



Comprar i vendre sense barreres

- L'option Red mantindrà la seguretat de l'arsenal nuclear als EUA
- Top500: Tres centres de supercomputació de l'Estat a la llista
- Internet busca un nou ordre
- El paral·lelisme ajuda la indústria del vidre

■ Els avenços tecnològics d'aquesta dècada

han motivat que el mercat de la supercomputació, tradicionalment dominat pels reptes científicotècnics, s'hagi expandit cap a d'altres camps. Al TERAFLIP número 21 vam parlar sobre el suport a bases de dades paral·leles; al número passat vam comentar l'expansió cap a la realitat virtual; i en aquest, ens centrem en el comerç electrònic. Aquests seran els mercats dominants per al futur creixement dels supercomputadors.

La nostra experiència en aquests temes serà debatuda el proper 30 d'octubre a la Jornada Catalana de Supercomputació (JoCS 97). Aquesta jornada serà un fòrum on es recullin les experiències en la transferència de tecnologia i on s'analitzi el creixement del mercat de la supercomputació. L'objectiu és servir de base per a la discussió i reflexió sobre el paper de les tecnologies de computació d'alt rendiment, l'impacte que tenen en els camps científicotècnics i en la competitivitat de les empreses del país, i les perspectives i necessitats de futur. Si us plau, marqueu el 30 d'octubre a les vostres agendes.

Bones vacances!

Miquel Huguet, Ph.D.
director del CESCA

El CEPBA passa a tenir la màquina més potent de Catalunya

Tres centres de supercomputació de l'Estat als TOP500

La nova edició de la llista dels TOP500, feta pública el 19 de juny, inclou per primer cop 3 centres de computació d'altres prestacions de l'Estat: el Centre Europeu de Paral·lelisme de Barcelona (CEPBA), el Centre de Supercomputació de Catalunya (CESCA) i el Centro Informático Científico de Andalucía (CICA).

■ Els TOP500 és una llista 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). L'ordinador que encapçala la llista en aquesta darrera edició és l'ASCI Red d'Intel amb 7.264 processadors instal·lat el 1997 al Sandia National Laboratory a Albuquerque (EUA) amb un R_{max} de 1.068 Gflop/s.

El CEPBA ocupa la posició 283 de la llista amb l'Origin 2000 de 32 processadors comprat l'any 1997. El seu R_{max} és de 10,42 Gflop/s. Si es consideressin els 64 processadors que l'Origin 2000 té actualment la posició que ocuparia seria la 140.

L'SP2 amb 44 processadors del CESCA es situa a la posició 382 amb un R_{max} de 8,79 Gflop/s. Cal tenir en compte que aquestes dades són anteriors a l'actualització de l'SP2 que es va produir l'abril de 1997. Si

l'actualització s'hagués tingut en compte a l'hora d'elaborar les dades de la llista, l'SP2 del CESCA ocuparia ara la posició 195 amb un R_{max} de 14 Gflop/s.

L'Exemplar S-Class de Hewlett-Packard amb 16 processadors del CICA, per la seva banda, ocupa la posició 441 amb un R_{max} de 7,78 Gflop/s.

Puertos del Estado (EPPE) és la propietària de la quarta màquina de l'Estat inclosa en la darrera edició dels TOP500: un altre Exemplar S-Class amb 16 processadors que ocupa el lloc 476.

En aquesta darrera edició dels TOP500 han desaparegut les dues empreses comercials que apareixien a la llista del passat novembre: El Corte Inglés i La Caixa. A més hi ha entrat per primer cop el CICA i l'EPPE.

Evolució dels centres de l'Estat a la llista dels TOP500



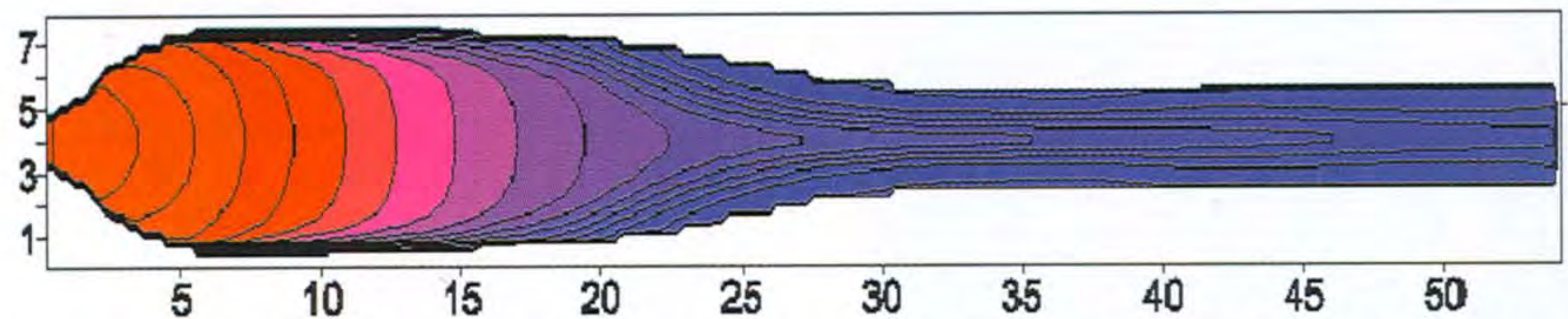
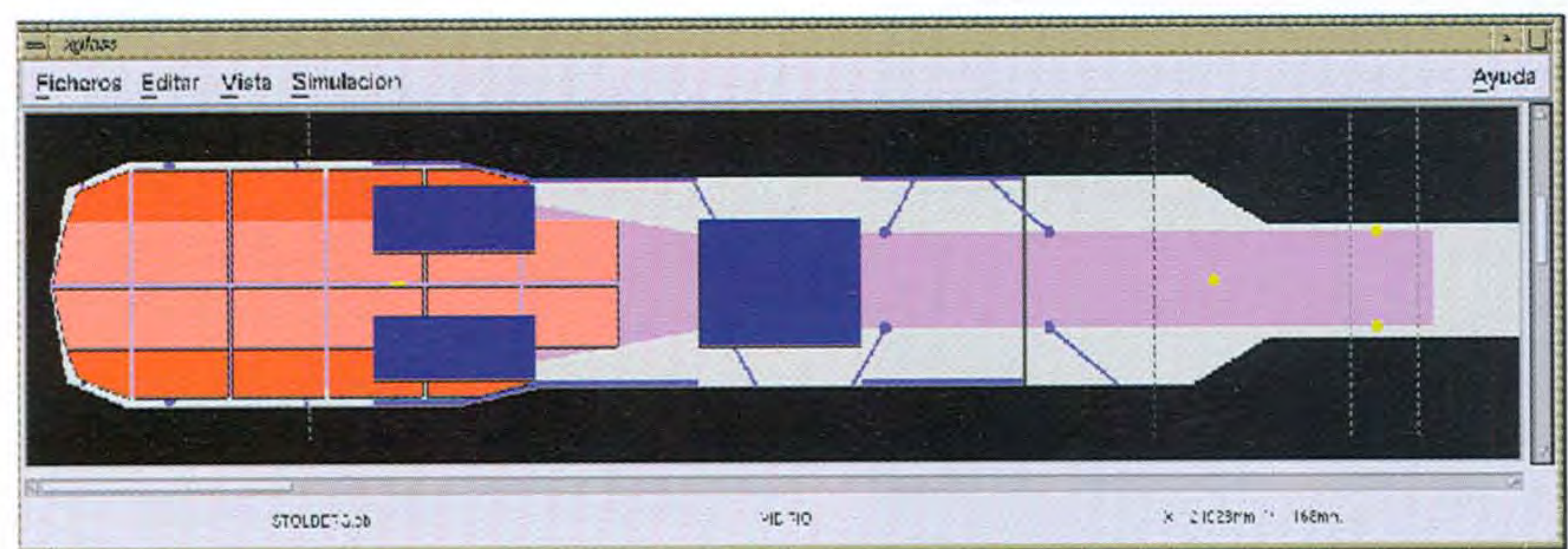
Aquest projecte té un clar benefici industrial ja que busca incrementar la capacitat de disseny de l'empresa i millorar la qualitat dels productes i la competitivitat de les empreses en el mercat. Els membres integrants del projecte són Cristalería, Española, S.A. (CESA), la Universidad de Cantabria (Grupo de Arquitectura y Tecnología de Computadores, Grupo de Ingeniería Oceanográfica y de Costas, Departamento de Ingeniería Geográfica y Técnicas de Expresión Gráfica) i el Centre Europeu de Paral·lelisme de Barcelona (CEPBA). Glasspar va començar l'abril de 1996 i està previst que s'acabi el setembre d'aquest any. El projecte s'emmarca dins el programa ESPRIT IV sota la iniciativa PCI-II i té un pressupost d'uns 32 milions de pessetes que assumeixen entre els diferents *partners*.

La planta de producció de CESA a Avilés (Astúries) és el lloc on s'ha seguit el procés: la pasta de vidre es conforma en un forn on s'escalfen i barregen els components fins a convertir-se en una massa líquida a més de 1.000°C que és abocada en un dipòsit que conté estany líquid. El vidre flota a sobre de l'estany, de densitat molt més gran que la del vidre, durant el procés d'estirament i solidificació de la fulla de vidre i és extret del dipòsit a menys de 700°C. Aquest fenomen d'arrossegament del vidre des del cap del dipòsit a la sortida d'aquest induïx uns corrents en el llit de l'estany líquid. Aquests corrents impliquen un transport de masses d'estany de diferents temperatures i per tant condicionen el mapa tèrmic final de les capes d'estany i de vidre. Aquest mapa tèrmic serà determinant en les condicions mecàniques, planimètriques i òptiques del vidre final.

El projecte vol obtenir un model matemàtic que modeli els fenòmens hidrodinàmics i tèrmics que determinen l'estat del dipòsit i la interacció entre les capes d'estany i de vidre. El model matemàtic desenvolupat pel Grupo de Ingeniería Oceanográfica y de Costas de la Universidad de Cantabria resol el problema físic mitjançant un sistema de diferències finites. Això suposa realitzar la discretització del domini geomètric del dipòsit en ele-

El paral·lelisme millora la competitivitat del sector del vidre

Glasspar és el nom d'un projecte desenvolupat a la Universidad de Cantabria, que persegueix un doble objectiu. D'una banda, es busca un model físic que descriu un procés concret de fabricació de vidre a escala industrial, i, de l'altra, es vol implementar aquest model en una plataforma paral·lela que permeti el modelatge de diversos prototipus de producció.



Disseny d'una planta fictícia de producció de vidre i mapa tèrmic per a una determinada làmina de vidre; aquestes dades gràfiques corresponen a l'entrada i la sortida del codi paral·lel GLASSPAR.

ments d'una grandària mínima establerta pels enginyers de CESA. Un cop obtingut el model matemàtic s'ha escrit un codi paral·lel que resol de forma eficient el problema anterior. L'avenç és important, sobretot si es té en compte que, abans que existís aquest codi, en una workstation moderna es trigava més d'una setmana per provar una geometria determinada. El problema, doncs, s'havia d'abordar mitjançant el paral·lelisme per guanyar temps.

Es va proposar implementar un algorisme paral·lel de memòria compartida en Fortran 90 sobre la SGI PowerChallenge que el grup té a Cantàbria. En aquest projecte també s'ha utilitzat la PowerChallenge i l'Origin 2000 del CEPBA per fer proves sobre l'escalabilitat de l'aplicació. L'SP2 del

CESCA també és usat per provar el model de programació basat en pas de missatges.

El projecte GLASSPAR, així, constitueix un entorn complet de disseny, anàlisi i verificació únic conegut en els ambients industrials de producció de vidre, ja que la resta de productors mundials mantenen molt confidencialment els seus treballs de millora de la qualitat en aquest camp.

El grup d'investigació està portant endavant la implementació d'una versió usant MPI amb l'objectiu que la portabilitat sigui màxima i pugui executar-se tant en màquines de memòria compartida com en xarxes de workstations o PC amb la finalitat de demostrar que el paral·lelisme és una opció vàlida, barata i assequible a qualsevol empresa amb gran necessitat de càlcul.

PROGRAMES DE MOBILITAT

Antonio Carrieri, del Dipartimento Farmacochimico de la Università di Bari (Itàlia), ha estat convidat per Ferran Sanz, de l'Institut Municipal d'Investigació Mèdica (IMIM, UAB), per desenvolupar el projecte *Anàlisi computacional de biomolècules*. Carrieri va arribar el 16 de juny i marxarà el 12 de setembre.

Evert Jan Baerends, del Department of Physical and Theoretical Chemistry de la Vrije Universiteit Amsterdam (Holanda), s'estarà entre nosaltres de l'1 al 31 de juliol. Baerends ha vingut convidat per Antoni Oliva, del Departament de Química de la UAB, per desenvolupar el projecte *Estructura i reactivitat de complexos metàl·lics: Aplicacions en síntesi orgànica i química ambiental*.

Gianfranco Pacchioni, del Dipartimento di Chimica Inorganica, Metallorganica e Analitica de la Università di Milano (Itàlia), desenvoluparà el projecte *Interaccions metall/òxid de metall* de l'1 al 31 de juliol, convidat per Francesc Illas, del Departament de Química Física de la UB.

Robert F. Tobler, de la Technical University of Vienna (Àustria), treballarà en el projecte *On-line Graphics System for the Creation of Photorealistic Images for Complex Scenes*. Tobler ha estat convidat per Xavier Pueyo, de l'Institut d'Informàtica i Aplicacions de la UdG, i s'estarà entre nosaltres del 7 de juliol al 26 de setembre.

Alan Gordon Chalmers del Department of Computer Science de la University of Bristol (Gran Bretanya) ha estat convidat per Xavier Pueyo de l'Institut d'Informàtica i Aplicacions de la UdG per treballar en el projecte *On-line Graphics System for the Creation of Photorealistic Images for Complex Scenes*. Gordon arribarà l'1 de setembre i marxarà el 22 del mateix mes.

El comerç electrònic canviarà els nostres hàbits

Comprar i vendre

Cada dia més sectors de la societat fan ús del comerç electrònic com a part normal de la seva activitat: béns de consum, serveis financers, agències de viatges... La supercomputació, com ja fa en d'altres àmbits, vol donar resposta a aquesta necessitat.

La supercomputació sempre ha estat dominada pel mercat científicotècnic. Els càlculs estadístics i la simulació exigeixen cada cop màquines amb més potència de càlcul i aquesta necessitat ha estimulat la indústria de la supercomputació.

No obstant això, els avenços tecnològics també han afectat aquesta indústria en passar de processadors especialitzats per segments de mercat en la dècada dels 80, a processadors estàndards usats en sistemes escalables que comprenen des de les estacions de treball fins als computadors massivament paral·lels aquesta dècada (vegeu Figura 1). Aquesta tendència continuarà en el

futur de manera que uns pocs processadors dominaran tots els segments del mercat: des del computador més econòmic, el network computer (NC), als sistemes més complexos.

La línia divisòria entre els supercomputadors i els computadors s'ha diluït i els sistemes que tindran la categoria dels primers seran aquells que estiguin configurats amb més memòria, més disc i xarxes d'interconnexió d'alta velocitat per resoldre grans reptes tecnològics que marcaran el futur creixement del mercat de la supercomputació. Els reptes no seran tan sols científicotècnics sinó també comer-

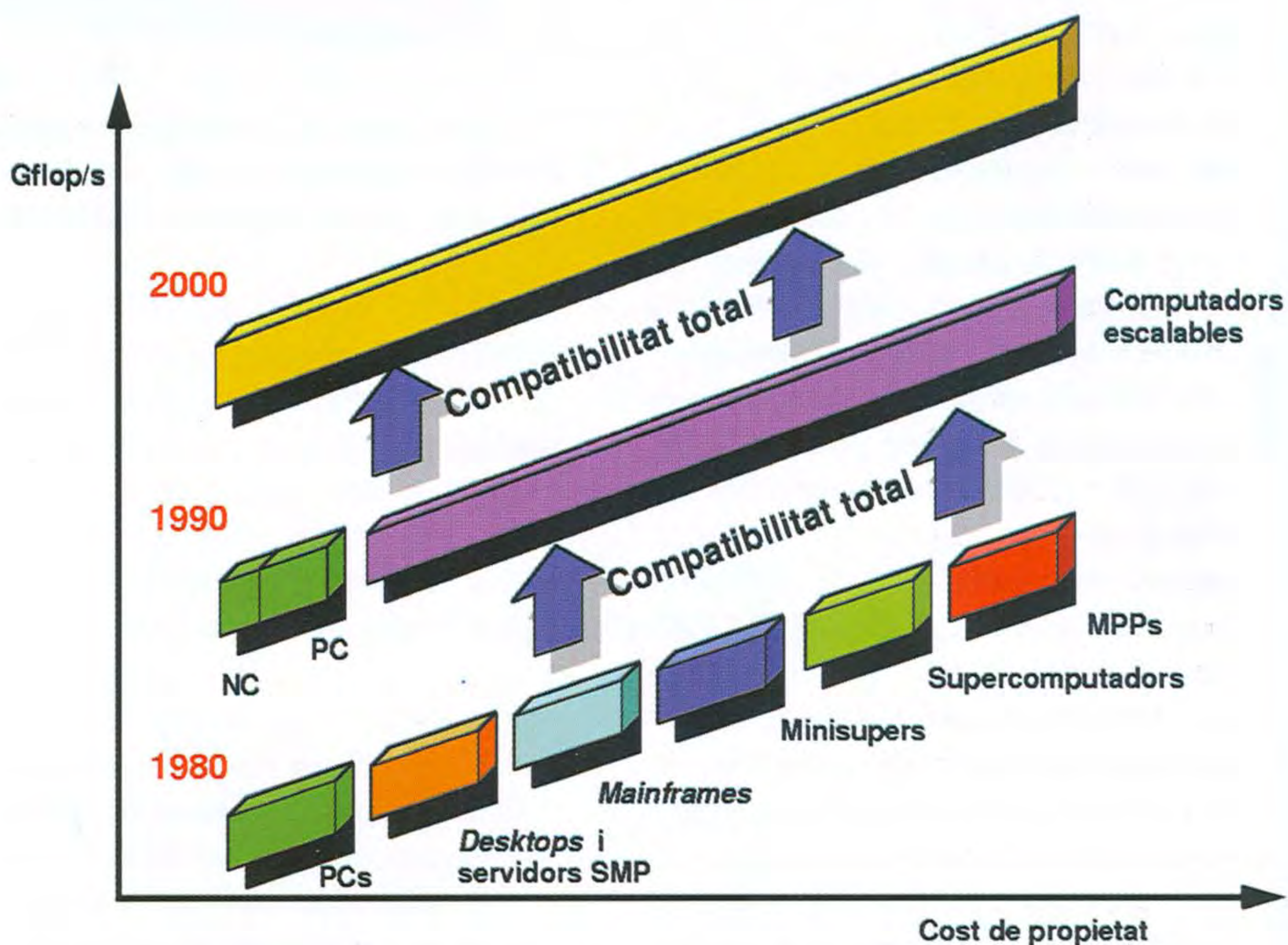


Figura 1. Els avenços tecnològics han permès la fabricació de processadors estàndards d'alta velocitat que s'usen en amplis segments del mercat: des de les estacions de treball amb un únic processador fins a les màquines massivament paral·leles. L'augment de la velocitat dels processadors ha ocasionat que s'obtingui millor cost/rendiment amb processadors estàndards que amb els processadors propietaris específics per a un segment del mercat.

sense barreres

		Temps	
		Sí	No
Lloc	Sí	Mercat tradicional	Màquines expenedores automàtiques
	No	Telemàrqueting	Comerç electrònic

Figura 2. L'evolució de la logística de compra-venda: del mercat tradicional al mercat electrònic.

cials, com les bases de dades paral·leles i el comerç electrònic.

Durant segles el comerç s'ha basat en el fet que el comprador i el venedor es trobin al mateix lloc i al mateix temps per a realitzar la seva transacció econòmica (vegeu Figura 2).

Des dels anys 70, els negocis també s'han pogut fer telefònicament de manera que el comprador i el venedor estiguessin a llocs diferents al mateix temps o a través de màquines expenedores automàtiques, al mateix lloc però en un temps diferent.

En l'actualitat, Internet (vegeu Figura 3) fa que les transaccions es puguin realitzar a qualsevol lloc i en qualsevol temps. Actualment hi ha uns 23,4 milions de llars interconnectades, majoritàriament als EUA, que donen entrada a uns 55 milions d'usuaris que poden esdevenir compradors virtuals! Es calcula que a l'any 2000 hi haurà uns 66 milions de llars connectades a Internet de manera que uns 550 milions d'usuaris podran realitzar les seves transaccions electrònica-

Catalunya ha estat pionera en l'ús del comerç electrònic amb la creació de la Universitat Oberta de Catalunya que ofereix un campus virtual als seus estudiants (en contrast al model tradicional educatiu on el professor i l'alumne han de coincidir en espai/temps). Com a reconeixement al seu lideratge, la UOC va rebre el premi Bargermann Challenge el passat mes de gener atorgat per la Unió Europea (vegeu TERAFLOR número 21).

De la mateixa manera, en multitud d'altres sectors (béns de consum, serveis financers, agències de viatge, publicitat, etc.), el comerç electrònic obrirà noves possibilitats de negoci per a les empreses. Per això, la majoria d'empreses estan construint les seves pròpies pàgines web per anunciar els seus productes. Si es consideren les empreses del Fortune 500, mentre l'any 1995 només n'hi havia

un 34% amb web, l'any 1996 un 80% en tenien, malgrat que només un 5% permetien fer-hi transaccions.

Un bon exemple és la llibreria Amazon de Seattle (WA, EUA). Aquesta llibreria virtual té 2,5 milions de llibres que els internautes poden

adquirir còmodament a qualsevol hora del dia des de casa. Realment només disposa d'uns 400 llibres en existència per ser distribuïts directament; els altres seran enviats al comprador des de la mateixa editorial. Amazon ofereix un mínim d'un 10% de descompte i fins a un 40% per als llibres més venuts, però a més ofereix un servei d'informació sobre els llibres que estimulen la visita al seu web per conèixer les últimes novetats i també ofereix una comissió (8%) a d'altres webs que s'apunten al seu

per a la compra de llibres. L'èxit s'ha traduït en una facturació de 16 milions de dòlars l'any 1996, 50 milions de pessetes per empleat amb una plantilla de 48 treballadors (principalment programadors i escriptors).

D'altres empreses que han confirmat l'èxit de les vendes per Internet són CISCO, que afirma que usant la xarxa de xarxes ha venut 1 bilió de dòlars l'any passat, i Dell Computer que ha venut per import 1 milió diari! Hi ha d'altres empreses que també han fet pública la seva aposta pel futur en aquest mercat. Un exemple és Wells Fargo que ha reconegut que la seva finalitat és aconseguir 1 milió d'usuaris l'any 1998 i estalviar-se 84 milions de dòlars ja que el cost de les transaccions electròniques és un 10% de les que es fan de manera tradicional.

**Actualment,
Internet fa que les
transaccions
es puguin realitzar
a qualsevol lloc
i en qualsevol temps.**

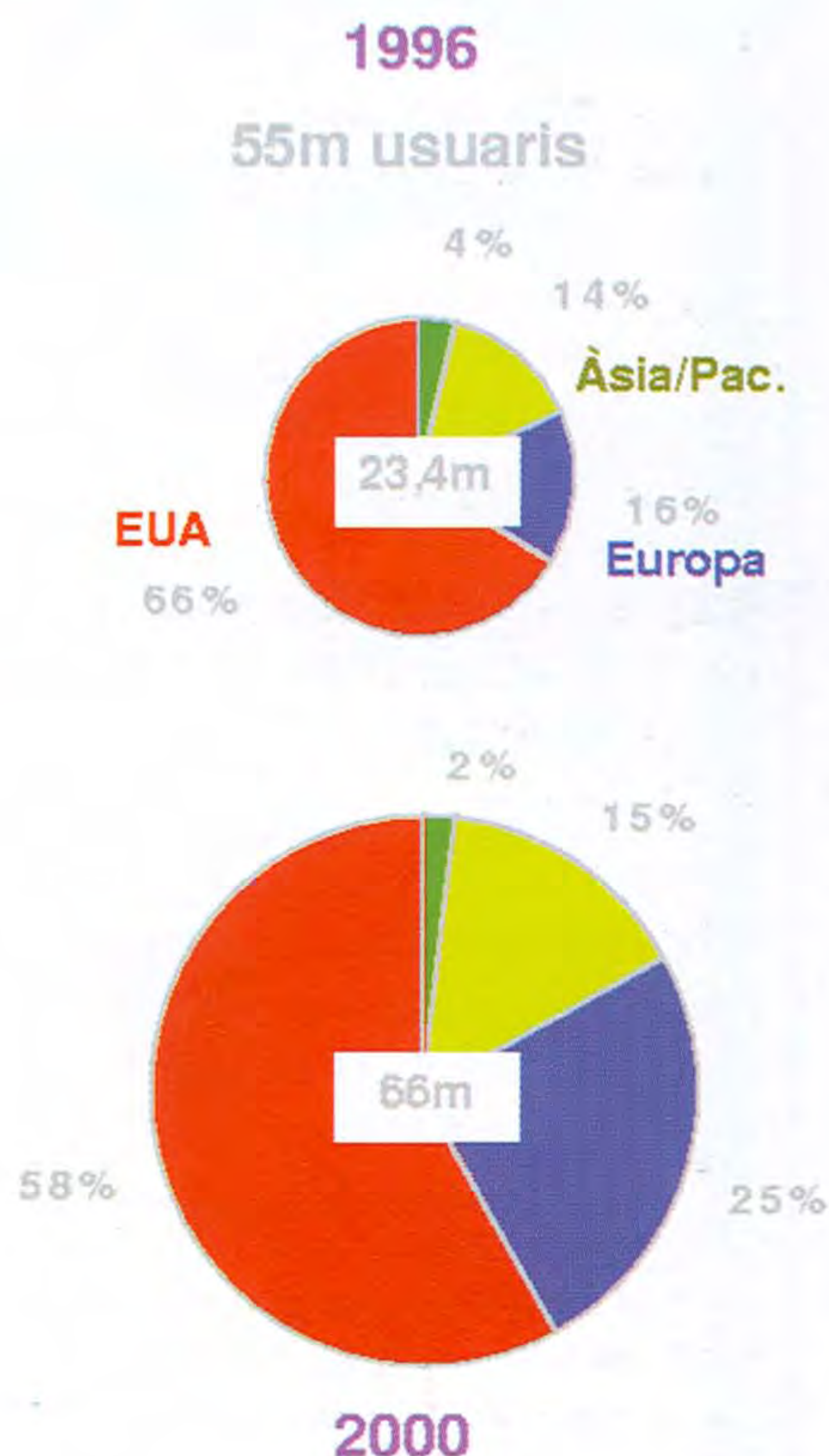


Figura 3. Creixement de la connectivitat a Internet.

Internet busca un nou ordre

La Internet del futur tindrà nous dominis, múltiples empreses amb llicència per registrar-los i és possible que reconegui dominis diferenciats a territoris amb identitat pròpia com Catalunya.

Actualment Internet compta amb 7 dominis (.com, .org, .net, .gov, .edu, .mil, .int) que organitzen els milions d'adreces que hi ha disponibles a la xarxa de xarxes. Però a partir de finals d'any l'ordre que venia regnant a Internet des de la seva creació el 1991 es trencarà amb la introducció de 7 nous dominis: .firm (per a negocis), .store (per a productes per vendre), .web (per a activitats relacionades amb la World Wide Web), .arts (per a cultura), .rec (per a activitats d'oci), .info (per a la informació) i

.nom (per a llocs individuals a la Web).

Els nous dominis volen adaptar Internet a la multiplicitat d'activitats que s'han anat incorporant a la xarxa amb el pas del temps i van ser aprovats per l'International Ad Hoc Committee (IAHC) a principis de 1997. L'IAHC és una coalició de participants de la comunitat d'Internet que treballen per satisfer els requisits per a l'augment dels Domain Name System (DNS) d'Internet.

La seva proposta es va discutir en una conferència feta els passats dies 29 i 30 d'abril i 1 de maig a Ginebra i va acabar amb 80 organitzacions signant o comproment-se a signar el nou Memorandum of Understanding (MoU) on generic Top Level Domains (gTLD), un document de compromís que vol posar ordre a Internet.

Els signants d'aquest nou acord de principis hauran de seleccionar d'ara en endavant a 28 "registradors" que seran les empreses que tindran autoritat per atorgar els nous dominis a tots aquells que ho sol·licitin. Aquesta decisió suposa un nou canvi en el món Internet, especialment als EUA: el trencament del monopoli que fins ara tirava endavant Network Solutions Inc (NSI) amb els tres dominis genèrics als EUA (.com, .org, .net). NSI tenia fins ara el dret exclusiu a atorgar adreces, però la National Science Foundation (NSF) ha anunciat que no renovarà amb la NSI el conveni que tenia signat des de 1993 i que s'acaba el proper mes de març. Així a partir d'ara les empreses que es dediquin a registrar competiran en una base global i els usuaris interessats podran mirar i triar per registrar-se amb aquell que els ofereixi més serveis i menys preu.

Però no tot està essent fàcil en el nou camí per on circula Internet. El Departament d'Estat dels EUA i la Comissió Europea ja han anunciat que no donaran suport a l'Internet Domain Name System MoU on gTLD signat per 57 organitzacions internacionals. El Departament d'Estat creu que el sistema de posar en circulació nous dominis no ha estat prou meditat. La Comissió Europea, per la seva banda, creu que l'IAHC no ha tingut en compte a la seva llista de candidats a prou representants de les nacions europees.

En la nova etapa d'Internet també és molt probable que tots aquells territoris amb identitat pròpia, com és el cas de nacions sense estat, colònies i d'altres territoris allunyats de les seves metròpolis, tinguin el seu propi domini. Catalunya es troba entre aquests territoris i per això grups com el Col·lectiu Català de Cibernetes (C3.ct) o el Domini-ct demanen que s'homologui l'identificatiu universal català sota l'abreviatura .ct a les llistes d'estandarització ISO/DIN número 3166 de codis per a la representació de països o bé que, en últim extrem, la IANA (Internet Assigned Numbers Authority) prescindeixi de les llistes ISO 3166 com a eina per registrar nous dominis perquè no s'adaptin a la realitat no estrictament geogràfica d'Internet.

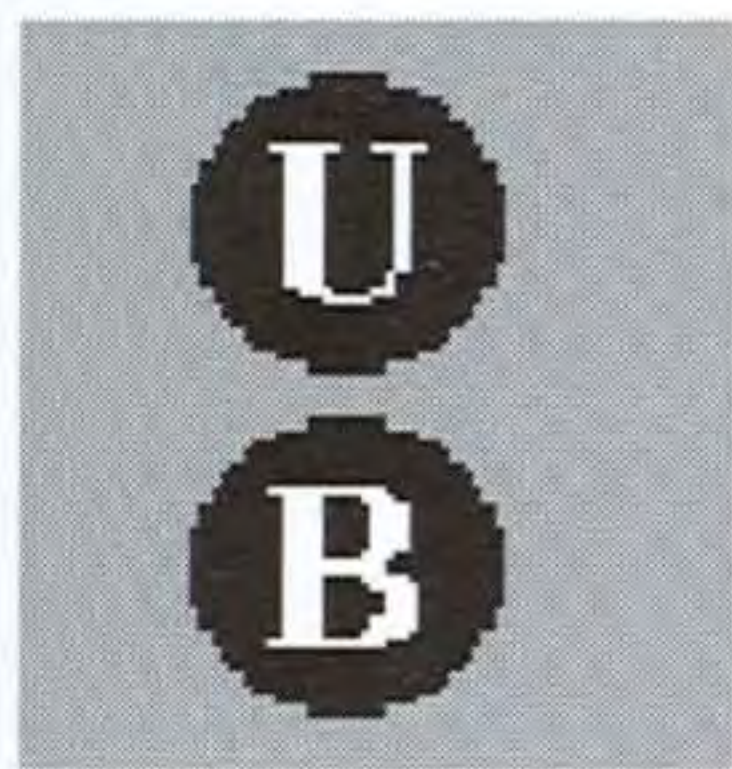
Internet: www.gencat.es/om/accsmet
INFOVLA: gencat.infocur/accsmet

- Història de Catalunya
- Els símbols nacionals i l'idioma
- Estatut d'Autonomia
- L'organització del territori
- Catalunya poble a poble
- Catalunya de lloc a prop

Salutació del president •
L'autogovern de Catalunya •
El Parlament de Catalunya •
Eleccions al Parlament •
El president de la Generalitat •
Consell Executiu o Govern •
L'Administració de la Generalitat •
Diari Oficial de la Generalitat •

La Generalitat de Catalunya

Estructura Electrònica de Molècules i Sòlids Inorgànics



“L’estructura cristal·lina i l’estructura electrònica, íntimament relacionades, determinen les propietats dels materials”

Santiago Álvarez

Cap del projecte: Santiago Álvarez Reverter (Departament de Química Inorgànica de la UB)

Equip investigador: Pere Alemany i Cahner, Antonio Buljan Hernández, Miquel Lluell i Marí, Antonio Rodríguez Fortea (Departament de Química Física de la UB). Gabriel Aullón López, Eliseo Ruiz Sabin, Xiang-Yang Liu, Ana Palacios Ruiz (Departament de Química Inorgànica de la UB).

Període: 1996-1999

Publicacions:

- "Chain Conformation and Metal-Metal Contacts in Dimers and Stacks of d_8 -ML₄ Complexes: Electronic Effects." *Chem. Eur. J.* 3, 655-664 (1997).
- "Towards the Prediction of Magnetic Coupling in Molecular Systems: Hydroxo- and Alkoxo- Bridged Cu(II) Binuclear Complexes". *J. Am. Chem. Soc.*, 119, 1297-1303 (1997).
- "Ab Initio Study of AlN and α -SiC (11 $\bar{2}$ 0) Surface Relaxation". *Phys. Rev. B*, 53, 4933 (1996).
- "On the Bonding Nature of the M-M Interactions in Dimers of Square-Planar Pt(II) and Rh(I) Complexes". *J. Am. Chem. Soc.*, 117, 7169 (1995).
- "Crystal Orbital Displacement Analysis of Weak Interactions in the Solid State. The Case of the Hofmann Clathrates". *J. Am. Chem. Soc.*, 116, 8207-8221 (1994).
- M. Lluell, P. Alemany, S. Alvarez, V. P. Zhukov, A. Vernes. "Electronic Structure and Bonding in Skutterudite-type Phosphides". *Phys. Rev. B*, 53, 10605 (1996).

El projecte que es desenvolupa actualment al nostre grup se centra en l'estudi teòric de l'estructura electrònica de molècules i sòlids inorgànics i de la seva relació amb l'estructura cristal·lina i les propietats físiques i químiques. Per assolir aquests objectius es fa ús de diversos mètodes de la química quàntica, que van des dels semiempírics (extended Hückel) fins als de tipus *ab initio* (Hartree-Fock, post-HF i DFT), tot intentant trobar relacions entre les estructures i propietats de molècules aïllades i de sistemes infinits (cadena, capes o sòlids) i proporcionar tant explicacions qualitatives com prediccions que puguin servir de guia als químics sintètics per intentar obtenir nous compostos amb les propietats desitjades.

Dins d'aquest ampli marc, els temes que estem estudiant poden agrupar-se en cinc apartats:

I) Interaccions metall-metall

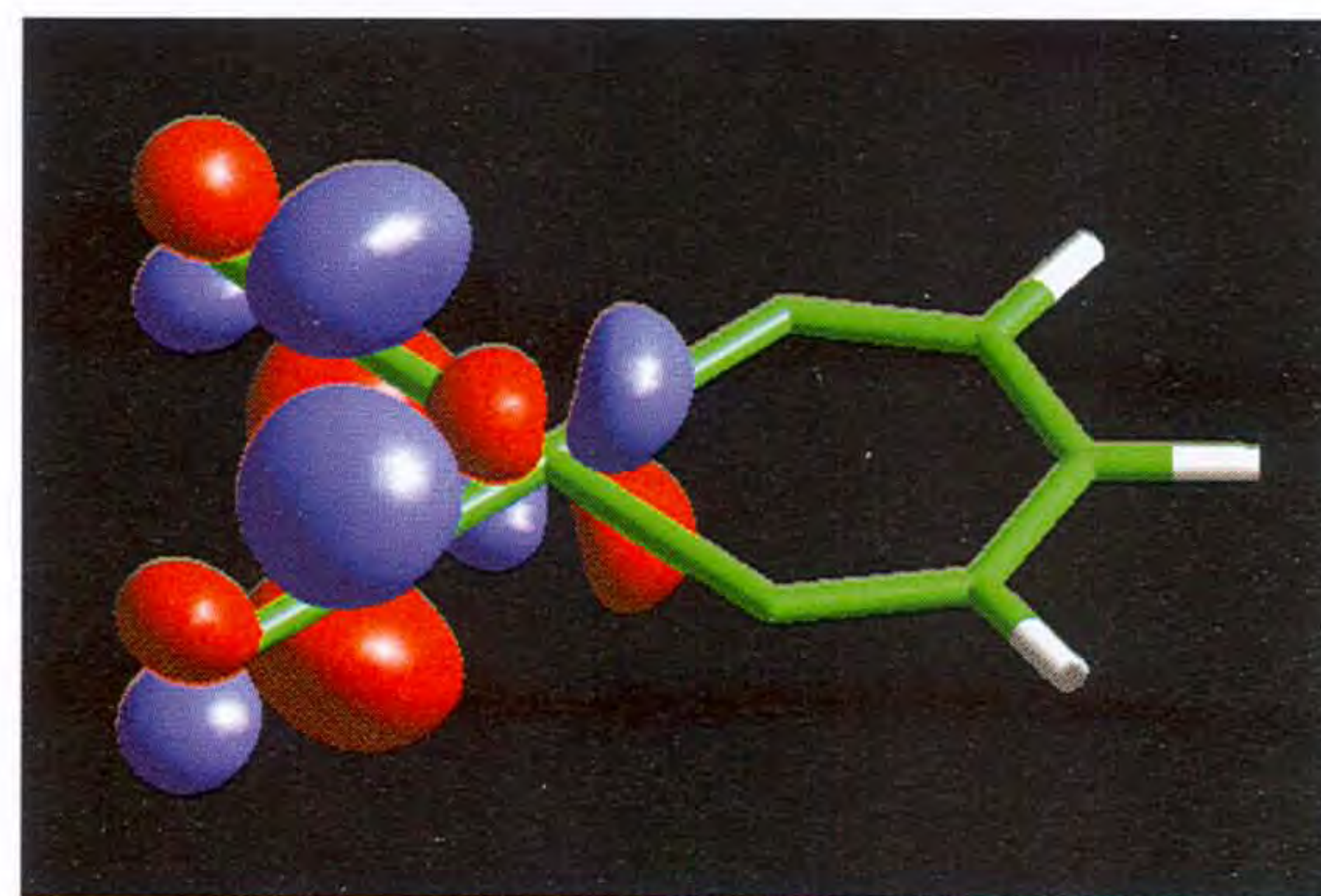
Estudi i descripció d'enllaços metall-metall heterodoxos (que no poden ésser descrits en termes d'una estructura de Lewis). Sistematització i descripció, des del punt de vista de la química quàntica, dels contactes curts entre metalls de transició amb configuració d_{10} observats en molts compostos, i també amb coordinació planoquadrada i configuració d_8 .

II) Correlacions magnetoestructurals en compostos de coordinació

Estudi quantitatiu de les correlacions que es troben entre l'estructura molecular i les propietats magnètiques en compostos polinuclears de metalls de transició. Hem proposat una nova metodologia que permet predir amb gran precisió l'acoblament magnètic en molècules formades per més de 100 àtoms.

III) Estudi d'interaccions febles a l'estat sòlid

En el nostre grup s'analitza la naturalesa, direccionalitat i selectivitat química de les interaccions en compostos on es



La topologia dels orbitals d'una molècula $Rh(acac)(CO)_2$ permet explicar el zig-zag de la cadena i l'orientació relativa de cadascuna d'elles al cristall.

troben molècules (hostes) dins les cavitats d'una xarxa estesa (amfitrió) que, encara que febles, són suficients en molts casos per induir canvis significatius en les propietats del sistema compost respecte dels seus constituents.

IV) Estructura i propietats elèctriques de compostos a l'estat sòlid

Treballs encaminats a esbrinar la relació entre l'estructura cristal·lina i les propietats elèctriques de sòlids inorgànics, centrats per una part en els fosfurs de metalls de transició i recentment en els tel·luriurs ternaris de metalls de transició amb estructures cristal·lines formades per capes.

V) Desenvolupament de nous mètodes computacionals per a l'estudi de l'estructura electrònica de sistemes complexos

L'aplicació de les tècniques de modelatge molecular al camp dels materials d'interès tecnològic es veu avui dia frenada per les grans exigències computacionals necessàries, degudes bàsicament a la grandària dels sistemes que es pretén estudiar. S'està treballant en la implementació de nous mètodes de càlcul que escalin linealment amb el nombre d'àtoms en els programes semiempírics de tipus extended Hückel dels quals es disposa actualment.

L'Option Red vetllarà per la seguretat de l'arsenal nuclear americà

9 200 processadors Pentium Pro a 200 MHz, gairebé 600 GB de memòria, i la possibilitat d'assolir una potència punta d'1,8 Tflo/s, tot això distribuït en 84 armaris. Aquestes són les característiques principals de l'Option Red, el nou ordinador massivament paral·lel d'Intel que a mitjan de juny va ser lliurat al Departament d'Energia dels Estats Units (DOE). L'ordinador ha estat desenvolupat en el marc de la iniciativa ASCI (Accelerated Strategic Computing Initiative), un programa de 10 anys de durada que té per objectiu desenvolupar el modelatge físic en tres dimensions necessari per avaluar l'estat i el procés d'envelliment de les reserves nuclears del país sense haver de recórrer a les actuals proves subterrànies. Això suposa un canvi: s'ha passat d'un model basat en les proves físiques a un model amb menys riscos simulat íntegrament per ordinador.

L'Option Red és, així, la màquina més ràpida del món i també la que té més memòria i actualment opera al Sandia National Laboratories, als Estats




Units. L'Option Red va aconseguir el Teraflop (aproximadament 10^{12} operacions de coma flotant per segon) el passat mes de desembre usant tres quartes parts de la seva potència total (7.264 Pentium Pro en 57 armaris) i al juny, ja a ple rendiment, ha tornat a superar el rècord arribant a un total de 1,34 Tflo/s executant el benchmark MP Linpack.

A més a més, l'Option Red s'ha usat per executar més de 24 aplicacions del Sandia National Laboratories, Los Alamos National Laboratory i Lawrence Livermore National Laboratory. Els representants de l'Oficina dels Programes de Defensa del DOE estan contents de les prestacions que els oferirà el Option Red per garantir la seguretat del país, però ja apunten cap a nous reptes: volen aconseguir un ordinador que arribi a la barrera dels 100 Tflo/s per a l'any 2004.

Edita

CESCA

AMB EL SUPORT DE

 Generalitat de Catalunya

 FUNDACIÓ CATALANA PER A 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

Alícia Martínez

REDACCIÓ

Mònica Tudela

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

<http://www.cesca.es>

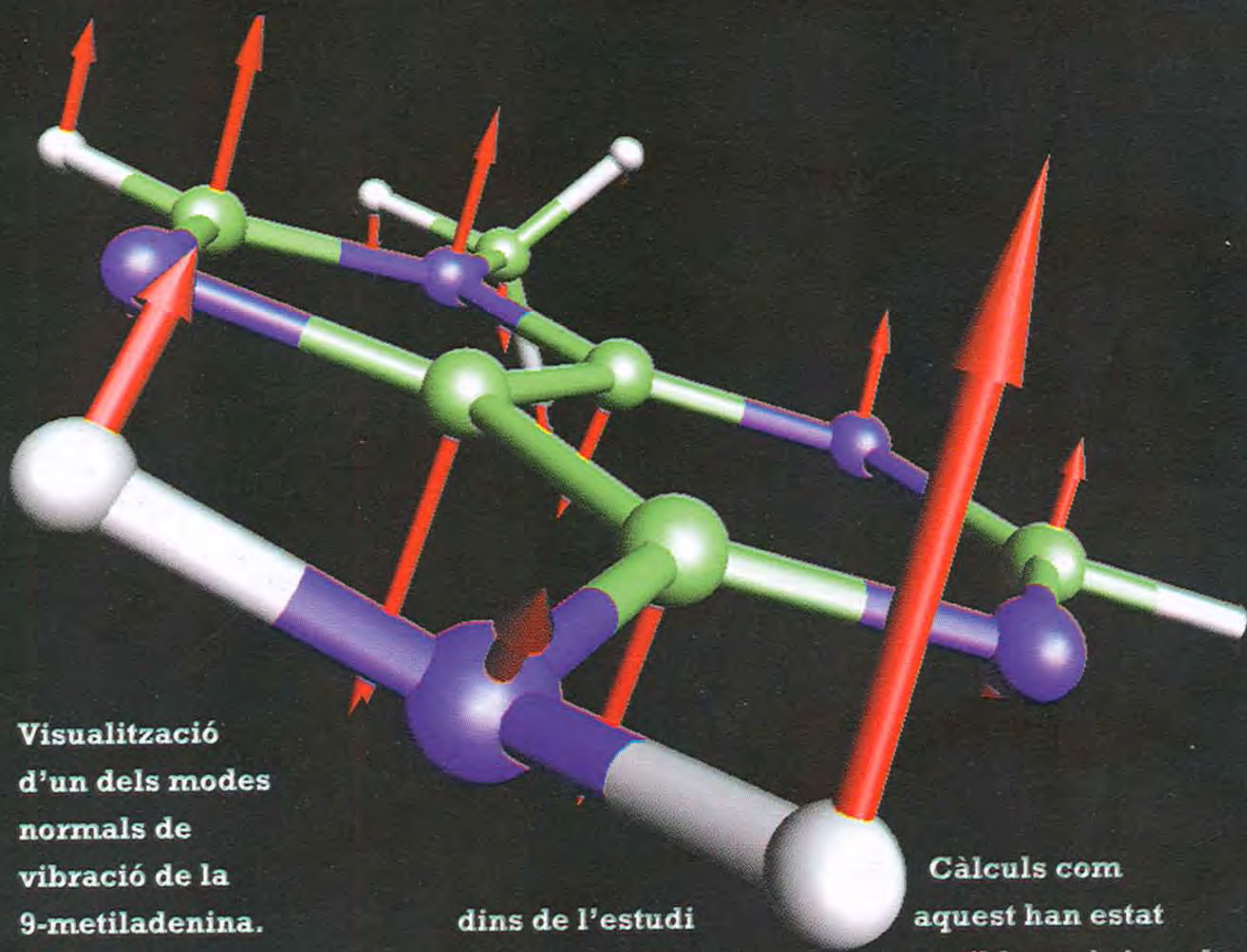
Subscripcions:

teraflop@cesca.es

DIPÒSIT LEGAL: B-33512-94

ISSN: 1134-6671

F O T O / N O T Í C I A



Visualització d'un dels modes normals de vibració de la 9-metiladenina.

Càlcul dut a terme pel Sr. Carles Colominas, del grup del Dr. Modesto Orozco (UB),

dins de l'estudi del reconeixement molecular per pont d'hidrogen en les bases de l'ADN.

Càlculs com aquest han estat possibles gràcies a la nova àrea de disc temporal de l'SP2 (més de 20 GB!).