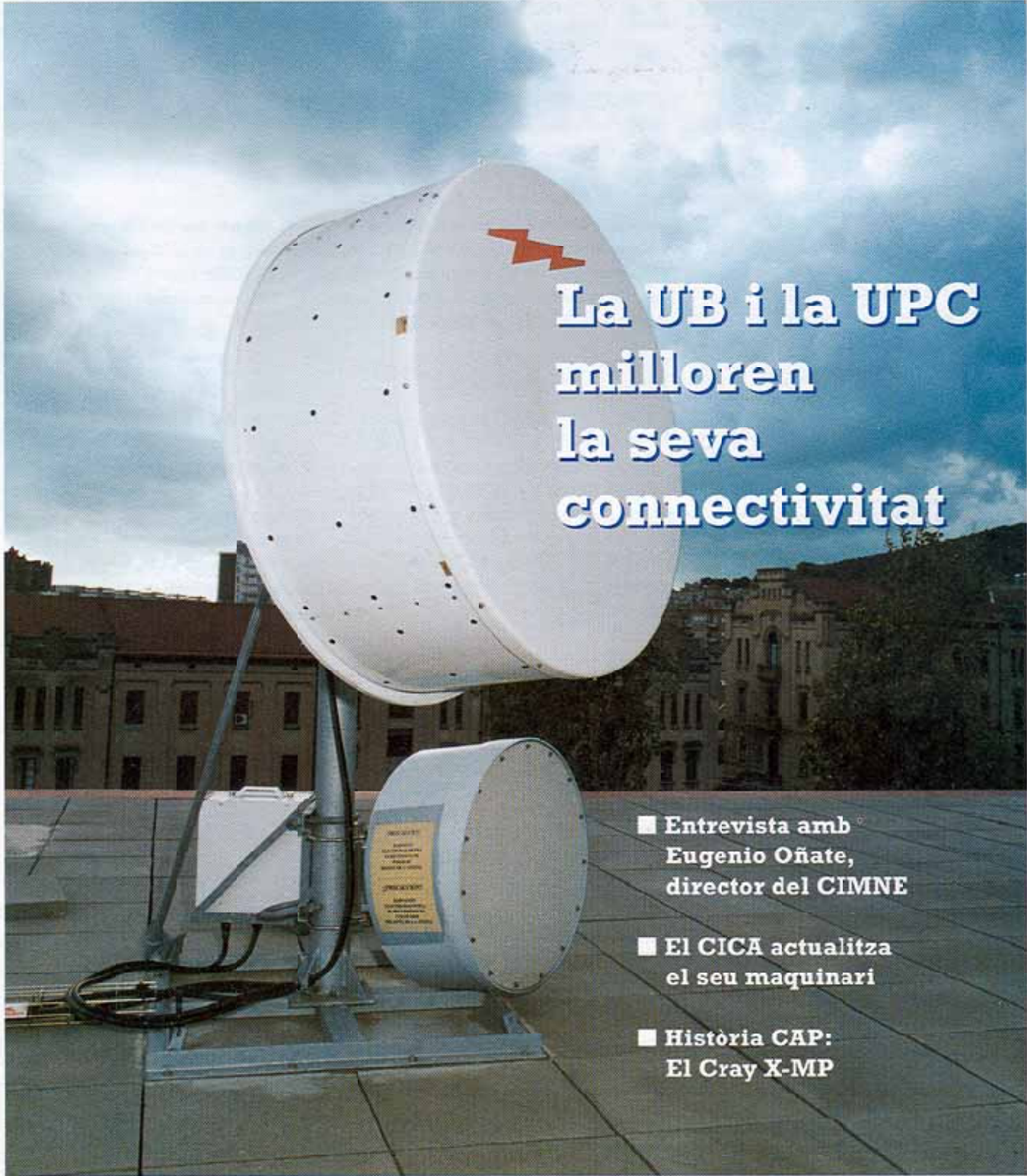


TERAFLOP

CESCA

REVISTA DEL CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA

Núm. 29 • Febrer 1998



La UB i la UPC milloren la seva connectivitat

- Entrevista amb
Eugenio Oñate,
director del CIMNE
- El CICA actualitza
el seu maquinari
- Història CAP:
El Cray X-MP

■ El tan esperat creixement del consum com a motor per a la reactivació de l'economia espanyola finalment s'ha produït. També en la supercomputació. Diversos centres han renovat el seu maquinari o encara ho estan fent: CICA, EPPE, CESGA, CIEMAT, CASA i CEPBA. En comptes de parlar de tots alhora, hem preferit començar pel CICA per raons històriques, en ésser el primer centre de supercomputació de l'Estat. En cada número aprofitarem l'ocasió per fer una revisió històrica del maquinari de cada centre.

Per tal de no oblidar la història dels computadors d'altres prestacions (CAP) a l'Estat, estrenem una primera fitxa amb la crònica del nostre Cray X-MP. Esperem comptar amb la col·laboració de fabricants i centres per continuar narrant les característiques d'altres grans màquines que han fet història.

A portada també us destaquem l'entrevista amb el Prof. Eugenio Oñate, expresident del Consell Científic del CESCA, amb motiu del 10è aniversari del CIMNE i del tancament del projectes HCM i PECO (que us vam comentar en el número anterior), i el canvi de configuració que hem fet a l'Anella Científica forçat pel primer col·lapse que s'ha produït des de la seva creació l'any 1993.

Bon Any Nou!

Miquel Huguet, Ph.D.
Director del CESCA

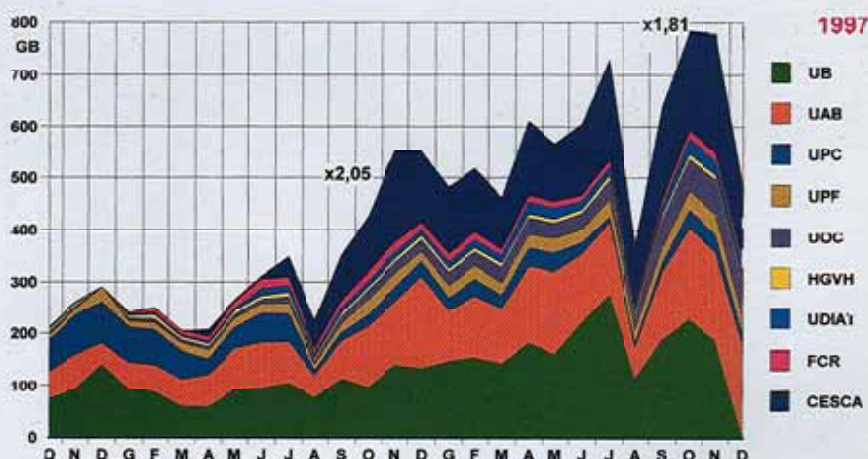
EL CANVI HA PERMÉS OPTIMITZAR LES COMUNICACIONS I DONAR UN MILLOR SERVEI A LES INSTITUCIONS DE LA XARXA

La UB i la UPC milloren la seva connectivitat

L'Anella Científica va ser concebuda l'any 1993 i, des de llavors, mai no s'havia congestionat com fins fa unes setmanes, quan el Catàleg Col·lectiu d'Universitats de Catalunya va connectar-se al CESCA com a entitat independent. Per evitar aquest col·lapse, la UB i la UPC estan connectades directament al CESCA des de finals de 1997.

■ El trasllat del Catàleg Col·lectiu d'Universitats de Catalunya (CCUC) a l'Edifici Annexus (vegeu TERAFLUP 28) i la seva connexió a l'Anella Científica com a entitat independent (abans pertanyia a la UPC) el passat mes de novembre van originar una ralentització de les comunicacions entre el CBUC i les universitats connectades a l'Anella, principals usuàries d'aquest servei.

En concret es va fer palès un augment del tràfic en el segment Ethernet del punt d'accés al CESCA que es col·lapsava. Aquesta saturació no es notava tant en operacions com accedir a la Web o fer un ftp, però en aplicacions interactives, com és el cas de telnet, sí que es posava de manifest la lentitud. Un exemple d'aquesta manca de velocitat la van detectar aquells que accedien al CCUC, ja que



La gràfica mostra el tràfic rebut per punt d'accés de l'Anella. Com es pot comprovar el volum de tràfic de la UB és gairebé similar al del CESCA. Amb les modificacions que s'han introduït en l'estructura de l'Anella, el volum de tràfic de la UB i la UPC ja no passen pel segment Ethernet del CESCA, que ara està més descongestionat.

en moltes ocasions, quan teclejaven, no sortien immediatament a la pantalla les lletres que ells estaven escrivint.

Per tal de millorar aquesta situació, descongestionar el tràfic i fer més fluides les comunicacions entre les institucions connectades a l'Anella, es va decidir canviar el camí d'accés al CESCO de les institucions amb punt d'accés a la

UB i crear un accés directe que uneix la UB i l'Edifici Annexus on es troba el switch Catalyst 3000. Aquest accés directe s'ha fet aprofitant un enllaç de fibra òptica ja existent que travessa

l'avinguda Diagonal per sota i que uneix l'Edifici Annexus amb l'antiga seu del CESCO a la Facultat de Biologia. Aquest canvi es va fer el 25 de novembre a la tarda. Amb aquesta mesura s'ha aconseguit descarregar el tràfic d'accés al CESCO provinent de l'Anella (vegeu la gràfica) de manera que el punt d'accés de la UB s'usarà exclusivament a partir d'ara com a backup.

Amb la UPC s'ha seguit un procés similar i s'ha aprofitat una fibra òptica també existent que connectava l'Annexus amb el mòdul B2 del Campus Nord de la UPC. Així, des del 17 de desembre, la connexió al Catalyst és directa. L'ac-

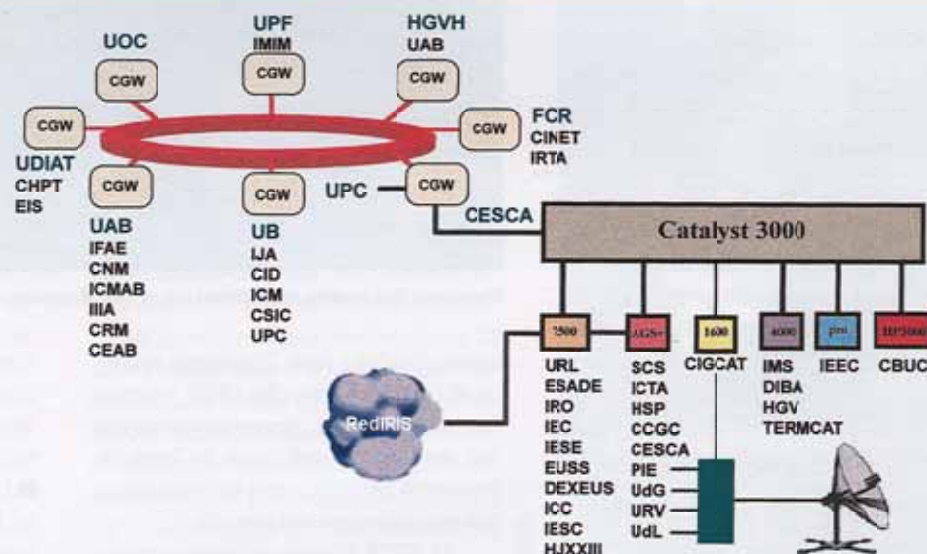
cés anterior (com en el cas de la UB) es farà servir també només com a backup.

D'altra banda, la UB està en procés de connectar el seu firewall (talla-foc) al router de RedIRIS. Mentrestant, el tràfic de la UB es canalitza a través del router que està connectat amb el Catalyst del CESCO per tal de solucionar els problemes d'accés que van sorgir amb l'arribada del CCUC. En un futur aquest router es tornarà a connectar a l'accés de la UB.

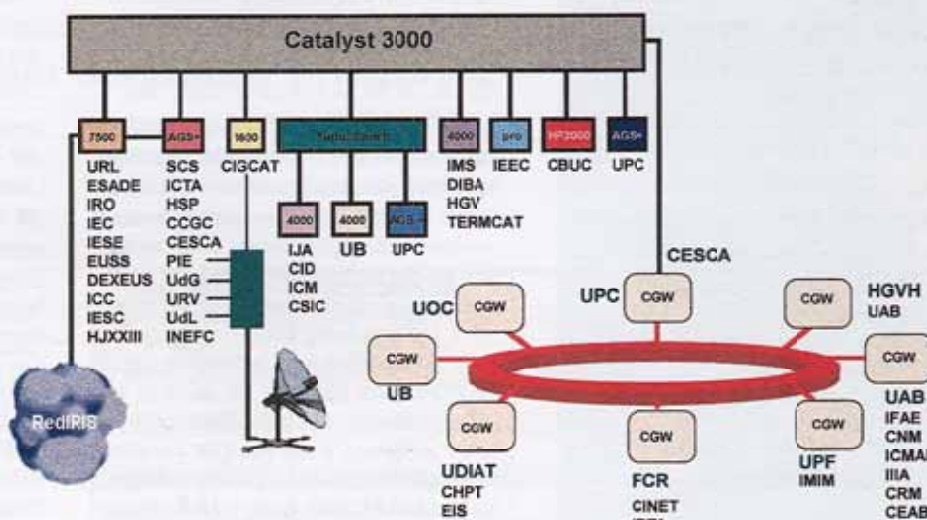
En conseqüència, s'ha aconseguit dividir per deu el temps d'espera per accedir al CCUC. Tots aquests canvis que s'han dut a terme en els darrers mesos a l'Anella Científica, han permès optimitzar les comunicacions i donar un millor servei a les institucions connectades.

La Xarxa Científica

■ L'esquema de l'Anella Científica de damunt mostra l'estructura de la xarxa abans de les modificacions introduïdes.



■ A sota, la UB i la UPC ja apareixen connectades directament al Catalyst 3000 del CESCO.



EL CENTRO INFORMÁTICO CIENTÍFICO DE ANDALUCÍA PORTA 9 ANYS AJUDANT AL DESENVOLUPAMENT TECNOLÒGIC DE LA REGIÓ

El CICA actualitza el seu maquinari amb un HP X-Class de 24 processadors

Des dels darrers mesos de l'any passat el CICA ha apostat per una renovació dels seus supercomputadors per tal de satisfer les necessitats dels seus usuaris. Un d'aquests passos ha estat la recent actualització d'un HP X-Class amb 24 processadors.

El Centro Informático Científico de Andalucía (CICA) es va crear el 1988 de la mà del Plan Andaluz de Investigación (PAI) dependent de la Dirección General de Universidades e Investigación Tecnológica de la Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Andalucía i a iniciativa de la Junta de Andalucía, el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) i la Universidad de Sevilla i va ser el primer centre a Espanya que va oferir serveis de supercomputació i de xarxa per a tot l'àmbit d'una comunitat espanyola.

Però va ser durant 1989 i 1990 quan el CICA va començar a oferir serveis a l'usuari, i en aquella data es van afegir a les tres institucions ja existents la resta d'universitats andaluses en funcionament (Cadis, Còrdova, Granada i Màlaga), a petició del Consell Rector del centre, ja que el CICA i la Red de Informática Científica de Andalucía (RICA) són considerades com a prioritàries en el Plan Andaluz de Investigación, dependent de la Dirección General de Universidades e Investigación de la Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Andalucía.

El 1994 es van incorporar al Consell les universitats de nova creació: Al-



Personal del centre treballant en el seu despatx.

meria, Huelva i Jaén. D'aquesta manera, el Consell Rector del CICA va quedar conformat per representants de les vuit universitats andaluses, la Junta de Andalucía i el CSIC, que és l'estructura que encara manté ara per ara.

El CICA ofereix servei informàtic en les tasques d'investigació i desenvolupament a la comunitat acadèmica i científica d'Andalusia, així com la planificació i coordinació i manteniment de RICA i la seva integració a RedIRIS a nivell estatal. Els objectius del centre són, bàsicament donar a conèixer els equips informàtics instal·lats al CICA i fer que tots els usuaris

de RICA tinguin accés als mateixos recursos independentment de la seva localització geogràfica. Segons Ana Botija, directora del CICA "el balanç global d'aquests anys de funcionament del CICA és positiu perquè tota la comunitat d'R+D andalusa està integrada en xarxa i amb connexió a Internet".

El desembre de 1989, quan es va crear el CICA, els ordinadors dels usuaris de partida es basaven en l'oferta de la tecnologia vectorial i el sistema operatiu Unix que en aquells moments s'introduïen amb força en el mercat espanyol. Al mateix temps es mantenia la tecnologia VAX amb sistema operatiu VMS propietari que du-

rant més de 5 anys havia donat suport al càlcul. S'augmentava la capacitat de càlcul sobre una tecnologia més actual. Les màquines disponibles eren:

■ Un VAX-Cluster d'un DEC VAX/8530 i un DEC VAX/6410 monoprocessadors, amb 16 i 64 MB de memòria cadascun i un total de 4,7 GB en disc que a l'any 1991 es va actualitzar i va passar a ser un VAX-Cluster d'un VAX/6510 i un VAX/6410 amb 64 MB de memòria cadascun i 11 GB en disc, el primer d'ells vectorial. Fins a l'any 1995 va augmentar la capacitat del DEC VAX/6510, a 128 MB de memòria i 22 GB en disc.

■ Un DEC VAX/785 monoprocessador, amb 16 GB de memòria que es va actualitzar a principis dels 90 fins a convertir-se en un DECSystem/Ultrix 5840, amb 4 processadors, 64 MB de memòria i, aproximadament, 6 GB en disc

■ El Convex C220 inicial, amb 2 processadors, arquitectura vectorial i capacitat de paral·lelització, 128 MB de memòria i 3 GB en disc va passar a ser un Convex C-240 amb 4 processa-

	PA-RISC 7200	PA-RISC 8000
Freqüència (MHz)	120	180
Amplada processador-memòria (GB/s)	0,96	0,96
Cache de dades (MB)	1	1
Cache d'instruccions (MB)	1	1
Potència Punta (Mflop/s)	240	720
LINPACK 100X100 (Mflop/s)	65	158
LINPACK TPP (Mflop/s)	195	510
SPECint95	6,41	11,8
SPECfp95	9,11	20,2

dors, 256 MB de memòria i 7 GB en disc. Uns anys més tard es va ampliar de nou el Convex C-240 a 512 MB de memòria i 24 GB en disc.

Fins al 1995, a més de les actualitzacions de maquinari que s'acaba de comentar es van adquirir un IBM RISC/6590 amb 128 MB de memòria i 4 GB en disc; diversos servidors i estacions SUN per a X-Windows i un DEC ALPHA 2000/400 amb 2 processadors, 512 MB de memòria i 30 GB en disc. A més a més, en aquests anys es van introduir els lectors CDROM i es van desenvolupar els models d'accés a CDROM en xarxa des de qualsevol lloc de treball. El DECSysTem 5840 es va donar de baixa en aquest període.

A finals de 1995 va adquirir-se per concurs públic un ordinador amb arquitectura paral·lela i un robot de cintes DLT, la instal·lació del qual es va realitzar en diverses fases al llarg de 1996 i principis de 1997. Es van donar de baixa el VAX-Cluster i el Convex C240 i es van comprar d'altres ordinadors com una SUN SPARC 1000 amb 2 processadors, 512 MB de memòria i 20 GB en disc.

L'evolució de l'ordinador paral·lel per fases era la següent:

- Fase 1: Convex SPP1000 amb 16 processadors PA-RISC 7000, 2 GB de memòria i 40 GB en disc. Robot ALT de cintes DLT amb 2,5 TB de capacitat.
- Fase 2: HP X-Class amb 16 processadors PA-RISC 8000, 2 GB de memòria i 40 GB en disc.
- Fase 3: HP X-Class amb 24 processadors PA-RISC 8000, 3 GB de memòria i 40 GB en disc.

Durant el mes de gener també van arribar al CICA un servidor Sun Enterprise UltraSparc 3000 monoprocedador amb 512 MB de memòria i 20 GB en disc; i un servidor SGI Origin 200 monoprocedador amb 512 MB de memòria i 9 GB en disc.

Amb tots aquests canvis es tornava a augmentar la capacitat de càlcul sobre tecnologia paral·lela d'acord amb les directrius del mercat. Així, actualment, la potència global de càlcul oferta pel CICA als seus aproximadament 2.500 usuaris és superior als 21 Gflop/s, sobre un total de 10 processadors, 5 GB de memòria i 130 GB en disc amb extensió a 1,5 TB per robot.

Pel que fa al programari científic del CICA, ubicat en l'ordinador paral·lel cal dir que cobreix gairebé totes les disciplines acadèmiques: compiladors, càlcul d'estructures, electrònica, electricitat i electromagnetisme, química-física, càlcul de fluids, llenguatges simbòlics, matemàtiques estadístiques, elements finits, gràfics, etc.

A més a més, el CICA va ser el primer centre que va desenvolupar un model de consulta de bases de dades en CDROM en xarxa des de qualsevol lloc de treball connectat a la xarxa sense limit d'accésos simultanis. Aquest model s'ha exportat a diverses universitats andaluses i espanyoles i a centres d'investigació de tot Espanya, com per exemple el CSIC, i va guanyar el premi "La Tecnologia de la Informació en la Comunidad de Andalucía" el 1996.

RICA: Una xarxa per connectar Andalusia

RICA, la Red Informàtica Científica de Andalusia, té per objectiu oferir serveis informàtics i de comunicacions als usuaris investigadors dels centres de recerca andalusos. El CICA és precisament el node central de RICA. El troncal de RICA uneix les vuit províncies d'Andalusia. De 1989 a 1997 els centres connectats a RICA han anat augmentant i actualment n'hi ha 56: 17 centres del CSIC a Andalusia, les 10 Universitats andaluses i d'altres 29 centres d'investigació i de suport a la I+D.

Actualment, el troncal de RICA es basa en tecnologia ATM amb les 8 províncies andaluses connectades amb enllaços ATM a 34 Mbps. Les universitats es connecten a RICA per ATM a 34 Mbps i la resta de centres provincials aniran passant de línies punt a punt a 64 Kbps a ATM a 34 o 100 Mbps. Des de la data de creació del CICA hi ha connexió amb les xarxes acadèmiques espanyola i europea i Internet a través de RedIRIS. La connexió actual amb CSIC-RedIRIS és de 8 Mbps sobre ATM.

PROGRAMES DE MOBILITAT

Karin Fink, de la **Ruhr-Universität Bochum** (Alemanya), va estar entre nosaltres de l'1 al 30 d'octubre de 1997 per desenvolupar el projecte *Ab Initio Calculation of Magnetic Exchange Coupling in Transition Metal Oxides and Binuclear Complexes*. Fink va venir convidada per Francesc Illas, del Departament de Química Física de la UB.

Alexis Markovits, de la **Université Pierre et Marie Curie** (França), ha estat convidat per Francesc Illas, del Departament de Química Física de la UB, per dur a terme el projecte *Influence of Correlation Effects for O₂ Dissociation on Si (100)*. Markovits va arribar el passat 1 de novembre de 1997 i ens deixarà el proper 28 de febrer.

Gernot Frenking, de la **Philipps-Universität Marburg** (Alemanya), ha estat convidat per Miquel Duran, de l'Institut de Química Computacional de la UdG, per desenvolupar el projecte *Mechanistic Study of the Iron Catalyzed Water-Gas Shift Reaction*. Frenking va arribar l'1 de desembre i marxarà el proper 1 de març de 1998.

Gunda Paulin, del **Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf** (Alemanya), ha estat convidada per Ferran Sanz de l'Institut Municipal d'Investigació Mèdica (IMIM, UAB), per dur a terme el projecte *Anàlisi computacional de biomolècules*. Paulin va arribar el passat 7 de gener i s'estarà entre nosaltres fins al 30 de juny de 1998.

Jose Richard Baptista, de la **Universidade do Porto** (Portugal), ha estat convidat per Francesc Illas, del Departament de Química Física de la UB per dur a terme el projecte *Ab Initio Studies on the Influence of Adsorbed O and OH on the Chemisorption of Methoxy Radical on Copper and Copper Oxide Surface*. L'investigador va arribar a Barcelona l'1 de febrer i marxarà el 30 de març.

“La característica essencial del CIMNE és la gran multidisciplinarietat i l'equilibri entre la recerca, la formació, la difusió i la col·laboració amb les empreses en camps molt diversos”

El Centre Internacional de Mètodes Numèrics en Enginyeria, usuari habitual de les instal·lacions del CESCA i el CEPBA, ha celebrat recentment el seu desè aniversari. La següent entrevista al director del CIMNE, Eugenio Oñate, fa un repàs d'aquests deu anys d'història dedicats a la formació, investigació i transferència de tecnologia en el camp dels mètodes numèrics.

Fa poques setmanes va celebrar-se el 10è aniversari del Centre Internacional de Mètodes Numèrics en Enginyeria. Què va impulsar-lo a crear aquest centre?

El CIMNE es va crear per iniciativa d'un grup de professors de la UPC aprofitant una sèrie de circumstàncies favorables: l'existència a les universitats catalanes d'una massa crítica d'experts en temes relacionats amb el desenvolupament i aplicacions dels mètodes numèrics, l'interès de la UNESCO

perquè existissin centres com el CIMNE per servir d'enllaç entre el món occidental i països en desenvolupament en aquest camp, l'evidència de l'interès de la indústria en la utilització d'aquestes tècniques i l'inestimable recolzament de la UPC i la Generalitat de Catalunya que en un termini molt breu varen donar llum verda al projecte de creació del CIMNE.

Quins dels objectius que s'havia proposat inicialment s'han assolit?

Els objectius essencials del CIMNE han estat els d'impulsar la recerca i la difusió dels seus resultats, la formació i la transferència de tecnologia al sector industrial en tots els àmbits dels mètodes numèrics i les seves aplicacions al món de l'enginyeria. A la vista de la tasca realitzada durant aquests anys pot afirmar-se que aquests objectius s'han assolit satisfactoriament.

Quin balanç fa vostè d'aquests deu anys al capdavant d'aquesta institució?

Penso que avui dia el CIMNE és un centre que gaudeix d'un prestigi a nivell internacional per la qualitat de la seva recerca, difosa a través de més de 500 publicacions, pel nivell dels seus cursos, entre els quals en destaca un màster, per haver organitzat nombrosos

El Centre Internacional de Mètodes Numèrics en Enginyeria (CIMNE) es va crear l'abril de 1987 com un consorci entre la Generalitat de Catalunya i la Universitat Politècnica de Catalunya en col·laboració amb la UNESCO. De 1987 a 1992 les seves instal·lacions estaven situades als locals cedits per l'Escola Tècnica Superior d'Enginyers de Camins, Canals i Ports de la UPC. A l'octubre de 1992 es va acabar de construir la nova seu del CIMNE al Campus Nord de la UPC, on encara s'hi està a hores d'ara.

El CIMNE organitza regularment cursos i seminaris relacionats amb la teoria i les aplicacions dels mètodes numèrics en enginyeria. Els cursos van adreçats a graduats novells i també a professionals provinents d'escoles

Deu anys plens d'èxit

d'enginyeria i facultats de ciències. El Centre promou estades de professors i investigadors per realitzar labors acadèmiques i científiques; publica llibres, revistes, monogràfics, treballs



L'edifici del CIMNE.

científics i programari educatiu en temes relacionats amb la teoria i aplicació dels mètodes numèrics en enginyeria i, a més, impulsa activitats de formació, d'investigació i de transferència de tecnologia en aquest camp.

A tal d'exemple el CIMNE ha participat en més de 290 projectes d'investigació i desenvolupament finançats per la Comunitat Europea, el Ministeri d'Indústria, el CIDEM, la CIRIT i la CICYT, i per empreses espanyoles i estrangeres.

En els seus deu anys d'història el CIMNE ha consolidat la seva política d'impulsar activitats de formació, investigació i transferència de tecnologia en el camp dels mètodes numèrics i aplicacions en enginyeria en un context internacional.



FOTOGRAFIES JORDI PARETO

Eugenio Ofiate porta deu anys al capdavant del CIMNE.

broços congressos internacionals i pels més de 200 projectes realitzats amb 140 empreses i organismes, molts dels quals s'han desenvolupat en el marc de programes europeus.

Seleccioni tres o quatre fites clau en la història del centre en aquests deu anys.

Moments clau varen ser l'instant en què el CIMNE va guanyar el primer projecte europeu dins del llavors anomenat programa BRITE, actuant com a coordinador del projecte, en el qual participaven dues empreses espanyoles de motllos, entre d'altres. A aquest projecte europeu el varen seguir uns altres 65 en els següents deu anys. També va ésser clau l'èxit en l'organització del primer congrés, l'any 1987, que va establir les bases per crear un departament específic que ha organitzat 27 congressos en aquesta dècada. També és rellevant el moment en què el CIMNE va acollir la seu de la primera Càtedra UNESCO del món en l'especialitat de Mètodes Numèrics, atorgada a la UPC el 1989.

Cap a on es dirigeix el CIMNE a partir d'ara? Quins camps d'aplicació dels mètodes numèrics seran els més explorats en els propers anys?

En els darrers anys s'ha detectat un interès creixent per part de tots els sec-

tors industrials per incorporar els mètodes de càlcul per ordinador com a instrument quotidià per al disseny de nous productes i processos. Per complir fidelment amb els seus objectius, el CIMNE haurà d'intentar de forma equilibrada seguir a l'avantguarda científica mitjançant la recerca original i col·laborar amb la indústria perquè els resultats d'aquesta investigació es tradueixin en productes de *software* concrets i en el coneixement que ajudi a millorar la competitivitat de les empreses. Pel que fa als camps més actius d'aplicació dels mètodes numèrics podria citar entre d'altres les àrees de fabricació de productes metàl·lics i plàstics, l'enginyeria geotècnica i ambiental, les enginyeries de l'automòbil, naval i aeroespacial, el manteniment i reparació de construccions, el disseny de nous productes en enginyeria química i farmacèutica, etc.

Hi ha diferències entre la metodologia que s'usa al CIMNE i la que es fa servir en d'altres centres d'Europa? Es pot parlar d'una escola catalana de mètodes numèrics?

Existeixen tres o quatre centres a Europa similars al CIMNE. La característica essencial del CIMNE és potser la més gran multidisciplinarietat i l'equilibri entre la recerca, la formació, la difusió i la col·laboració amb les empreses en camps molt diversos. Modestament, penso que el model del CIMNE està creant escola, com ho demostra la creació recent de dos centres basats en el nostre model a l'Argentina i a Xile.

El mes de setembre va acabar-se el programa *Human Capital and Mobility* del qual vostè era el responsable tècnic. Quina valoració fa d'aquest programa?

Aquest programa ha servit perquè més d'un centenar de científics de tota Europa s'integrin en grups de treball de les universitats catalanes per un període d'alguns mesos. Els beneficis d'aquesta acció, a més dels pròpiament científics han estat múltiples. D'una banda ha potenciat la imatge de tots aquests grups a nivell europeu, ha enfortit els llaços dels grups amb d'altres similars a Europa i també ha estat una font d'iniciatives i nous projectes conjunts en el marc de programes europeus. La meua valoració és, per tant, molt positiva.

Un dels objectius del HCM és que els investigadors que ens visiten

s'enriqueixin amb les seves experiències a les *Large Scale Facilities* (CESCA i CEPBA), per així tornar als seus països i poder enriquir alhora els seus col·laboradors. Què ha aportat el CIMNE als investigadors que ha acollit?

El CIMNE ha acollit a diversos d'aquests investigadors que

han realitzat la seva activitat dins de projectes en marxa en àrees com ara l'anàlisi d'estructures, la mecànica de fluids o els processos de conformat. En tots els casos els investigadors visitants s'han integrat a grups de treball del CIMNE que han col·laborat en la seva formació i també els han proporcionat el *software* necessari per a la seva feina.

"Human Capital and Mobility ha enfortit els llaços dels grups amb d'altres similars a Europa i també ha estat una font d'iniciatives i nous projectes conjunts"



El director del CIMNE en un moment de l'entrevista.

Aquest procés d'enriquiment de ben segur que ha estat bidireccional. Creu que els contactes amb d'altres països d'Europa han ajudat a enriquir el nivell de coneixements del CIMNE i a augmentar el prestigi internacional de què ja gaudeix el centre?

Una de les línies de recerca del CIMNE és afavorir els intercanvis científics i visites d'especialistes. Indubtablement, els investigadors del programa HCM han contribuït de manera essencial al desenvolupament de nombrosos projectes de R+D i d'aquesta manera han ajudat a consolidar la imatge del CIMNE en el món.

Vostè va formar part del Consell Científic del CESCA des dels primers anys del Centre i fins a la constitució del C⁴, el 1995. Com recorda els anys en què vostè va formar part d'aquesta figura?

La primera etapa del CESCA va ser molt intensa des del punt de vista científic i d'organització. Tot era nou i es van haver d'introduir formes de cooperació originals entre les universitats catalanes i la Fundació Catalana per a la Recerca, a la qual he de reconèixer un paper essencial en aquell procés.

El sol fet d'aconseguir que el CESCA funcionés amb normalitat, crec que ja va ser tot un èxit. A partir d'aquella realitat

"En els darrers anys s'ha detectat un interès creixent per part de tots els sectors industrials per incorporar els mètodes de càlcul per ordinador com instrument quotidià pel disseny de nous productes i processos"

es van aconseguir projectes importants a Europa, com el HCM ja esmentat, noves màquines, més usuaris, l'expansió cap al C⁴, etc.

Quines són les decisions més importants per al CESCA que, segons el seu criteri, va prendre el Consell Científic?

Entre les decisions importants destacaria la d'impulsar els intercanvis amb Europa a través del programa HCM, la idea de facilitar l'ús del CESCA al major nombre d'usuaris possible i, indubtablement, la de recomanar la renovació contínua dels ordinadors de manera que el CESCA estigués sempre a l'avantguarda en aquest camp.

Quines necessitats computacionals preveu vostè que seran necessàries en el futur?

La solució de problemes tridimensionals de tipus industrial no ha fet més que començar. Per això estic segur que les necessitats de càlcul augmentaran considerablement en els propers anys. Per cobrir aquestes necessitats, serà indispensable sumar forces entre els recursos de computació ordinaris que els mateixos grups puguin adquirir amb els seus mitjans i els superrecursos de computació, que hauran d'estar a la frontera de la tecnologia i que continuaran sent només accessibles a centres com el CESCA

B R E U S

L'INEFC de Lleida es connecta a l'Anella.

L'Institut Nacional d'Educació Física de Catalunya (INEFC) a Lleida forma part de l'Anella Científica des del passat 9 de desembre. La connexió es porta a terme a través d'un enllaç amb la xarxa local de la Universitat de Lleida. Des d'aquesta xarxa l'INEFC es comunica amb el CESCA mitjançant el radioenllaç de 2 Mbps. L'INEFC és la primera de les institucions de l'Anella Científica que està directament vinculada al món de l'esport i l'activitat física. Amb l'INEFC ja són 51 les institucions que formen part de l'Anella.

Nou radioenllaç per a l'accés de la UdL, la UdG i la URV.

La Universitat de Girona (UdG), la Universitat Rovira i Virgili (URV) i la Universitat de Lleida (UdL) estan connectades al router del CESCA per un nou radioenllaç des del passat 16 de desembre. Fins aquesta data, les universitats perifèriques es comunicaven amb el radioenllaç de Collserola i des d'allà es connectaven al CESCA mitjançant un altre radioenllaç de 8 Mbps distribuït en 4 boques de 2 Mbps. Ara, en canvi, hi ha disponibles 34 Mbps, dels quals se usen 14, que es distribueixen en 7 boques de 2 Mbps cadascuna. Així, si abans la UdG, la UdL i la URV compartien les tres juntes un radioenllaç de 2 Mbps, ara cadascuna passa a tenir per a ella sola una capacitat real de 2 Mbps.

El primer Cray del CESCA

El Cray X-MP va ser un dels tres ordinadors que va viure el naixement del CESCA l'any 1991, juntament amb l'IBM 3090/1205 i l'IBM 3090/600J. El Cray va estar funcionant durant un any i vuit mesos i després va ser substituït pel Cray Y-MP que va donar servei a les instal·lacions del Centre fins al passat desembre, després de successives actualitzacions.

El Cray X-MP, el primer Cray del CESCA, es va fabricar el 1989 i va estar operatiu al Centre Meteorològic de Finlàndia abans d'arribar al nostre centre. El Consorci de creació del CESCA el va comprar l'any 1990 i el va instal·lar l'abril de l'any següent.

La màquina es va adquirir per satisfer les necessitats de càlcul de les universitats catalanes en aquell temps. Igualment, van ser les demandes dels usuaris les que van fer que es comprés el primer programari llibreries de càlcul numèric (IMSL, NAG, Math-Advantage) perquè era el que més demanaven els usuaris.

El Cray tenia un sol processador vectorial però era ampliable fins a quatre i la seva velocitat era de 235 Mflop/s. La refrigeració es feia per líquid (com en tots els Cray de l'època). A partir de 1992 van aparèixer els primers Cray refrigerats convencionalment (per aire) i avui dia només es refrigeren per aigua els models més grans.

La instal·lació del Cray va suposar dues setmanes de feina. La primera es va fer el muntatge dels circuits de refrigeració i tota l'electrònica i es van executar diagnòstics de comprovació. La segona setmana es va generar i instal·lar el sistema operatiu, compiladors i altres eines. El transport de la màquina es va realitzar amb un tràiler ja que, a part del Cray pròpiament

dit, s'inclouien desenes de capses amb mobiliari, consoles de control, equip de reparacions, peces de recanvi, etc.

El Cray X-MP tenia més de 200 plaques de circuits, cadascuna muntada sobre una placa de coure que extreia el calor generat pels xips. Durant la seva vida al CESCA només hi va haver una avaria de maquinari, concretament a una de les més de 100 plaques que formaven la CPU. Una de les novetats tècniques que va introduir aquesta màquina va ser el càlcul vectorial en 64 bits (doble precisió).

El mateix model de Cray ha estat instal·lat a d'altres centres d'Espanya, com el CIEMAT, el Ministeri de Defensa, la TECNATOM (que l'usava per a simular centrals nuclears) i Construcciones Aeronáuticas, S.A. (CASA).

El primer Cray presentava uns problemes en els seus inicis. D'una banda, la falta de memòria es va anar solucionant progressivament quan es va veure que el nombre d'usuaris creixia. Així el febrer de 1992 es va passar dels 4 Mwords (32 MB) a 16 Mwords (128 MB). D'altra banda, es van detectar problemes de comunicació ja que els protocols TCP/IP que s'usaven estaven poc estesos en aquella època.

Els primers usuaris de la màquina van ser Gemma Sesé, de l'equip dels doctors Giró i Padró; Ramon Carbó, que pertanyia a la UAB i el servei de

Breu cronologia

Data de disseny	1985
Data de fabricació	1989
Data de compra	1990
Data d'instal·lació	1991
Data de desconnexió	1992



El Cray X-MP

Geologia de la Generalitat, entre d'altres. Tots els usuaris tenien experiència treballant amb d'altres Cray en els Estats Units i Gran Bretanya. Projectes com *Estudis conformacionals de macromolècules* d'Ignasi Fita són d'aquesta època.

Els primers Cray treballaven només en mode batch i van portar el sistema operatiu COS (Cray Operating System) fins al 1984. A partir de llavors es va adoptar el Unix, amb el que es va anomenar UniCOS i els Cray ja van poder treballar tant en mode batch com interactiu. Des del primer dia, els usuaris del CESCA van poder accedir al Cray d'aquestes dues maneres. A causa dels sistemes operatius dominants en aquella època a les diferents universitats (VAX/VMS i IBM VM) es van configurar les connexions a xarxa de manera que tothom hi pogués accedir. Per a l'entorn VAX/VMS es va instal·lar un computador VAX 780 que feia de pont amb les xarxes DECNET de les universitats. Per a l'entorn IBM VM es va instal·lar un adaptador que comunicava directament amb l'IBM 3090/600J del CESCA.

El Cray X-MP es va desconnectar el desembre de 1992, data en què va ser substituït per un model superior de Cray, el Y-MP/232.

Computador	Any de disseny	Temps de cicle (ns)	Nombre màxim de processadors	Velocitat punta (Gflop/s)	TPP (Gflop/s)
Cray X-MP	1985	8,5	4	0,94	n/d
Cray Y-MP	1988	6	8	2,6	2,1
C-90	1991	4	16	15,2	10,8
Convex C200	1987	40	4	0,20	0,17
Convex C3400	1991	40	8	0,40	n/d
Convex C3300	1991	16,7	8	0,96	0,79
Fujitsu VP2600/10	1990	3,2	1	5	4
IBM3090/600J	1985	14,5	6	0,828	0,54

Comparació de superordinadors de l'època de l'adquisició del Cray X-MP

PROJECTES

Desenvolupament de nous algorismes per al càlcul de la semblança molecular quàntica i aplicacions al disseny de fàrmacs



"Desenvolupament de nous algorismes computacionals que facilitin el càlcul de les mesures de semblança molecular quàntica per així poder ser aplicats en estudis QSAR de molècules d'interès biològic"

Ramon Carbó

Cap

Ramon Carbó-Dorca

Integrants

Emili Besalú, Lluís Amat, Miquel Lobato, Albert Bach, Narcís Bartis, Xavier Gironès, David Robert

Període

1997-2000

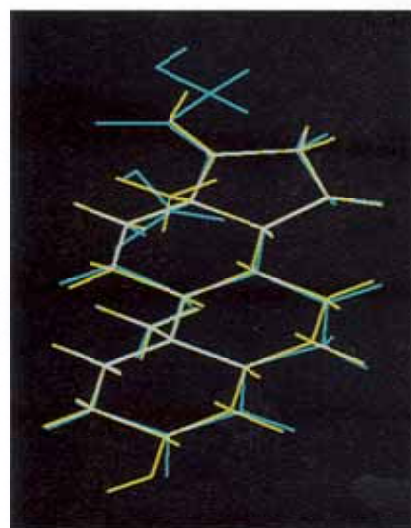
Publicacions

- "Atomic Shell Approximation: Electron Density Fitting Algorithm Restricting Coefficients to Positive Values," *J. Chem. Information & Comp. Sciences*, vol. 35, 1995, p. 1048.
- "On Quantum Molecular Similarity Measures (QMSM) and Indices (QMSI)," *J. Math. Chem.*, vol. 19, 1996, p. 47.
- "Effect of Solvation on the Charge Distribution of a series of Anionic, Neutral, and Cationic Species. A Quantum Molecular Similarity Study," *J. Phys. Chem.*, vol. 100, 1996, p. 606.
- "Mendeleev Conjecture as a Consequence of Mendeleev Postulates," *Afinidad*, vol. 53, 1996, p. 77.
- "The Use of *ab initio* Quantum Molecular Selfsimilarity Measures to Analyze Electronic Charge Density Distributions," *Intl. J. Quantum Chem.*, vol. 58, 1996, p. 361.

En l'actualitat, el desenvolupament de nous compostos terapèutics constitueix una de les principals àrees d'investigació de les indústries farmacèutiques. Els mètodes teòrics, com la semblança molecular, tenen un paper molt important en el disseny de nous fàrmacs amb activitat biològica. Darrerament, algunes aplicacions de les mesures de semblança molecular quàntica (MSMQ) per determinar relacions tridimensionals entre l'estructura i l'activitat (3D-QSAR) de determinats conjunts de molècules han justificat l'ús d'aquesta tècnica. Paral·lelament als estudis pràctics, s'ha realitzat una important feina fonamentada en el desenvolupament de nous algorismes computacionals per alleugerir els càlculs de les MQSM i permetre l'automatització de tot el procés.

Els principals punts d'investigació teòrica en els quals estem treballant i que estan relacionats amb les MSMQ són:

- 1) Construcció de densitats electròniques moleculars aproximades que reproduïxin amb gran precisió les densitats *ab initio* i que n'evitin el càlcul directe.
- 2) Desenvolupament de nous mètodes d'optimització per trobar la superposició òptima entre dues molècules.
- 3) Descripció de nous processos estadístics que permetin extreure la informació de les MQSM i correlacionar-la amb les dades experimentals.
- 4) Utilització dels anomenats índexs topològics de semblança quàntica com a descriptors moleculars.
- 5) Definició de mapes de semblança molecular tridimensionals utilitzant MSMQ per tal d'obtenir més informació de les molècules estudiades.
- 6) Saturació de l'entorn molecular mitjançant funcions de simetria esfèrica amb l'objectiu de construir conjunts de funcions de base per tal d'obtenir bo-



Superposició molecular òptima de dos esteroides, l'aldosterona i l'androstenediol, que presenten afinitat pel corticosteroide que s'enllaça amb el receptor de la globulina.

nes funcions densitat per la seva posterior aplicació a les MSMQ.

Els fàrmacs que volem analitzar són molècules grans per ser tractades a nivell *ab initio*. A més a més per obtenir unes bones prediccions és necessari estudiar conjunts amb gran nombre de molècules i alhora que siguin representatives en un ampli rang de la propietat analitzada. Aquests aspectes es tradueixen en un elevat cost computacional bàsicament utilitzat en els següents punts: optimització de les estructures moleculars, càlcul de les MSMQ conjuntament amb l'obtenció de la superposició molecular òptima, i construcció dels models QSAR mitjançant la resolució d'equacions lineals. Una forma d'accelerar tot aquest procés de càlcul consisteix en la paral·lelització dels nostres programes, així com l'optimització dels algorismes que hi prenen part. Aquest és un dels objectius que ens hem marcat en el nostre laboratori i que actualment estem duent a terme.

Estudi de les transferències protòniques en l'estat fonamental i estats excitats de diferents sistemes per a la determinació teòrica de molècules amb capacitat per actuar com a memòries òptiques



"L'estudi de les transferències protòniques en l'estat fonamental i excitats pot ajudar al disseny de molècules amb capacitat per actuar com a memòries òptiques"

Miquel Duran

Cap
Miquel Duran

Integrants
Marta Fores, Miquel Solà i Maricel Torrent

Període
1997-2000

Publicacions

• "Intramolecular Proton Transfer in the Ground and the Two Lowest-lying Singlet Excited States of 1-amino-3-propenal and Related Species", 1998, Submitted.

• *J. Phys. Chem.*, vol. 99, 1995, p. 14277.

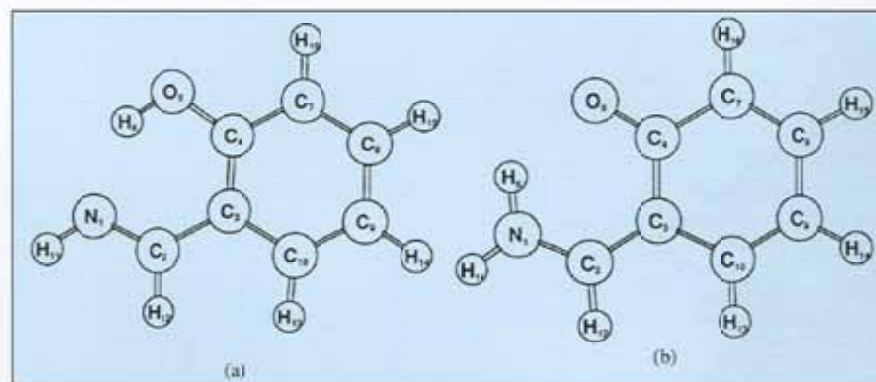
• *J. Phys. Chem.*, vol. 98, 1994, p. 3582.

• *Chemical Phys. Letters*, vol. 204, 1993, p. 36.

• *Chemical Phys. Letters*, vol. 211, 1993, p. 293.

La investigació de compostos que formen enllaços per pont d'hidrogen intramoleculars, juntament amb l'estudi de la transferència protònica en l'estat fonamental i els estats excitats, és un dels camps de recerca més actius en l'àmbit de la química actual. Hi ha un evident interès bioquímic en l'anàlisi d'aquest tipus de compostos. Val a dir, per exemple,

moció inicial a l'estat excitat, es podria produir la transferència protònica que dona lloc al fototautòmer, el qual tornaria a l'estat fonamental emetent fluorescència. Immediatament, tindria lloc la transferència protònica inversa que regeneraria el tautòmer original. En un sistema d'aquest tipus és possible utilitzar un sistema de dos làsers per fabricar una memòria molecular òptica.



Catalyst, UniChem i la base de dades de projectes del Centre passen a funcionar a la nova workstation OCTANE

El tancament del Cray Y-MP que fins ara tenia el CESCA, el passat 19 de desembre, ha provocat que un seguit d'aplicacions que fins ara s'executaven en aquesta màquina passin, en dates properes, a funcionar a l'SP2.

Un dels programes que passarà a operar en l'SP2 serà UniChem, un paquet que serveix per a càlculs químics mecanoquàntics. UniChem té dues parts: una interfície gràfica per visualitzar sistemes químics i els resultats dels càlculs efectuats sobre ells, i un seguit de programes de càlcul mecanoquàntic. UniChem, que estava abans repartit entre el Cray (programa de càlcul) i l'estació de treball *bastiments* (interfície gràfica) passarà ara a estar dividit entre l'SP2 i una nova màquina que ha comprat el CESCA: una Silicon Graphics model OCTANE/SI amb processador R10000, 192 MB de memòria i 13 GB de disc. El nou ordinador acollirà la interfície gràfica de l'UniChem.

La màquina també acollirà el Servei

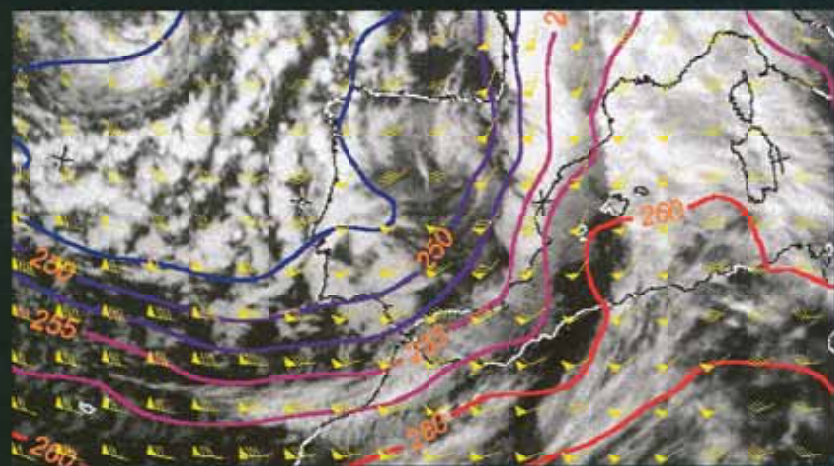


La nova workstation OCTANE/SI.

de Cerca de Farmacòfors (SCF) que comprèn un programa de cerca (Catalyst) i bases de dades tridimensionals i relacionals de compostos d'interès biològic, i la base de dades de projectes i visitants dels Programes de Mobilitat del CESCA accessible des de la web.

Aquest servei, obert a la comunitat científica, correspon a un projecte conjunt entre els principals laboratoris farmacèutics catalans, la UAB, la UPC i el CESCA que van obtenir finançament de la CIRIT.

FOTO / NOTÍCIA



Un cop instal·lat el codi MASS a l'SP2 i automatitzats els processos d'ingestió de dades per a l'obtenció de pronòstics meteorològics per a Catalunya dos cops al dia, el grup de predicció numèrica del Departament d'Astronomia i Meteorologia de la Universitat de Barcelona, encapçalat per Àngel Redaño, està treballant en l'assimilació d'imatges infrarojes del satèl·lit METEOSAT pel model MASS per a millorar les anàlisis de les variables meteorològiques i els seus pronòstics. A la fotografia es mostra la integració de la imatge IR del satèl·lit amb els camps de temperatura i vent a 500 hPa corresponents a la profunda depressió que provocà un fort temporal a la costa mediterrània el 18 de desembre passat.

Edita

CESCA

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

COL·LABORADORS

Ana Botija

Félix Díez

Maria Isabel Gandia

Oleg Mercader

Oriol Riu

Enric Torres

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà & Associats

MAQUETACIÓ

Rosa Álvarez

CESCA

Gran Capità, 2-4

08034 Barcelona

Tel. (93) 205 64 64

Fax: (93) 205 69 79

<http://www.cesca.es>

teraflop@cesca.es

DIPÒSIT LEGAL: B-33512-94

ISSN: 1134-6671