

TERAFLOP

NOTICIARI DEL CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA

Núm. 10
15.000 exemplars

CESCA

Publicació mensual
Octubre 1995

Una introducció al mètode dels elements finits clourà la tercera Aula del CESCA

Des del proper 17 d'octubre i fins al 30 de novembre s'impartiran al CESCA els cursos de la tercera Aula de Supercomputació. Dins el seu programa s'ha preparat un monogràfic d'Introducció al Mètode dels Elements Finitos, per al qual existeixen un nombre limitat de beques.

Aquest mes s'estrena al CESCA la tercera Aula de Supercomputació, que en aquesta ocasió inclourà cursos que versaran sobre l'entorn dels ordinadors Cray. L'Aula de Supercomputació consisteix en un seguit de cursos que or-

ganitza el CESCA per a aprofundir en els coneixements i en la utilització eficaç de les eines que ofereix la supercomputació. Cada trimestre, l'Aula se centra en l'entorn d'un dels superordinadors del CESCA, l'IBM SP2 i el Cray Y-MP.

El monogràfic que tancarà la tercera Aula del CESCA serà una introducció al Mètode dels Elements Finitos (MEF). Aquest curs, que s'impartirà els dies 28, 29 i 30 de novembre, presentarà de forma introductòria les bases matemàtiques del MEF per a resoldre diferents problemes en les àrees de mecànica de sòlids i estructures, mecànica de fluids i transmissió de calor i proces-

sos de fabricació, entre d'altres.

Per una altra banda, s'explicaran les tècniques que ofereix la supercomputació per a solucionar els problemes de gran dimensió que es poden trobar en l'aplicació del MEF. Eugenio Oñate, director del Centre Internacional de Mètodes Numèrics per a l'Enginyeria (CIMNE), és el coordinador del curs, i cal també destacar la presència de dos professors convidats recone-

guts experts mundials en aquest mètode: el catedràtic de la UNESCO a la UPC, O. C. Zienkiewicz i el professor R. L. Taylor de la Universitat de Califòrnia a Berkeley (EUA).

Els cursos fixos per a totes les Aules són el tutorial d'Introducció a la Supercomputació (17 d'octubre); el de visualització, que en aquest cas se centrarà en el programa EnSight, de Cray, (7 de novembre); i el de Comunicacions, Xarxes i eines Multimèdia (14 i 15 de novembre). Els altres cursos estaran centrats en la supercomputació sota l'entorn Cray. Tots els cursos tenen un nombre màxim de 20 places.

El preu del curs tutorial és de 2.000 pessetes; 4.000 pessetes costen cada un dels altres cursos i 5.000 pessetes el monogràfic. El preu inclou apunts de cada un dels cursos i existeix un nombre limitat de beques per a assistir al monogràfic.

L'SP2 ajuda a calcular el disseny òptim de ventiladors industrials

El disseny de ventiladors industrials, la laminació de metalls, la construcció de vaixells o l'estudi de les turbulències són alguns dels problemes que es poden optimitzar a partir de simulacions a l'ordinador. El CIMNE està treballant amb l'IBM SP2 del CESCA en el desenvolupament d'un programa que podrà resoldre molts problemes de mecànica de fluids reduint al màxim els assaigs experimentals.

El disseny de ventiladors industrials es fa avui dia dins una habitació en la qual entra aire per una de les bandes i on hi ha un ventilador. A partir d'aquí es va mesurant la pressió en un punt de l'habitació abans i després de l'actuació del ventilador. Llavors s'observa com el ventilador dona pressió a l'aire i l'empeny cap a fora de la cambra. També es fan mesures de com millora o empitjora la funció del ventilador segons la forma que tingui i, a partir de gràfiques comparatives, es tria quin és el millor. "Amb l'ajut de l'SP2 s'està fent un programa que

simula aquests processos a l'ordinador", explica Orlando Soto, especialista del CIMNE (Centre Internacional de Mètodes Numèrics per a l'Enginyeria).

Ramon Codina, professor de l'E.T.S.E. de Camins, Canals i Ports i director del projecte, i Orlando Soto han construït un programa per a resoldre problemes de mecànica de fluids a partir d'equacions de Navier-Stokes incompressibles (per problemes que tenen a veure amb l'aigua, l'aire a baixa velocitat, o altres fluids que no es poden comprimir). El programa pot tenir diverses aplicacions, algunes de les quals ja s'han treballat al CIMNE: el disseny de reactors químics, l'optimització de l'ompliment de motlles o la laminació de metalls.

(Continua a la plana 3)

"Teraflo" ja es pot consultar electrònicament a través del WWW

A partir d'aquest número d'octubre, es pot accedir a la informació que transmet Teraflo mensualment a través de la xarxa Internet. A més del tradicional format paper amb què s'edita des del mes de novembre de 1994, Teraflo es podrà llegir i consultar a través del World Wide Web (WWW).

El WWW és una de les aplicacions de la xarxa Internet en la qual es pot trobar documents en format hipertext, sons i imatges estàtiques o en moviment. L'accés a la informació que es troba distribuïda per la xarxa és molt senzill i ràpid gràcies a l'estructuració que ha comportat el World Wide Web, que es pot visualitzar a partir d'al-

guns programes que es distribueixen gratuïtament per la xarxa, com el Netscape.

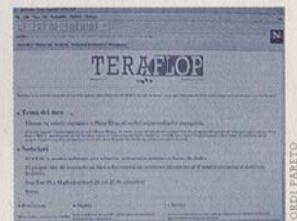
Empreses i institucions de tot el món han entrat a Internet gràcies al WWW i cada dia és més comú trobar la premsa diària i periòdica en format on-line. A Catalunya, el primer diari que va oferir la seva informació de forma íntegra per la xarxa va ser l'Avui, al qual més tard es van unir altres mitjans. Revistes especialitzades o de gran consum i premsa d'arreu del món és avui fàcilment consultable a través del WWW.

A partir d'aquest mes, Teraflo també serà a l'abast dels lectors en aquest format, on es trobaran totes les notícies del mes així com una hemeroteca on hi

haurà accés als números anteriors.

Des de la pàgina de Web de Teraflo també hi haurà links (connexions) a altres noticiaris de centres de supercomputació d'arreu del món i a altres Webs d'interès general.

Des d'aquesta pàgina també es podran enviar missatges directament per correu electrònic per a fer comentaris sobre els articles de Teraflo o sobre el mateix Web. L'adreça provisional de Teraflo és <http://balandrau.cesca.es/teraflop>



Una pàgina electrònica de Teraflo, accessible a World Wide Web des d'aquest mes

□ CUG Barcelona

La propera primavera es celebrarà a Barcelona el congrés Cray User Group (CUG). Ja es poden enviar els papers per a participar-hi com a conferenciant **Plana 3**

□ Top 500

L'SP2 del CESCA ha entrat en la classificació dels ordinadors més potents del món **Plana 3**

□ Entrevista

Keiichi Uchida, cap de HPC de Fujitsu, explica els avantatges dels processadors vectorials **Plana 4**

□ Fusió d'empreses

Dues grans empreses de software químic, Molecular Simulations i Biosym han anunciat la seva fusió **Plana 4**

□ Nova versió d'UniChem

El passat mes de juny es va presentar la versió 3.0 del programa UniChem **Plana 2**

AGENDA

OCTUBRE

- **3 (12 h) Conferència: "Nucleosynthesis in novae and the role of radioactive isotopes".** Per Alain Coc (CNRS, França), CIESCA, Barcelona. Telèfon (93) 491 40 14.
- **5 (17 h) Conferència: "Diffusive behaviour of coupled random walkers".** Per Igor Sokolov (Univ. Freiburg, Alemanya), CIESCA, Barcelona.
- **11-12 Workshop on Scientific Parallel Computing.** C&C Research Labs (Alemanya). Telèfon +49 2241 92520. E-mail hoffman@crl-ri-necetechnopark.gmd.de.
- **17 (10 a 13 h) Curs Tutorial: Introducció a la Supercomputació.** CIESCA, Barcelona.
- **19 (10 a 13 h) Curs: Introducció a la Supercomputació sota l'entorn Cray.** CIESCA, Barcelona.
- **24 i 25 (10 a 13 h) Curs: Optimització de programes sobre computadors Cray.** CIESCA, Barcelona.

NOVEMBRE

- **7 (10 a 13 h) Curs: Eines Gràfiques de Supercomputació: En-Sight.** CIESCA, Barcelona.
- **8 al 10 Seminari Interaccional: Anàlisi Estructural de Construccions Històriques.** CIMNE, Barcelona. Telèfon (93) 401 60 37. E-mail roca@tsecpcb.upc.es.
- **14, 15 (10 a 13 h) Curs: Comunicacions, xarxes i eines multimèdia.** CIESCA, Barcelona.
- **16 (10 a 13 h) Curs: Introducció al Fortran-90.** CIESCA, Barcelona.
- **21 (10 a 13 h) Curs: Introducció a la programació del Cray T3D.** CIESCA, Barcelona.
- **22 (10 h) Conferència: "Planar near-fields scanning in the time-domain".** Per T. B. Hansen (Rome Laboratory, EUA), CEPBA, Barcelona. Telèfon (93) 401 69 86.
- **28 al 30 (10 a 13 h) Curs Monogràfic: Introducció al Mètode dels Elements Finitos.** CIESCA, Barcelona. Telèfon (93) 491 40 14.

EDITA
CIESCA

TERAFLOP

CONSELL EDITORIAL

Teresa Delàs
Albert Marcat
Antoni Oliva
Santiago Olivella
Eugenio Oriate

CONSELL DE REDACCIÓ

Josep Àngel Martes
Jordi Aguilà

COORDINACIÓ

M. Àngels Novoa
DISSENY I PRODUCCIÓ
Subirà & Associats

MAQUETACIÓ

Rosa Álvarez

PUBLICITAT

J. L. Naranjo
Begoña Durán
Tel. 315 23 23

AMB EL SUPORT DE

Generalitat de Catalunya

FUNDACIÓ CATALANA PER A LA RECERCA

La computació i el projecte Genoma Humà

RODERIC GUIGÓ
Institut Municipal d'Investigació Mèdica de Barcelona (IMIM)

L'objectiu del projecte Genoma Humà és la caracterització del material genètic dels éssers humans. El projecte permetrà aprofundir el nostre coneixement del funcionament molecular dels organismes vivents, i tindrà un profund impacte en la medicina, en l'agricultura i en molts processos industrials. Atès el volum i la naturalesa de la informació que generarà, el projecte és impensable sense el concurs de la computació.

El cos humà és constituït per milers de milions de cèl·lules. En les cèl·lules es troben els cromosomes, molècules llargues d'Àcid Desoxirribonucleic (DNA). El DNA és constituït per la successió de molècules elementals anomenades nucleòtids. Una de les funcions importants del DNA és "codificar" les proteïnes. Les proteïnes són els components estructurals de les cèl·lules i fan possible els processos bioquímics subjacents a les manifestacions de la vida (la respiració, el llenguatge, ...). Les proteïnes són cadenes lineals de centenars d'unitats elementals anomenades aminoàcids, que poden ser de 20 tipus diferents. D'acord amb la seqüència d'aminoàcids, aquestes cadenes es pleguen i adopten una conformació tridimensional, de la qual depèn la seva funció. Hom creu que existeixen uns cent mil tipus diferents de proteïnes en l'organisme humà. La seqüència concreta d'aminoàcids de les proteïnes d'un organisme és "codificada" per la seqüència de DNA en els cromosomes d'aquest organisme. Cada grup de 3 nucleòtids consecutius en la seqüència de DNA especifica un aminoàcid en la seqüència d'una proteïna. La maquinària cel·lular "llegeix" la seqüència de DNA dels cromosomes d'acord amb aquest codi i sintetitza les proteïnes corresponents. Per això hi ha qui es refereix al DNA com al programa que especifica la construcció d'un organisme. Pro-

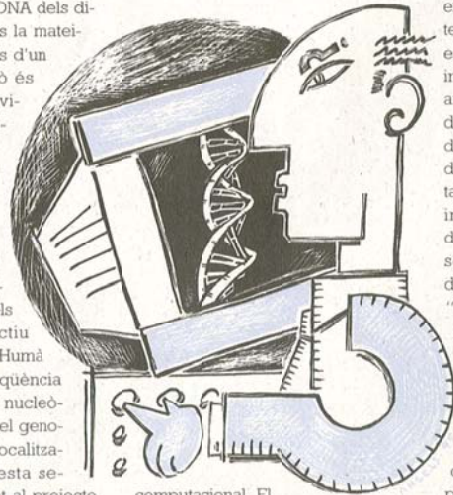
teïnes diferents són codificades per segments diferents del DNA, anomenats "gens".

La seqüència de DNA dels diferents cromosomes és la mateixa en totes les cèl·lules d'un mateix individu, però és diferent en les d'individus diferents. La seqüència de DNA característica és el que anomenem el genoma. El genoma d'individus d'espècies diferents varia en el nombre, tipus i organització dels gens en els cromosomes. L'objectiu del projecte Genoma Humà és l'obtenció de la seqüència dels 3.000 milions de nucleòtids que constitueixen el genoma dels humans i la localització dels gens d'aquesta seqüència. Paral·lelament al projecte Genoma Humà, estan sent desenvolupats projectes de seqüenciació del genoma d'altres organismes i el projecte de la Diversitat del Genoma, que pretén determinar el grau de variabilitat del genoma humà.

El projecte Genoma Humà tindrà molta influència en el desenvolupament de la Biologia. Permetrà, primer, un millor coneixement del funcionament de l'organisme a nivell molecular i de la causa bioquímica de malalties amb un component genètic. Segon, la seqüenciació dels genomes d'organismes diferents permetrà una millor comprensió de les relacions filogenètiques entre les espècies i la identificació de la component genètica subjacent als rets característics d'una espècie. Tercer, l'estudi de la variabilitat genòmica dins l'espècie humana permetrà determinar la importància dels factors genètics versus els ambientals en la diversitat dels individus. D'altra banda, el projecte Genoma tindrà conseqüències tecnològiques importants, com ara la possibilitat de modificar genomes o de dissenyar-ne de nous.

La Informàtica juga un paper molt important en la investigació en

Biologia Molecular. La informació que produeix aquesta investigació la fa apropiada a l'anàlisi



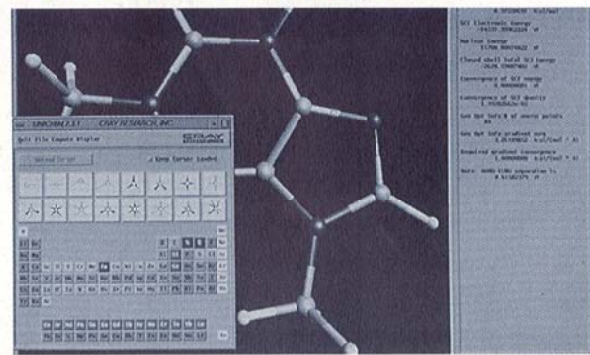
computacional. El fet que en la seqüència d'una biomolècula es troba implícita la seva funció, fa aquesta anàlisi extraordinàriament rellevant. Avui, la utilització de la computació ha esdevingut rutinària als laboratoris de Biologia Molecular. Així, quan els investigadors obtenen una nova seqüència, l'anàlisi computacional és utilitzat per localitzar-ne dominis funcionals, per predir-ne el plegament, per establir-ne relacions filogenètiques, però sobretot per compararla amb les seqüències ja emmagatzamades a les bases de dades, de manera que la similitud amb una seqüència ja coneguda en pugui suggerir la funció. Característic de la utilització de la informàtica en Biologia Molecular és que la computació es realitza essencialment a Internet. Tant les bases de dades de bioseqüències -actualitzades diàriament-, com els programes i recursos d'anàlisi de seqüències es troben distribuïts per Internet i s'hi accedeix utilitzant la infraestructura proporcionada pel WWW.

És evident que en els projectes de seqüenciació genòmica, la Informàtica hi jugarà un paper crucial. En aquests moments, GenBank, la base de dades de les se-

qüències de nucleòtids als EUA, rep al voltant de 20.000 connexions diàries per Internet. Conté 492.000 seqüències de més de 11.000 espècies, que totalitzen 354 milions de nucleòtids. Tot i així, la longitud de les seqüències emmagatzemades a GenBank representa només un 10% de la longitud del genoma d'un únic individu humà. El projecte del Genoma generarà, doncs, un enorme volum d'informació; els sistemes informàtics juguen un paper essencial en l'adquisició d'aquesta informació, la seva administració, anàlisi i interpretació, i una nova disciplina científica, la "Informàtica del Genoma", està sorgint per tal de fer front als problemes computacionals que es generen durant la investigació genòmica. Alguns d'aquests problemes només poden ser tractats amb supercomputadors, i han estat identificats com a "Grand Challenges". En aquest sentit, ordinadors paral·lels han estat recentment utilitzats en algunes àrees de l'anàlisi de seqüències, com ara la reconstrucció de filogènesis moleculars, la recerca de similituds en les bases de dades de bioseqüències i el plegament tridimensional de les proteïnes i seran utilitzats aviat en àrees com ara l'anàlisi comparativa de genomes, l'anàlisi de seqüències de DNA de mida cromosòmica i l'extracció automàtica de coneixement de les bases de dades.

En definitiva, el projecte del Genoma Humà representa un punt d'inflexió a la història de la Biologia. Amb ell, la Biologia deixa de ser una ciència purament experimental per passar a tenir un fort component teòric o computacional. Com ha escrit recentment John Maddox, l'editor de la revista Nature, "la computació i la biologia molecular, ja interdependents, estan a punt d'unir-se inextricablement... Els ordinadors són cada cop més un dels mitjans a través dels quals els problemes de biologia molecular poden ser resolts". Però no es tracta només que la computació pugui contribuir a resoldre determinats problemes en Biologia Molecular, sinó que aquests problemes només poden ser plantejats en termes computacionals. Després de tot, la síntesi de proteïnes a partir del DNA és una computació, el desxiframent del programa de la qual és l'objectiu últim del projecte del Genoma Humà.

NOVETATS HPCN Nova versió d'UniChem



FORDI PARETO

Cray Research Inc va anunciar el passat mes de juny el llançament d'una nova versió del software UniChem, un programa que funciona com a interfície gràfica per a treballar amb els programes de química quàntica.

L'UniChem 3.0, que des del passat mes de juny ja ha arribat a la xifra de 85 llicències de funcionament venudes, té una arquitectura client-servidor i pot fer córrer els programes MNDO94, DGauss 3.0, Cadpac 5.2 i, opcionalment, el programa Gaussian. La interfície gràfica d'UniChem ja està preparada

per córrer sobre estacions de treball Sun o Silicon Graphics i els programes químics sobre plataformes Cray o Silicon Graphics. Cray Research està preparant actualment una versió del programa per a que treballi sobre la plataforma IBM Risc 6000. És previst que aparegui durant aquesta tardor, tot i que no s'ha concretat la data.

Si voleu obtenir més informació sobre les característiques tècniques d'aquest nou producte podeu fer una consulta a la pàgina de Web que Cray té destinada a UniChem. La seva adreça és: <http://www.cray.com/apps/UNICHEM/Mainpage.html>.

(Ve de la plana 1)

El CIMNE utilitza l'SP2 per optimitzar problemes de mecànica de fluids

Ara per ara un dels projectes amb què s'està provant el programa és el de disseny de ventiladors. Amb aquest software, que forma part d'un projecte Brite-Euram de la Unió Europea, es vol aconseguir fer molts menys assaigs guanyar temps en el seu disseny i que sigui més fàcil fer-hi canvis. "Ara per ara el que estem fent és comparar els resultats que obtenim nosaltres amb els càlculs i els comparem amb els que les empreses han aconseguit a partir de l'experiència", explica Orlando Soto.

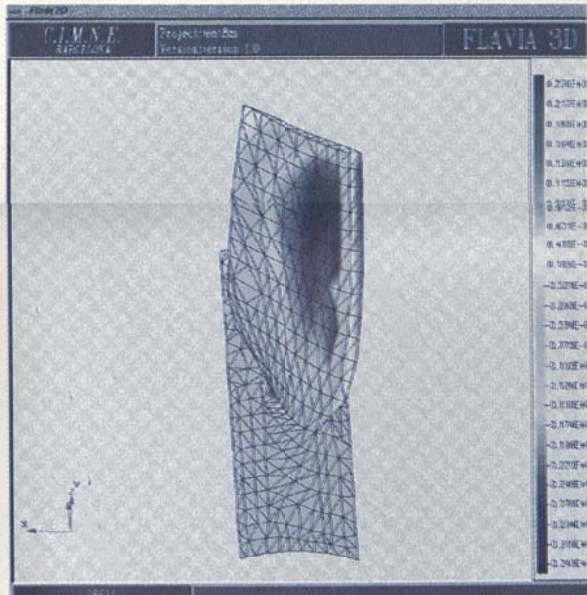
Necessitat de memòria

Encara que no existeix un mètode definitiu per a resoldre les equacions de Navier-Stokes, sí que hi ha diferents maneres de fer-ho. Una de les formes de resoldre

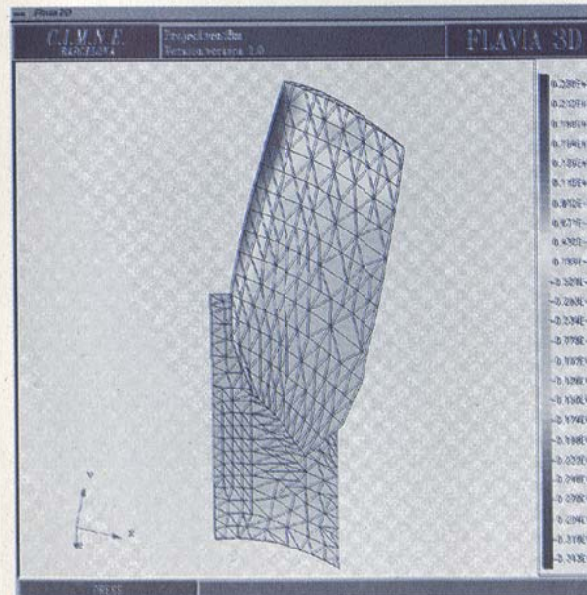
aquestes equacions és a partir de programació implícita, que és molt més rigorosa matemàticament però per a la qual es necessita més memòria de l'ordinador. "En aquest projecte, al CIMNE estem programant de forma implícita i per això necessitem molta memòria i necessitem fer el nostre estudi a l'SP2 del CIESCA", explica Chris Morton, del CIMNE.

Una altra de les aplicacions del programa en les quals s'està treballant actualment és en el disseny del casc de vaixells. "Aquest és un problema, en el qual intervien dos fluids, difícil de resoldre i que necessita molta memòria", assegura Morton, que està utilitzant el programa per a calcular l'optimització de casc de vaixells.

Tot i que aquest programa de mecànica de fluids que s'està fent al CIMNE no és paral·lel, està previst que properament es paral·lelitzari fent que la malla d'elements finits per a calcular en cada moment es divideixi en dues o més parts i que, d'aquesta manera es vagin calculant paral·lelament a diferents processadors de l'ordinador.



Simulació de l'aspa d'un ventilador per la cara que repel l'aire



Discretització de l'aspa d'un ventilador per la banda on empeny l'aire

Fins al novembre hi ha temps per optar a ser conferenciant al CUG Barcelona

Fins al 3 de novembre hi ha temps per enviar les ponències per a participar com a conferenciant al CUG (Cray User Group) Barcelona que se celebrerà entre els propers 11 i 15 de març. El CUG és una organització internacional que té com a objectiu crear un fòrum obert per promoure un intercanvi lliure d'informació i idees d'interès mutu per als usuaris de computadors Cray.

Per optar a ser conferenciant en aquestes jornades cal omplir el Call for Papers que podeu aconseguir enviant un e-mail a cugbarcelona@cug.org, connectant-vos a l'adreça de World Wide Web <http://www.cesca.es/CUG/CUGBarcelona.html> o bé a través d'ftp anònim a <ftp://ftp.cesca.es> al directori /pub/CUGBarcelona. En el Call for Papers s'haurà d'indicar a quin tipus de sessió l'autor creu que podrà anar la seva ponència: generals, sobre xarxes, sobre aplicacions, etc. S'espera que entre els assistents al CUG de Barcelona hi hagi destacats científics dels Estats Units, Europa i Japó.

El CUG Barcelona va ser presentat en l'edició de la tardor del CUG, que es va celebrar entre el 25 i el 29 de setembre passat a Alaska a la seu de l'Artic Region Supercomputing Center, situat a la Universitat d'Alaska, a Fairbanks. L'edició de la primavera del 96 serà organitzada pel CESCA i està



Xapa amb el logotip del CUG Barcelona que s'obsequiarà a tots els participants

previst que tingui lloc a les instal·lacions de l'Hotel Melià.

La recepció del primer dia de les conferències (11 de març) està esponsoritzada per: Cray Research Inc. i tindrà lloc a l'esmentat hotel, així com la recepció especial que sempre es fa a les persones que assisteixen per primer cop a un CUG. Als assistents del CUG Barcelona també se'ls oferirà un sopar de gala.

Per que les jornades Cray User Group es puguin fer de la millor manera possible, el CESCA convoca la presència de voluntaris per ajudar en feines diverses. Aquests voluntaris podran assistir de forma gratuïta a totes les sessions del CUG a Barcelona.

Per a qualsevol informació, podeu enviar un mail amb les vostres preguntes a l'adreça electrònica oficial de les CUG Barcelona: cugbarcelona@cug.org, o al telèfon del CESCA, (93) 491 40 14, o bé al fax del centre (93) 490 46 35.

L'SP2 del CESCA apareix a la classificació mundial dels superordinadors més potents i es situa en el lloc 377è

L'SP2 del CESCA va entrar el mes de juny al més conegut dels rankings per a ordinadors: el Top 500. Segons aquest test, l'SP2 és l'ordinador més potent de Catalunya i el segon de l'estat espanyol.

Periòdicament, Jack J. Dongarra, de la Universitat de Tennessee (EUA), fa un seguit de tests de potència (benchmarks) dels grans superordinadors. A partir dels tests elabora un llistat, el Top 500, on apareixen els 500 ordinadors més potents del món.

A l'últim Top 500 hi figura l'SP2 del CESCA en el número 377 mundial, cosa que el situa com l'or-

dinador més potent de Catalunya. L'SP2 més potent del món, instal·lat al Correll Theory Center (EUA), apareix en l'onzè lloc de la llista general.

El primer ordinador del Top 500 és un Fujitsu de fabricació específica per a recerca aeroespacial. El més potent instal·lat a Europa que es troba a la llista és el Cray T3D de la Universitat d'Edimburg, que apareix amb el número 18. El computador més ràpid de l'estat espanyol apareix en el lloc 278 i és el Cray Y-MP de l'Institut Nacional de Meteorologia (INM). Apart de l'SP2 del CESCA i el Cray de l'INM apareix un altre ordinador instal·lat a Espanya, el Fujitsu del CESCA.

BREUS

ENTRE EL 25 I EL 27 DE SETEMBRE ES VA CELEBRAR A MADRID LA CONFERÈNCIA SUP'EUR A finals del passat mes de setembre es va celebrar a la seu de la Universitat Politècnica de Madrid el congrés anual d'usuaris de superordinadors IBM, Sup'Eur. Cal destacar la presència en el congrés de Jack J. Dongarra, autor de la classificació més famosa, el Top 500, i de Thierry van der Pyl, màxim responsable de HPCN a la Unió Europea. El CESCA també va participar al congrés en una taula rodona que es va celebrar dimarts dia 26 de setembre sobre migracions a sistemes SP.

ÚLTIMA CONVOCATÒRIA DEL CALL FOR PAPERS D'HPCN EUROPE'96

L'1 de novembre es tanca l'última convocatòria del Call for Papers de la conferència HPCN Europe'96 que se celebrarà a Brussel·les entre el 15 i el 19 d'abril de l'any vinent. Els temes de les conferències hauran de versar sobre solucions avançades per a la indústria, la recerca i el món acadèmic, basades en estacions de treball, superordinadors i tecnologies de xarxes. Les propostes s'han d'enviar a Ad Emmen a l'adreça de correu electrònic emmen@cenias.de.

L'EPCC, EL CENTRE AMB ORDINADORS MÉS POTENTS D'EUROPA

Segons un estudi que ha fet la revista Supercomputer European Watch a partir de la classificació Top 500 de J.J. Dongarra, l'EPCC de la Universitat d'Edimburg (Gran Bretanya) és el centre amb ordinadors més potents d'Europa. L'EPCC té un Cray T3D, un TMC CM-200 i un Meiko CS-2. L'estudi presenta en un llistat els 25 centres amb ordinadors més potents a Europa. Alemanya és el país del qual més centres apareixen a la llista, seguit per Gran Bretanya (que té els tres primers centres) i Suïssa.

REGISTRE ON-LINE A SC'95

Entre el 3 i el 8 de desembre se celebra a San Diego (Califòrnia, EUA) la conferència-exhibició Supercomputing'95. Enguany, les subscripcions a aquesta conferència es podran fer on-line a l'adreça de World Wide Web: <http://sc95.sdsc.edu/SC95>.

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

ENTREVISTA

Keiichiro Uchida, cap del grup de High Performance Computing de Fujitsu

“La combinació entre un processador vectorial i un sistema paral·lel permet construir ordinadors més ràpids”

Keiichiro Uchida, cap del grup de High Performance Computing (Computació d'Altes Prestacions) de Fujitsu, va ser a Barcelona el passat mes de juliol amb motiu de la International Conference on Supercomputing (ICS). Uchida va obrir una de les jornades de l'ICS amb una conferència sobre els avantatges de les arquitectures vectorials paral·leles. Keiichiro Uchida es va graduar l'any 68 en enginyeria elèctrica i des d'aleshores treballa a Fujitsu, un dels grans fabricants mundials d'ordinadors.

TERAFLOP Segons diversos tests per a conèixer la velocitat dels ordinadors, com el de Jack Dongarra —un dels més famosos—, Fujitsu fabrica alguns dels ordinadors més ràpids del món. **KEIICHIRO UCHIDA** A Fujitsu hem desenvolupat sistemes que volem vendre arreu del món. A Europa ja n'hem venut més de 40, la majoria dels quals són a Alemanya, tot i que també en tenim a Gran Bretanya, França i un ordinador a Espanya, al Centre de Supercomputació de Galicia (CESGA). El nostre sistema més ràpid, el VPP500, està instal·lat a Tsukuba, una ciutat molt propera a Tòquio (Japó). Tot i que no podem



Keiichiro Uchida creu que Europa no ha dedicat massa esforços al hardware

revelar el nom dels propietaris de les nostres màquines, podem dir que ja hi ha 14 sistemes VPP500 en funcionament. El més ràpid té més de 100 Gigaflips i probablement és el superordinador més potent del món. Quan a la velocitat pic (l'òptima a la qual mai no s'arriba), potser hi ha sistemes més ràpids, com l'IBM SP2 c el Cray T3D, però crec que quant a la velocitat efectiva,

el de Fujitsu és el més ràpid.

TERAFLOP Fujitsu està treballant en el desenvolupament d'arquitectures vectorials, mentre que la majoria de les companyies que actualment estan desenvolupant superordinadors aposten per les arquitectures paral·leles. Quins avantatges els comporta seguir treballant amb arquitectures vectorials?

K. U. Històricament, un processador vectorial es fa fonamental per aconseguir una velocitat realment alta. A més, aquest tipus de processador és el més comú en el món de la supercomputació i té molta acceptació a l'hora d'executar aplicacions i programes. En el cas d'un canvi del sistema és molt fàcil de migrar les aplicacions que s'utilitzen d'un sistema vectorial a un altre de nova generació. Així doncs, a Fujitsu fabriquem els processadors individuals vectorials, però també és cert que fem aproximacions a sistemes paral·lels utilitzant processadors vectorials. La combinació entre un processador vectorial i un sistema paral·lel té bons efectes per a construir computadors més i més ràpids. Fujitsu però, dins la seva àrea de supercomputació, desenvolupa tot tipus de processadors: vectorials, vectorials paral·lels i massivament paral·lels.

TERAFLOP Quines són les perspectives de Fujitsu per als propers anys en el camp de la supercomputació?

K. U. La nostra filosofia és desenvolupar en un futur proper superordinadors amb processadors vectorials o bé amb processadors paral·lels més ràpids. Però cal dir que Fujitsu és una companyia molt gran que no es dedica únicament a la supercomputació, encara que aquesta àrea forma part del nostre programa de recerca i desenvolupament (R+D). També investiguem en moltes àrees que tenen relació amb la supercomputació, com el desenvolupament de processadors paral·lels, d'aplicacions, etc.

TERAFLOP Segons la seva opinió, quin serà el futur de la supercomputació?

K. U. Crec que la tecnologia clau pel futur de la computació és la computació paral·lela.

TERAFLOP Quins seran els ordinadors més usats en un futur proper?

K. U. En el cas de la recerca més teòrica que realitzen les universitats o laboratoris governamentals, es necessita supercomputadores amb un gran poder de càlcul, mentre que els usuaris que depenen de la indústria busquen tenir un cost menor. En molts casos aquests usuaris no tenen pressupost per treballar amb un gran ordinador i els surt més a compte treballar amb un ordinador no tan ràpid.

TERAFLOP A l'Estat espanyol, la majoria dels usuaris de temps de supercomputació provenen de la universitat o de centres de recerca públics, mentre que el sector industrial és molt més minoritari.

K. U. Al Japó, més de la meitat dels supercomputadors els tenen indústries que fan recerca i l'altre meitat les universitats i els centres de recerca públics. Alguns dels sectors més introduïts en aquest àmbit són el camp de la dinàmica de fluids com, per exemple, en la indústria automobilística; el sector d'indústries que es dediquen a la dinàmica molecular; o el camp de l'anàlisi estructural, entre d'altres. Recentment, la supercomputació està adquirint rellevància en qüestions d'anàlisis socials, sobretot pel que fa al camp de l'economia, en prediccions de borsa o aplicacions per al món dels negocis. Als Estats Units, per exemple, sé que també hi ha molts usuaris de la indústria que treballen en la recerca petrolífera, per exemple. A Europa, però, el percentatge és menor, tot i que nosaltres tenim clients a empreses petrolíferes europees, com GECO.

TERAFLOP Quin creu que és el nivell de la recerca en el camp de la supercomputació a Europa respecte de Japó?

K. U. Crec que, en el camp de les aplicacions, Europa té un nivell molt alt, sense que hi hagi diferència amb el Japó o els Estats Units. Quant al hardware, però, Europa no està treballant tant.

M. Àngels Nova

Biosym i Molecular Simulations Inc Es fusionen les dues companyies més importants en fabricació de software químic

El passat 15 d'agost dos eterns competidors del món del software informàtic per a aplicacions químiques van anunciar la seva fusió. Biosym i Molecular Simulations Inc (MSI), ara unides sota el nom Biosym/MSI, continuaran desenvolupant software científic i oferint serveis per millorar els processos de recerca, desenvolupament i producció per a la indústria dedicada a les Ciències de la Vida i a les Ciències dels Materials.

La recent formada companyia operarà de moment amb el nom Biosym/MSI fins que els propietaris de la nova empresa n'acordin un de nou. Coming, l'empresa propietària de Biosym, tindrà el 55% de la nova companyia mentre que els propietaris de MSI en tindran el 45% restant. El president i CEO (Chief Executive Officer) de Biosym/MSI serà

Michael Savage, que fins ara havia estat el CEO de MSI.

Les dues empreses van arribar a la decisió de fusionar-se a causa, segons fonts de l'empresa, del fet que els seus camins eren complementaris. Amb aquesta fusió Biosym/MSI preén oferir millor servei al client i un desenvolupament i comercialització més ràpids dels

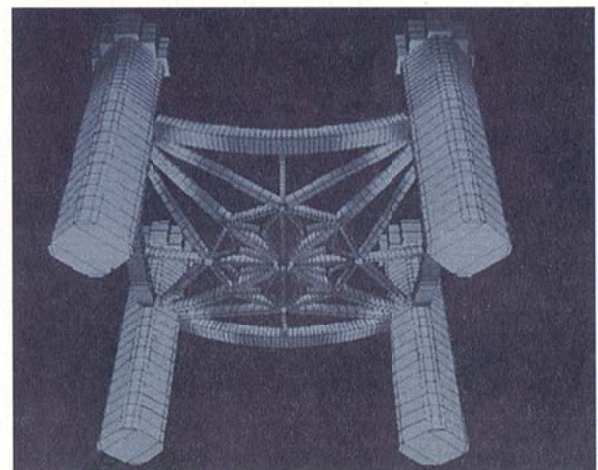
seus productes. La central de la nova companyia serà a l'edifici que fins el passat mes d'agost ocupava la central de Biosym, a San Diego (Califòrnia), mentre que la central a Europa serà a les oficines de Cambridge (Anglaterra) de l'antiga MSI.

Biosym/MSI mantindrà els tractes amb els seus clients

Segons informa la nova companyia, els clients no trobaran canvis pel que fa al tracte que tenien amb cada una d'elles i seguiran interactuant amb els mateixos representants que en el passat. Cal dir, per a la tranquil·litat dels clients d'aquestes empreses, que mantindran els productes que distribuïa cadascuna de les companyies.

Pel que fa als canvis que comportarà la fusió d'ambdues empreses, Biosym/MSI ha anunciat que llançarà nous productes en períodes de temps més curts. A més, és possible que la gamma de productes es diversifiqui a altres àrees de recerca i que s'aprofundeixi en les àrees que ja es cobrien.

FOTO / NOTÍCIA



RESTAURACIÓ VIRTUAL La simulació informàtica per a ajudar en la restauració d'edificis històrics és el tema que es tractarà en el seminari internacional que ha preparat la UPC pels dies 8, 9 i 10 de novembre. A la foto veiem una imatge de l'estudi que es va fer al CESCA sobre l'església arxiprestal de Morella per part d'un equip de la UPC. Si voleu més informació sobre el seminari, que es farà a la seu del CIMNE (UPC), truqueu al telèfon (93) 401 60 37.