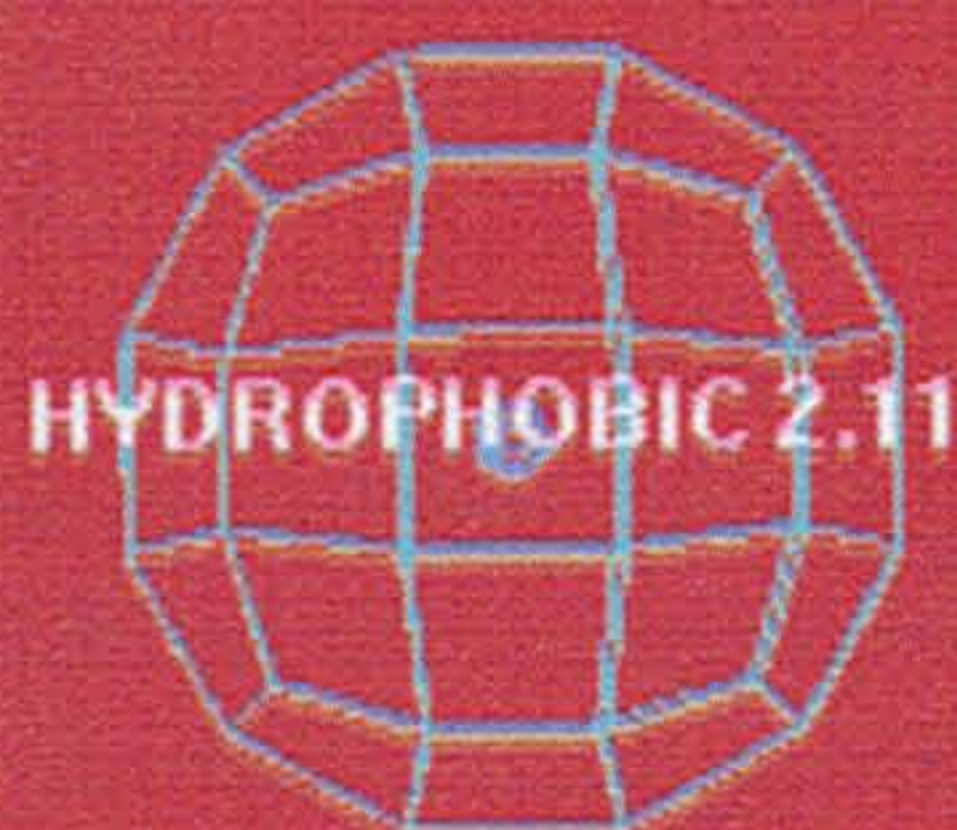
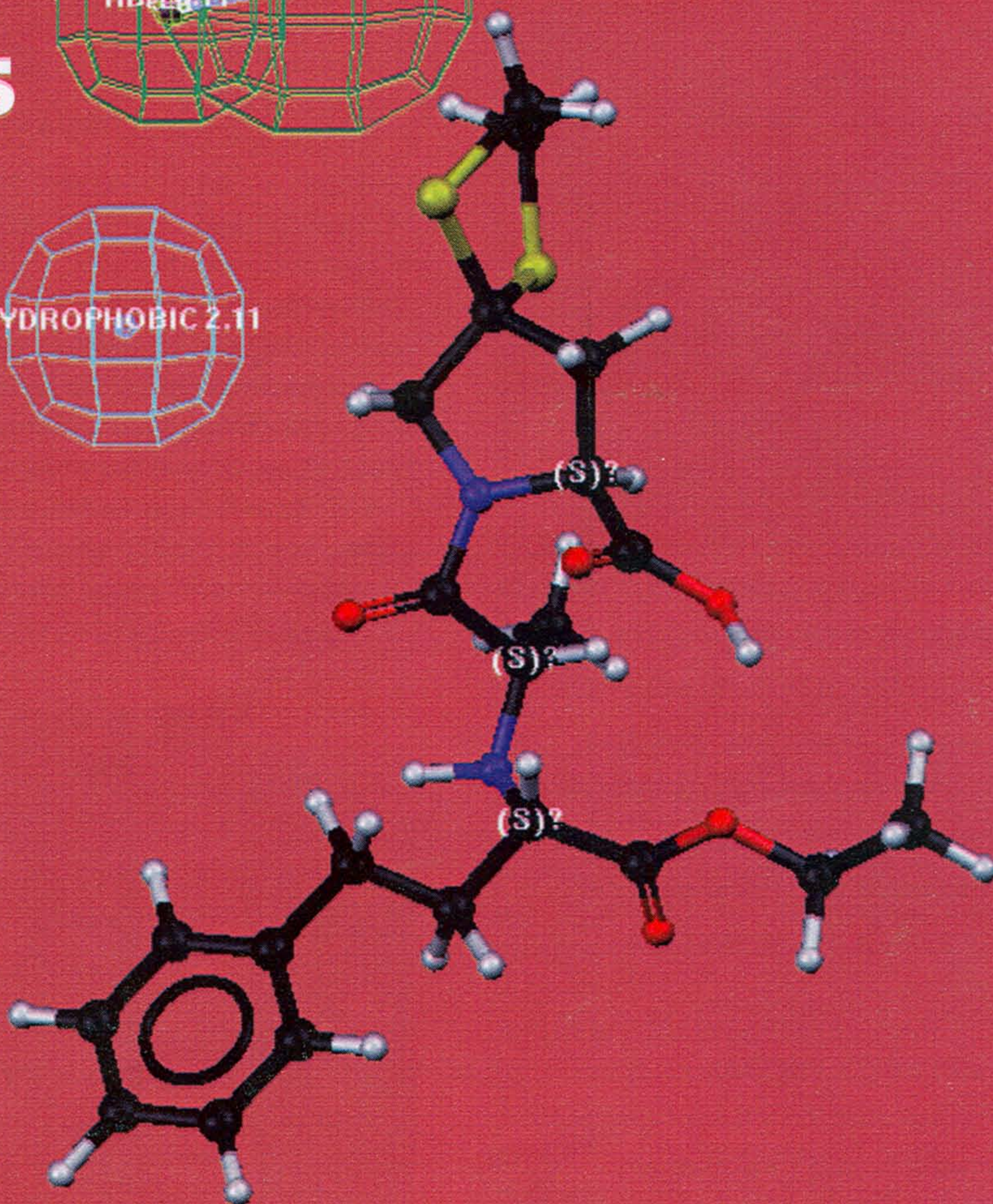


## El futur del disseny de fàrmacs



- L'SP2 duplica la seva potència
- Cap a un nou concepte de supercomputació als EUA
- Entrevista a Antoni Giró, director general de Recerca
- La UIB adquireix 10.000 hores



■ Com us vam avançar al número anterior, el noticiari publicat des del 1995 ha passat a ser una revista, en un format diferent, més còmode i atractiu. El nostre objectiu és publicar-ne 10 números l'any, mensualment excepte l'agost i el setembre, de 8 o 12 pàgines, d'acord amb les notícies que es vagin produint.

Continuarem informant-vos de les novetats en els serveis oferts i de l'ús i els beneficis dels computadors d'altres prestacions; un bon exemple d'això són els articles de portada i de l'actualització de l'SP2. A més, també volem incloure aquells esdeveniments clau en supercomputació com la resolució de la NSF sobre el futur dels centres de supercomputació als EUA. Les seccions habituals continuen (Entrevista, Opinió, Foto/notícia, Novetats CAP, Agenda i Breus) i se n'incorporen de noves: Projectes, Història CAP i Programes de Mobilitat; malgrat que no necessàriament les trobareu totes en cada número.

Des de TERAFLUP desitgem mantenir-vos ben informats i esperem que gaudiu del nou format i dels nous continguts.

Miquel Huguet, Ph. D.  
director del CESCA

# L'SP2 duplica

**L'IBM SP2 del CESCA permetrà realitzar càlculs molt més de pressa a partir d'aquest mes. La incorporació de nodes de la nova tecnologia IBM Power2 Super Chip (P2SC) a 120 MHz farà que el rendiment en coma flotant es multipliqui gairebé per dos.**

■ Els actuals 32 nodes de tipus thin2 de 266 Mflop/s s'han substituït per nodes thin120 de 480 Mflop/s de la tecnologia Power2 d'IBM (P2SC) que integra 8 xips de 23 milions de transistors en un únic xip de 15 i, per tant, aconsegueix una millora important en el rendiment. Alhora, els 10 nodes tipus thin a 66 MHz s'han convertit en nodes de tipus thin2 la qual cosa millora igualment el rendiment de l'SP2 en la majoria d'aplicacions gràcies al fet que es duplica la memòria de cada processador (de 128 a 256 MB), es multiplica per dos la capacitat de la cache de dades (de 64 a 128 KB) i es dobla l'amplada del bus. Els nodes tipus wide, però, no es canvien i tant el 512 MB com el de 1024 MB romanen a la màquina.

Com a complement a les millores als nodes, els usuaris disposaran tam-

bé de 27 GB de disc en un servidor de fitxers que serveix a qualsevol node via Network File System (NFS). Així doncs, l'espai en disc de l'SP2 augmenta de 359 a 431 GB, la memòria principal passa d'11 a 12 GB i la potència punta de 11,70 a 18,55 Gflop/s. L'actualització tecnològica de l'SP2 s'ha dut a terme gràcies al patrocini de la Fundació Catalana per a la Recerca.

Des del 26 de gener de 1995 en què es va instal·lar el primer sistema de 12 nodes, el CESCA ha apostat per l'avenç tecnològic actualitzant l'SP2 quan aquest ho ha requerit. Els sistemes POWERparallel SP2 són físicament armaris que disposen cadascun de setze "espais" per a calaixos de nodes. En aquests "espais" poden combinar-se, de manera flexible, calaixos de nodes diferents (wide, thin, thin2 i ara thin120 i wide135). El primer sistema de 12 nodes comprenia dos processadors wide —l'un de 512

**El CESCA ha  
apostat per l'avenç  
tecnològic**



Els tècnics de hardware d'IBM treballant en l'actualització de l'SP2.

JORDI PARETO

# la seva potència



## Característiques tècniques dels processadors Power2

	<i>thin</i>	<i>wide</i>	<i>thin2</i>	<i>thin120</i>	<i>wide135</i>
<b>Disponibilitat</b>	<b>3T94</b>	<b>3T94</b>	<b>1T95</b>	<b>4T96</b>	<b>4T96</b>
<b>Freqüència (MHz)</b>	<b>66</b>	<b>66</b>	<b>66</b>	<b>120</b>	<b>135</b>
<b>Cache de dades</b>	<b>64</b>	<b>256</b>	<b>128</b>	<b>128</b>	<b>128</b>
<b>Amplada bus memòria</b>	<b>64</b>	<b>256</b>	<b>128</b>	<b>256</b>	<b>256</b>
<b>Potència punta (Mflop/s)</b>	<b>266</b>	<b>266</b>	<b>266</b>	<b>480</b>	<b>540</b>
<b>TPP (Mflop/s)</b>	<b>55</b>	<b>236</b>	<b>231</b>	<b>406</b>	<b>440</b>
<b>SPECint95</b>	<b>N/D</b>	<b>3,8</b>	<b>3,31</b>	<b>5,61</b>	<b>6,2</b>
<b>SPECfp95</b>	<b>N/D</b>	<b>12,4</b>	<b>9,35</b>	<b>16,6</b>	<b>17,6</b>

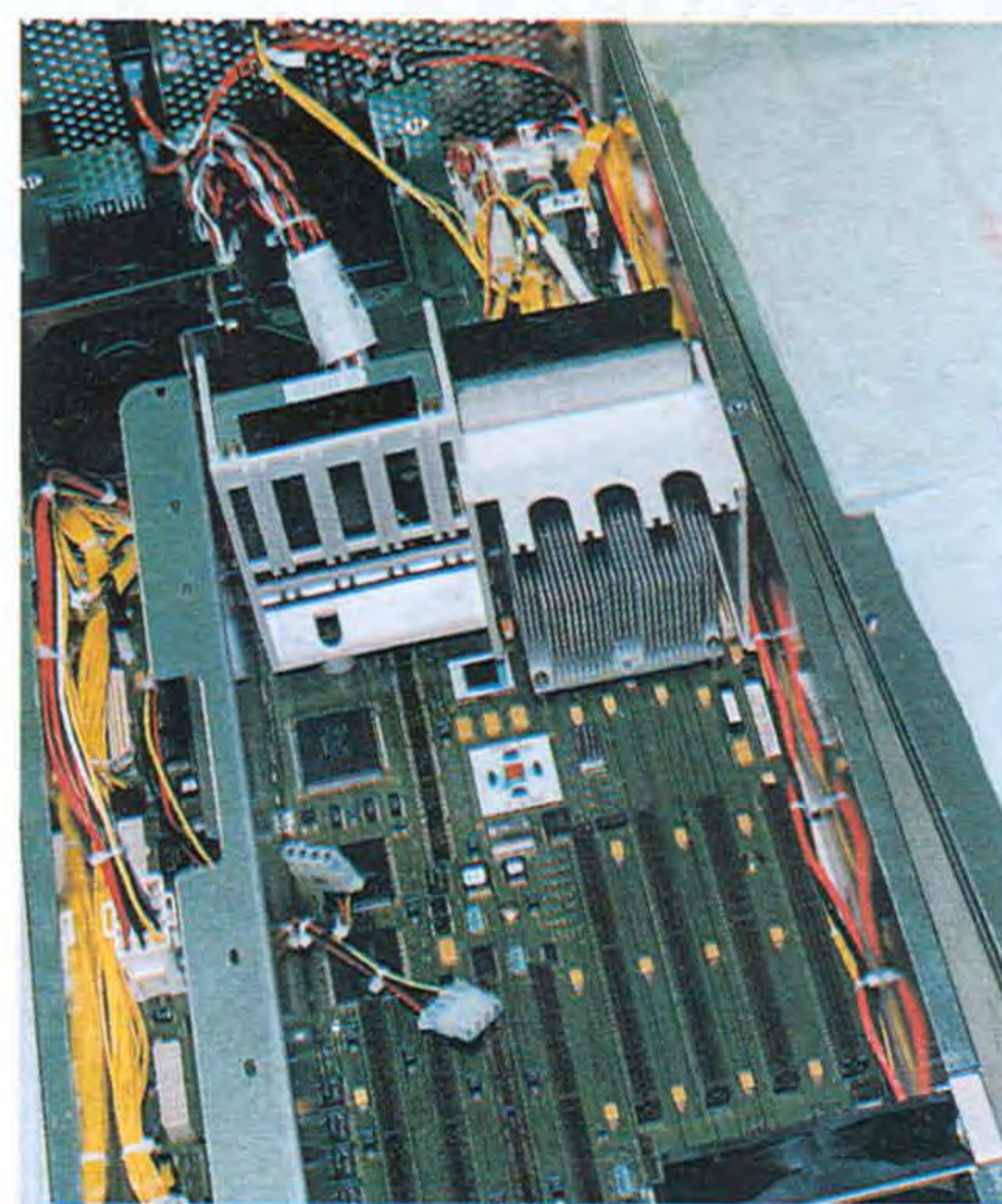
TPP, SPECint95 i SPECfp95 són mesures de benchmarks que permeten classificar els ordinadors per la seva potència. TPP ("Towards Peak Performance") és la resolució d'un sistema d'equacions lineal (LINPACK 1000x1000), optimitzat manualment per cada fabricant per obtenir la màxima potència de cada processador (més informació a <http://www.netlib.org>). Els SPEC són un conjunt de programes d'aritmètica entera (int) o de coma flotant (fp) que mesuren el rendiment relatiu de cada processador; per exemple, el thin120 és 1,78 vegades (16,6/9,35) més ràpid que el thin2 a l'hora d'executar els benchmarks de coma flotant (més informació a <http://www.specbench.org>).

MB de memòria i l'altre de 1024 MB—, dos processadors thin de 256 MB de memòria i 8 processadors thin de 128 cadascun. Aquest sistema tenia una potència punta de 3,19 Gflop/s i el juny de 1995 va estar a la posició 377 en la llista TOP500, que elaboren Jack Dongarra i Erich Strochmaier de la Universitat de Tennessee (EUA) i Hans Meuer de la Universitat de Mannheim (Alemanya) i que classifica els 500 ordinadors més potents del món segons la màxima potència obtinguda ( $R_{max}$ ) en resoldre un sistema d'equacions lineals (LINPACK) que, en el nostre cas, era de 2,25 Gflop/s. El novembre del mateix any l'SP2 va desaparèixer de la llista.

La primera setmana de gener de

1996 va arribar el segon sistema de 32 nodes thin2 amb 256 MB de memòria per node, una màquina en què es va instal·lar una nova xarxa d'interconnexió dels processadors anomenada SP Switch, més ràpida que la High Performance Switch que interconnectava els nodes del primer sistema (de 80 a 300 megabytes/segon d'amplada de banda bidireccional) i evidentment encara més ràpida que una xarxa de tipus Ethernet (10 megabits/segon). Aquest segon sistema de 44 processadors tenia una  $R_{max}$  de 7,9 Gflop/s i va ocupar la posició 169 dels TOP500 al juny de 1996 i la posició 210 al novembre del mateix any. La instal·lació d'aquesta xarxa va ser una de les primeres experiències pilot a nivell mundial. L'ac-

Durant el trasllat de l'SP2 de la facultat de Biologia al seu actual emplaçament a l'edifici Annexus es va produir un incident: una de les caixes de l'SP2 va caure de la grua. Afortunadament la caixa només contenia cables, manuals i part de l'estructura externa de la màquina.



El calaix del Super Chip. El processador és a sota del dissipador, que es veu al fons.

tual SP2 té una  $R_{max}$  estimada de 13,94 Gflop/s i el mes de juny se sabrà quina posició ocupa en la llista dels TOP500.

A l'Estat espanyol hi ha actualment 28 sistemes SP2. A més de l'SP2 del CESCA, n'hi ha dos més que estan inclosos en els TOP500. En el rànquing del novembre passat el següent el departament d'Informàtica d'El Corte Inglés i La Caixa en el lloc 313 i 422 respectivament. El Corte Inglés posseeix un SP2 amb 28 processadors, una potència punta de 8,62 Gflop/s i un  $R_{max}$  de 6,40 Gflop/s, mentre que La Caixa en té un de 26 processadors, una potència punta de 6,92 Gflop/s i un  $R_{max}$  de 5,38 Gflop/s. Ambdós centres utilitzen aquesta màquina per a la gestió de dades.

## A G E N D A

### Aula de primavera

#### Introducció a la Supercomputació

26 de maig, de 10 a 13 h

M. Valero (Director del C<sup>4</sup>)

- Processadors superescalars
- Processadors vectorials
- Sistemes multiprocessadors
- Avaluació de rendiment

#### Entorn de Supercomputació al C<sup>4</sup>

28 de maig, de 10 a 13 h

S. Moya (CESCA)

- Maquinari
- Compiladors, llibreries i altres eines
- Accés i ús dels recursos disponibles

#### Xarxes ATM (Asynchronous Transfer Mode)

2, 3, 4 i 5 de juny, de 17 a 20 h

J. Domingo i J. Solé (UPC)

- Conceptes bàsics d'ATM
- La capa d'adaptació a ATM (AAL)
- Classes de servei portador (CBR, VBR, ABR, UBR)
- Interfície usuari-xarxa (UNI)
- Interconnectivitat amb ATM

#### Paral·lelització per Arquitectures amb Memòria Distribuïda

10 i 11 de juny, de 10 a 13 i 16 a 19 h

E. Ayguadé i S. Girona (CEPBA)

- Introducció a la paral·lelització i distribució de dades
- Model de programació HPF (High Performance Fortran)
- Model de programació PVM (Parallel Virtual Machine)
- Sessions pràctiques

Per a més informació podeu adreçar-vos a Clara Torreblanca:  
Tel.: (93) 205 64 64  
Fax: (93) 205 69 79  
E-mail: clara@cesca.es

## LA NATIONAL SCIENCE FOUNDATION CONCENTRA LES SEVES AJUDES I APOSTA PELS RECURSOS COMPARTITS

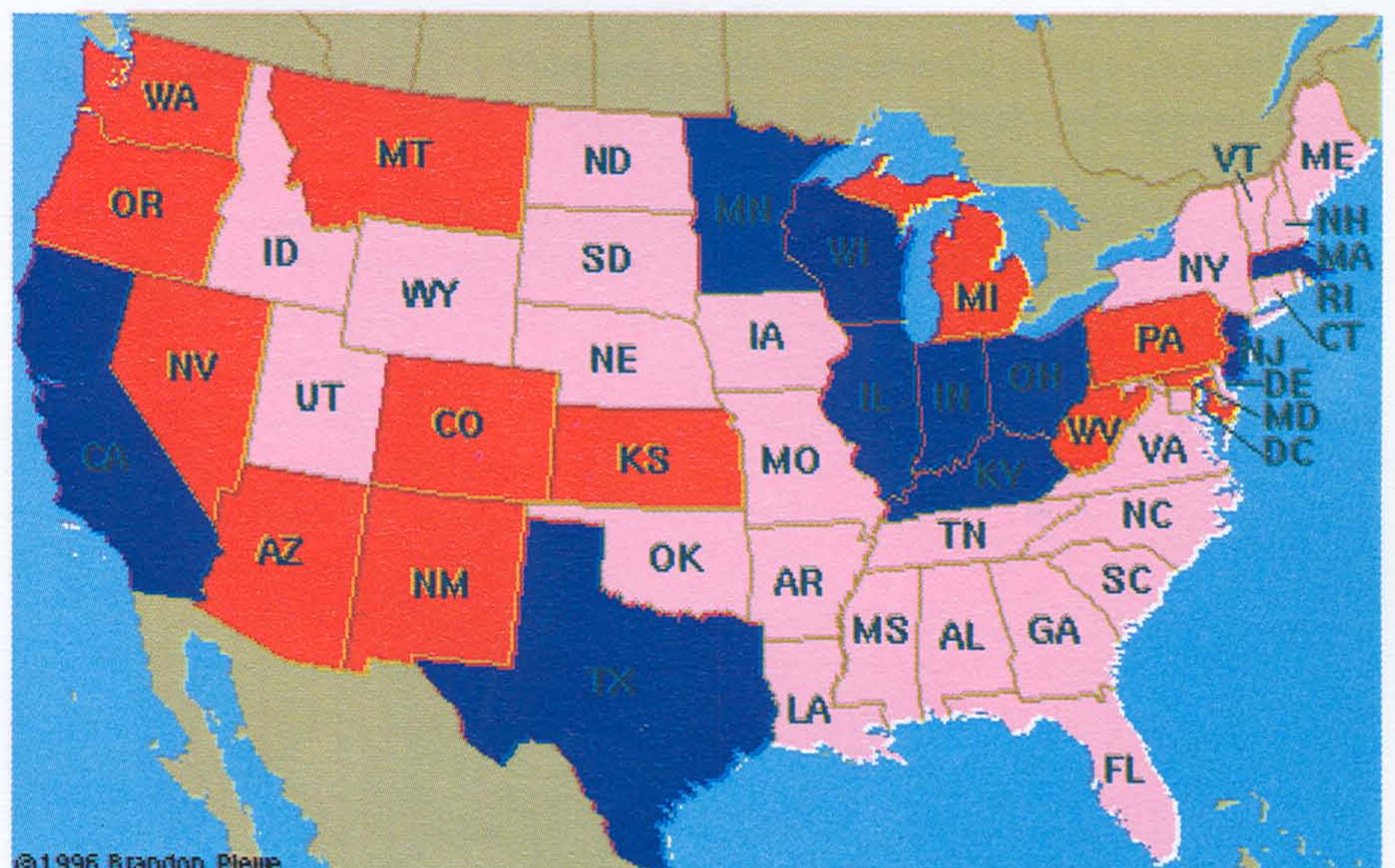
# "Partnership": Cap a un nou concepte de supercomputació als Estats Units

*El món de la supercomputació als EUA està patint un canvi: de l'antiga idea de "centre" com a abastador de serveis computacionals s'està evolucionant cap al concepte de "partnership". Aquesta nova paraula implica també una nova filosofia d'intercanvi i aprofitament comú de recursos que permeti els Estats Units continuar avançant com a capdavanter en el camp de la supercomputació.*

La National Science Foundation (NSF) ha decidit concentrar els ajuts destinats a la supercomputació en només dos dels quatre centres de supercomputació que els rebien fins ara. La National Computational Science Alliance (NCSA) a Illinois, sorgida del National Center for Supercomputing Applications (també NCSA), i el National Partnership for Advanced Compu-

tational Infrastructure (NPACI) de San Diego, sorgit del San Diego Supercomputer Center (SDSC), són els afortunats que, a partir de l'1 d'octubre, i per un període de 10 anys, rebran les ajudes de la NSF i posaran a prova la nova idea de "partnership" proposada per la NSF i que neix amb la intenció de crear un conglomerat nacional de computació.

### Distribució dels centres que col·laboren amb NPACI i NCSA



El mapa inclou els estats que tenen institucions que ja s'han compromès a col·laborar amb NPACI (en vermell), i els estats que tenen institucions amb representants al Comitè Executiu de NCSA (en blau). Els 'partners' definitius de NCSA estan encara per definir. El color violeta indica els estats que tenen institucions o professionals vinculats tant a NPACI com a NCSA.

D'altra banda, el Pittsburgh Supercomputing Center (PSC) i el Cornell Theory Center (CTC) han quedat fora del nou programa de la NSF anomenat Partnerships for Advanced Computational Infrastructure (PACI) i el suport els serà retirat progressivament en els propers dos anys. Aquesta decisió, però, no els ha desanimat i tots dos pensen continuar la seva activitat en el món de la supercomputació en el futur.

El PACI és innovador no només per la concentració de les ajudes, sinó també perquè planteja una concepció nova dels centres que ofereixen serveis de supercomputació als Estats Units. Per primer cop s'introdueix el terme "partnership" que podria traduir-se com a "acoblament" o "aliança" i que té una visió de la supercomputació que va més enllà de l'oferiment d'un servei a aquelles empreses o institucions que el necessitin.

NPACI i NCSA són, segons la NSF, els centres que han fet propostes més brillants i els que poden mantenir el liderat dels Estats Units en el camp de la supercomputació.

El centre d'Illinois, NCSA, vol desenvolupar *software* i d'altres tecnologies adaptades a les necessitats dels investigadors, especialment en el

camp de la física i el càlcul per crear una infraestructura nacional d'informació que permeti fer més fàcil la recerca. El centre, a més, té previst comprar nou *hardware* que pugui donar un millor servei als investigadors. Tot i que la llista definitiva dels seus "partners" encara no s'ha donat a conèixer, aquest centre establirà aliances amb l'empresa del sector farmacèutic Eli Lilly, amb l'Argonne National Laboratory, i col·laborarà també amb 10 universitats dedicades a la recerca.

El National Partnership for Advanced Computational Infrastructure centrarà les seves investigacions en les àrees d'enginyeria, ciències moleculars, neurociència i ciència dels sistemes de la Terra. A més, els professionals del camp de la medicina podran beneficiar-se de les investigacions del centre en les àrees de biologia i farmàcia. La proposta de NPACI involucra un total de 37 socis, que ja s'han fet públics, entre universitats, centres de recerca i laboratoris nacionals.

Aquests dos centres rebran de la NSF 29 milions de dòlars (4.233 milions de pessetes) cadascun durant el primer any i un total de 170 milions (24.814 milions de pessetes) en els propers cinc anys. Si un cop passat aquest període s'han aconseguit els objectius establerts, les ajudes es prolongaran per a cinc anys més. La decisió de concentrar les ajudes en dos centres implica eliminar progressivament el suport als altres dos, que rebran 11 milions de dòlars (1605 milions de pessetes) cadascun en els propers dos anys perquè continuïn fent funcionar el seu maquinari, però no per a comprar nous equips.

El PACI és el programa successor de la iniciativa d'establir una xarxa de cinc centres de supercomputació (dels que fins ara en quedaven quatre) que la NSF va crear el 1986 amb un objectiu bàsic: facilitar l'accés als supercomputadors a tots els investigadors del país. Amb el temps s'ha comprovat que aquesta estructura inicial de centres aïllats només era satisfactò-

ria per proporcionar serveis en un àmbit local i restringit, i s'ha vist que individualment els centres no podien continuar avançant. Ara, el PACI va més enllà i ha nascut amb la voluntat de crear una política global nacional que faciliti el desenvolupament de la supercomputació a tot el país mitjançant un seguit d'acoblaments. Així, NPACI i NCSA són només els dos nuclis d'una xarxa que s'estendrà a tots els Estats Units mitjançant els "partnerships" que aquests dos centres establiran amb un seguit d'universitats i institucions diverses en tots els estats.

Els dos centres s'han afanyat a confirmar que continuaran oferint els serveis que donaven fins ara a la comunitat científica però, a més, tenen nous plans que inclouen el desenvolupament d'un entorn de metacomputació

nacional on els sistemes de HPC, els servidors de dades i d'altres equips a tot el país s'uniran en una xarxa per abordar problemes que d'altra manera serien intractables.

Aquesta nova manera de fer també suposarà avenços en el camp de l'educació i la formació i molts esforços aniran destinats a augmentar la participació de minories i grups reduïts i a fer més accessible la supercomputació a professionals com els científics socials que tradicionalment no estan en l'entorn de HPC.

El concepte de "partnership" difereix bastant de la filosofia operant de "centres" de supercomputació, però el canvi d'una a l'altra no ha estat bruscat.

A més de "millorar l'accés a les instal·lacions de supercomputació als científics i enginyers americans" (objectiu primer d'un "centre"), tots quatre centres havien anat establint relacions més o menys formals amb d'altres institucions acadèmiques o instal·lacions de recerca i firmes privades per unir esforços i ampliar els recursos i coneixements a l'abast. És per això que, ara, la idea de "partnership" com a conglomerat computacional per a tot el país ha estat formalment acceptada per la NSF.

### Les ajudes s'atorguen per a cinc anys i són renovables

Estat	NPACI	NCSA
Arizona	1	
California	17	1
Colorado	1	
Illinois		4
Indiana		1
Kansas	1	
Kentucky		1
Maryland	2	
Massachussets	1	2
Michigan	1	
Minnesota		1
Montana	1	
Nevada	1	
New Jersey	1	1
New Mexico	2	
Ohio		1
Oregon	1	
Pennsylvania	1	
Texas	3	1
Virginia	1	
Washington	2	
Wisconsin	1	1

## PROGRAMES DE MOBILITAT

**R. Matteazzi** de la **Universitat de Padova** ha estat convidat per Eugenio Oñate del CIMNE (UPC) per treballar en el projecte titulat *Parallel Partitioned Solution of Coupled System* des del 15 de gener fins al 15 de març de 1997.

**Cornelis de Graaf** de la **Universitat de Groningen** (Països Baixos) ha estat convidat per Francesc Illas del departament de Química Física de la UB per treballar en el projecte titulat *Estudi ab initio dels efectes col·lectius en acoblaments magnètics en compostos de metalls de transició* des de l'1 de febrer fins al 31 de març de 1997.

**Elena Mosso** del **Politecnico di Torino** (Itàlia) ha estat convidada per Eugenio Oñate del CIMNE (UPC) per treballar en el projecte titulat *CFD Methods for Ship Hydrodynamics* des de l'1 de febrer fins a l'1 de maig de 1997.

**Massimo Brambilla** del **Politecnico di Bari** ha estat convidat per Ramon Vilaseca del departament de Física i Enginyeria Nuclear de la UPC per treballar en el projecte titulat *Transverse Effects in a Cascade Lasser: Pattern Interaction* des del 15 al 25 de febrer de 1997.

**Yuri Ossetski** del **Kurchatov Institute** (Rússia) ha estat convidat per Anna Serra del departament de Matemàtica Aplicada de la UPC per treballar en el projecte titulat *Diffusion and Phase Transformations in Iron-Based Alloys* des de l'1 de març fins al 30 de juny de 1997.

## ENTREVISTA

**ANTONI GIRÓ,**  
**DIRECTOR GENERAL DE RECERCA**

# “EL CESCO i el CEPBA, coordinats a través del C<sup>4</sup>, estan donant una bona resposta a la necessitat dels investigadors i de les empreses”

*Antoni Giró és director general de Recerca, vicepresident de la CIRIT i president del C<sup>4</sup>, de la Comissió Permanent del CESCO i de la Societat Catalana de Física, filial de l'Institut d'Estudis Catalans. Coneixedor de les aplicacions de la simulació per ordinador i dels projectes de la Unió Europea, en alguns dels quals participa (SCIENCE, HCM), Antoni Giró remarca l'esforç que s'ha dut a terme per tenir una gran instal·lació en supercomputació com la que representen el CESCO i el CEPBA.*

■ **TERAFLOP** A l'octubre de 1995 es van coordinar les activitats dels dos centres de supercomputació catalans, el CESCO i el CEPBA. Quin balanç en fa?

**ANTONI GIRÓ** Certament, el balanç és positiu. Crec que els objectius inicials de voler apropar el Centre de Supercomputació de Catalunya i el Centre Europeu de Paral·lelisme de Barcelona mirant d'optimitzar recursos humans i materials s'han aconseguit. A més a més, també hem assolit dinamitzar el centre reforçant-lo de cara a la supercomputació del futur.

**TERAFLOP** Com és que es va preferir signar un conveni de col·laboració entre els dos centres en comptes de fusionar-los?

**A.G.** El CESCO i el CEPBA són dos centres amb entitat jurídica pròpia, que van néixer de manera molt diversa. Intentar coordinar els dos centres era més fàcil d'aconseguir que canviar l'estructura legal de cadascun dels centres, sobretot perquè en el CESCO participen la Generalitat, la FCR, 7 uni-

versitats... Això és una estructura complexa. El CEPBA, com a iniciativa conjunta de la universitat i la CICYT, va néixer per donar servei a totes les universitats i és un centre d'excel·lència en el tema del paral·lelisme. Integrar aquests dos centres es podrà aconseguir després d'un període d'aproximació física dels dos centres. De totes maneres, jo crec que és bo mantenir els dos centres: un centre de serveis en supercomputació vectorial o paral·lela com el CESCO i un centre de recerca en paral·lelisme.

**TERAFLOP** Amb la coordinació dels dos centres, s'ha aconseguit optimitzar els recursos públics, és cert, però el que ens preocupa és que la suma d'actius dels quals disposen els dos centres disminueixi a causa de les restriccions pressupostàries que estem patint...

**A.G.** El que és cert és que l'esforç econòmic que es va fer fa cinc anys en supercomputació a Catalunya no es podrà repetir. Vam entrar a la supercomputació amb un esforç econòmic

important ja que les màquines eren molt cares. Ara les màquines són cada cop més barates i més potents. Per tant, es pot obtenir màquines molt bones amb recursos més modestos. La coordinació dels dos centres és positiva també en aquest sentit ja que es va fer abans que s'apliqués la contenció pressupostària. Tenim una gran instal·lació a Catalunya. La UE ens ho ha confirmat. Hem de poder continuar amb els programes de mobilitat (HCM, TMR) i gestionar projectes europeus com el PACOS o el PCI-II, que han estat un suport per a Catalunya i per grups de recerca de les empreses i de la resta de l'Estat. Crec que tant el CESCA com el CEPBA, coordinats ara a través del C<sup>4</sup>, estan donant molt bona resposta a la necessitat dels investigadors i de les empreses.

**TERAFLOP** Una de les característiques dels centres de supercomputació catalans és que han estat sempre finançats per institucions sense comptar amb ajuts europeus, cosa que no passa a la resta de l'Estat. Hi ha alguna perspectiva perquè això canviï?

**A.G.** Els fons FEDER, fons estructurals, es poden utilitzar ara en camps en què abans no era possible. El que passa és que la demanda de fons FEDER és molt elevada i hem de mirar d'optimitzar i prioritzar els recursos que tenim. De tota manera, crec que el CESCA no tindrà la necessitat d'utilitzar fons FEDER per mantenir les màquines que es necessiten.

**TERAFLOP** Què pensa del fet que els grups d'investigadors hagin de compartir una part dels costos de la recerca?

**A.G.** Penso que és positiu que l'investigador s'adoni que els recursos són cars i no són infinits.

Per tant, és positiu que aquest hagi de prioritzar els càlculs que fa perquè li suposen un cost econòmic. La política que s'ha endegat perquè el temps consumit de CPU tingui un cost per a l'investigador també és molt positiva i pedagògica. A més, els preus són suficientment assumibles i sempre han de

**Els recursos són cars i no són infinits**



JORDI PARETO

“Els objectius inicials de voler apropar el CESCA i el CEPBA mirant d'optimitzar recursos humans i materials s'han aconseguit”, afirma Antoni Giró.

permetre que a l'investigador li surti més a compte utilitzar aquestes instal·lacions que no pas recursos propis. Es tracta de buscar un equilibri entre el que els facturem i el que els oferim com a gran instal·lació en supercomputació.

**TERAFLOP** El CEPBA ha estat seleccionat com un dels 22 TTN (Technology Transfer Node) en computació d'altres prestacions per la Unió Europea. Com creu que la CIRIT pot ajudar a fer aquesta transferència en un sector on no hi ha gaire demanda industrial?

**A.G.** El problema de la demanda industrial rau en el tipus d'indústria del qual parlem. A Catalunya predomina la petita i mitjana empresa, però hi ha algunes grans empreses en sectors com l'alimentari o el farmacèutic, en els quals les necessitats de càlcul per fer recerca poden ser importants. El

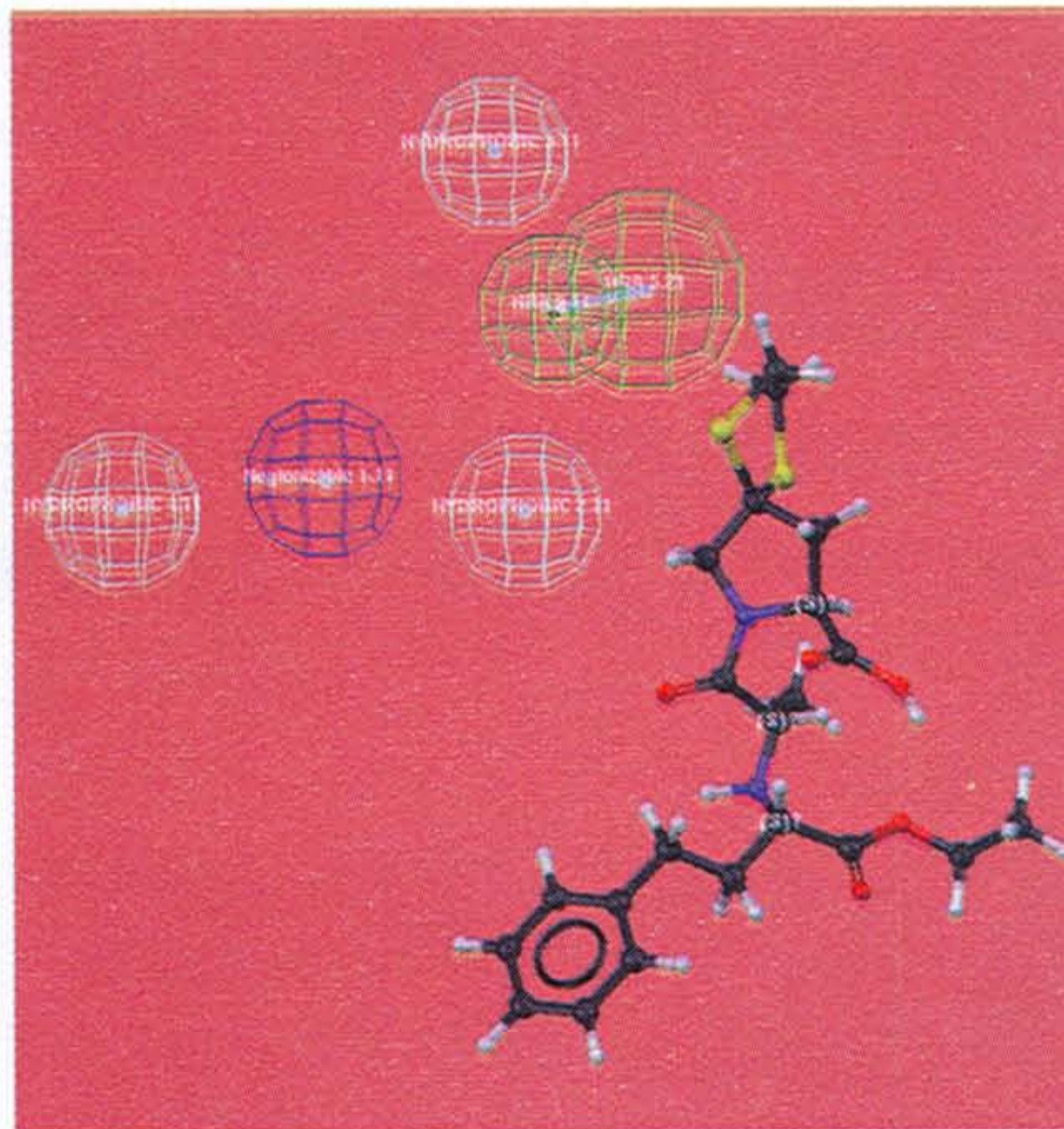
CESCA podria cobrir perfectament aquestes necessitats. S'han de buscar maneres de crear alguns ponts d'unió. Ja s'han fet algunes accions de col·laboració com per exemple *software* per a cerca de molècules que interessin tot el sector quimicofarmacèutic i que en lloc d'estar en cada indústria està disponible per a tot el sector gràcies a un acord en el qual també ha participat la CIRIT [vegeu article sobre Catalyst a la pàgina 12]. Crec que això demostra que es pot donar servei a l'empresa i optimitzar recursos del propi centre alhora. De totes maneres, hem de continuar buscant en cada cas a quines empreses ens podem dirigir i amb quines utilitats. És cert també que, moltes vegades, les empreses desconeixen les possibilitats de la Universitat i de centres de suport com aquest. L'important, però, és que es vagin fent projectes. En els últims anys s'han realitzat experiències molt positives amb empreses, la qual cosa fa pensar que com més es coneix el servei de supercomputació més utilitzen les empreses les facilitats que se'ls donen.

## LA PORTADA

### Noves possibilitats en el disseny de fàrmacs assistit per ordinador

**E**l CESCA és la seu del nou servei de cerca de compostos d'interès farmacològic en bases de dades d'estructures químiques tridimensionals. Aquest servei, adreçat a les empreses farmacèutiques i emmarcat dins les activitats de la Xarxa de modelització de molècules bioactives, està ubicat a l'edifici Annexus i consta d'un programa gràfic ("Catalyst") per definir i cercar farmacòfors en bases de dades 3-D (Derwent, BioByte, NCI, Maybridge) que s'executa remotament en un servidor Indigo Impact del CEPBA.

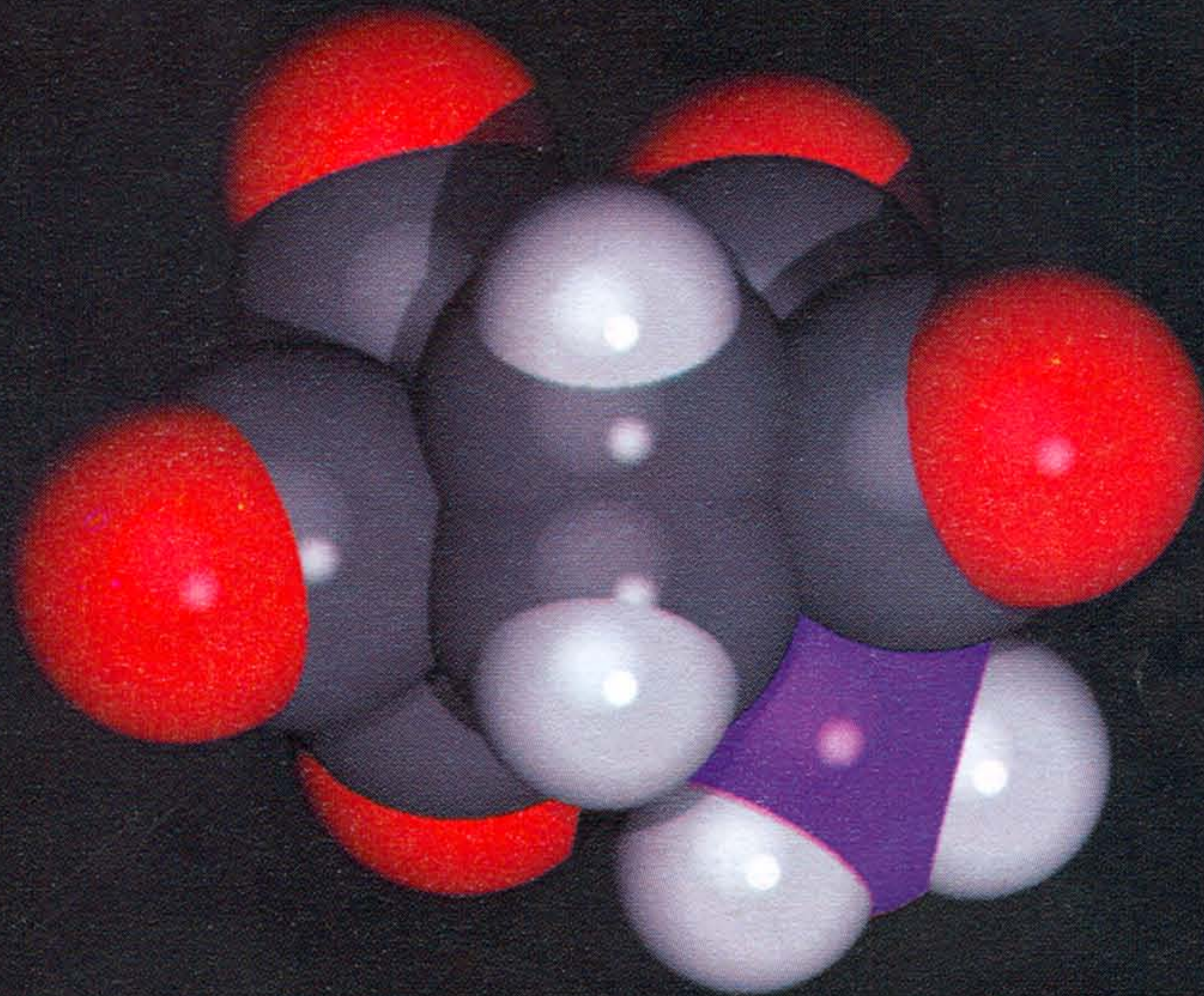
La iniciativa ha estat possible gràcies al suport de la CIRIT al projecte conjunt presentat pels Laboratoris Almirall, Dr. Esteve i Menarini, l'Institut Municipal d'Investigació



Mèdica (IMIM), la UPC i el CESCA.

El proper mes de juny està prevista la realització d'un *workshop* de 2 dies per a la difusió d'aquesta iniciativa. El primer dia es presentarà el servei i el segon farà èmfasi en les metodologies de cerca, amb conferències i demostracions pràctiques a càrrec d'especialistes en el camp del disseny de fàrmacs assistit per ordinador (T. Howe, P. Willett, R. Hoffmann).

## F O T O / N O T Í C I A



*Imatge 'CPK' d'un compost organometàl·lic amb enllaç cobalt-cobalt. L'estudi estructural ha estat dut a terme pel grup del Dr. Miquel Àngel Pericàs (UB) amb el programa ADF a l'ordinador IBM SP2. Gràcies a l'ajut inicial del Dr. Vicenç Branchadell (UAB) i a la voluntariosa col·laboració del Dr. Pericàs es disposa d'una llicència de prova de l'ADF fins al 15 de juliol d'enguany.*

Edita

# CESCA

AMB EL SUPORT DE



Generalitat  
de Catalunya



FUNDACIÓ  
CATALANA  
PER LA  
RECERCA

Universitat de Barcelona

Universitat Autònoma  
de Barcelona

Universitat Politècnica  
de Catalunya

Universitat de Girona

Universitat Rovira i Virgili

Universitat de Lleida

CSIC

### TERAFLOP

#### DIRECTOR

Miquel Huguet

#### COORDINADORA

Alicia Martínez

#### REDACCIÓ

Anna Solana

Mònica Tudela

#### COL·LABORADORS

Eduard Ayguadé

Joan Cambras

Carles Gascón

Sara Moya

Caterina Parals

#### DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà & Associats

#### MAQUETACIÓ

Rosa Álvarez

### CESCA

Gran Capità, 2-4

08034 Barcelona

Tel. (93) 205 64 64

Fax: (93) 205 69 79

E-mail:

teraflop@cesca.es

DIPÒSIT LEGAL: B-33512-94

ISSN: 1134-6671