

TERAFLOP

NOTICIARI DEL CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA

Núm. 20
9.000 exemplars

CESCA

Publicació mensual
Desembre 1996

El C⁴ adquireix un Origin 2000 de 64 processadors

El Centre de Computació i Comunicacions de Catalunya (C⁴) ha respost a la demanda creixent de recursos de computació paral·lela, que realitza la comunitat científica, dotant un dels centres que coordina, el CEPBA, d'un nou supercomputador de la família Origin de Silicon Graphics, que a partir d'una arquitectura multiprocessadora innovadora escala fins a 128 processadors tot i mantenint un ample de banda gairebé constant.

Des de mitjan de desembre el Centre Europeu de Paral·lelisme de Barcelona disposa d'un computador d'altres prestacions que li permetrà donar un millor servei als usuaris que utilitzen els recursos del centre. L'Origin 2000 de Silicon Graphics és un supercomputador amb una arquitectura innovadora (SMP) que presenta avantatges clars respecte dels sistemes de multiprocés més tradicionals com el sistema de multiprocés paral·lel simètric (SMP). La millora dels supercomputadors de SGI amb una arquitectura SMP és limitada a causa de l'ample de banda del bus que

incorporen. La nova línia de productes Origin d'SGI elimina aquests obstacles fent possible que s'escalin des d'1 fins a 128 processadors (Cray Origin 2000) afegint-hi simplement components addicionals. De fet, tal com precisa Vicky Mokkarala, Product Line Manager de la divisió de Sistemes Avançats d'SGI, "el sistema Origin funciona com un verdader sistema escalable SMP més que no pas com una màquina de memòria distribuïda amb un mecanisme de comunicació de memòria compartida".

L'Origin 2000 del qual disposa ara el CEPBA suporta fins a 64

processadors MIPS R10000 a 195 MHz, amb 4 MB de cache cadascun, la qual cosa el fa més ràpid que el Power Challenge. Aquest nou sistema proporciona una potència punta de 25 Gflop/s amb 8 GB de RAM i 300 GB de disc.

L'adquisició d'aquest nou supercomputador, que ja és present en altres centres de supercomputació europeus com l'Automatic and Informatic Nation Research Institute (INRIA) francès ha estat possible gràcies a l'ajuda de la Comissió Interministerial de Ciència i Tecnologia (CICYT) a través del programa Tecnologia de la Informació y las Comunicaciones (TIC). Diverses universitats europees com la University of Bergen de Noruega, o la Technical University of Dresden i la University of Dusseldorf, totes dues alemanyes, també han adquirit el sistema Origin pels avantatges que ofereix.



Nova família de computadors Origin 2000 de Silicon Graphics.

L'INET-CAT'96 reflecteix la situació d'Internet a Catalunya



INET-CAT'96

El primer Congrés d'Internet a Catalunya (INET-CAT'96), que va organitzar el capítol català de la Internet Society (ISOC-CAT), amb la col·laboració de la Universitat Politècnica de Catalunya, i va ser patrocinat pel C⁴ entre altres entitats, va palesar que el desenvolupament d'Internet a Catalunya és essencialment acadèmic i que la incidència del que ja s'anomena quart mitjà comença a créixer en el món empresarial, tot i que resta minsa a nivell polític i de públic en general.

El Fòrum Nord de la Tecnologia va reunir durant la darrera setmana del mes de novembre, una colla d'investigadors i professionals d'Internet més que no pas usuaris interessats en el desenvolupament de la xarxa de xarxes. I és que és cert que no tothom té accés a Internet. No obstant això, el Congrés va constituir la plataforma

ideal per a la difusió d'aquest mitjà de comunicació en la societat.

Tot i la manca de públic en general que es va patir, segons el president del Capítol Català d'Internet Society, Artur Serra, "aquest primer congrés pot servir per crear la xarxa dels grups de recerca que es dediquen a fer aplicacions avançades d'Internet en diferents

campes a Catalunya". En aquest sentit, cal destacar el treball dels diversos grups de recerca de la UPC i el Grup de Periodistes Digitals (CPD), que aposten pel futur

del periodisme electrònic. De fet, el capítol català de la Internet Society va preparar una sessió conjunta amb els periodistes que s'aplegaven al III Congrés de Periodistes Catalans que es feia aquell mateix cap de setmana i, finalment, es va acordar establir mecanismes de col·laboració estrets i permanents entre les dues entitats. Gerard Martínez, membre del comitè organitzador de l'INET-CAT, considera que aquesta sessió conjunta "va ser una de les millors sessions del Congrés" ja que la qualitat de les ponències va fer que s'organitzés una taula rodona "àgil i magistral", dirigida per Luis

Àngel Fernández Hermana, responsable de la pàgina telemàtica d'El Periódico i membre actiu de l'ISOC-CAT.

Els diversos tutorials, les ponències, l'exposició i la fira oberta dels quals constava l'INET-CAT'96 van dur unes 500 persones al Fòrum Nord de la Tecnologia durant la darrera setmana del mes de novembre. Una xifra que es pot superar l'any vinent -segons el creixement de la xarxa al nostre país- ja que tant la Generalitat com l'Ajuntament de Barcelona s'han compromès a millorar el seu suport per a la propera edició del Congrés d'Internet a Catalunya.

■ Entrevista

Carlos Pérez del Valle, titulat en Químiques, demostra que la descomposició de l'HO₂ en fase aquosa és possible

Pàgina 4

■ Opinió

Manuel Rincón, coordinador de Relacions Institucionals de CSIC-Red-IRIS, dona la seva visió sobre el futur de les comunicacions.

Pàgina 2

■ Setmana de la Ciència

La Setmana de la Ciència atreu unes 230.000 persones.

Pàgina 3

■ TOP 500

Aquest any, per primer cop, 5 centres espanyols al Linpack benchmark.

Pàgina 3

■ Novetats HPCN

L'ASCI Red Project d'Intel espera superar el Teraflop a final d'any amb un supercomputador de 86 armaris.

Pàgina 2

AGENDA

GENER 97

• 7-10: "Engineering Complex Systems", que té lloc a Maui, als Estats Units. Més informació a <http://www.CE.UniPR.IT/hicss/eccs>.

• 22-24: "5th Euronero Workshop on Parallel and Distributed Processing", que es fa a Londres, Gran Bretanya. Més informació a <http://www.par.univie.ac.at/PDP97>.

FEBRER 97

• 4-6: "MUNDO INTERNET '97". "II Congreso Nacional de Usuarios de Internet e Infovia", organitzat per l'Associació de Usuaris de Internet amb l'objectiu d'intercanviar punts de vista, anàlisis i experiències sobre l'evolució del món d'Internet-Infovia i sobre les oportunitats i els reptes competitius que la xarxa de xarxes planteja a la nostra societat. Palació de Congressos y Exposiciones de Madrid.

• 10-12: "Distributed Shared Memory: Concepts and Systems". Curs organitzat pel CEPBA i el Departament d'Arquitectura de Computadors de la UPC en què el professor Veljko Milutinovic, de la Universitat de Belgrad, introduirà els conceptes i algorismes de sistemes multiprocessadors amb memòria físicament distribuïda, però compartida a nivell de programació.

Per a més informació, adreceu-vos a Cristina Coll: Tel. (93) 401 69 86. E-mail: crisco@ac.upc.es

• 17-19: "Current and future High-Performance Processors". Curs organitzat pel CEPBA i el Departament d'Arquitectura de Computadors de la UPC en què el professor James E. Smith, de la Universitat de Wisconsin-Madison (EUA), parlarà de les arquitectures de computadors escalars i vectorials que s'estan utilitzant actualment i s'usaran també en el futur. Per a més informació, adreceu-vos a Cristina Coll: Tel. (93) 401 69 86. E-mail: crisco@ac.upc.es

El futur immediat de les comunicacions científiques espanyoles

MANUEL RINCÓN ARCHE

Dr. Enginyer de Telecomunicació
Coordinador de Relacions
Institucionals del CSIC - RedIRIS

El món de les comunicacions, especialment a Europa, viu uns moments que es podrien qualificar d'històrics. S'acaba el monopoli del qual han gaudit les empreses subministradores de serveis durant molts anys. Això vol dir que un bé com les comunicacions de tot tipus, que es demana molt socialment, serà més barat i tindrà més qualitat a partir de l'any 1998. Com a pròleg a aquest esdeveniment, hem de remarcar que les comunicacions mòbils no han deixat d'abaratir-se i millorar en prestacions des que existeixen dos operadors nacionals. En el cas particular d'Espanya, aviat comptarem amb un segon operador de telefonia bàsica, la qual cosa permetrà a l'usuari escollir la companyia que li subministrarà les comunicacions que això suposa.

Si el mercat de transmissió de dades ja té un creixement important gràcies a l'activitat econòmica que desenvolupen les empreses, el nou fenomen comunicatiu que ha aparegut, Internet, estimula ara en gran mesura la demanda de serveis avançats de comunicacions.

Així doncs, tant les empreses com el públic en general desitgen més i millors comunicacions mentre que els operadors pretenen emportar-se tot el que poden d'un negoci tan suculent. Si ens fixem en el mercat nord-americà, on sempre hi ha hagut competència, ens podem fer una idea del que passarà en aquest país.

Els governs també coneixen el poder de les comunicacions i ja es fa palès el desig d'algunes comunitats autònomes de tenir una operadora pròpia, cosa que no és indispensable dins del marc legal

tot i que cal recordar que per a l'economia d'escala com més ampli sigui el mercat potencial millors preus es podran obtenir.

En aquest marc general, ens centrarem particularment en el cas de les comunicacions científiques espanyoles. Ara mateix, hi ha una única xarxa estatal que dona servei a tot el país, la xarxa IRIS. RedIRIS està atemert en aquests moments 250 institucions i incrementa dia a dia la seva capacitat d'acord amb les seves possibilitats. La xarxa realitza la connectivitat internacional de dues maneres: connexió a Europa per una línia de 2 Mbps i connexió als Estats Units per una altra línia de les mateixes característiques. En aquests moments, aquestes capacitats són clarament insuficients, però s'ampliaran durant l'any vinent, a través del projecte TEN-34 de la Unió Europea on participen totes les xarxes acadèmiques.

Els òrgans rectors de la xarxa (Comisión Interministerial de Ciencia y Tecnología o CYCIT) vol potenciar-ne la "regionalització". De moment però, cada autonomia té el seu propi node. Si s'arriba a un model cofinançat, és possible que cada autonomia pugui gestionar la seva àrea, atorgant d'aquesta manera a la xarxa IRIS el paper de coordinadora i prestadora del servei nacional. No obstant això, de moment aquest model és tan sols una especulació ja que la política que se seguirà en el futur encara no ha estat decidida.

D'altra banda, un dels problemes importants que afecta RedIRIS pel que fa a Internet és el dels "punts neutres". En principi, quan dos usuaris -un de la xarxa IRIS i l'altre d'un altre proveïdor- inter-

canvien informació, ho fan a través de les línies internacionals. Però, això canviarà aviat en establir-se un "punt neutre" espanyol. I també podria ser així pel que fa a les autonomies ja que els proveïdors lo-

rics (edu, com, gov, etc.). Això estava bé quan no hi havia gaires usuaris, però amb l'increment d'usuaris que s'ha produït aquests anys, aquesta concepció canvia i seria interessant fragmentar els països més actius en dominis locals. En el cas d'Espanya, algunes de les autonomies més actives podrien tenir un domini propi. Escric això com a suggeriment personal ja que em consta que veus molt autoritzades en aquest àmbit propugnen la unicitat dels dominis. Tot i això, vull insistir-hi: a nivell administratiu i pràctic és millor descentralitzar.

Finalment, cal esmentar que RedIRIS està contribuint, des de fa anys, al desenvolupament d'Internet a Espanya i a la formació



canvien informació, ho fan a través de les línies internacionals. Però, això canviarà aviat en establir-se un "punt neutre" espanyol. I també podria ser així pel que fa a les autonomies ja que els proveïdors lo-

rics (edu, com, gov, etc.). Això estava bé quan no hi havia gaires usuaris, però amb l'increment d'usuaris que s'ha produït aquests anys, aquesta concepció canvia i seria interessant fragmentar els països més actius en dominis locals. En el cas d'Espanya, algunes de les autonomies més actives podrien tenir un domini propi. Escric això com a suggeriment personal ja que em consta que veus molt autoritzades en aquest àmbit propugnen la unicitat dels dominis. Tot i això, vull insistir-hi: a nivell administratiu i pràctic és millor descentralitzar.

Finalment, cal esmentar que RedIRIS està contribuint, des de fa anys, al desenvolupament d'Internet a Espanya i a la formació

EDITA

CECSA

TERAFLOP

CONSELL EDITORIAL

Jordi Domingo
Lluís Garrido
Albert Marcet
Antoni Oliva
Santiago Olivella
Xavier Oliver
Eugenio Oñate

COORDINACIÓ

Miquel Huguet

ASSESSOR

Juan Carlos González
CAP DE REDACCIÓ
Anna Solana
Publicitat
Jordi Aguilà
Tel.: (93) 205 34 64
Disseny i producció
Subirà & Associats
Maquetació
Rosé Álvarez

amb el suport de

Generalitat de Catalunya

FUNDACIÓ CATALANA PER A LA RECERCA

NOVETATS HPCN

L'Asci Red Project d'Intel, a un pas del Teraflop

Amb una configuració d'11 armaris amb 688 nodes, 1376 200 MHz processadors Intel Pentium Pro i més de 89 Gbytes de memòria, la multinacional Intel Corporation ja ha assolit els 213 Gflop/s de potència punta al Linpack benchmark. La companyia augmeniarà el nombre d'armaris del supercomputador fins a 86, amb la qual cosa espeja obtenir la velocitat punta esperada, és a dir, 1,8 Tflop/s a final d'any.

Intel Corporation està aconseguint molt bons resultats en el desenvolupament d'un supercomputador d'1,8 Teraflop/s per al Departament d'Iniciativa de Computació Estratègica Accelerada (ASCI). El projecte, emmarcat dins del programa Option Red, s'està instal·lant per etapes al Sandia National Laboratory d'Albuquerque (EUA) i serà utilitzat pels científics de Sandia, de Los Alamos National Lab i del Lawrence



Livermore National Lab per fer proves nuclears virtuals.

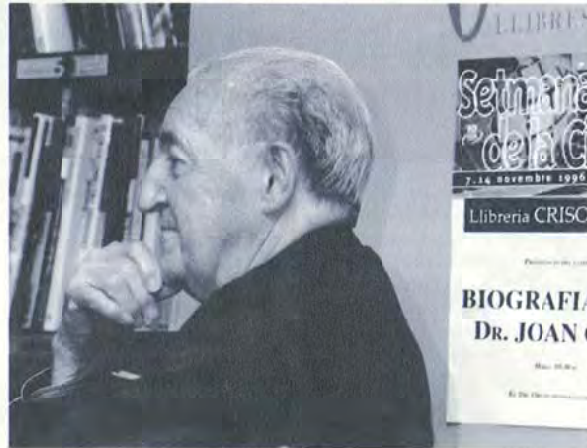
Tot i que el sistema configurat per 11 armaris és tan sols una part del supercomputador final, la seva capacitat computacional i la seva memòria el converteixen en una eina molt útil per a les investigacions a l'ASCI. Els científics de Sandia, Allen Robinson i James Peery asseguren que, tot i que encara s'està construint, l'estabilitat d'aquest supercomputador és realment sorprenent. Quan es completi el programa, els científics tindran, així doncs, a les mans una eina molt valuosa per irar endavant les seves investigacions sobre simulacions nuclears.

Bona acollida de "La Setmana de la Ciència"

La Setmana de la Ciència, organitzada per la Fundació Catalana per a la Recerca i en la qual va col·laborar el C⁴, va aplegar, del 7 al 14 de novembre passats, unes 200.000 persones interessades a descobrir els darrers avenços científics i tecnològics. Aquesta iniciativa, potenciada per la Unió Europea des de fa uns anys, pretén afavorir el contacte directe del públic amb allò que generalment considera incomprensible però que, en realitat, es pot explicar amb claredat. El director de la Fundació Catalana per a la Recerca, Josep Antoni Plana, assenyalava de fet que "la setmana de la ciència ha aconseguit el seu principal objectiu que és apropar el científic i la ciència al públic".

Tot i que tots els actes d'aquesta setmana científica van tenir una participació destacable, cal remarcar l'èxit de la jornada de portes obertes als museus de Catalunya, la presentació del *Libre Blanc de la Divulgació Científica i Tecnològica*, que es va fer al Col·legi de Periodistes de Catalunya per promoure la normalització de la ciència com a contingut bàsic en els mitjans de comunicació, i la de la biografia del científic Joan Cró. El primer premi escolar de pàgines web de contingut científic també va tenir una bo-

na acollida. Hi van participar 500 estudiants d'escoles de tot Catalunya amb 23 pàgines web. La jornada de portes obertes al C⁴, que es va fer el 12 de novembre, va atreure sobretot estudiants de la Universitat Politècnica de Catalunya interessats en la supercomputació, però, curiosament, també una jubilada de 75 anys que no va poder estar-se de fer preguntes sobre el funcionament del centre. La Setmana de la Ciència es va cloure amb el lliurament dels



Joan Cró, en actitud reflexiva durant la presentació del seu llibre.

premis de la Fundació Catalana per a la Recerca en un acte solemne que es va celebrar al Palau de la Generalitat. Els premis es van atorgar al Dr. Antoni M. Badia i Mar-

garit, lingüista, filòleg i professor emèrit de la Universitat de Barcelona, i al Dr. Josep Egozcue, catedràtic de Biologia Molecular de la Universitat Autònoma de Barcelona.

L'Anella Científica permetrà el desenvolupament de nous projectes



Caterina Parals, cap en funcions del Departament de Comunicacions del CESC.A, va destacar durant la ponència titulada "L'Anella Científica: avaluació de resultats", que es va fer en el marc del Primer Congrés d'Internet a Catalunya (INET-CAT'96) la darrea setmana del mes de novembre, que aquesta xarxa metropolitana de fibra òptica és a la base del desenvolupament de nous projectes de comunicació.

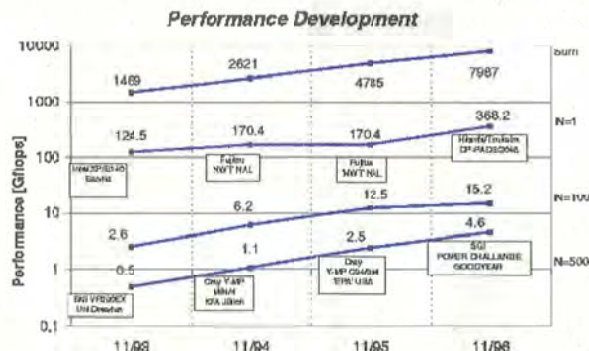
L'Anella Científica, que és una de les 5 plataformes que formen part de l'Spanish National Host, facilita la transmissió de la major part del trànsit telemàtic científic. Per aquest motiu, el nombre d'institucions que accedeixen als serveis d'aquesta xarxa ha anat creixent en els darrers anys. L'avaluació dels seus resul-

jats és, per tant, força positiva. No obstant això, el C⁴ continua treballant per millorar les prestacions de l'Anella Científica. De moment, les prioritats que s'ha marcat el Centre són l'actualització de l'arquitectura i la creació de nous serveis d'interès general, de comú acord amb les institucions connectades.

Comentari gràfic Performance Development

El Linpack benchmark (TOP 500) és una col·lecció de programes d'àlgebra lineal creada per Jack Dongarra que serveix per mesurar la potència dels ordinadors.

Aquest any, per primer cop, hi ha 5 centres espanyols al TOP 500, entre els quals cal destacar la presència de dos centres industrials de bases de dades: 210) C4/CESCA amb un IBM SP2 de 44 processadors. 289) C4/CEPBA amb un SGI Power



Challenge 10000 de 24 processadors. 313) Departament d'Informàtica d'El Corte Inglés amb un IEM SP2 de 28 processadors. 399) Universitat Jaume I de Castelló amb un Power Challenge Array de 24 processadors. 422) La Caixa amb un IBM SP2 de 26 processadors.

En el gràfic es pot observar que tant la potència dels ordinadors més ben classificats en el TOP 500 com la dels que estan a la cua de la llista es duplica cada any. D'altra banda, també cal assenyalar que hi ha una tendència global a substituir els processadors vectorials per processadors paral·lels.

BREUS

PARSYTEC OBRE UNA NOVA SUCURSAL ALS ESTATS UNITS

L'empresa alemanya manufacturera de computadors paral·lels utilitzats bàsicament per processos de reconeixement, Parsytec, ha obert una segona sucursal a Campbell, a prop de Silicon Valley, als Estats Units per donar servei a la costa oest americana. La sucursal de Campbell obrirà les portes del mercat del reconeixement de la imatge a l'oest dels Estats Units. Parsytec té altres sucursals a Chicago (EUA), Chernitz (Alemanya) i Utrecht (Països Baixos).

GENIAS DESENVOLUPA UN SOFTWARE DE GESTIÓ PER A CENTRES DE COMPUTACIÓ

L'empresa holandesa Genias Software And Instrumental Inc. ha creat un sistema de gestió anomenat Global Resource Director (GRD) pensat per permetre la realització de tasques complexes en el temps previst en els centres de computació. El GRD combina un sistema dinàmic de planificació de Raytheon E-Systems amb un software de recull dinàmic de dades d'Instrumental and Codine i un sistema de gestió de Genias per traduir les necessitats empresarials en pràctiques operacionals. La primera versió del GRD sortirà el gener de 1997 i serà adquirida en primer lloc per Silicon Graphics IRIX i la Cray UNICOS.

ELS AVENÇOS EN COMPUTACIÓ PARAL·LELA PERMETEN DESCOBRIR EL GEN QUE CAUSA EL PARKINSON

Les eines de computació paral·lela desenvolupades pel departament d'Informàtica de la Universitat de Rice (Houston, Texas) han facilitat el descobriment de la localització del gen que pot causar el parkinson en algunes persones i han confirmat el que molts investigadors ja sospitaven: el fet que aquesta malaltia té una base genètica. L'estudi d'una família italiana amb més de 500 membres que viuen en continents diferents ha estat el punt d'inici d'una recerca que s'ha efectuat amb els programes Treadmarks i FASTLINK. Per a més informació podeu consultar les pàgines web d'aquests programes a <http://www.cs.rice.edu/~willy/treadmarks/overview.html> i <http://www.cs.rice.edu/~schaffer/fastlink.html>.

Podeu veure Teraflop en format electrònic a partir de 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

Carlos Pérez del Valle

“Els mitjans computacionals del CEPBA m’han permès avançar molt ràpidament en la meva investigació”

Des que el teòric holandès Paul Crutzen va descobrir el 1970 el cicle catalític dels òxids de nitrogen, responsable de la destrucció de l'ozó en l'estratosfera natural, el forat de la capa d'ozó ha estat un motiu de preocupació creixent per a investigadors químics i físics. Carlos Pérez del Valle, titulat en Químiques i becari del grup de recerca del professor Juan José Novoa, de la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona, dins del programa impulsat per la Unió Europea "Training and Mobility of Researchers", ha fet un gran pas endavant en la investigació d'aquesta reacció demostrant el paper determinant dels efectes dissolvents en la dissociació iònica de l'H₂O₂.

TERAFLOP És el primer estudi de la descomposició de l'ozó que es fa en fase aquosa?

No. Hi ha molts estudis experimentals sobre aquest tema. També n'hi ha molts de teòrics. Hi ha grups importants d'investigació que estan estudiant les reaccions en fase aquosa, per exemple el CNRS francès o el Max-Planck alemany, entre altres. El que diferencia el grup del professor Novoa en el qual he treballat dels altres és la manera de tractar les reaccions químiques en la fase aquosa, que és innovadora.

TERAFLOP Quin és l'aspecte novèdós del projecte?

El nostre grup ha intentat reproduir les reaccions en fase aquosa utilitzant el menor nombre possible de molècules d'aigua. És a dir que treballarem amb les molècules d'aigua que tenen un paper més important en la reacció. En general, els investigadors intenten reproduir tot el medi. Tenen una petita molècula, l'envolten d'un model discret i a l'entorn de tot això posen una mena de mitjana de totes les molècules d'aigua. Nosaltres vam començar així però no aconseguíem res i va sorgir aquesta manera de

calcular, de reduir-ho tot al mínim.

TERAFLOP Per què és tant important que l'estudi es faci en el medi aquós?

Tot el que s'ha fet en química computacional fins ara s'ha fet en fase gasosa. Això vol dir que només es

constant d'equilibri. Amb el mètode tradicional no ho aconseguia, però amb aquesta nova fórmula hem obtingut alguns resultats, tot i que encara manca fer moltes coses. Aquest és un tema en què sempre hi ha noves investigacions per fer.

TERAFLOP Què és el que ha aconseguit fins ara?

Bé, en el grup en el qual he treballat hem aconseguit tenir les dues parts de la reacció (de la descomposició de l'H₂O₂), tenir una estructura neutra i una iònica, en un mateix tipus d'enllaços. Hem assolit reproduir la constant d'equilibri. El que falta és tenir ben establitzades aquestes molècules —encara no sabem com—, perquè aleshores podrem dir que això està bé.

TERAFLOP Quin tipus de càlculs ha utilitzat? En

quina metodologia s'ha basat? En mètodes quàntics bastant sofisticats implementats en un programa especialitzat, el Gaussian 94, que permet fer càlculs molt ràpidament. He utilitzat el sistema paral·lel Power Challenge Array de Silicon Graphics del qual disposa el CEPBA. Aquest sistema està format per dues màquines paral·leles de memòria compartida, Khufu i Khaefre. Però, el que he utilitzat més és el Khufu, que té 12 processadors R10000 (2 Mbytes de memòria cache cadascun) 2 Gigabyte de memòria principal i un bus d'alta velocitat (1.2 Gbs) que connecta els processadors a la memòria principal i els dispositius d'entrada i sortida.

TERAFLOP La beca dura tres mesos. De moment, quant temps de CPU ha consumit?

Doncs, he consumit bastant temps de CPU aquests dos primers mesos. Crec que tines dues mil hores el primer mes i unes mil i escaig, el segon. En total, més de tres mil hores, que han estat molt profitoses ja que gràcies a la potència d'aquest ordinador he pogut avançar molt més ràpidament en les meves investigacions.

TERAFLOP Aquests càlculs poden ser útils per a altres investigacions?

Sí, això és molt important. Fins ara ningú havia estat capaç de reproduir la constant d'equilibri, tot i que



Carlos Pérez del Valle al despatx on ha treballat durant aquests mesos.

es coneix des de fa molt temps. Es pot utilitzar per a molts sistemes.

TERAFLOP Quines conseqüències tenen aquests resultats en el forat de la capa d'ozó que preocupa tant?

El que jo he intentat descobrir és que la reacció clau, la descomposició de l'H₂O₂, és possible en fase aquosa. I això no s'havia fet mai. Però això no solucionarà el forat de la capa d'ozó. De totes maneres, els químics troposfèrics han de conèixer aquesta mena de reaccions i d'estudis per poder pensar en alguna solució.

TERAFLOP Tot això és molt teòric, oi?

La veritat és que té poca aplicació pràctica però com més coses coneixes, més coses es poden explicar. Dir que aquesta reacció és possible és important. Al principi es pensava que l'ozó que es destruïa en fase aquosa era molt, ara es pensa que se'n destrueix menys. Cal estudiar-ho tot. A més, aquesta manera d'estudiar les reaccions en fase aquosa també pot ser útil per

al disseny de fàrmacs, per exemple, i altres coses. El fàrmac, a més d'atacar la malaltia, també actua en un medi que és el nostre cos, que està compost per un 70% d'aigua. Per tant, és important

TERAFLOP El que ha aconseguit el satisfà...

Més que el que jo he aconseguit, el que cal destacar és el que ha aconseguit el grup de J.J. Novoa. Però sí, estic content perquè en dos mesos, amb els processadors del CEPBA, he aconseguit avançar gairebé més que en els tres anys que fa que em dedico a la meua tesi de final de carrera. Fent la tesi havia de modelitzar —havia de posar a priori on eren les molècules d'aigua— i treballava amb màquines molt més lentes. En canvi, aquí, amb més mitjans computacionals, he millorat els mètodes de les molècules i ha anat tot molt més ràpid. La computació paral·lela té molts avantatges per a la recerca que necessita càlculs complexos. Com més ràpid és l'ordinador i com més informació mou, més et facilita la feina.

FOTO / NOTÍCIA



Per a un bon nombre de problemes reals, no es coneixen mètodes eficients per trobar solucions exactes. En certs casos, l'ús del paral·lisme massiu, conjuntament amb tècniques d'aproximació, permet generar, en un temps raonable, solucions de qualitat quasi-optimal. A la figura, aproximació a la partició d'una "grid" pròxima d'anàlisis aerodinàmiques.