

TERAFLOP

NOTICIARI DEL CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA

Núm. 9
15.000 exemplars

CESCA

Publicació mensual
Setembre 1995

Illescas va vèncer clarament a Deep Blue, el millor superordinador escaquista

El millor jugador d'escacs espanyol, el català Miquel Illescas, va vèncer en un enfrontament a dues partides a la màquina més potent del món per a jugar a escacs, Deep Blue d'IBM. L'esdeveniment estelar de la International Conference on Supercomputing, celebrada entre el 4 i el 7 de juliol passat a Barcelona, va demostrar que el progrés d'aquests jugadors informàtics encara està lluny de poder fer ombra als millors escaquistes del món.

La definició de les arquitectures del futur, el software de base dels ordinadors d'altres prestacions i les aplicacions més prometedores van ser els temes en els quals es va centrar fonamentalment a la novena edició de la International Conference on Supercomputing (ICS). La ICS'95 es va celebrar a l'Hotel Hilton de Barcelona i va ser organitzada pel Centre Europeu de Paral·lelisme de Barcelona (CEPBA) de la Universitat Politècnica de Catalunya (UPC).

En la novena edició de la ICS van haver 175 participants, fet que

va ser un èxit ja que, segons Mateo Valero, director del CEPBA, "cap edició d'aquesta conferència havia tingut mai més de 160 participants". El perfil dels assistents a aquestes sessions, de caràcter tècnic, era el de professors d'universitat i tècnics de la indústria.

La clara victòria d'Illescas
Deep Blue és un prototipus d'IBM amb xips dissenyats específicament per a jugar a escacs i es considera l'ordinador més potent en aquest camp. Té 17 processadors paral·lels i pot calcular se: milions

d'operacions per segon. El seu rival va ser el millor jugador d'escacs espanyol, el gran mestre Miquel Illescas que està classificat en el lloc 33è del rànquing mundial.

Illescas i Deep Blue van jugar dues partides que van generar molta expectació, per tractar-se del primer cop que es produïa a Espanya un due: home-màquina d'aquest nivell i també pel fet que era una ocasió per comprovar el nivell real de Deep Blue amb vista al seu proper enfrontament amb el campió mundial, Gari Kasparov, previst per al febrer. Illescas estava a Barcelona i Deep Blue a Nova York. L'ordinador va rebre les jugades d'Illescas a través d'Internet.

La primera de les dues partides va acabar en taules després d'un joc de templeig per part del jugador català. En la segona, Miquel Illescas —amb blanques— va

vèncer per temps, després que, sorprenentment, Deep Blue no arribés a moure en una posició on, per defensar-se de les amenaces, només havia una jugada possible.

Chung-Jen Tar, un dels responsables de Deep Blue va explicar que "el seu joc és molt irregular". "Juga millor en posicions complicades de calcular i pitjor en posicions tranquil·les on importen més les idees que els càlculs", va dir Arthur J. Hoane, que va manejar la màquina durant les partides.

Deep Blue havia vençut en 1993 a Judit Polgar, que en aquell moment era la número 20 del món. Kasparov s'enfrontarà a una versió més potent de la màquina que calcularà 1.000 milions de jugades per segon. El repte dels programadors, però, serà crear algorismes matemàtics que permetin a Deep Blue escollir de manera més selectiva les jugades adequades.



Illescas nou en la partida guanyadora; el tècnic de Deep Blue l'observa

El CESCA avalua softwares per a buscar compostos químics en bases de dades

Des de l'octubre de l'any passat s'han estat instal·lant al CESCA diferents softwares per a buscar compostos químics en bases de dades estructurals tridimensionals. D'aquestes bases de dades, molts interessants per a les empreses farmacèutiques ja que permeten reduir el procés de desenvolupament de nous fàrmacs, se'n triarà una per a instal·lar-la de forma definitiva al CESCA.

empreses ja han instal·lat als ordinadors del CESCA el seu software, amb llicència per a un mes aproximadament, i han estat provats pels investigadors de diferents laboratoris farmacèutics. Els programes de les dues últimes s'instal·laran

properament. Un cop provats i avaluats cadascun dels productes, està previst que entre els laboratoris farmacèutics interessats i el CESCA en comprin un i s'instal·li definitivament al centre.

Les bases de dades estructurals de compostos químics són llistes de milers de molècules d'interès farmacològic. De cadascuna de les molècules es té la seva estructura tridimensional (que es pot visualitzar a qualsevol estació de treball) i informació sobre les seves propietats. Això permet reduir el procés de cerca de noves molècules per a desenvolupar nous fàr-

(Continua a la plana 3)

ENTREVISTA

Mateo Valero, director del CEPBA



Mateo Valero explica que els objectius del centre de paral·lelisme que dirigeix, el CEPBA, són formar nous professionals en computació paral·lela, oferir les màquines als grups de la universitat perquè hi treballin i ajudar a la creació de consorcis europeus. Avui aquest centre té quatre ordinadors d'altres prestacions i està previst que properament en comprin un altre.

(Entrevista a la plana 4)

Sup'Eur 95

Entre el 24 i el 27 de setembre se celebrarà a Madrid la conferència que organitza cada any IBM sobre l'ús de la supercomputació a Europa **Plana 3**

Reconstruccions històriques i supercomputació

El proper mes de novembre es farà a Barcelona un seminari internacional d'anàlisi estructural d'edificis històrics **Plana 3**

Opinió

Juan Jesús Pérez, de la JPC, parla sobre la modelització molecular i la computació **Plana 2**

Superordinadors i millora del café

Un projecte que s'està desenvolupant al Cray C90 del CINECA (Itàlia) millorarà la qualitat del café **Plana 4**

Mopac

El programa d'aplicacions químiques MOPAC s'ha instal·lat a l'ISP2 del CESCA **Plana 3**

Si les empreses fabricants de software han ofert al CESCA demostracions dels seus productes per a fer cerques en bases de dades estructurals. Quatre d'aquestes

El reconeixement molecular i la supercomputació

JUAN JESÚS PÉREZ

Departament d'Enginyeria
Química de l'ETS d'Enginyers
Industrials de Barcelona (UPC)

El treball continu dels científics fa que els paradigmes que en un moment determinat es proposen siguin cada vegada més universals, permetent així que es puguin abordar temes cada cop més complexos i alhora més apassionants. El reconeixement molecular és un tema d'extraordinària dificultat, del qual es poden començar a desxifrar alguns dels seus misteris. A més, em sembla un tema ideal de reflexió en aquest fòrum, ja que la seva relació amb la supercomputació és bidireccional: la supercomputació resulta necessària per a modelitzar la interacció entre un lligand i el seu receptor i, per altra banda, el reconeixement molecular representa la base del disseny d'un ordinador molecular.

Des del punt de vista estructural, el reconeixement selectiu d'un lligand per un receptor està regulat per un gran nombre d'interaccions dèbils, com ara enllaços d'hidrogen de dispersió (de vegades sinònims de van der Waals), interaccions electrostàtiques o efectes del dissolvent. Aquesta col·lecció d'interaccions modelen les preferències geomètriques de les macromolècules i dominen les relacions moleculars. Si bé són d'intensitat molt menor que els enllaços químics, són de la seva mateixa naturalesa electromagnètica. El fet de tenir associades energies d'enllaç petites els fa jugar un paper molt important com a moduladors del comportament molecular. El seu estudi implica donar explicació al comportament de les molècules

complexes, així com les d'interès biològic i a la seva comunicació, en definitiva la Biologia.

Ha estat, sens dubte, la millora continua dels ordinadors la que ha permès fer ús d'un dels paradigmes més fonamentals com és la teoria atòmica de Dalton juntament amb la mecànica quàntica per a explicar per deducció el comportament de les molècules d'interès biològic i fins i tot proposar roves espècies moleculars que facin una funció específica. L'any 1929, Dirac va escriure una frase que ha estat citada diverses vegades: "Les lleis de la física necessàries per a elaborar una teoria matemàtica de gran part de la física i de la química són completament conegudes, la dificultat rau ara en el fet que l'exacta aplicació d'aquestes lleis duu a equacions massa difícils de resoldre". Així, no va ser fins a la dècada dels 60 que la química quàntica es va fer una realitat, gràcies a l'aparició dels primers ordinadors comercials que, units a l'habilitat d'uns científics, van resoldre el dubte que Dirac havia plantejat. Durant els anys 60 i 70 l'interès fonamental residia en l'explicació de l'estabilitat química i la reactivitat de les espècies senzilles. Tot i així, no va anar bé fins als anys 80 quan es va realitzar un salt qualitatiu i els sistemes d'interès biològic van començar a estudiar-se seriosament. Amb ordinadors cada vegada més potents s'han pogut dur a terme estudis amb models cada vegada més realistes. Potser

l'última revolució que ha fet canviar la nostra forma de veure les possibilitats de la modelització molecular hagi estat l'aparició de les estacions de treball amb altes prestacions gràfiques.

En un reportatge publicat a la revista *Science* el passat mes de març, es mostraven les opinions de prestigiosos científics preguntats sobre què veien en el futur de la ciència. Cal destacar el fet coincident de diverses opinions sobre el paper destacat que desenvoluparà la modelització molecular, bé sigui per al disseny racional de noves substàncies actives, o per al disseny de catalitzadors enzimàtics. Totes aquestes iniciatives tenen

com a denominadors comú un clar enteniment sobre els mecanismes de reconeixement molecular.

La modelització molecular ha aconseguit ja fites importants i encara té un seguit de reptes plantejats. Per una banda, el disseny de substàncies bioactives, bé fàrmacs o fungicides, el disseny d'enzims artificials (anticossos catalítics) que realitzen les mateixes funcions que enzims naturals específics, etc., però encara té molts reptes plantejats com el problema del plegament de les proteïnes, denominat de vegades com "la segona part del codi genètic", o el disseny d'enzims amb funcions tan específiques com la transformació de metà en productes orgànics de major interès, o l'oxidació específica de productes clorats. Aquesta evolució és la que portarà aviat a disposar d'un cos de doctrina que permetrà fer ús de tota una metodologia per a resoldre problemes tècnics, cos de doctrina que es podria anomenar Enginyeria Molecular.

Però tornem al tema del reconeixement molecular. Ja fa algun temps es va proposar la idea del disseny d'un ordinador molecular. Si bé la idea de tenir un ordinador d'aquestes característiques no sembla que arribi en un futur immediat, l'octubre passat *Science* va publicar un treball molt interessant sobre un experiment de càlcul realitzat amb molècules de DNA. L'experiment mostra una possibilitat real de realitzar càlculs a nivell molecular, basant-se en el reconeixement que realitzen dos fragments de DNA. Les regles del joc són: la base adenina (A) reconeix per complementarietat l'uracil (U) o la timina (T), i la base citosina (C) reconeix per complementarietat la de la guanina (G). El problema de càlcul resolt va ser una versió simplificada del problema del viatjant, consistent a trobar el camí òptim

per a visitar set ciutats disposant de 14 camins diferents d'una sola direcció entre elles. A cada ciutat se li va associar una seqüència de 20 nucleòtids i a cada camí una seqüència de 20 nucleòtids on els 10 primers corresponen a la ciutat de partida i els altres 10 a la ciutat d'arribada. En un primer pas es van barrejar en el reactor oliçonucleòtids corresponents a cada camí i nucleòtids complementaris de cada una de les ciutats. Per reconeixement entre bases complementàries es van formar "camins a l'atzar" entre les ciutats, ja que l'oligonucleòtid complementari d'una ciutat agrupa un camí que arriba a la ciutat amb un altre que surt d'ella. Es van eliminar tots els camins que no comencessin i acabessin en un punt determinat. Posteriorment, es van aïllar aquells corresponents únicament a camins "set ciutats", i se'n van conservar únicament aquells en els quals cada ciutat "era visitada" només una vegada, obtenint-se la solució buscada! El procés va suposar gairebé set dies de treball intens de laboratori, però l'experiment obre les possibilitats a problemes de més envergadura que requereixen l'ús de xarxes neuronals (recordem l'ordre de magnitud del número d'Avogadro).

Aquest audaç experiment reflecteix l'entramat existent entre totes les àrees de coneixement. Com comentàvem al principi, el reconeixement molecular és un tema de gran actualitat i, des d'ell, aquest experiment ens duu a reflexionar sobre la forma com avui en dia entenem els ordinadors. La part final de la transmissió del senyal pel qual un organisme viu realitza una contracció muscular, per exemple, no es realitza per impulsos elèctrics, sinó per un missatger molecular. Potser si entenem una mica millor les propietats de les molècules i les seves formes de comunicació serem capaços d'entendre el mecanisme de funcionament del cervell humà i ampliar les nostres possibilitats de dissenyar superordinadors des d'un punt de vista completament diferent al que utilitzem avui en dia.



AGENDA

• **"Eccomas 96"**. París (França), 9-13 de setembre. Dues conferències organitzades per l'European Community on Computational Methods in Applied Sciences. Per a més informació, truqueu a F. Tapissier al telèfon +33 39 63 56 00 o envieu un mail a symposia@inria.fr.

• **"PARCO'95"**. Genè (Bèlgica), 19-22 de setembre. Conferència internacional sobre computació paral·lela. Per a més informació, truqueu al professor Koen De Bosschere, de la Universitat de Gent, al telèfon +32 9 264 35 94 o envieu un mail a parco95@elis.rug.ac.be.

• **"Sup'Eur 95"**. Madrid, 24-29 de setembre. La conferència Supercomputing Europe, que se celebra anualment, es farà enguany a la Universitat Politècnica de Madrid, a la seva facultat d'Informàtica. Per a més informació, adreueu-vos al professor: Félix Garcia Merayo al telèfon (91) 336 69 31 o envieu un mail a l'adreça de correu electrònic fgmerayo@fi.upm.es.

• **"Finite Elements in Fluids"**. Venècia (Itàlia), 15-21 d'octubre. No-

vena conferència sobre elements finits en fluids per conèixer les noves tendències en el tema arreu del món i, especialment a Europa. Informació al telèfon +3949 875 85 96 o a l'e-mail mcecchi@pdmat1.math.unipd.it.

• **"Workshop European Academic Supercomputing"**. Amsterdam (Holanda), 30 de novembre. Per a commemorar el cinquè aniversari de The Netherlands National Computing Facilities Foundation (NCF), aquesta organització ha preparat un workshop sobre com aconseguir una col·laboració més propera dels centres de supercomputació a Europa. Per a més informació, truqueu al telèfon +31 70 344 07 00 o envieu un mail a aerts@sara.nl.

• **"Eurogen 95"**. Las Palmas de Gran Canària, 4-8 de desembre. Curs curt d'algorismes genètics i les estratègies d'evolució en ciències computacionals i enginyeria. Per a més informació, truqueu al telèfon (928) 45 19 16 o envieu un mail a eurogen@titan.ulpgc.es.

Per a qualsevol notícia o comentari sobre els articles de TERAFLOP, podeu dirigir-vos a nosaltres mitjançant l'adreça del correu electrònic: teraflop@cesca.es

EDITA
CESCA

TERAFLOP

CONSELL EDITORIAL

Teresa Delàs
Albert Marcat
Antoni Oliva
Santiago Olivella
Eugenio Oñate

CONSELL DE REDACCIÓ

Josep Àngel Martos
Jordi Aguilà

COORDINACIÓ

M. Àngels Novoa
DISSENY I PRODUCCIÓ
Subirà & Associats

MAQUETACIÓ

Rosa Álvarez

PUBLICITAT

J.L. Naranjo
Begoña Duran

Tel. 315 23 23

AMB EL SUPORT DE

Generalitat
de Catalunya

FUNDACIÓ CATALANA
PER A LA RECERCA

BREUS

QUATRE GUANYADORS DE LES BEQUES CRAY 95

Enguany han estat quatre els guanyadors de les beques de la Fundació Catalana per a la Recerca i Cray Research per a anar a un centre Cray d'Europa o dels EUA durant dos mesos. Es tracta de José Luis Andrés, del departament de Química de la Universitat de Girona; Miquel Costa, del departament de Màquines i Motors Tèrmics de la Universitat Politècnica de Catalunya; Jordi Pallarès, del departament d'Enginyeria Elèctrica i Mecànica de la Universitat Rovira i Virgili; i Eduard Vives, del departament d'Estructures i Constituents de la Matèria de la Universitat de Barcelona.

NOU SUPERORDINADOR MASSIVAMENT PARAL·LEL DE CONVEX

Convex Computer Corporation ha introduït al mercat recentment un nou model de la seva sèrie de superordinadors massivament paral·lels Exemplar SPP. Aquest nou ordinador, anomenat SPP1200, està basat en un nou processador de Hewlett Packard, el PA-RISC 7200, que té una velocitat punta de 240 Megaflops per segon. Segons fonts de Convex, ja s'han venut tres exemplars del nou ordinador al National Center for Supercomputing Applications (EUA), a l'Ohio Supercomputing Center (EUA) i a la Universitat de Mainz (Alemanya). El nou superordinador es pot trobar en dos models diferents: l'SPP 1200/CD, que pot tenir entre 2 i 16 processadors, i l'SPP 1200/XA, que en pot tenir entre 8 i 128.

PLAÇA DE DIRECTOR PER AL SARA

El centre de supercomputació d'Amsterdam, anomenat SARA, està buscant un director. Les seves tasques consistiran en el desenvolupament d'una política estratègica per al centre i l'estimulació de la seva entrada al mercat. També s'encarregarà de la direcció financera i econòmica, la política de personal i la direcció quotidiana. El candidat haurà de tenir experiència en els camps de les tecnologies de la informació i la ciència i serà preferible que tingui experiència en el mercat comercial. El salari es pactarà de mutu acord. Si voleu més informació, envieu un mail a hollenberg@sara.nl, truqueu al telèfon +31 0 3402 40555 o envieu un fax al +31 0 3402 481724.

EL PROGRAMA D'APLICACIONS QUÍMIQUES MOPAC S'HA INSTAL·LAT A L'SP2

Properament s'instal·larà al superordinador paral·lel IBM SP2 del CESCA el programa Gaussian 94, que s'utilitza en la química computacional. Ja està instal·lat a aquest ordinador el programa Mopac, que serveix per al càlcul molecular semiempíric.

Diversos laboratoris farmacèutics han estat avaluant els programes instal·lats al CESCA

(Ve de la plana 1)

Per a manipular aquestes bases de dades i identificar i aïllar molècules d'una determinada geometria i propietats d'entre els milers que hi ha, fa falta un software especialitzat. Programes d'aquest tipus són els que s'han instal·lat durant els últims mesos al CESCA.

El primer software per a buscar compostos en bases de dades, el Chem-X, de l'empresa Chemical Design, es va instal·lar durant els mesos de novembre i desembre del passat any 1994.

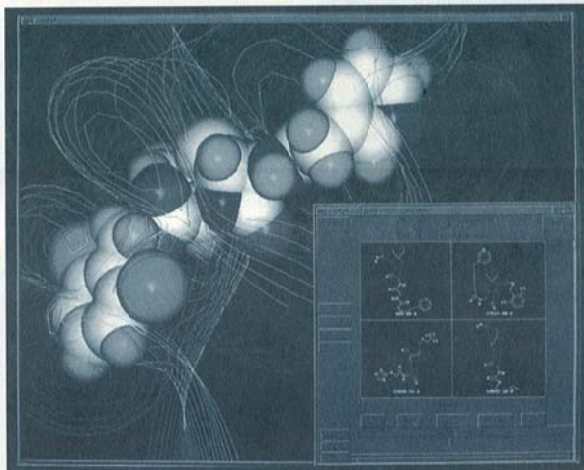
Aquesta empresa també va deixar 6 bases de dades sobre les quals treballar: la del National Cancer Institute americana, dues bases de dades de Chapman & Hall, la Maybridge, la Derwent i la PJB Projects. El Chem-X és el software més conegut, juntament amb

Sybyl/Unity i Catalyst, també instal·lats al CESCA.

El software Sybyl/Unity de l'empresa Tripos es va instal·lar el mes de gener d'aquest any, juntament amb les bases de dades NCI, CAST/3D, Maybridge i Index Chemical. Catalyst es va instal·lar durant el febrer amb la possibilitat de treballar amb les bases de dades NCI, Derwent, BioByte i Maybridge.

L'últim software que s'ha instal·lat és Isis, de l'empresa MDL, que ha estat al CESCA entre els mesos de maig i juny. Manca instal·lar la Cambridge Structural Database, que inclou programa i base de dades, i dos softwares de l'empresa Daylight.

Aquest tipus de programes per a buscar en bases de dades i les bases de dades en si mateixes són de gran interès per a les indústries farmacèutiques però tenen un cost elevat. És per això que s'està estudiant comprar un d'aquests productes al CESCA en col·laboració amb diferents laboratoris. Els laboratoris Esteve, Almirall i Menarini són els que han estat provant tots els productes que s'han instal·lat. Altres laboratoris, com Ferrer Internacional, Lasa i Glaxo, han mostrat interès en el projecte.



els programes instal·lats al CESCA permeten fer cerques en bases de dades estructurals de compostos químics, útils per als laboratoris

La UPC organitza un seminari internacional d'anàlisi estructural de construccions històriques

El coneixement del comportament mecànic dels materials i les estructures contribueix a l'estudi de les construccions històriques i les seves necessitats de reforçament. Entre els dies 8 i 10 de novembre es farà a Barcelona un seminari sobre l'anàlisi estructural de construccions històriques amb reconeguts especialistes. La supercomputació s'ha convertit en una eina clau en aquesta disciplina.

els equips que s'encarreguen de l'estudi de l'estat de les construccions històriques són cada vegada més interdisciplinaris. La supercomputació i la informàtica en general poden ajudar a l'anàlisi de l'estructura d'aquestes construccions. El proper mes de novembre es farà a la Universitat Politècnica de Catalunya (UPC) un seminari internacional sobre aquest tema, on es parlarà de les possibilitats de tècniques numèriques i experimentals.

El seminari, del qual el CESCA és una de les entitats patrocinadores, començarà el dimecres dia 8 de novembre a la tarda amb una sessió que exposarà les bases dels estudis, que constarà de quatre conferències, entre les quals s'explicaran les accions que es van dur a terme en el cas concret de la catedral de Mèxic. Dijous dia 9 a la sessió del matí es parlarà de les possibilitats dels diferents elements de l'anàlisi, en la qual s'explicaran les possibilitats tant de les tècniques numèriques com de les experimentals.

Diferents conferències explicaran casos reals

El dia 9 a la tarda i el dia 10 al matí hi haurà dues sessions en què s'exposaran casos reals de rehabi-

litacions de construccions antigues. D'entre els projectes que s'han fet a la UPC s'explicarà l'experiència amb la Casa Botines de León i la Cripta de la Colònia Güell de Barcelona.

També s'explicaran sis experiències més de projectes que s'han fet fora de la UPC, entre els quals hi ha la Basilica de San Marco de Venècia, el Coliseu de Roma i la Torre de Pisa. El seminari es tancarà amb una visita opcional al temple de la Sagrada Família de Gaudí i una conferència sobre la forma final del temple, que s'impartirà allà mateix.

El seminari tindrà lloc al Centre Internacional de Mètodes Numèrics per a l'Enginyeria (CIM-NE), al Campus Nord de la UPC. El preu del curs és de 45.000 pessetes si es paga abans del 30 de setembre i 55.000 si es paga després d'aquesta data. Existeixen un seguit de beques per a cobrir el 50% de l'import en el cas dels estudiants. La Fundació Catalana per a la Recerca també atorga a estudiants o investigadors tres beques del 100% de l'import. Per demanar qualsevol tipus d'informació sobre el congrés, podeu adreçar-vos a l'organització al telèfon (93) 401 60 37, al fax (93) 401 65 17 o bé al e-mail roca@etsecpcb.upc.es.

La conferència d'usuaris europeus d'IBM, Sup'Eur 95, se celebra enguany a Madrid

Del 24 al 27 de setembre se celebrarà a la Universitat Politècnica de Madrid la conferència anual que organitza IBM, la Sup'Eur 95. Aquesta conferència inclourà la concessió del Sup'Prize, premi dirigit als usuaris de HPCN, tant acadèmics com industrials.

La conferència anual que celebra IBM a Europa, Supercomputing Europe 95 (Sup'Eur 95), serà organitzada enguany per la Facultat d'Informàtica de la Universitat Politècnica de Madrid. Sup'Eur és l'associació d'usuaris europeus de computació d'altres prestacions (HPCN) sobre plataformes IBM.

"L'objectiu d'aquesta associació és facilitar l'ús de la HPCN i el software corresponent en màqui-

nes IBM, bàsicament clústers, SP1 i SP2, en l'entorn acadèmic, de recerca i industrial", explica Félix García Merayo, director de la conferència Sup'Eur 95.

En la conferència d'aquest setembre es tractaran temes com ara les estratègies en supercomputació a nivell europeu i mundial; hardware i software de l'IBM i tendències futures; i compiladors, llenguatges i eines per al paral·lisme, entre d'altres.

Conferenciants d'arreu del món

Cal destacar que, en representació del CESCA, Alicia Martínez, tècnica de sistemes del centre, participarà en una de les taules rodones i parlarà de la migració de l'IBM 3090 que hi havia al centre cap al nou SP2. Està confirmada l'assistència com a conferenciants de Mateo Valero, director del CEPBA; Jack J. Dongarra, de l'Oak Ridge National Laboratory, autor d'un famós test que permet elaborar la classificació dels superordinadors que hi ha al món en funció de la seva potència; i Adolfo Hoise, del Cornell Theory Center, entre d'altres.

El preu de la inscripció és de 36.000 pessetes i inclou l'admissió a la conferència, els cafès i menjars, un sopar oficial i els apunts de les conferències. Dins el programa de la conferència, està previst celebrar unes sessions tutorialis durant el diumenge dia 24 de setembre. També cal dir que Sup'Eur 95 inclou també la concessió del Sup'Prize, un premi de l'associació que està adreçat als actuals i futurs usuaris de HPCN tant pertanyents a l'àmbit acadèmic com industrial, i als treballadors dels Centres de Càlcul.

Si voleu més informació sobre la conferència, dirigiu-vos al Dr. Félix García Merayo, enviant un mail a l'adreça e-mail fmerayo@fi.upm.es, o a la secretària de la conferència, Mari Paz Bartolomé, al número de fax (91) 336 69 42 o a l'e-mail maripaz@fi.upm.es. També es pot buscar informació a través del World Wide Web a les adreces <http://www.sara.nl/supeur> i a la <http://www.fi.upm.es/~vicens/supeur95.html>.

ENTREVISTA

Mateo Valero, director del Centre Europeu de Paral·lelisme de Barcelona

“El paral·lelisme és l'única possibilitat de dissenyar màquines cada cop més potents”

Mateo Valero és catedràtic al departament d'Arquitectura de Computadors de la UPC, director del CEPBA i ha presidit la recent conferència ICS'95. Reconegut expert en arquitectures paral·leles, Valero parla sobre la seva evolució previsible.

TERAFLOP Quins han de ser els objectius d'un centre de recerca dedicat als computadors paral·lels?

MATEO VALERO L'objectiu fonamental de les arquitectures paral·leles és aconseguir que s'executin eficientment aplicacions tant de tipus numèric com de gestió, però encara estem lluny de complir aquest objectiu. Per a accelerar el procés d'ajut a la recerca i de transferència de tecnologia a les empreses, el govern dels EUA, el japonès i la Unió Europea han llançat projectes d'R+D al voltant d'aquestes tecnologies. Com a conseqüència de l'existència d'aquests programes, s'han creat centres de recerca sobre paral·lelisme a molts països industrialitzats. Tot i que cada centre és diferent, en general es dediquen a dos tipus d'activitats: el disseny de noves arquitectures i la programació del software de base i l'ús d'aquests recursos per a programar les aplicacions perquè es faci un ús eficient dels recursos de hardware d'aquestes supermàquines.

TERAFLOP Quins són els objectius i la raó de ser del CEPBA?

M.V. La idea que va impulsar la seva creació va ser que fos un centre avançat en les tecnologies dels computadors paral·lels amb pro-



Mateo Valero creu que a Espanya manca tradició d'utilitzar supercomputació

jecció cap a Europa. El CEPBA és un centre de la UPC amb un patronat que agrupa a la UPC, la CICYT, la CIRIT, la FCR i el CSIC. Els objectius del CEPBA durant els seus 4 anys d'existència han estat bàsicament posar al servei de la comunitat científica un conjunt de recursos informàtics d'altres prestacions, impartir cursos de formació per a investigadors universitaris i empreses i ajudar a les empreses espanyoles a formar consorcis per a participar en projectes europeus.

TERAFLOP Quin va ser el context en el qual va néixer el centre?

M.V. El CEPBA neix com a conseqüència de la importància mundial de la recerca en supercomputació paral·lela. Com que a Espanya no hi havia cap centre dedicat a aquesta activitat es van començar a fer un seguit de gestions per a crear el cen-

tre, que va néixer l'any 1991.

TERAFLOP Què aporten els ordinadors paral·lels a la recerca de computadors d'alta velocitat?

M.V. En supercomputació hi ha hagut tres generacions de màquines ràpides. Fins l'any 75 es feien sistemes amb un sol processador escalar. Llavors s'introdueix el primer processador vectorial que significa un avenç qualitatiu quant a velocitat. Per altra banda, es comencen a dissenyar sistemes que contenen diferents processadors vectorials treballant conjuntament. Aquests sistemes han dominat la supercomputació durant 20 anys, però els alts costos de fabricació d'aquestes màquines i els avenços en el disseny de processadors superescalars han fet que els processadors vectorials comencin a deixar de fabricar-se i que, a partir

d'ara, l'única forma de dissenyar els computadors més ràpids, sigui mitjançant l'ús d'un nombre relativament elevat de processadors com els de les workstations actuals.

TERAFLOP Aquests sistemes, són el futur de la supercomputació?

M.V. En aquest moment els superordinadors més ràpids del món són sistemes multiprocessadors amb configuracions superiors a 1.000 processadors. Per altra banda, la batalla real en la computació d'altres prestacions està en el disseny de processadors individuals. Els costos de fabricació fa que pocs fabricants sobrevisquin i que s'estableixin aliances i divorcis impensables fa poc. Aquests processadors són la peça bàsica per a construir sistemes que van des de les workstations i computadors simètrics actuals fins als computadors massivament paral·lels. S'obre així un ventall de computadors que permeten adaptar-se a les necessitats de cada usuari i que han donat lloc al terme computador d'altres prestacions

TERAFLOP Què ofereixen els superordinadors paral·lels respecte dels altres?

M.V. Un computador paral·lel és aquell que té més d'un processador a nivell d'estructura. A més, està dissenyat perquè tots aquests processadors estiguin executant una aplicació o programa al mateix temps amb l'objectiu de reduir el temps d'execució. Des que es van començar a comercialitzar els primers sistemes multiprocessadors, es creu que el paral·lelisme és l'única possibilitat de dissenyar màquines cada cop més potents.

TERAFLOP El CEPBA té una forta participació en programes subvencionats per la Unió Europea.

M.V. El CEPBA només té projectes institucionals i facilitat que els investigadors dels departaments que utilitzen els seus recursos puguin ser socis en projectes europeus. El CEPBA va ser seleccionat, juntament amb el CIESCA, com a 'Gran Instal·lació' dins el programa Capital Humà i Mobilitat de la UE. Des de fa dos anys, investigadors europeus utilitzen les dues instal·lacions

i investiguen amb grups catalans gràcies a aquest programa. El CEPBA també és soci del consorci Advanced Computer Technology (ACT), les activitats de la qual són la creació de material pedagògic i la realització de cursos dins del programa europeu COMETT. El CEPBA ja ha fet 5 cursos sobre arquitectura i programació dels computadors massivament paral·lels.

TERAFLOP El CEPBA també lidera un projecte europeu dirigit a les petites i mitjanes empreses.

M.V. Fa dos anys vam sol·licitar liderar un projecte dirigit a pimes amb l'objectiu que les empreses veïessin si els computadors paral·lels d'altres prestacions els podien millorar la producció. Aquest projecte s'engloba dins d'un programa Esprit anomenat *Parallel Computing Initiative*. El CEPBA gestiona aquesta iniciativa per a Espanya i Itàlia i la part espanyola s'anomena PACOS. L'any passat es va fer una primera convocatòria, de la qual es van seleccionar 8 projectes. Ja hem presentat una segona proposta del programa PACOS que s'està avaluant. Esperem que dins d'aquesta iniciativa, més de 30 pimes hagin col·laborat amb el CEPBA en el context europeu. Entre les empreses catalanes amb les quals hem treballat hi ha INDO, en un projecte que ens va donar el premi Ciutat de Barcelona a la Tècnica l'any 1994.

TERAFLOP Creu que en un futur proper les empreses aniran entrant en l'entorn de la computació d'altres prestacions?

M.V. Avui els computadors ràpids són necessaris per a moltes aplicacions. Per exemple, no es poden dissenyar bons avions si no es fa amb superordinadors: la part estructural del Boeing 777 s'ha fet a partir de simulacions, no usant túnel de vent. A l'Ames Research Center de la NASA volen arribar al final d'aquesta dècada fent servir només superordinadors. A Espanya no hi ha hagut tradició d'utilitzar supercomputació i no crec aquesta tradició aparegui ara. El que falta aquí és estar al límit de la necessitat.

M.Àngels Novoa

El cafè italià millorarà amb l'ajut d'un model informàtic

Un grup de la Universitat de Milà està estudiant, amb l'ajut d'un Cray C90, com es pot millorar la qualitat del cafè gràcies a la supercomputació. Aquest projecte s'està desenvolupant al Consorci Interuniversitari del Nord-Est d'Itàlia per a la Computació Automàtica (CINECA).

Un grup de matemàtics i experts en software del Departament de Ciències de la Computació de la Universitat de Milà (Itàlia) volen descobrir quina és la millor manera de fer *espresso* italià de la millor qualitat. Per a descobrir això, el grup ha necessitat l'ajut del Cray C90 del CINECA, amb el qual han fet un autòmata cel·lular que explica la dinàmica de fluids del mètode de la percolació en un medi porós en dos i en tres dimensions. Un autò-

mata cel·lular és un model informàtic que imita qualsevol objecte de la natura que es multipliqui seguint una llei matemàtica. Analitzant com creix aquest objecte, doncs, amb el model es pot arribar a preveure quina serà la seva evolució.

El problema de com es fa un cafè és de dinàmica de fluids. S'ha de tenir en compte que el flux de l'aigua ha de ser exactament d'un mil·límetre per segon i que la pressió de la màquina és alta, cosa que fa

que el moviment de les partícules sigui molt irregular. Tots aquests factors s'han de traçar en el model informàtic. Com que les partícules sòlides de cafè involucrades són molt petites, és impossible fer experiments de laboratori com els que aquest grup simula. "Amb aquest model es poden obtenir dades per a treure els millors aromes del cafè i, a mesura que el model es vagi millorant, se'n podran anar extreient més informacions", explica Sbragion Denis, integrant del projecte. Aquesta idea ja ha estat avaluada per l'empresa productora de cafè IllyCaffè

Per a fer aquest projecte, el grup ha utilitzat des de PCs a superordinadors. El superordinador del CINECA es va fer servir, sobretot, per les simulacions tridimensionals, així com per a la codificació de l'autòmata cel·lular.

FOTO / NOTÍCIA



LA IMATGE DE LES CUG BARCELONA Les CUG (Cray User Group) són un seguit de seminaris que organitzen els centres que tenen algun superordinador Cray. La primavera de l'any vinent (18-22 de març de 1996), el CIESCA organitza aquestes jornades a Barcelona, el logo de les quals veiem en aquesta imatge. Les persones que ho desitgin ja poden enviar pònencies per a ser conferenciantes en les jornades. Per a més informació, envieu un mail a cray@aliga.cesca.es.