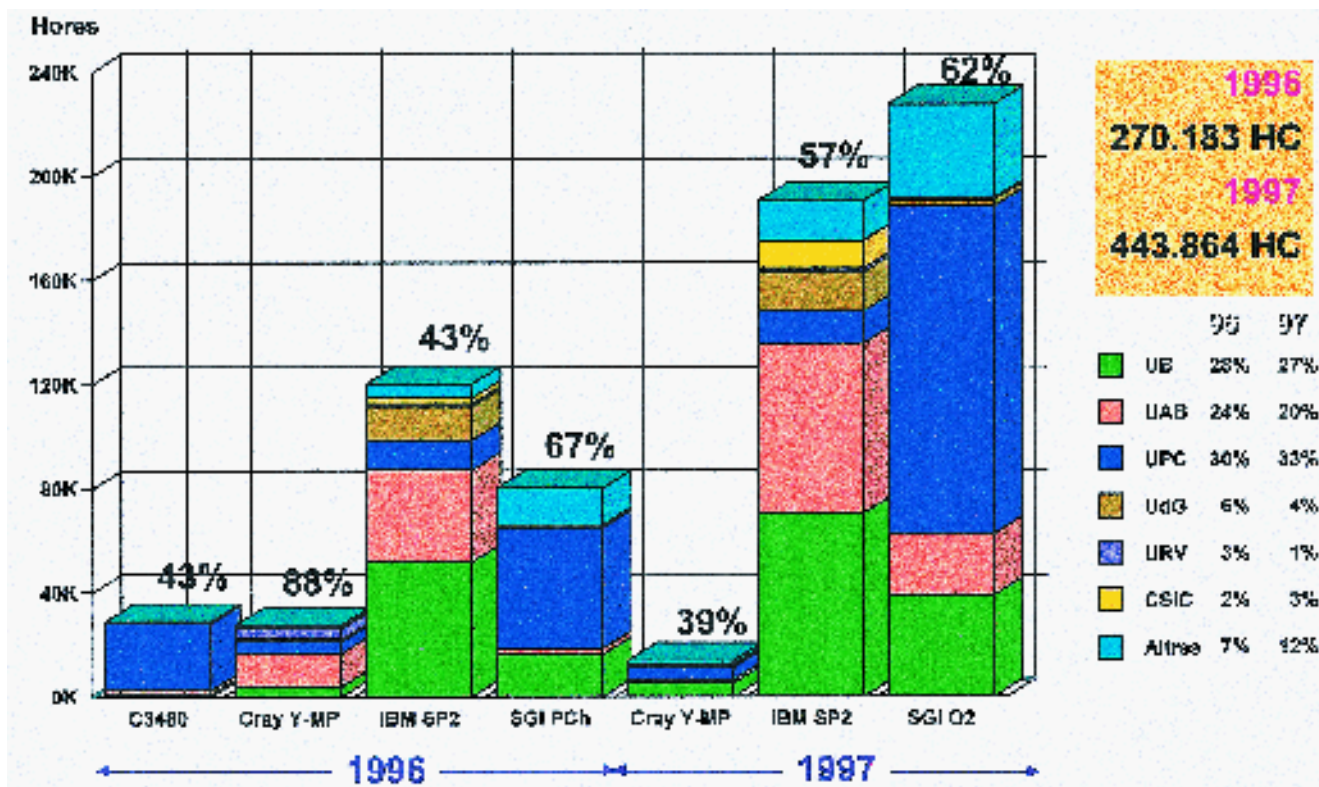
La gran majoria de projectes són acadèmics, tant de recerca bàsica com de transferència de tecnologia. També s'ofereix el servei diari de la predicció del temps a Catalunya, patrocinat pel Departament de Medi Ambient i la FCR, amb la col·laboració de la UB.

El temps de resposta també ha millorat: un 76% dels 58.774 treballs executats han hagut d'esperar menys d'una hora per iniciar-se. L'augment de potència també ha permès executar treballs més llargs. La durada mitjana d'un treball a l'SP2 va ser de 10,5 hores el 1997, un 76% més que el 1996; i a l'Origin 2000, va ser de 5,2 hores, un 79% més.

El nombre de consultes telefòniques el 1997 (1.456) ha superat les rebudes el 1996 (960), la majoria de les quals (un 74%) s'han pogut resoldre al

Consum per institució i per màquina

El gran consum s'ha concentrat en tres institucions: la UPC ha consumit un 33% de tots els recursos; la UB, un 27%; i la UAB, un 20%. Les màquines paral·leles han estat funcionant a ple rendiment, mentre que el Cray ha estat poc utilitzat.



mateix moment de la trucada. Les consultes més freqüents han estat sobre els gestors de cues (20%), els sistemes operatius (11%), la paral·lelització (10%) i els compiladors (6%).

S'ha recopilat la descripció de 57 projectes, amb 456 publicacions generades, 45 dels quals s'han publicat al TERAFLUP. La descripció de cada projecte s'ha incorporat a la base de dades documental del centre (<http://www.cesca.es>) on es pot generar automàticament una pàgina web amb tota la informació disponible (títol, cap de projecte, descripció, publicacions, visitants, etc.).

En total, a la nostra base de dades documental, hi ha hagut 16.738 accesos provinents de 12.600 hosts dife-

rents, els quals han accedit a un total de 115.061 pàgines, un 31% de les quals són d'informació sobre els nostres serveis, i s'han transmès 1,1 GB de dades.

El Departament ha realitzat diverses millores per optimitzar l'ús dels nostres recursos:

- Al gener es va reduir a un terç el preu del disc i a partir del juliol, un cop feta l'ampliació de disc prèviament mencionada, es va eliminar aquest concepte de la fórmula.

- Al gener també es va crear un espai virtual temporal de 2 GB usable per qualsevol usuari connectat a qualsevol processador que ampliava els 100 MB disponibles per projecte.

- Al febrer, es va incrementar el nombre de processadors disponibles per

als treballs paral·lels de 8 a 14 i, a partir del novembre, a 28.

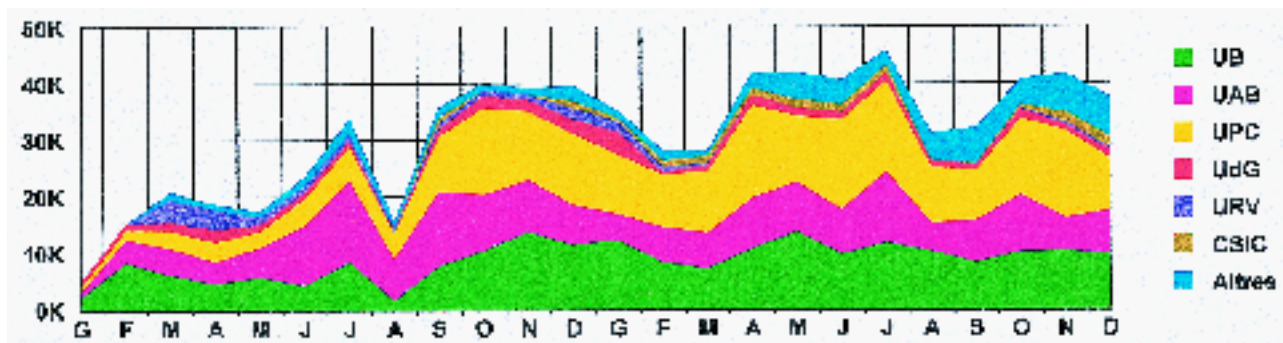
- Al juliol, es va augmentar el rendiment del sistema substituint les dues targetes de 128 MB per processador per quatre de 64 MB.

- Al novembre, es va ampliar encara més l'ús del sistema cap al mercat comercial reconfigurant les adreces IP dels processadors de manera que fossin visibles externament per a les aplicacions client-servidor.

Finalment, també s'han recopilat sis aplicacions característiques de la càrrega dels nostres usuaris per avaluar les futures noves adquisicions de maquinari. Així, s'ha descartat la compra d'una nova màquina vectorial per substituir el Cray Y-MP.

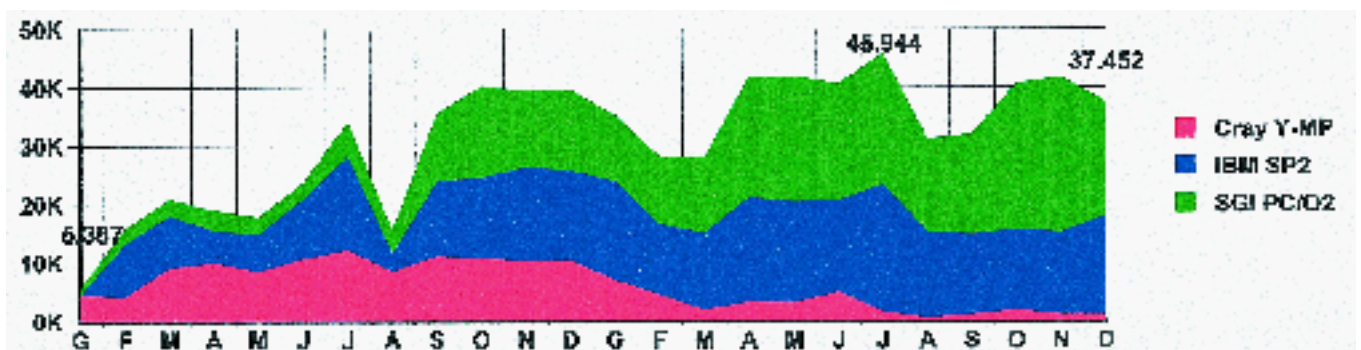
Consum mensual per institució

El consum mensual de recursos de les diferents institucions ha anat augmentant progressivament al llarg de l'any: de les 270.183 HC usades el 1996 s'ha passat a les 443.864 HC de 1997.



La compartició de recursos

L'ús irregular de les màquines per part de les diferents institucions/proyectos fa que la compartició de recursos rendibilitzi les inversions en maquinari.



Més de 50 institucions connectades



L'ordinador del CBUC instal·lat a l'Annexus.



La Sun UltraSPARC que allotja el servidor de News.

El Departament de Comunicacions i Operacions gestiona l'Anella Científica, patrocinada per la FCR, donant suport i ajuda a les organitzacions que s'hi connecten, tant en el moment de la connexió com a l'hora de resoldre els problemes que puguin sorgir en el dia a dia. A més, s'encarrega de l'administració del nus de RedIRIS a Catalunya, patrocinat per la CICYT, fent la instal·lació física de les connexions als seus equips. El Departament també gestiona i manté tot l'equipament d'infraestructura bàsica (servidors de correu, llistes de distribució i web, xarxa local, instal·lacions tècniques, etc.), realitzant còpies de seguretat tant de maquinari d'infraestructura bàsica com de supercomputació.

En total, el 1997 s'han transmès per l'Anella Científica 7.041 GB que també han sobrepassat amb escreix els 4.252 GB de l'any 1996. Actualment hi ha 51 institucions connectades a la Xarxa Científica. L'any 1997 s'hi han incorporat l'Hospital Universitari de Tarragona Joan XXIII, l'INEFC de Lleida i el Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya (CBUC). D'altra banda l'Institut Català de Tecnologia s'ha donat de baixa.

S'han realitzat diverses modificacions per tal de millorar el funcionament de la xarxa tant per a la connectivitat com per als serveis oferts:

■ Des del mes de febrer s'han recopilat estadístiques del tràfic mensual acumulat, enviat i rebut, per diverses institucions (UdG, URV, UdL i RedIRIS).

■ Al mes d'abril es va augmentar fins a 2 Mbps la connexió per radioenllaç de la UdL i la Xarxa Telemàtica Educativa de Catalunya del Departament d'Ensenyament.

■ Al juliol el Centre d'Informàtica de la Generalitat de Catalunya (CIGCAT) va connectar el seu propi router al nostre commutador de l'Anella esdevenint el CESCO un punt neutre per a l'intercanvi de tràfic entre les institucions de la Xarxa i les de la Generalitat.

■ També des del juliol, es proporciona un nou servei d'estadístiques que permet consultar l'ocupació de les diferents interfícies dels routers situats al CESCO.

■ Al novembre i al desembre, la UB i la UPC es van connectar directament al nostre commutador per tal de descongestionar el tràfic suportat pel punt d'accés del CESCO a l'Anella.

■ També al desembre, la UdL, la UdG i la URV van connectar-se a un nou radioenllaç de 2 Mbps de capacitat real per cada universitat.

El CESCO ha continuat atenent les consultes de les institucions connectades, majoritàriament d'interrupció del servei i de routers (en total, 288). Un any més, també ha contribuït a la celebració de les jornades Centre



El radioenllaç situat a l'edifici Annexus amb la torre Collserola al fons.

de Física de Benasque (Osca) proporcionant el suport tècnic a la instal·lació d'una línia punt a punt de 64 Kbps que connectava l'Annexus amb la petita població dels Pirineus.

L'any 1997 el CESCO ha incorporat tres noves activitats:

■ El servei de News que fins aleshores proporcionava parcialment la UAB i la UPC per a tota la Xarxa Científica. Aquest servei s'afegeix als que ja estan disponibles (Mbone i servidor secundari del domini .es) i es complementarà amb els de ftp mirrall i proxy-cache que optimitzaran els accessos WWW internacionals.

■ La gestió del servidor del Catàleg Col·lectiu d'Universitats de Catalunya (CCUC) del CBUC, la seva connectivitat a la Xarxa Científica i l'administració del domini cbuc.es. L'objectiu és optimitzar l'ús dels recursos d'ambdós consorcis i dur a terme el servei de biblioteques amb el menor cost possible per a les universitats catalanes.

■ L'allotjament de les revistes virtuals del Consorci HOISE-NM: Primeur, EIT i VMW.

Finalment, al llarg de l'any 1997 s'ha estat estudiant i debatent la nova configuració de l'Anella Científica, basada en tecnologia ATM, que ha de substituir l'actual, basada en tecnologia DQDB i que expira el proper 30 d'abril.

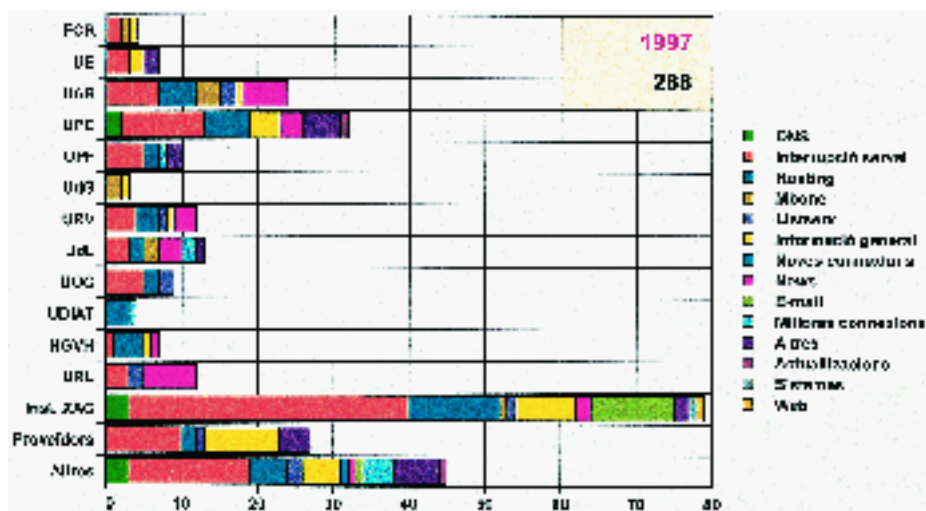
L'estructura de l'Anella Científica, a debat en el TAC'97

La Trobada de l'Anella Científica (TAC'97) va debatre el passat 13 de maig l'estructura que l'Anella ha de tenir en un futur. A la jornada de discussió (a la foto) van assistir els membres de la Comissió Tècnica de l'Anella Científica (CTAC) i representants de les universitats catalanes. A l'abril d'enguany s'acaba el conveni amb Telefónica, que va instal·lar l'Anella Científica el 1993. En la jornada del TAC'97 es van presentar noves propostes per donar forma a la futura Anella de la mà de Telefónica i del Centre de Telecomunicacions de la Generalitat de Catalunya. Finalment, la proposta del Centre de Telecomunicacions ha estat l'escolida per gestionar d'ara en endavant l'Anella Científica.



Consultes de comunicacions

S'han atès un total de 288 consultes, majoritàriament d'interrupció del servei i de routing. Noteu que la majoria de consultes rebudes són d'institucions de fora del Consorci.





OCTANE/SI, que acollirà la interfície gràfica de l'UniChem, el Servei de Cerca de Farmacòfors i la base de dades de projectes i visitants dels Programes de Mobilitat del Centre.

Difusió de la CAP

El Departament de Promoció difon l'ús i els beneficis de les tecnologies d'altres prestacions. Amb aquest objectiu organitza activitats de formació, dona a conèixer els serveis del Centre a través del TERAFLUP i d'altres mitjans de comunicació, participa en projectes institucionals i experimenta amb noves tecnologies. En aquest darrer aspecte destaca el treball d'assessorament en bases de dades que s'ha fet durant l'any.

L'Aula de Supercomputació, organitzada amb la col·laboració del CEPBA, ha tingut dues edicions el 1997. La primera va rebre 19 assistents i es va centrar bàsicament en les telecomunicacions presentant la nova tecnologia ATM. La segona va tractar en detall la

programació paral·lela sobre arquitectures amb memòria distribuïda i hi van participar 28 persones.

S'han programat diverses activitats per presentar i debatre les noves tecnologies disponibles:

- La Jornada Catalana de Supercomputació (JoCS'97), també en col·laboració amb el CEPBA, per debatre i difondre els resultats i experiències derivats de l'ús de les plataformes actuals.

- La Trobada de l'Anella Científica (TAC'97) per debatre la visió de futur que Telefónica i el Centre de Telecomunicacions tenen de l'Anella Científica amb els directors dels serveis d'informàtica i els responsables de comunicacions de les universitats del Consorci.

- El seminari "Cerca en bases de dades d'estructures químiques 3D", per presentar el Servei de Cerca de Farmacòfors (SCF). Aquest servei s'ha creat amb el patrocini de la CIRIT i està orientat vers el camp del disseny de fàrmacs. Les eines que proporciona són capaces de trobar fàrmacs potencials que s'assemblin a un patró donat mitjançant cerques en bases de dades de compostos d'interès biològic. Inicialment usat per tres laboratoris farmacèutics, està obert a d'altres indústries que en vulguin fer ús.

A més, s'han donat 33 conferències per presentar els resultats obtinguts per diversos projectes (24) i els nostres serveis (9). També, s'han rebut 15 visites interessades a conèixer les nostres instal·lacions, la més nombrosa ha estat la Jornada de Portes Obertes dins de les activitats de la Setmana de la Ciència, organitzada per la FCR, que va apropar la supercomputació a més de 110 visitants.

A l'abril de 1997 el TERAFLUP, el butlletí mensual del CESCA, va canviar de format i va passar a ser una revista a tot color per fer-lo més atractiu. Fins a finals de 1997 s'han publicat 21 números en el format antic i 7 en el nou. A més, amb motiu de la JoCS'97, es va publicar un TERAFLUP especial on es recollia un resum de les ponències presentades i una descripció de diversos projectes dels usuaris del CESCA i del CEPBA.

El Centre participa en diversos projectes institucionals per promoure l'ús i els beneficis d'aquestes tecnologies i la cooperació amb d'altres universitats i centres de supercomputació:

- Els programes d'accés a Grans Instal·lacions de la Unió Europea, HCM i PECO, que es van tancar el passat mes de setembre i que, des del 1993 han permès que 110 investigadors europeus hagin accedit a les instal·lacions del CESCA i del CEPBA, convidats per 37 grups de recerca catalans en un total de 129 estades (d'una mitjana de 9,12 setmanes).

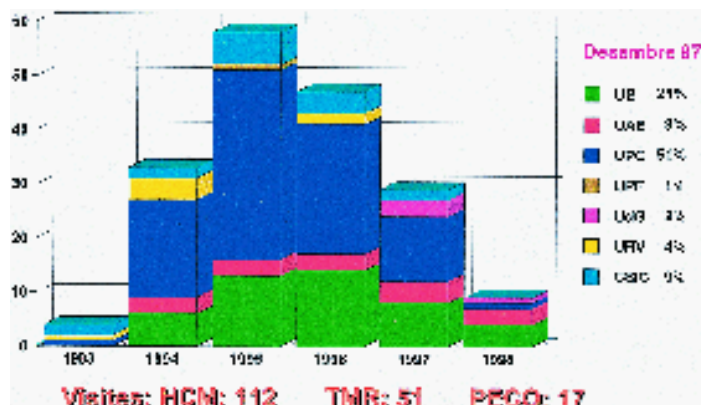
- El programa *Training and Mobility of Researchers* (TMR), continuació del



Una imatge d'una de les ponències de la JoCS (30 d'octubre de 1997).

Programes de mobilitat: visites per institució

Totes les universitats membres del Consorci i el CSIC han gaudit de la possibilitat d'acollir investigadors europeus interessats a accedir a les instal·lacions del CESCA i del CEPBA. La UPC ha estat la institució que han sol·licitat més convidats (91).





Els Drs. J. J. Pérez, J. Ibáñez, M. Orozco i M. Huguet (d'esquerra a dreta) en el seminari *Cerca en bases de dades d'estructures químiques 3D* que es va celebrar el passat mes de juny.



El CESCA, l'Institut d'Estadística de Catalunya i IBM van signar el passat 18 de juliol un conveni per aplicar les tècniques de mineria de dades al conjunt del cens de Catalunya. A més d'aquest conveni, el CESCA n'ha signat 3 més el 1997: amb el CBUC, amb Labs. Almirall, i amb CESUP-RS (Brasil).

HCM, que continuarà vigent fins a finals de 1998 amb probable continuïtat fins a l'abril del 2000 i que ha permès durant 1996 i 1997 que 19 grups de recerca convidessin un total de 51 investigadors europeus per treballar conjuntament a les instal·lacions del CESCA i del CEPBA.

■ El projecte *HPCN Europe On-Line Newsmagazine* (HOISe-NM), coordinat per Genias (Holanda), va crear una revista virtual (*Primeur*) l'any 1996 sobre el món de la computació d'altres prestacions i les comunicacions a Europa, que des de llavors es publica mensualment. També dins d'aquest mateix projecte el CESCA ha elaborat una relació dels centres de supercomputació europeus classificats per països. Durant 1997 s'han creat dues noves revistes virtuals: *EuroInfoTech* (EIT), per a

tots aquells interessats en les telecomunicacions, les innovacions tecnològiques, la radiodifusió i la televisió a la Unió Europea; i *Virtual Medical Worlds* (VMW), que parla de telemedicina i computació d'altres prestacions aplicada als entorns mèdics. A finals d'any es va acordar passar el servidor des de SARA al CESCA.

■ L'*Spanish Awareness Campaign* (SAC), coordinat pel CEPBA, difon l'ús de la computació paral·lela a tres sectors: l'automòbil, la maquinària industrial i les finances. Aquest projecte va durar des de l'abril a desembre de 1997.

■ L'InfoWin, coordinat per Telefónica I+D, vol promocionar les comunicacions, les tecnologies i els serveis avançats entre diversos països europeus i vol ser un camp de proves per a les innovacions en el món de la co-

municació i la transmissió de dades. El projecte va iniciar-se el gener de 1996 i durarà fins a finals de 1998. Per a aquest projecte, el CESCA va publicar l'article "ATM: Origins and State of the Art" al llibre *ATM in Europe. ACTS Trials*

■ El *Development of an Interdisciplinary Round Table for Emerging Computer Technologies* (DIRECT), coordinat per EPCC (Escòcia), va començar l'1 de novembre de 1997 i s'acabarà el 31 d'octubre de l'any 2000. Es tracta d'un grup de debat per anticipar-se i satisfer les necessitats dels usuaris de supercomputació i planificar l'impacte de les noves tecnologies en les grans instal·lacions.

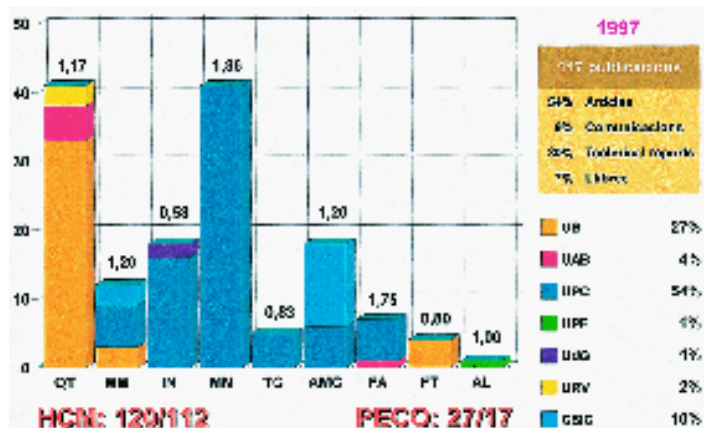
El Departament, per segon any consecutiu, ha continuat impulsant l'ús de les noves tecnologies orientades al mercat comercial que ja es beneficien del càlcul d'altres prestacions: les bases de dades paral·leles (des del 1996) i les eines de mineria de dades (des del 1997).

Així, s'ha assessorat un projecte industrial i tres d'acadèmics, on s'han demostrat els beneficis en qüestió de temps de resposta que comporten aquestes noves tecnologies. També s'ha signat un conveni amb l'Institut d'Estadística de Catalunya i IBM per aplicar les tècniques de mineria de dades al conjunt del cens de Catalunya, on s'espera obtenir informació que l'estadística tradicional no pot abordar.

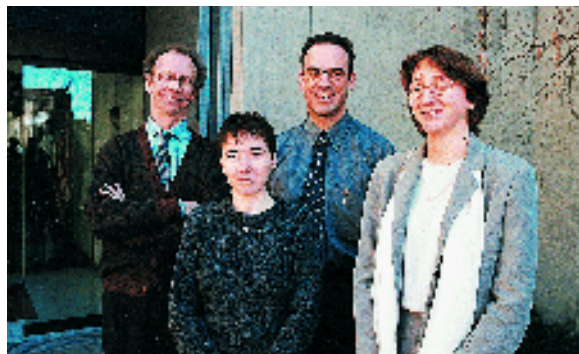
A partir de 1998, es considera que aquesta etapa d'experimentació ha finalitzat i el suport es donarà des del Departament d'Assistència Tècnica, tal com es fa per les aplicacions científicotècniques.

Programes de mobilitat: publicacions per àrea i institució

Els programes de mobilitat HCM i PECO, tancats al setembre de 1997, han donat fruit a prop de 150 publicacions en les diverses àrees de recerca. La gràfica mostra el nombre total de publicacions, per a cadascuna de les àrees de recerca, amb desglossament per universitats. La mitjana de publicacions per visitant, indicativa de la productivitat en una determinada àrea, es mostra a sobre de les barres.



Els departaments



Assistència Tècnica



Comunicacions i Operacions



Promoció



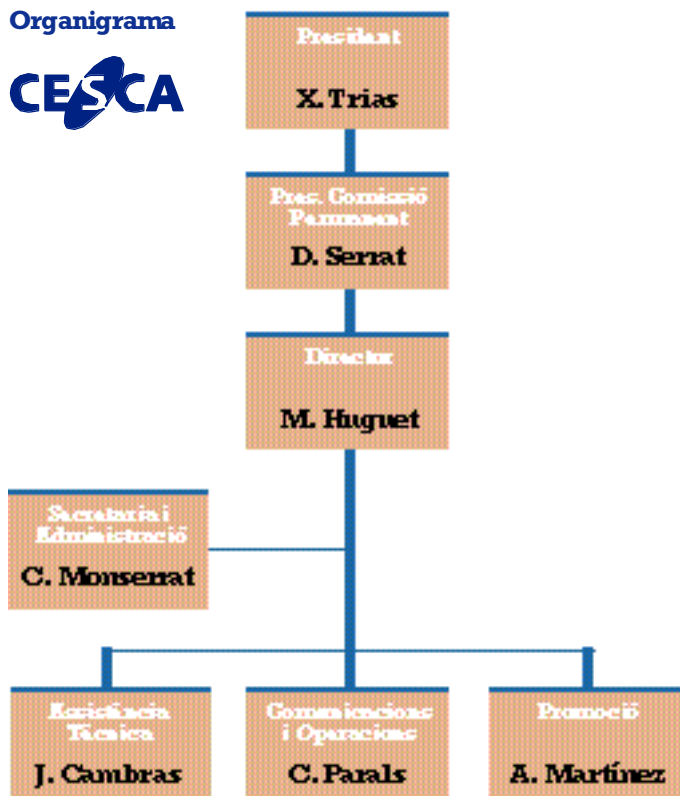
Secretaria i Administració

El creixement dels serveis consolidats

	1994	1995	1996	1997
Potència punta (Gflop/s)	1,49	3,83	23,92	44,96
Nombre d'usuaris	300	350	363	579
Nombre de projectes	40	86	179	112
Hores computacionals	29.792	30.258	270.183	443.864
Consultes			960	1.456
Tràfic Anella (GB)	509	1.836	4.252	7.041
Aula de Supercomputació		467	283	47
Conferències	24	42	29	33
Jornades, seminaris i congressos (assistents)	1 (76)		1 (258)	3 (168)
Visites al Centre			9	15
TERAFLOP	2	10	8	8
Programes de mobilitat	34	62	54	35

Així doncs, s'han incorporat nous serveis als de 1996: el de News, la gestió dels servidors del CCUC i del HOISe-NM, la cerca de farmacòfors i l'experimentació en mineria de dades. Tots ells han crescut en els tres eixos en els quals el CESCA ha consolidat la seva oferta de serveis a la comunitat científicotècnica, com es pot veure a la taula superior: unes eines de càlcul potents a l'abast de tothom, una tecnologia de comunicacions avançada per accedir-hi i una difusió dels beneficis que tot això aporta per al progrés del país.

Organigrama



1. Mateo Valero
Simulació d'arquitectures
i benchmarks
UPC (10,2%)

2. Santiago Álvarez
Estructura electrònica de
molècules i sòlids inorgànics
UB (9,6%)

3. Josep Maria Lluch
Reaccions de transferència
protònica i d'hidrogen
UAB (5,7%)

4. Antoni Oliva
Estructura i reactivitat de comple-
sos metàl·lics. Aplicacions en síntesi
orgànica i en química ambiental
UAB (4,5%)

5. Xavier Oliver
Simulació numèrica de processos
UPC (4,3%)

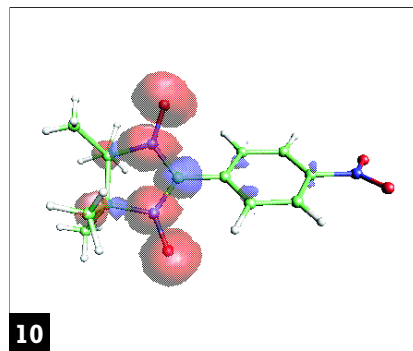
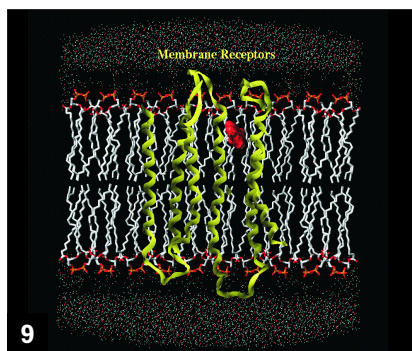
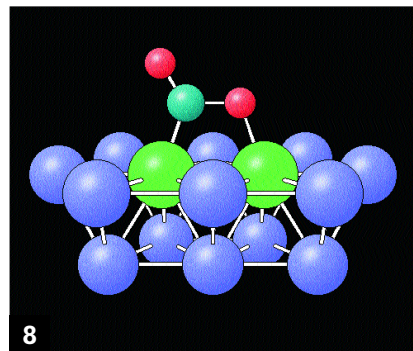
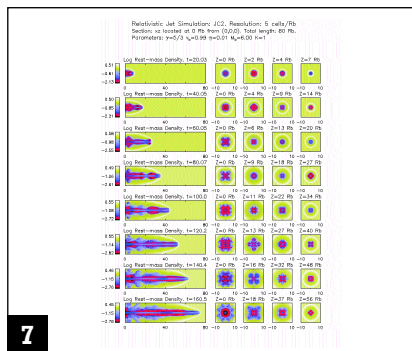
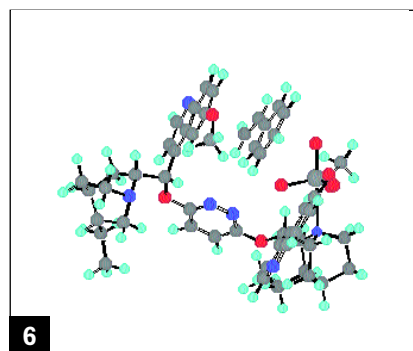
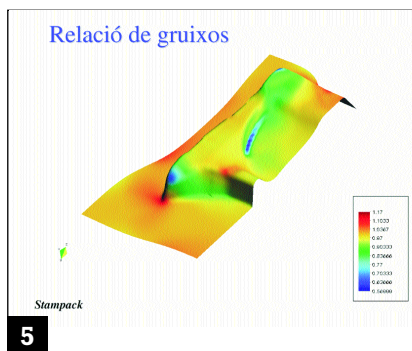
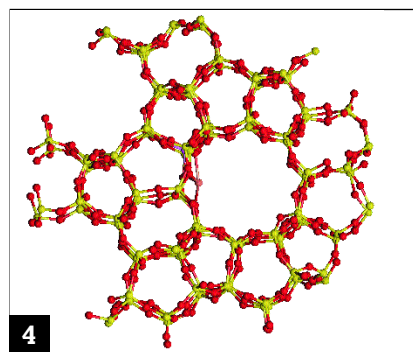
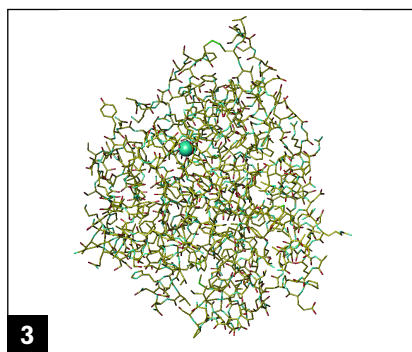
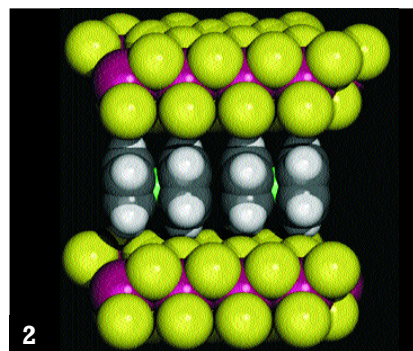
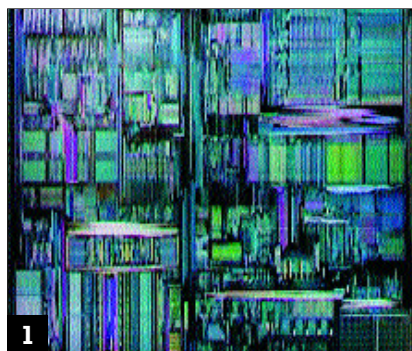
6. Agustí Lledós
Modelització molecular de
sistemes amb metalls de transició
UAB (3,8%)

7. José María Ibáñez
Fluids relativistes en astrofísica
i física d'objectes compactes
UV (3,6%)

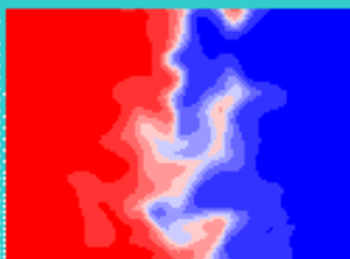
8. Francesc Illas
Models *ab initio* en catàlisi
heterogènia i ciència de materials
UB (3,6%)

9. Leonardo Pardo
Modelització i simulació
de processos biològics
UAB (3,2%)

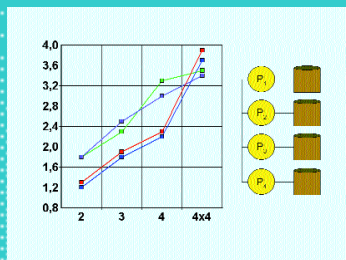
10. Juan José Novoa
Enginyeria de cristalls moleculars
d'interès tecnològic
UB (3,0%)



Els nostres serveis de supercomputació



La recerca bàsica



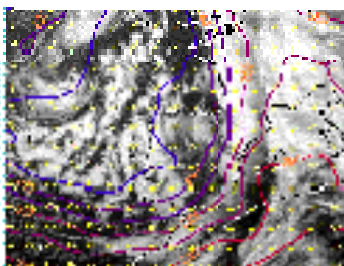
L'experimentació
en noves tecnologies



El càlcul puntual
(time-to-market)



El càlcul diari



La transferència
tecnològica



Edita



Gran Capità, 2-4
08034 Barcelona
Tel. (93) 205 64 64
Fax: (93) 205 69 79
<http://www.cesca.es>
teraflop@cesca.es

AMB EL SUPORT DE



Generalitat
de Catalunya



FUNDACIÓ
CATALANA
PER A LA
RECERCA

Universitat de Barcelona
Universitat Autònoma
de Barcelona
Universitat Politècnica
de Catalunya
Universitat Pompeu Fabra
Universitat de Girona
Universitat Rovira i Virgili
Universitat de Lleida
Universitat Oberta
de Catalunya
CSIC

TERAFLOP

DIRECTOR

Miquel Huguet

COORDINADORA

Alicia Martínez

REDACCIÓ

Mònica Tudela

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà & Associats

FOTOGRAFIES

Jordi Pareto

DIPÒSIT LEGAL: B-33512-94

ISSN: 1134-6671