

TERAFLOP

NOTICIARI DEL CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA

Núm. 18
10.000 exemplars

CESCA

Publicació mensual
Juny 1996

La computació d'altres prestacions, present a Internet

Internet i, sobretot, el World Wide Web s'han convertit en una eina bàsica en molts camps per a aconseguir informació. La computació d'altres prestacions és una àrea que s'està beneficiant d'aquesta font d'informació. Tant les empreses fabricants de màquines com els congressos apareixen ja al web.

La majoria dels centres de supercomputació i de computació paral·lela d'arreu del món ja tenen la seva pàgina de web. Informació sobre les seves prestacions, serveis i màquines i, fins i tot, manuals per als usuaris són algunes de les possibilitats que ja es poden trobar a Internet. El Centre de Computació i Comunicacions de Catalunya (C³) és el seu web en línia a l'adreça <http://www.cccc.es> des del mes de març d'enguany. Aquest web, però, encara està en procés d'elaboració.

Els altres centres de supercomputació de l'Estat espanyol, el CESGA, de Galícia, i el CICA, d'Andalusia, també tenen la seva plana de web a les adreces <http://www.cesga.es> i <http://www.cica.es>, respectivament.

El National Aerospace Laboratory (<http://www.nal.go.jp>), situat a Tòquio (Japó), és el centre que a nivell mundial té uns ordinadors més potents. Al seu web hi ha informació sobre les activitats que realitza, sempre relacionades amb l'espai. El centre amb el computador més potent d'Europa és l'Edinburgh Parallel Computing Center (EPCC). El centre, creat el 1990, parla al seu web (<http://www.epcc.ed.ac.uk>) dels projectes, l'educació i del seu Cray T3D de 256 nodes. Per consulta: una llista dels superordinadors més potents del món, us podeu dirigir al web <http://www.mordor.com/gunter>. També es poden consultar a través de la xarxa els benchmarks de Jack J. Dongarra, Hans W. Meuer i Erich Strohmaier, el Top 500, a l'adreça <http://paral·lel.rz.unimannheim.de/top500.html>. El Top 500 és una llista dels ordinadors més potents del món que s'elabora a través d'un seguit de benchmarks.

Congressos i informació d'interès, també al web

La informació sobre els esdeveniments de més importància relacionats amb la computació i les

comunicacions d'altres prestacions també es pot trobar a diferents webs. Un dels índexs d'aquests esdeveniments els poden trobar a <http://www.cs.cmu.edu/afs/cs.cmu.edu/project/scandal/public/www/conferences.html>. El congrés Supercomputing té també una pàgina de web i es pot consultar a l'adreça <http://www.supercomp.org>. Enguany aquest congrés,

que habitualment es fa als Estats Units i és el que més participants convoca d'aquelles mon, es farà entre el 17 i el 22 de novembre.

Moltes persones interessades en la supercomputació i la computació paral·lela han ideat pàgines de web pròpies que consisteixen en un índex de recursos relacionats amb aquesta àrea. Un exemple és la pàgina de David A. Ba-

der, on hi ha *links* a les agències federals del EUA, amb una llista dels computadores més potents i un índex de centres de supercomputació i paral·lelisme. Al web <http://www.ipac.ac.uk/SELHPC/Articles/index.html> es pot trobar un arxiu d'articles per a consultar sobre diferents temàtiques relacionades amb aquest món. A més de consultar-los, també s'hi poden enviar articles propis.

Revistes i empreses

Les revistes i *journals* sobre aquesta àrea també solen tenir una pàgina de web. La més recent, que tracta sobre la computació i comunicacions d'altres prestacions a Europa, és *Primeur* (<http://www.hoise.com/primeur>). Aquesta revista, en què participa el CESCA, va néixer d'un projecte

ESPRIT de la Unió Europea i s'hi pot accedir a través del web o del correu electrònic. *HPCwire* és la revista sobre computació d'altres prestacions amb més subscriptors. Aquesta es distribueix mitjançant correu electrònic però té un web informatiu a <http://hpcwire.tgc.com/HPCwire.html>.

Les companyies que es dediquen a la venda de superordinadors també tenen informació als seus webs sobre els seus productes i les rovetats que tenen lloc en aquesta canviat àrea. Per exemple, la fusió de Silicon Graphics i Cray Research es reflecteix als webs respectius, així com el pla de futur que tenen preparat (<http://www.sgi.com> i <http://www.cray.com>). L'accés als webs d'altres companyies es poden fer a través de <http://www.cs.cmu.edu/~scandal/vendors.html>.

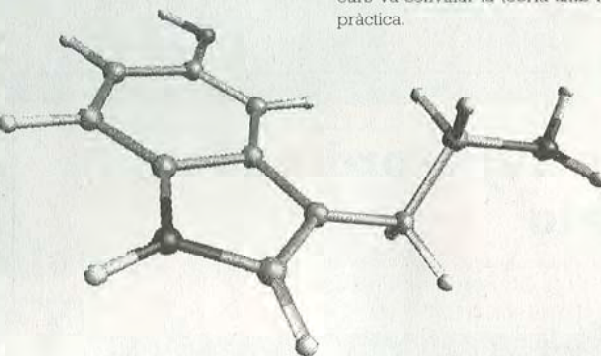
Prop d'una trentena de participants al workshop de Gaussian

Els dies 30 i 31 de maig es va fer al Campus Nord de la Universitat Politècnica de Catalunya (UPC), un workshop del programa Gaussian. Hi van assistir prop d'una trentena de persones.

El workshop de Gaussian va ser organitzat pel Centre de Computació i Comunicacions de Catalunya (C³), la Universitat de Barcelona (UB) i Cray Research.

El workshop, en el qual van participar 26 persones, va durar dos dies en horari de matí i tarda. Hi han assistit persones de les universitats catalanes i d'algunes de la resta de l'Estat, així com persones provinents d'Alemanya i d'Itàlia.

L'objectiu del workshop ha estat donat a conèixer aquest programa als químics interessats. Els professors d'aquests curs van ser Juan Novoa, del departament de Química Física de la UB; José Luis Andrés, de l'Institut de Química Computacional de la Universitat de Girona (vegeu entrevista plana 4);



El Gaussian és el software més usat pels químics

Michael Robb, de King's College de Londres; Carlos Sosa, de Cray Research; i Alicia Martínez, del CESCA.

Alguns dels temes que es van tractar durant el workshop van ser l'optimització de la geometria, els mètodes de correlació electrònica, així com mètodes avançats que es poden utilitzar amb la versió última del programa, el Gaussian 94. El curs va convalidar la teoria amb la pràctica.

Trasllat cap al Nexus

El proper 17 de juny, la seu social del CESCA es traslladarà a l'edifici Nexus, al Campus Nord de la Universitat Politècnica de Catalunya (UPC). La nova adreça del centre serà:

Gran Capità, 2-4
08034 Barcelona
Telèfon (93) 205 64 64
Fax (93) 205 69 79

Aquesta seu també serà compartida pel C³ i el CEPBA.

Fins al setembre
Aquest número del mes de juny és l'últim Teraflopp dels 10 que s'han editat durant el curs 1995-1996. Aquest noticiari, després d'haver-vos informat puntualment durant tots aquests mesos, s'acomiada fins al proper mes de setembre.

Entrevista

José Luis Andrés, de l'Institut de Química Computacional de la Universitat de Girona, parla del programa Gaussian

Plana 4

Opinió

Marta Filizola ha estat convidada per usar les màquines del CESCA a partir del programa Capital Humà i Mobilitat

Plana 2

HPCnet

HPCnet és una xarxa virtual a nivell europeu que agnupa les organitzacions amb interès en la HPC

Plana 3

VAMOS

Fer un simulador de VHDL és l'objectiu d'aquest projecte PACOS del programa ESPRIT

Plana 3

QDeSC

La nova màquina QDeSC d'Alemanya Spazio és un superordinador amb la mida d'un ordinador de sobretaula

Plana 2

AGENDA

JUNY

• **17 Conferència: "Colloidal particles absorbed at solid surfaces: statistical properties"**, Pascal Wojtaszek (Institut Charles Sadron, Estrasburg, França). Lloc: Aula 505 del departament de Física Fonamental de la Facultat de Física de la Universitat de Barcelona, Av. Diagonal 647. Informació al CESA al telèfon (93) 491 40 14.

• **19-21 Curs: "IMSL: Nueva Tecnología para Cálculo Científico"**. Lloc: Aula S-103 del mòdul D6 del Campus Nord de la UPC. Informació: Cristina Coll (cisco@ac.upc.es), telèfon (93) 401 6986.

Congressos internacionals

• **Workshop: "International Workshop on Molecular Modeling of Solvation in Biochemical Systems"**, 16-18 de juny, Barcelona. Es pot demanar informació enviant un mail a modesto@luz.bcq.ub.es, javier@far1.far.ub.es o upceq101@bcscsa.es.

• **Workshop: "NATO Advanced Research Workshop High Performance Computing: Technology and Applications"**, 24-26 de juny, Cetraro (Itàlia). Informació a l'adreça d'e-mail natcp@unicat.it.

• **Congrés: "MPI Developers Conference & Users' Group Meeting"**, 1-2 de juliol, Notre Dame, Indiana, EUA. Informació al telèfon +1 219 63118716 o a l'adreça de correu electrònic mpi-dec96@cse.nd.edu.

• **Curs: "Internet Avanzada: Instalación, Administración y Programación de sitios World Wide Web"**, 15-20 de juliol, Escuela Técnica Superior de Ingeniería Informática de Granada. Informació al web <http://kal-el.ugr.es/cursos/curso-internet.html> o al telèfon (958) 243 162.

• **Congrés: "Sup'Eur 96"**, 8-11 de setembre, Cracòvia (Polònia). Informació al web <http://www.cyf-kr.edu.pl/supeur96> o a l'adreça d'e-mail supeur96@cyf-kr.edu.pl.

MARTA FILIZOLA*
Instituto di Biochimica delle Macromolecole (II Università degli Studi di Napoli)

El disseny de fàrmacs en fisiopatologia digestiva i nutricional

El complex mecanisme de la nutrició implica tant les respostes sensorials i emocionals com les que estan associades amb la sensació de gana i amb les preferències alimentàries, així com els processos d'assimilació de substàncies nutritives, la secreció d'enzims, les correlacions metabòliques, les despeses energètiques o el control del pes. Tots aquests processos estan regulats per una xarxa complexa de reconeixements moleculars que involucren a nombrosos pèptids, d'origen neuronal o no, amb funcions de senyals químics, hormones o immunomoduladors.

Aquestes substàncies passen els seus efectes biològics a través de la seva unió amb receptors específics. En particular, una interacció lligand-receptor adequada és condició necessària per al desenvolupament dels processos moleculars relacionats amb la transmissió d'estímul a les cèl·lules.

La comprensió dels mecanismes que regulen aquestes interaccions és de gran importància per a la previsió molecular de noves substàncies que presenten més potència, selectivitat i eficàcia des del punt de vista farmacològic. Per això, el coneixement de les estructures que els sistemes adopten en el moment de la interacció resulta fonamental.

Si bé en general la descripció completa de les relacions entre activitat i estructura és força complexa en el camp digestiu, ho és encara més en el nutricional. Això es deu essencialment a la manca d'informació estructural adequada sobre la majoria de sistemes químics involucrats. A més, aquests sistemes són extremadament complicats (s'ha de tenir en compte que, per exemple, els pèptids presents a nivell gastrointestinal posseeixen, de mitjana, seqüències de 30-35 aminoàcids) amb un nombre elevat

de possibilitats conformacionals i dificultats notables en l'aplicació de les tècniques experimentals que normalment proporcionen les informacions de tipus estructural.

Des d'aquesta òptica es fa indispensable l'ús de la modelització molecular com a mitjà alternatiu per a l'estudi de la relació estructura-funció. Aquesta tècnica permet, mitjançant la simulació per ordinador, la proposta de models moleculars (tant per al lligand com per al receptor), les propietats moleculars del qual poden ser calculades.

Les estratègies usades en modelització molecular poden dividir-se en dues categories, segons la informació estructural de què disposi: directes i indirectes. En particular, es recorre a l'ús de mètodes indirectes quan no hi ha informació estructural del sistema estudiat i a mètodes directes si es coneix l'estructura tridimensional.

A causa de les raons assenyalades anteriorment, es dedueix fàcilment la necessitat d'usar els mètodes indirectes en el cas d'estudiar els problemes relacionats amb la majoria dels sistemes involucrats en el camp digestiu i nutricional.

Aquesta estratègia implica la generació d'una hipòtesi sobre les característiques moleculars que han de complir els lligands i els receptors. El primer pas preveu, llavors, la recerca de les propietats moleculars dels compostos i de les seves preferències conformacionals per inferència a partir de la comparació amb molècules que presentin un alt grau d'homologia, l'estructura de la qual sigui coneguda. En el cas que no es disposi d'un bon model per al receptor obtingut per homologia, es pot obte-

nir igualment una imatge adequada per construcció d'un model matemàtic basat en les informacions experimentals que es posseeixen.

En tots els casos, la formulació d'una hipòtesi racional per a la construcció d'un model és més o menys difícil segons la flexibilitat de les molècules en qüestió.

El cas més senzill és quan els lligands són molècules rígides, pel fet que aquestes seran segurament les seves formes d'interacció amb el receptor. En canvi, per a lligands flexibles com, per exemple, els pèptids, atès el gran nombre de possibilitats conformacionals, existeix la dificultat objectiva d'arribar a conèixer la conformació bioactiva i les propietats moleculars implicades en la interacció amb el receptor.

Recentment, l'experimentació de metodologies, basades en càlcul de dinàmica molecular aplicats per pèptids de 5-10 aminoàcids, ha permès la identificació de conformacions diferents que existeixen en el interval energètic amb probabilitat màxima per la conformació bioactiva (5 kcal/mol). Posteriorment, les dades bioquímiques i farmacològiques sobre agonistes i antagonistes del pèptid objecte d'estudi i el docking en el receptor de les diverses conformacions, seleccionades per al lligand, proporcionen les informacions necessàries per a la identificació de la conformació única del lligand responsable de l'activitat biològica.

La presència en el camp digestiu i nutricional de molècules peptídiques, amb seqüències de 30-35 aminoàcids, afegeix a l'estratègia el problema de desenvolupar una metodologia adequada per a l'exploració de l'espai conformacional de lligands tan grans. Un cop es disposi d'una hipòtesi en 3D sobre les condicions necessàries per al reconeixement pel receptor i la seva activació eventual, el model proposat ha de ser validat per resultats d'experiments que la mateixa modelització pot suggerir, com la síntesi de molècules amb afinat més gran pel receptor, els experiments de mutagenesi dirigida, etc.

Tot i això, per a poder representar de forma adequada el comportament i les propietats de les molècules estudiades, quan fos necessari, s'ha de modificar i corregir el model de les molècules

interaccionants, fins a l'obtenció d'un nombre d'informacions estructurals adequades, per a la proposició racional de molècules biològicament actives amb propietats òptimes per a l'experimentació clínica.

Pel que s'ha escrit, resulta evident que els problemes proposats en el camp digestiu i nutricional sol·licitin la realització d'experiments de naturalesa diferent i la intervenció conseqüent d'experts en diverses especialitats. El gran interès que existeix per al disseny de fàrmacs, que puguin ser



usats per a resoldre moltes patologies involucrades en el camp digestiu i nutricional, fa que s'hagi aconseguit fàcilment gràcies a l'anys per part de moltes persones pertanyents al món científic. Per altra banda, és aquesta mateixa pluridisciplinarietat d'intervencions la que assegura, en molts casos, l'obtenció ràpida d'objectius proposats en el camp científic.

*Marta Filizola ha estat convidada per un investigador de la UPC a través del programa Capital

NOVETATS HPCN

QDeSC el nou superordinador d'Alenia Spazio

La companyia italiana Alenia Spazio va llançar el passat mes d'abril, durant el congrés HPCN Europe 1996, el seu sistema massivament paral·lel QDeSC. Aquest superordinador de mida molt reduïda és comercialitzat en dos tipus de configuracions.



Spazio a Europa, "el sistema és molt complet, incou un sistema SPARC que fa de front-end i tots els accessòis".

Aquesta nova màquina és part de la línia Quadrics d'Alenia, que tenen una arquitectura

SIMD i que són escalables de 8 a 2.000 nodes (entre 0,4 i 100 Gflop/s). Ja han instal·lat més de 50 d'aquests sistemes a Europa des que es van començar a comercialitzar el 1993, sobretot a Alemanya i a Itàlia.

EDITA



CONSELL EDITORIAL

- Jordi Domingo
- Lluís Carrido
- Albert Marcet
- Antoni Oliva
- Santiago Olivella
- Xavier Oliver
- Eugenio Oriate

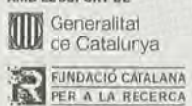
COORDINACIÓ

Miquel Huguet

ASSESSOR

- Juan Carlos González
- CAP DE REDACCIÓ
- M Àngels Novoa
- PUBLICITAT
- Jordi Agudà
- Tel.: (93) 205 64 64
- DISSENY I PRODUCCIÓ
- Subirà & Associats
- MAQUETACIÓ
- Rosa Alvares

AMB EL SUPORT DE



Una xarxa virtual agrupa les organitzacions europees interessades en la computació d'altres prestacions

HPCnet pretén unir en un sol fòrum els usuaris finals de la indústria i el comerç, les organitzacions governamentals, industrials o acadèmiques de computació d'altres prestacions i els proveïdors de tecnologia d'altres prestacions, tant de hardware com de software. Els seus objectius són ampliar el coneixement, la comprensió i l'ús de les tecnologies avançades de computació a la Unió Europea, sobretot pel que fa a la indústria, i coordinar la recerca i el desenvolupament establint relacions duradores entre els sectors rellevants d'aquesta indústria.

Per a aconseguir els seus objectius, HPCnet fa un seguit d'activitats que es poden resumir en l'organització de *workshops* especialitzats per a persones amb interessos comuns i en la creació d'una pàgina de web en què estigui disponible informació sobre la computació d'altres prestacions. Els *workshops* versen sobre les aplicacions d'aquesta tecnologia o bé sobre la tecnologia en si mateixa.

Un supermercat virtual per als interessats en la HPC

Una àrea que està promovent el projecte és el que s'anomena Virtual HPC Supermarket. Aquest supermercat virtual permet als seus clients trobar solucions a nivell europeu, als problemes que puguin tenir en l'àmbit de la computació d'altres prestacions, a partir d'informació basada en els programes i experiències de cada país en particular.

Per que totes les organitzacions amb un interès comú, la computació d'altres prestacions, estigui unida per una xarxa d'excel·lència és l'objectiu del projecte HPCnet. Aquest projecte, que forma part del programa ESPRIT, serà recolzat financerament per la Unió Europea fins a l'estiu del 97.

D'aquesta manera s'evita la disseminació de la informació arreu d'Europa i, alhora, es potencien les iniciatives d'aquest sector. Tota aquesta informació i tot el que fa referència a formació a nivell de

computació d'altres prestacions es troba en un servidor de web, al qual es pot accedir des de la pàgina general del projecte (<http://hpcnet.soton.ac.uk>).

Les impulsores d'aquest pro-

jecte, que va començar el 1994 i acabarà l'estiu del 1997, són 15 organitzacions relacionades amb la computació d'altres prestacions i un representant de la Comissió Europea. Entre aquestes, s'hi troben la Universitat Politècnica de Catalunya, representada pel CEPBA, i la divisió espai de CASA (Construccions Aeronàutiques, SA). L'empresa més important de l'Estat espanyol pel que fa a l'Aeronàutica.

The Virtual Supermarket

In Europe	Outside Europe	Application	Software	Hardware Events	Benchmark Education
European countries	USA	Case	Vendors	Vendors	Benchmark
			Standards	Networks	
			Tools	Research	
		Multimedia	Public		
National programs	Japan		Cluster Software	Other link bases	Virtual classroom
CEC programs	R.O.W	Research	Software Research	Publications	

Un projecte PACOS ha paral·lelitzat un simulador de models en llenguatge VHDL

El Very High Description Language (VHDL) és un llenguatge d'alt nivell que permet la descripció i simulació específica dels circuits o sistemes electrònics. Construir un simulador paral·lel dels models descrits en VHDL és l'objectiu del projecte VAMOS, dins la iniciativa PACOS del programa ESPRIT.

El VHDL no és un llenguatge genèric, sinó que està orientat a definir estructures lògiques com ara processos o connexions", explica Guillermo Ricalde, coordinador i desenvolupador del projecte VAMOS a l'empresa TGI.

Simular el que fa aquest llenguatge i fer-ho en paral·lel és el principal objectiu d'un dels projectes de la iniciativa PACOS: el VAMOS.

El projecte VAMOS vol treure avantatges de les plataformes multiprocessador per poder utilitzar

qualsevol nombre de processadors d'acord amb les necessitats i per a expandir l'ús del llenguatge VHDL.

Un projecte realitzat entre TGI i la UPM

Aquest projecte l'estan duent a terme l'empresa TGI (Tecnologia Grupo INI) i un grup de la Universitat Politécnica de Madrid (UPM). TGI ha desenvolupat el simulador i hi ha implementat un generador de

codi C, que converteix el model que entra al simulador fet en llenguatge VHDL en un model en llenguatge C. Per la seva part, la UPM s'ha encarregat de paral·lelitzar el simulador i d'implementar un depurador (*debugger*) per al simulador.

El depurador permet seguir l'execució del programa a nivell de sentències i variables de VHDL controlant els possibles problemes.

Ara per ara ja s'ha obtingut aquest simulador per a la versió 87 del llenguatge VHDL i s'està duent a terme el que podrà simular la versió 92, l'última fins ara.

Aquest projecte s'està realitzant amb una màquina Sun SPARC amb Solaris entre 4 i 10 processadors. Ara bé, el simulador es vol desenvolupar per a treballar finalment sobre una màquina que tingui un nombre qualsevol de processadors.

BREUS

CRAY VEN A SUN LA LINIA DE CS-6400

Cray Research ha venut la seva línia de servidors per als negocis CS-6400 a Sun Microsystems, mentre que Cray continuarà amb les seves línies de productes T90, J90 i T3E. També han afirmat que properament es desenvoluparan successors per a aquestes màquines. SGI i Cray tenen també previst que a finals d'aquest segle, desenvoluparan conjuntament un ordinador basat en la tecnologia de processadors MIPS (de Silicon Graphics).

SUPEUR 96 A KRACÓVIA

Del 8 al 11 de setembre es farà a la localitat de Kracòvia (Polònia) el congrés anual de SupEur. Aquesta és una associació europea d'usuaris de computació d'altres prestacions sobre ordinadors IBM. L'objectiu fonamental d'aquesta associació és facilitar l'ús de màquines IBM i intercanvia idees i experiències entre els seus membres. Les dates destacables per a enguany són el 15 de juny (acceptació de les contribucions) i 29 de juny (data límit d'inscripció a preu reduït). Per a més informació poden contactar amb el representant espanyol a SupEur, Félix García Merayo, a l'adreça d'e-mail fgmerayo@i.uprr.es.

1.000 SP2 IBM ja ha instal·lat el seu sistema SP2 número 1.000 a un

laboratori farmacèutic francès: el Pasteur Merieux Connaught Company. L'ús fonamental d'aquest sistema és córrer aplicacions de suport a la decisió amb l'ajuda d'Oracle i altres softwares, tal com Holos i Business Object.

DURANT EL PASSAT MES DE MAIG ES VA FER EL CONGRÉS JENC 7.

Entre els dies 13 i el 16 del passat mes de maig es va fer a Budapest (Hongria) el congrés de comunicacions Joint European Networking Conference 7 (JENC 7). La conferència es va dividir en dos grups de sessions, una sobre els aspectes tècnics de les comunicacions i les infraestructures que es necessiten i l'altra sobre les aplicacions de les xarxes. Durant el congrés es van realitzar un total de 12 sessions i 7 tipus de demostracions en una àrea especialment equipada.

Podem veure Teraflop en format electrònic a partir del World Wide Web a l'adreça <http://www.cesca.es/teraflop>

Si voleu fer-nos algun comentari, utilitzeu l'adreça de correu electrònic

teraflop@cesca.es

ENTREVISTA

José Luis Andrés, investigador de l'Institut de Química Computacional de la Universitat de Girona

“El Gaussian té un ventall de possibilitats més ampli que altres programes”

José Luis Andrés és l'únic espanyol que apareix com a autor del programa de química Gaussian. Ell va ser un dels professors del *workshop* de Gaussian que es va fer el mes de maig a Barcelona organitzat pel C⁴, la Universitat de Barcelona i Cray Research. Andrés ens parla d'aquest programa i de les seves possibilitats.

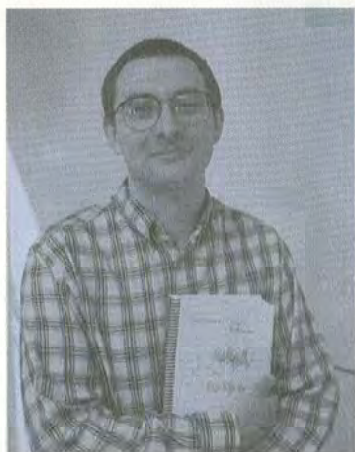
TERAFLOP El Gaussian és el programa més usat a la majoria dels grans ordinadors dels centres d'arreu del món. El CESCÀ n'és un exemple més.

JOSÉ LUIS ANDRÉS Una de les raons d'aquest alt índex d'ús del programa és que amb el Gaussian és molt més fàcil introduir les dades i generar un fitxer que no amb altres programes de característiques similars. També cal dir que va ser el primer programa del seu estil que es va comercialitzar.

TERAFLOP Quines aplicacions té aquest software?

J.L.A. Amb el Gaussian es pot modelitzar qualsevol interacció química o fer l'estudi estructural d'un compost determinat a nivell de geometria, d'orbital molecular o d'espectre infraroig. Ara, al Gaussian 94, fins i tot es poden reproduir espectres RMN a nivell teòric. L'espectre RMN és un diagrama que permet deduir l'estructura d'un compost. El que té també el Gaussian és un ventall de possibilitats més ampli que altres programes. Això fa que hi hagi més gent que ho pugui fer servir.

TERAFLOP Això vol dir que el



Andrés és un dels autors del Gaussian

Gaussian és un programa menys especialitzat, més general?

J.L.A. No, sinó que, mantenint l'especialització, té més possibilitats per a fer càlculs diferents. Per exemple, qualsevol programa de química quàntica permet calcular l'energia d'un sistema i també pot trobar la geometria i l'estructura que correspon a la mínima energia, així com trobar l'espectre infraroig. Però no qualsevol programa permet trobar l'espectre RMN i comparar aquest espectre teòric amb els que s'obtenen al laboratori. I no només a nivell d'estructures sinó també de reactivitat. El Gaussian també té avantatges de tipus computacional. El fet que fos el primer a comercialitzar-se també li ha donat avantatges.

TERAFLOP Definiria el Gaussian

com un programa de química quàntica?

J.L.A. Aquesta és una altra de les diferències amb altres programes. Els altres serveixen bàsicament per als químics quàntics però el Gaussian el pot fer servir qualsevol altre químic.

TERAFLOP Quina ha estat la trajectòria d'aquest software des de la seva comercialització als anys 70?

J.L.A. Al principi, als anys 70, es feien bàsicament càlculs d'energia de molècules molt petites, amb tres o quatre àtoms de carboni, per exemple. A finals dels anys 70 ja es podia començar a buscar les geometries que corresponien a la mínima energia i poc després es van poder obtenir els espectres infraroigs tècnics. A finals dels anys 80 es van afegir avantatges computacionals i una millora dels algorismes directes que permetien estalviar molt de disc i fer servir més memòria. També van introduir-se noves possibilitats químiques com ara trobar camins de reacció per aplicar aquest programa a càlculs de dinàmica i a l'obtenció teòrica de constants de velocitat.

TERAFLOP Vostè és l'única persona de l'Estat espanyol que forma part del grup d'autors del Gaussian, en què ha consistit la seva contribució?

J.L.A. Al començament dels anys

80 es podia calcular l'espectre teòric infraroig (calcular derivada segona de l'energia) a un nivell de càlcul anomenat SCF o Hartree Fock. Això suposa unes aproximacions és la manca de correlació electrònica, que vol dir que no mesura bé la repulsió. Per a corregir aquesta correlació hi ha diverses tècniques, la més fàcil és la teoria de la perturbació de segon ordre. La meua contribució va ser en el càlcul de les segones derivades de l'energia quan s'estava introduint l'energia de correlació en aquesta teoria perturbacional. Això es va incloure al Gaussian 92.

TERAFLOP En aquell moment la seva recerca se centrava només en el Gaussian?

J.L.A. Llavors jo estava a Detroit (Michigan, EUA) amb el professor Schlegel, un dels autors històrics del Gaussian. Allà treballava en les segones derivades de l'energia i també en la generalització de mecanismes de reacció en el cas de les oxidacions d'hidrocarburs saturats. El mecanisme de reacció és com transcorre aquesta. Generalment, es coneixien la majoria de mecanismes de reacció. Però n'hi ha alguns que no estan gaire ben establerts, com és el cas de l'oxidació d'hidrocarburs saturats. Vam treballar en la proposta d'un model per intentar generalitzar el mecanisme d'aquestes oxidacions o activacions dels enllaços carboni-hidrogen.

TERAFLOP Ara continua amb línies de recerca similars?

J.L.A. Aquesta part de codificació ja es va acabar. Ara continuo amb altres tipus de treball de programació que faig amb Gaussian. Intento programar unes quantes derivades de l'energia juntament amb Josep Maria Fom aquell treball amb la intenció de calcular de forma analítica i exacta les propietats òptiques no lineals de sistemes moleculars grans a partir dels quals s'obtenen els materials que formen els nous materials, com per exemple fibres òptiques, que permeten transmetre la informació de forma més ràpida i tenen una capacitat més gran d'emmagatzemament.

TERAFLOP Al seu treball habitual, usa la supercomputació i la computació paral·lela?

J.L.A. Si m'he plantejat la possibilitat d'obtenir aquestes quantes derivades de l'energia és perquè disposava d'aquests recursos, sinó seria inviable perquè l'esforç computacional és molt gran. Cal molt temps de càlcul i molta memòria. Treballo amb l'ISP2 a través de les nostres estacions de treball.

TERAFLOP Que busquen i que els han aportat als alumnes de *workshop* de Gaussian que es va fer el mes passat a Barcelona?

J.L.A. La majoria d'assistents va conèixer per primer cop el Gaussian. El curs els ha permès conèixer la forma d'usar el programa el més ràpid possible per a fer servir la informació. Per exemple, retallar un sistema i centrar-se en una àrea més interessant.

TERAFLOP Creu que hi ha gent que podria utilitzar el Gaussian però que encara no el coneix suficientment?

J.L.A. A l'àmbit químic hi ha molts més possibles usuaris dels que realment existeixen, sobretot a nivell de química orgànica i inorgànica. La seva tradició és més experimental i el seu apropament a tècniques computacionals és menor.

TERAFLOP Què hi guanyarien respecte de les tècniques experimentals?

J.L.A. La substitució total de l'experimentació és impossible, perquè sempre arriba un moment en què cal tenir la substància al laboratori. Però un programa com el Gaussian pot ajudar quan es busca un tipus de molècula amb unes propietats o característiques determinades: s'estalvia la síntesi d'algunes molècules. Ja hi ha grans laboratoris farmacèutics que ho han començat a provar. Aquí, però, la inèrcia de fer servir només la síntesi encara existeix. Quan jo era a Detroit, treballàvem per a Ford per a problemes concrets que tenien amb el fet que les superfícies d'òxid de zinc s'oxidaven amb relativa facilitat.

M. Àngels Novoa

Raytheon E-Systems està treballant en un sistema de més de 15 Tflap/s

La definició d'un centre de supercomputació amb capacitat de 15 Tflap/s és l'objectiu de Raytheon E-Systems. Aquesta companyia nord-americana ha triat recentment les empreses de hardware que participaran en aquest projecte.

Raytheon E-Systems té més de 25 anys d'experiència en el disseny, desenvolupament, instal·lació i manteniment de sistemes especials de hardware i software i ha estat especialment líder en computació d'altres prestacions. Ara, el seu objectiu és crear un centre de supercomputació de pròxima ge-

neració que es convertirà en el més potent d'arreu del món (15 Tflap/s).

Recentment ha seleccionat d'entre diferents companyies a les empreses de hardware que fabricaran els components d'aquest nou sistema. Després de diverses proves, les empreses seleccionades

han estat Silicon Graphics Inc., Cray Research Inc. i Digital Equipment Corporation. Raytheon E-Systems desenvoluparà directament la infraestructura de software que permetrà a diferents tipus de màquines actuar com a un sistema informàtic virtual únic.

A part dels superordinadors, aquest sistema usarà en la seva arquitectura una xarxa de banda ampla basada en un estàndard que actualment està emergint: l'ANSI HIPPI-6400.

Quan estigui complet (es calcula que al 2002), el sistema tindrà una velocitat punta de processament superior als 15 Tflap/s, una memòria interna propera al Terabyte i una memòria compartida propera als 25 Terabytes. L'any 1999 hi haurà una primera fase del sistema operacional de 5 Tflap/s.

FOTO / NOTÍCIA



LA SUPERCOMPUTACIO AJUDA AL CINEMA. Les màquines del San Diego Supercomputing Center (Califòrnia, EUA) han ajudat a la creació d'una pel·lícula sobre dos clubs de cartes que volen triomfar, "Card Tricks". Els ordinadors que serveixen per al càlcul científic també poden tenir aplicacions de visualització orientades a l'oci.

Exemplar gratuït