

TERAFLOP

NOTICIARI DEL CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA

Núm 21
9.000 exemplars

CESCA

Publicació mensual
Gener/febrer 1997

El Consorci Hospitalari de Catalunya avalua l'ús del paralel·lisme

Les proves de rendiment de la base de dades Oracle, realitzades per l'empresa EY Consulting sobre l'SP2 del CESCA amb estadístiques mensuals de peticions i resultats de proves mèdiques, provinents del Consorci Hospitalari de Catalunya, posen de manifest els avantatges que comporta l'ús de les bases de dades paral·leles quan es treballa amb un volum de registres considerable. En aquest cas, la utilització de quatre nodes va permetre que s'obtinguessin els resultats de les consultes més llargues gairebé quatre cops més ràpid.

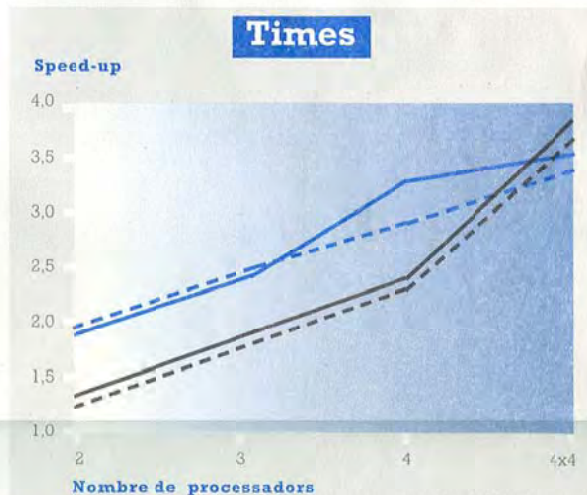
Quan un sol processador es troba desbordat per la capacitat de dades amb les quals ha de treballar, se n'hi pot connectar un altre perquè l'ajudi. En teoria, aleshores es dobla la capacitat de resposta del sistema. I si aègim un tercer processador i un quart, es triplica... es quadruplica? No és tan senzill. La relació entre el nombre de nodes utilitzats i la rapidesa aconseguida (*Speed-up*) no és proporcional, almenys de moment.

Com es pot veure en el gràfic adjunt, l'*Speed-up*, aconseguit amb quatre nodes per analitzar 30 milions de registres (2GB) pertanyent a 200.000 pacients de l'Hospital del Mar, és de 3, és a dir, satisfactori, però millorable. Per aquesta raó, es va introduir una variació en les proves realitzades amb 4 nodes que consistia a indicar a Oracle que cada processador realitzés 4 processos alhora (4x4). D'aquesta manera es va aconseguir un *speed-up* encara més proper a 4.

El *software* utilitzat per fer aquestes consultes, Oracle 7.3, aplica un nou conjunt de metodologies escalables anomenat KDD

(Knowledge Discovery in Database), que està dissenyat per treballar amb volums importants de dades i permet no tan sols emmagatzemar-les sino accedir-hi ràpidament i visualitzar i interpretar els resultats obtinguts (Decision Support System).

Oracle 7.3 disposa de dues opcions de treball: el Paralel Server i el Paralel Query. La primera possibilita que es faci una multitud de consultes alhora, ja que el sistema les distribueix en els diferents processadors de que disposa per agilitar l'obtenció de resultats. La segona permet que una consulta molt complexa es descompongui en consultes més simples que es distribueixen en els diferents processadors. Quan cada node ha complert la seva funció, aleshores s'apleguen els resultats per elaborar la resposta a la consulta realitzada.



- 1**
Sobre 7 milions de peticions
- q5c Distribució tipus de servei en funció any i mes (3 anys).
 - q5c2 Distribució tipus de servei en funció any i mes (2 anys).
- 2**
Sobre 19 milions de resultats
- q7 Distribució resultats patològics en funció any, mes i tipus (2 anys).
 - q9 Mitjana valor mèdic en funció any, mes i tipus.

La UOC aposta per la societat de la informació



Gabriel Ferraté és rector de la UOC des de 1995

La Universitat Oberta de Catalunya (UOC) va lluitar a la ciutat de Barcelona el guardó Bangemann Challenge, que va concedir-li la Unió Europea a Estocolm, a final de gener, pel seu projecte educatiu a distància. El campus virtual de la UOC va ser triat com un dels més innovadors en l'àmbit de la telemàtica i de la telecomunicació entre 14 projectes d'11 ciutats europees. Amb el guardó Bangemann Challenge, la UOC confirma el gran

potencial de les noves tecnologies pel que fa a l'ensenyament i accepta el repte europeu d'accelerar la marxa cap a la societat de la informació amb la seva implicació en vuit projectes europeus de recerca.

Relació de ciutats premiades en el Bangemann Challenge per categoria:

Teletreball:

París (regió) i Estocolm

Ensenyament a distància:

Barcelona, Estocolm i Anvers

Xarxes universitàries:

Edimburg

Telemàtica per a pimes:

Anvers i Manchester

Control de transit viari:

Rotterdam

Control de transit aeri: Bremen

Salut Pública:

Edimburg i Estocolm

Licitació electrònica: Estocolm

Administració pública:

Bolònia i Manchester

Autopistes de la informació:

Anvers i Edimburg

Entrevista

Martin Bohle-Carbonell i Jean Berlamont, moderadors de la trobada d'accions concertades del MAST-II.

Pàgina 4

Opinió

Jesús Labarta, director del CEPBA, explica la tasca que realitzarà el centre com a Technology Transfer Node del programa ESPRIT.

Pàgina 2

Modelat de molècules bioactives

Primera reunió de la xarxa catalana que treballa en aquest tema.

Pàgina 3

La UdL, al Consorci del CESCA

La incorporació al Consorci permet a aquesta universitat desenvolupar la seva xarxa ATM.

Pàgina 3

Novetats HPCN

La lògica quàntica pot fer que els ordinadors del futur siguin molt més ràpids que els actuals.

Pàgina 2

AGENDA

FEBRER 97

- **17-19: "Current and future High-Performance Processors":** curs a càrrec del professor James E. Smith de la Universitat de Wisconsin-Madison sobre les arquitectures de computadors escalars i vectorials avançades que s'estan utilitzant i que probablement s'utilitzaran en el futur. Sala de Conferències del Departament d'Arquitectura de Computadors de la Universitat Politècnica de Catalunya. Més informació a: crisc@uc.upc.es
- **23-28: "EUROCAST'97: Fifth International Conference on Computer Aided Systems Theory and Technology",** que tindrà lloc a la Universitat de Las Palmas de Gran Canaria. Més informació a: mayca@dic.ulpgc.es
- **24-26: "Virtual Reality Modelling Language (VRML) Symposium":** simposi sobre llenguatge de modelatge de realitat virtual, que es farà a The Hyatt Regency, a Monterrey (Califòrnia, EUA). Més informació a: <http://www.sdsc.edu/vrml97> o a l'adreça de correu electrònic: ljohnson@redshift.com

MARÇ 97

- **6-7: "High-level Languages, Compilers and Tools for Parallel Scientific Computation":** curs a càrrec del professor Hans Zima de la Universitat de Viena sobre les eines disponibles pel que fa a programació d'aplicacions de gran envergadura per grans plataformes de càlcul i, alhora, llenguatges de programació novadors orientats al paral·lelisme de dades. Sala de Conferències del Departament d'Arquitectura de Computadors de la Universitat Politècnica de Catalunya. Més informació a: crisc@uc.upc.es
- **12-14: "NEURAP'97: Third International Conference on Neural Networks and their Applications":** fòrum sobre les aplicacions industrials de les xarxes neuronals artificials que es farà a la Universitat d'Aix-Marseille III. Més informació a: <http://www.iupim.u-3mrs.fr/neurap'97.htm>

La selecció del CEPBA com a TTN és un reconeixement a la tasca realitzada amb PCI-PACOS i PCI-II

JESÚS LABARTA

Director del CEPBA

A partir de l'abril i per un període de dos anys, el Centre Europeu de Paral·lelisme de Barcelona (CEPBA) realitzarà la tasca de TTN (Technology Transfer Node) dins del programa ESPRIT per a temes d'HPCN (High Performance Computing and Networking). L'objectiu dels TTN és promoure la tecnologia del paral·lelisme com a eina per augmentar la competitivitat de les indústries europees i, en especial, de les PIMES. La Comissió Europea ha seleccionat un total de 20 TTN distribuïts per tota la seva geografia i coordinats dins d'una xarxa anomenada METIER.

Entre les idees bàsiques que divulga la xarxa, cal destacar la necessitat de fer arribar a les empreses i els centres d'investigació, que desenvolupen i utilitzen les aplicacions paral·leles, no només la tasca de promoció del paral·lelisme sinó també la de gestió d'aquesta tecnologia. La transferència de tecnologia és una tasca que requereix proveïdors i consumidors potencials (centres d'investigació i indústria), però també "catalitzadors" que, des de la proximitat, ajudin a trencar les barreres que els separen. En l'entorn de la xarxa METIER, el terme "catalitzador" s'aplica tant a la tecnologia del paral·lelisme com als centres seleccionats com TTN.

En el primer cas, el paral·lelisme és una eina per aconseguir temps d'execució d'una aplicació suficientment petits com perquè aquesta darrera sigui viable. No hi ha cap restricció pel que fa a l'àrea temàtica o tecnologia de base, ja que el paral·lelisme és una tecnologia complementària. Sovint, les empreses o centres d'investigació amb coneixements profunds sobre la física i la modelització d'un pro-

blema tenen alguns problemes a l'hora d'aplicar-les a la indústria per limitacions en els temps de càlcul. En la mesura que un sistema amb diversos processadors permeti que aquests codis tinguin una utilitat real, la tecnologia del paral·lelisme farà possible la transferència de la tecnologia de base.

Pel que fa als TTN, la seva tasca és la d'entendre la problemàtica associada a la relació entre el que proveeix la tecnologia i el que l'adopta. Com a catalitzador d'a-

quest problema si és necessari. Tot i que el fet forma part de la tasca dels TTN, promoure consorcis aturar-se aquí aportaria, en la majoria dels casos, una col·laboració poc productiva. Però, això passa quan es tracta de fer possible aquesta cooperació a través de la tecnologia del paral·lelisme, que es pot veure en mots casos com a esotèrica. En la filosofia de la xarxa METIER, un TTN no és tan sols un administrador d'una sèrie d'ajuts, sinó també un company de viatge per a tots els qui s'hi embarquen. Per això, els centres que han estat seleccionats com a TTN ho han estat tant per la seva experiència tècnica com pel seu interès per promoure el paral·lelisme.

Des d'aquesta opinió sobre un dels objectius i raons de ser del CEPBA, m'agradaria convidar tots aquells grups d'investigació

d'adoptar una tecnologia o aplicació paral·lela demostrada en aquesta àrea o en una de similar. La duració pot ser de fins a 18 mesos.

• Demostradors en els quals, en un període no superior als 18 mesos, s'ha d'adoptar en un nou sector una tecnologia que s'ha demostrat en un altre.

En el primer cas, el finançament pot ser de desenes de KECU, mentre que en els altres dos arriba a ser de poques centenes de KECU. En tots els casos, els consorcis han de ser petits i els socis poden tenir tots la mateixa nacionalitat. El TTN dona la dimensió europea a tot el grup de projectes a través de la xarxa METIER.

La selecció del CEPBA com a un dels 20 TTN que duran a terme aquesta tasca arreu d'Europa constitueix un reconeixement al treball realitzat en els projectes PCI-PACOS i PCI-II. Els objectius i la manera de treballar del programa de la Comissió Europea, pel qual s'estableix la xarxa de TTN, s'inspiren en gran mesura en la tasca realitzada en aquests dos projectes. Això ens satisfà molt i ens anima a continuar en la nostra línia d'oferir dins del C⁴, juntament amb el CESCA, un servei de màquines, formació i transferència de tecnologia.

Per a més informació sobre aquest tema, adrecen-vos a:

- Prof. Jesús Labarta: Tel. 401 69 87. Fax: 401 70 55 E-mail: jesus@ac.upc.es
- Judit Jiménez: Tel. 401 71 78. E-mail: judit@ac.upc.es



questa tecnologia, el TTN es mou en una zona difusa, en la qual és difícil pressionar de vegades, acceptar respostes vagues d'altres o estirar la corda sense trencar-la... i tot això per tal que les dues parts del procés se sentin reconegudes en les seves competències i interessos, alhora que se les empeny a maximitzar els resultats de la col·laboració. Aquesta tasca no pot fer-se sense una forta base tècnica, amb capacitat i voluntat de col·laborar en la solució

per als quals el temps de càlcul ha estat una barrera en la transferència dels seus treballs a la indústria, que consideressin les possibilitats que ofereix el TTN. Hi ha tres tipus d'activitats, parcialment finançades per la Comissió Europea, que tenen una rellevància particular:

- Estudis de factibilitat d'uns sis mesos de duració. Cal analitzar-hi si el paral·lelisme permetria afrontar el problema i com.
- Best Practice en els quals un nou usuari d'una àrea específica ha

vier Tejada col·labora des de fa uns anys amb l'empresa Xerox i ha treballat més d'un any a la Universitat de Nova York, que el va nomenar doctor *honoris causa* només fa sis mesos. Allà va començar els experiments que han dut l'equip amb qui treballa a descobrir l'efecte túnel ressonant espín, aquí a Barcelona.

De moment, tot i que hi ha diverses possibilitats de construir l'ordinador quàntic, l'imaní microscòpic sembla ser l'única alternativa plausible d'aconseguir-ho. Més de 500 investigadors d'arreu del món treballen en aquest projecte que, de moment, tan sols és una idea que probablement trigarà un cert temps a materialitzar-se.

NOVETATS HPCN

L'ordinador del futur, a les mans de la mecànica quàntica

El descobriment d'un nou efecte de la física ha obert les portes perquè d'aquí a uns anys pugui existir un computador quàntic que faci operacions matemàtiques d'una manera molt més ràpida, a partir de la lògica quàntica i no pas de la binària i que, per tant, sigui molt més ràpid que qualsevol computador actual.

Aquest efecte s'ha descobert en un iman de la mida d'una molècula, creat a partir de la combinació de manganès, oxigen, carboni i hidrogen. Aquest iman permetria emmagatzemar dades en una unitat de la grandària d'una molècula, la qual cosa és un avenç important respecte dels ordinadors actuals en els quals les uni-

tats d'emmagatzematge magnètics requereixen bilions de molècules.

El físic Javier Tejada, catedràtic de la Universitat de Barcelona (UB), ha tingut un paper fonamental en el descobriment d'aquest efecte físic, que han anomenat *efecte túnel ressonant espín*, i que pot revolucionar el món de la computació. Ja

EDITA

CEPBA

TERAFLOP

CONSELL EDITORIAL

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

COORDINACIÓ

Miquel Huguet

ASSESSOR

Joan Carles González

CAP DE REDACCIÓ

Anna Solana

PUBLICITAT

Jordi Aguilà

Tel (93) 209 64 64

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà & Associats

MAQUETACIÓ

Rosa Álvarez

AME EL SUPORT DE

Generalitat de Catalunya

FUNDACIÓ CATALANA PER A LA RECERCA

La xarxa catalana de modelatge de molècules bioactives palesa la necessitat de col·laboració entre la universitat i la indústria



Fragment de PNA-DNA-PNA obtingut per dinàmica molecular

La primera reunió de la xarxa catalana de modelatge de molècules bioactives es va cloure el 22 de gener amb la idea que cal potenciar una col·laboració estreta entre la universitat i la indústria. Els assistents a la primera trobada de la xarxa, que coordina Modesto Orozco, professor titular de la Universitat de Barcelona, van coincidir, en aquesta ocasió, que s'haurien de fomentar iniciatives com la que, en aquesta ocasió, ha finançat la CIRIT. Aquest organisme ha ofert, d'altra banda, el seu suport econòmic per adquirir el programari necessari (Catalyst) per a instal·lar en el nostre maquinari per tal que es creï un servei de cerca en bases de dades d'interès farmacològic.

El congrés, titulat Tècniques computacionals en el modelatge i disseny de molècules bioactives, va comptar amb l'assistència de 82 participants. Aquests van escoltar les xerrades de diversos conferencians de l'Estat que van exposar el camí que prenen, ara mateix, les línies d'investigació punteres que segueixen —la majoria de les quals usen recursos de supercomputació—, com són el modelatge de DNA, el de proteïnes

i pèptids, la semblança molecular i altres temes de repercussió social com l'estudi d'un nou pèptid contra la SIDA i les vacunes sintètiques.

En la taula rodona que va posar punt final a la reunió i que va ser moderada per un investigador dels laboratoris Menarini, Albert Palomer, es va apuntar la possibilitat de crear un institut virtual de modelatge molecular al qual poder dirigir els dubtes que es planegen en aquest camp d'investigació.

BREUS

L'ORDINADOR MÉS POTENT D'ESPANYA AL CIEMAT

Silicon Graphics ha instal·lat al Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT). L'ordinador de càlcul científic més potent d'Espanya, el Cray T3E. Aquest computador paral·lel, que es pot escalar fins a 2.048 unitats de procés, té ara 32 processadors i pot assolir una potència punta de 19,2 Gflop/s, la qual cosa permet la resolució de problemes científics i tècnics en un temps rècord.

SILICON GRAPHICS PRESENTA LA NOVA FAMÍLIA D'ESTACIONS DE TREBALL OCTANE

La nova família d'estacions de treball OCTANE de Silicon Graphics utilitza els components de l'arquitectura dels computadors d'altres prestacions per processar diferents tipus d'informació: àudio, vídeo, imatges i geometria tridimensional. Un sistema de multiprocessador simètric (SMP) amb un únic dispositiu crossbar de 7 ports i 1 o 2 processadors MIPS R10000 fa possible que OCTANE pugui crear, en aplicacions de qualsevol tipus, imatges en temps real com, per exemple, modelatge de sòlids, animació en 3D i altres aplicacions més recents com el procés de volums 3D en temps real.

BCNET POSA EN MARXA UNA REVISTA DIGITAL SOBRE XARXES CIUTADANES

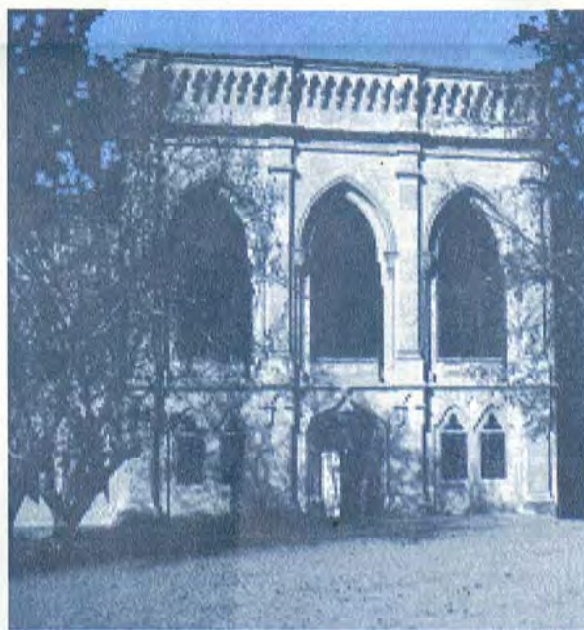
La xarxa metropolitana de Barcelona BcNet està treballant en la creació d'una revista experimental destinada a servir de suport a la construcció de les xarxes ciutadanes i a fomentar la participació responsable del ciutadà en aquest tipus de xarxes. BcNet Magazine oferirà informació sobre projectes i temes de treball com la democràcia electrònica o el teletreball, notícies de les xarxes de districtes i crítica de webs relacionats amb el món de les xarxes ciutadanes. El Magazine treballarà conjuntament amb el programa de la televisió de Nou Barris, BCN Digital, dedicat també a les xarxes ciutadanes.

La Universitat de Lleida entra al Consorci del CESCO i dona l'impuls definitiu a la seva xarxa ATM

La Universitat de Lleida (UdL) s'ha integrat al Consorci del CESCO, en el qual ja figuraven, entre altres membres, les altres universitats catalanes. Aquesta incorporació, que segons el coordinador per al Desenvolupament del Pla Informàtic de la UdL, César Fernández Camor, "era necessària per a la Universitat de Lleida", permetrà al centre lleidatà continuar desenvolupant una xarxa ATM (Asynchronous Transmission Mode) pròpia que és operativa des de l'estiu de 1996.

El projecte de xarxa ATM de la Universitat de Lleida és un projecte de 1.000 punts Ethernet amb cablejat FTP (veu i dades) i fibra

òptica a través del qual s'interconnecten, amb commutadors ATM i emulació de LAN, quatre campus metropolitans (Ciències de l'Educació, Ciències de la Salut, Agrònoms i l'edifici del Rectorat) a 185 Mbps. De moment, l'empresa que es va endur el projecte al començament de 1996, Telefónica/Alcatel, monitoritza, configura i assumeix els serveis de la xarxa. Però, d'aquí a quatre anys, aquesta passarà a ser propietat de la Universitat de Lleida. Aquesta universitat ja està treballant en dues ampliacions de connexió a la xarxa ATM: Torre Avizanda, on s'ubicarà l'Escola Universitària Politècnica que formava un cinquè campus i l'Hospital Arnau de Vilanova. Aquesta darrera, per cert, està gairebé enllestida.



La UdL celebra aquest any el seu set-cents aniversari

Voleu continuar rebent el TERAFLOP?

Estem actualitzant la nostra base de dades. Si voleu continuar rebent aquest butlletí, si us plau ompliu aquesta butlleta i envieu-la per correu postal a:

CESCA
Gran Capità 2-4 (Ed. Nexus)
08034 Barcelona

Teniu també la possibilitat d'enviar-la per e-mail a

teraflop@cesca.es

o bé d'omplir-la directament a través del web a:

<http://www.cesca.es/teraflop>

Nom: _____
 Universitat: _____
 Departament: _____
 Adreça: _____ Ciutat: _____
 Codi Postal: _____ E-mail: _____

Les subscripcions no confirmades s'esborraran automàticament de la base de dades!

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

Martin Bohle-Carbonell i Jean Berlamont

“Amb la supercomputació, el problema és tornar a la base per millorar els algorismes que permeten paral·lelitzar”

Van ser els moderadors de la trobada d'Accions Concertades (Cas) sobre ciència i tecnologies marines del programa MAST-II de la Unió Europea que es va fer a mitjan de gener a la Universitat Politècnica de Catalunya (UPC). Martin Bohle-Carbonell és el coordinador científic oficial del MAST-II i Jean Berlamont, professor de la Universitat de Leuven (Bèlgica), el coordinador del projecte MMARIE, que desenvolupa l'aplicació de la supercomputació en la modelització d'ecosistemes marins.

TERAFLOP Quin és l'objectiu d'aquesta trobada?

JEAN BERLAMONT: La idea d'aquesta trobada és seure tots junts per intercanviar punts de vista, experiències i preocupacions pel que fa a la nostra línia de recerca, que en el cas de MMARIE se centra en l'aplicació del paral·lelisme a l'estudi de les ciències marines. No esperem solucionar cap acció concreta sinó simplement compartir els nostres coneixements per poder enriquir les nostres investigacions i determinar els canvis que podem realitzar en els nostres models numèrics.

MARTIN BOHLE-CARBONELL: Això és comú a les tres accions concertades (MMARIE, MEDMEX i NOMBDS) que s'han reunit aquests dies a la Universitat Politècnica de Catalunya. Es tracta d'aplegar investigadors de diferents institucions de la Unió Europea que tenen els seus propis programes. La Unió Europea finança la trobada i fa

possible que els equips es trobin i col·laborin. Tots els investigadors que es reuneixen aquí han ideat models diferents per aplicacions comparables i aquí tenen la possibilitat de confrontar-los.

TERAFLOP Es pot dir que hi ha models numèrics més adequats que altres per un estudi determinat?

J.B. Tots els models són diferents i és molt difícil dir quin és millor que un altre. De fet, una de les discussions que hem tingut durant la trobada fa precisament referència a la manera més idònia de comparar models, de fer-ne un *benchmarking*. Com es pot dir que un model matemàtic és millor que un altre per estudiar el medi marí quan les premisses de base ja són diferents? Jo no crec que els models matemàtics es puguin classificar.

M.B.-C. Ens enfrontem a un problema considerable ja que els elements que s'han de comparar són



Jean Berlamont i Martin Bohle-Carbonell al campus de la UPC

molt complexos. És com si algú tingués molts cotxes per escollir a la seva disposició. Podria dir amb tota seguretat quin és el millor? No, perquè la tria depèn de diversos factors. Un cotxe petit no és adequat per a una família nombrosa. Per tant, el que cal fer és desenvolupar aproximacions per comparar elements de natura molt diferent que estan construïts amb aplicacions diferents i per les quals s'usen tècniques molt diverses. Continuant amb l'exemple dels cotxes: es pot comparar els frens de diversos cotxes, els motors, etc. Tot això permet determinar les característiques d'un cotxe en particular. Pel que fa als models numèrics es tracta de fer el mateix. El que passa és que és una mica més complicat perquè són virtuals i tan sols existeixen en l'ordinador.

TERAFLOP Però quina és la conclusió a la qual s'ha arribat, de moment?

M.B.-C. De moment, pel que fa a MMARIE, cal destacar que quan el programa es va posar en marxa fa dos anys, hi havia dues comunitats diferenciades que treballaven en el projecte: els matemàtics que pensaven en la millor manera de fer els càlculs (el *software*) i la gent que volia que les aplicacions anessin una mica més ràpid. Ara treballen junts per fer funcionar models que vagin sis, set o vuit vegades

més ràpid i que els permetin fer coses en una nit en lloc d'una setmana. És un pas important.

J.B. El problema que tenim ara que l'aspecte computacional se soluciona tan ràpidament és tornar a la base, a les matemàtiques, per millorar els algorismes necessaris per poder paral·lelitzar.

TERAFLOP Quines màquines s'utilitzen per dur a terme la investigació en el marc de MMARIE?

“És molt difícil dir que un model matemàtic és millor que un altre”

J.B. S'utilitzen màquines paral·leles com l'IBM SP2 de 12 processadors, computadors CRAY de 34 i 128 processadors i un *cluster de workstations*, bàsicament.

M.B.-C. Els processadors paral·lels permeten respondre a moltes preguntes que ens fem, però també en susciten altres com és saber com es pot comparar els models numèrics que utilitzen els diferents grups d'investigació.

TERAFLOP Per aquest motiu

és profitós realitzar accions concertades i reunions de trobada...

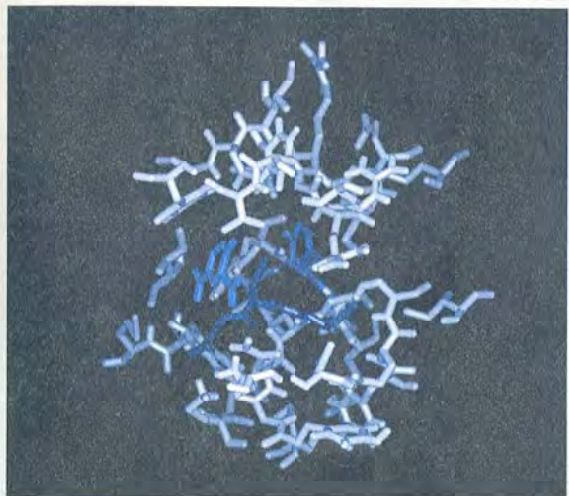
M.B.-C. Sí, és molt útil. I, a més, des del punt de vista de la Comissió Europea, cal dir que s'obtenen uns beneficis extraordinaris amb una inversió mínima.

J.B. Sí, crec que les accions concertades i les reunions com aquesta haurien d'estendre's a altres camps d'investigació.

TERAFLOP Sr. Bohle-Carbonell, vostè ha clos les jornades presentant el cinquè Programa Marc de la Comissió Europea. Quins reptes es plantegen en aquesta nova etapa?

M.B.-C. Personalment, he volgut remarcar que cal apropar la ciència a la vida quotidiana, a la gent del carrer. Els ciutadans han d'entendre per què es fan certes recerques. D'aquesta manera, s'obtenen beneficis tangibles a curt termini. D'una banda, la creació de treball i de l'altra, la formació d'una comunitat científica acostumada a divulgar els resultats de les seves investigacions al públic: en general i als grups d'usuaris potencials per tal que la informació es transformi en aplicacions pràctiques més ràpidament. Aquest és el repte que la Comissió Europea vol que la comunitat científica es plantegi. I crec que serem molt convincents en aquest aspecte.

FOTO / NOTÍCIA



Detall del centre actiu de l'enzim Glutathione S-Transferase modelat per a l'estudi del mecanisme de reacció de la GST. En la il·lustració es pot observar el glutatí, el segon substrat (Cl-dinitrobenzè) i una tirosina clau en el mecanisme. La simulació del mecanisme de reacció es va realitzar amb mètodes de càlcul mecan quàntics i de mecànica estadística (càlculs de perturbació d'energia lliure). Els càlculs quàntics es va fer a l'IBM SP2 i la majoria de les simulacions de mecànica estadística en una estació de treball del grup.

Autors: Grup d'investigació de Modesto Orozco (Universitat de Barcelona)

Exemplar gratuït
Paper reciclat