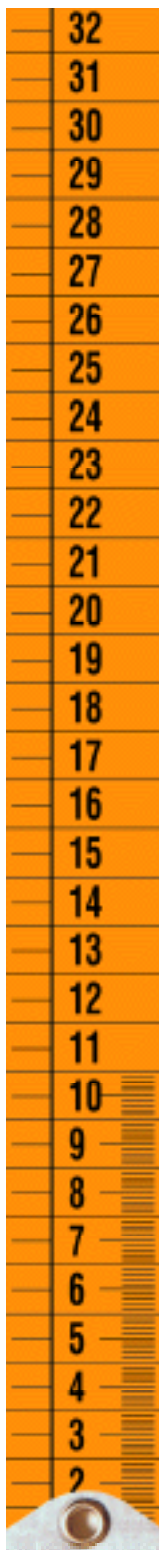


L'avaluació del maquinari amb Gaussian 94

- Entrevista a Joan Albaigés, comissionat per a Universitats i Recerca
- Breu història del CB UC
- Nova adquisició del CEPBA



La meitat de la càrrega del maquinari del nostre Centre correspon a aplicacions químiques, la més important de les quals és el Gaussian. Per tant, és important avaluar la seva execució per determinar quina és la màquina que proporciona el millor rendiment. Afortunadament per als diversos fabricants, no hi ha una única "màquina Gaussian", tal com us expliquem en aquestes pàgines.

Un cop acabades les reformes del CESCA impulsades per la CIRIT hem entrevistat al seu president, el Dr. Joan Albai-gés, comissionat per a Universitats i Recerca i vicepresident del CESCA, per fer-ne un balanç global i, al mateix temps, parlar del futur de les nostres universitats a la nova Era de la Informació.

El CEPBA ha adquirit una nova màquina, un Parsytec CCI, amb processadors Pentium Pro. Malgrat que l'ús d'aquests processadors no és novedós en els computadors d'altres prestacions (la màquina més potent del món en té 9.152), la màquina del CEPBA, orientada bàsicament a la indústria, és la primera d'aquest tipus que Parsytec ven a l'Estat.

Per acabar, després d'uns mesos de gestionar el Catàleg Col·lectiu de les Universitats de Catalunya (CCUC) per al CBUC, hem considerat oportú explicar als nostres lectors els serveis que aquest catàleg ofereix a la comunitat universitària ja que, igual que els nostres, permeten optimitzar l'ús dels recursos públics.

Miquel Huguet, Ph.D.
Director del CESCA

EL CESCA PRESENTA PER PRIMER COP ELS RESULTATS DE CINQ BENCHMARKS DE GAUSSIAN 94

Avaluar per prendre millors decisions

El CESCA ha seleccionat una sèrie de programes dels seus usuaris per caracteritzar la càrrega del Centre i avaluar el maquinari disponible i les possibles noves adquisicions. Avui us presentem els resultats de cinc d'aquests benchmarks, basats en el programa de química quàntica Gaussian 94.

Gaussian 94 és el programa de química quàntica d'ús més estès entre la comunitat científica. Permet realitzar càlculs d'estructura electrònica sobre una àmplia gamma de sistemes moleculars, principalment a nivell *ab initio*, emprant diferents nivells de teoria o metodologies.

Els benchmarks de Gaussian 94 es corresponen amb càlculs reals endegats pels nostres usuaris i constitueixen un conjunt força representatiu de les metodologies més emprades a les nostres màquines, com són Hartree-Fock, Density Functional Theory, MP4, etc.

Els benchmarks que presenta el CESCA han estat executats en el Cray Y-MP (ja desconnectat), els processadors *thin2*, *wide*, i *thin120* de l'IBM SP2 i l'Origin 2000. Les velocitats punta per processador són 333, 266, 266, 480 i 388 Mflop/s respectivament. Així doncs, l'*speedup** teòric respecte al processador *thin2* seria de 1,25, 1,00, 1,80 i 1,46.

Afortunadament per als diferents fabricants, el Gaussian no es comporta de manera uniforme per cada execució (vegeu Figura 1). Els nodes *wide*, amb idèntica potència punta que els *thin2*, però amb més amplada de bus a memòria (256 versus 128 bits) i més

cache de dades (256 versus 128 KB), donen *speedups* des d'1,12 a 1,32. D'altra banda, els nodes *thin120*, amb la mateixa cache (128 KB), però amb més amplada de bus (256 bits), donen *speedups* des de 1,33 a 1,71. De mitjana ponderada, el processador *thin120* és el que dona millor rendiment d'entre els avaluats.

L'*speedup* més gran s'obté amb el Cray (2,12) per a l'execució del benchmark UdGMS. En tres dels cinc benchmarks és la màquina que obté el millor temps d'execució. Malgrat aquest avantatge, la possible compra d'una nova màquina vectorial ha estat descartada perquè el factor cost/rendiment era significativament desfavorable respecte als processadors superescalars d'altres prestacions.

El processador MIPS R10000 de l'O2000 amb un rendiment teòric d'un 80% d'un *thin120*, però amb una cache de dades de 4 MB, dona *speedups* des d'1,05 a 1,71, superant la potència punta teòrica (1,46).

Si comparem els resultats globals amb diversos benchmarks estàndard (vegeu taula), es constata que sempre és millor l'avaluació del maquinari feta amb programari propi, representatiu

**speedup*: quocient indicatiu de la relació entre les velocitats (temps) de dues execucions de programes. Els *speedup* > 1 indiquen que s'ha aconseguit una millora de l'execució del programa. Per contra, els *speedup* < 1 indiquen que, en la nova situació, l'execució és més lenta.

	Cray Y-MP	wide	thin2	thin120	R10000
Freqüència (MHz)	2,35	1,00	(66)	1,81	2,94
Rendiment punta (Mflop/s)	1,25	1,00	(266)	1,80	1,46
LINPACK 100 x 100 (Mflop/s)	1,21	0,97	(134)	1,74	0,85
LINPACK TPP (Mflop/s)	1,40	1,02	(231)	1,76	1,48
SPECfp95	n/d	1,33	(9,35)	1,77	2,02
CESCA/QT	1,36	1,19	—	1,50	1,24

Rendiment relatiu de diversos benchmarks respecte al *thin2*.

de la càrrega real per a suportar pel sistema, que la realitzada amb els benchmarks estàndard. En general, sembla que els resultats obtinguts amb el LINPACK 1000x1000 (TPP: "Towards Peak Performance") són més similars a la càrrega tipus Gaussian que els obtinguts amb l'SPECfp95.

Els links del Gaussian

La conclusió és que, en general, no hi ha una màquina millor que totes les altres per executar el Gaussian 94 perquè l'*speedup* està fortament condicionat pels *links* que dominen el càlcul del programa (vegeu Figura 2).

Els programes que necessiten els *links* 703 o 1110, necessaris per al càlcul de freqüències vibracionals, s'executaran millor en una màquina vectorial. Per exemple, aquest és el cas del UABJML, però el resultat final no és tant significatiu: l'*speedup* del Cray és d'1,80 i el del *thin120*, de 1,66.

D'altra banda, si el càlcul està dominat pel *link* 913, usat per al càlcul de les energies CI, CC, QCI, MP3 i MP4, seria preferible executar-lo en els *thin120* (com és el cas dels UBMO i UBJNN).

El Gaussian en paral·lel

Mentre que hi ha certes aplicacions químiques que paral·lelitzan molt bé (Gamess, ADF, Hondo), aquest no és el cas del Gaussian (vegeu Figura 3). En cap cas és aconsellable executar-lo en més de quatre processadors, tal com ho demostren les execucions realitzades a l'O2000.

Per tant, la nostra segona conclusió és que de moment no sembla aconsellable disposar d'una versió de Gaussian 94 en paral·lel per a l'SP2 per l'elevat nombre de treballs en execució. Per exemple, l'execució del benchmark UdGMS a l'O2000 en un únic processador dura 5,32 hores i gasta unes 5,28 HC. Si s'executa en quatre, el temps d'execució es redueix a 1,98 hores (és a dir, un *speedup* de $5,32/1,98=2,69$) i el temps de processador total usat és lleugerament superior, 5,33 HC. Així doncs, en 5,32 hores es poden executar quatre treballs de tipus UdGMS en seqüencial o 2,7 paral·lelitzats. Mentre hi hagi més demanda que processadors, l'execució seqüencial del Gaussian garanteix obtenir el màxim rendiment del sistema.

Figura 1: Els benchmarks de Gaussian 94 del CESCA

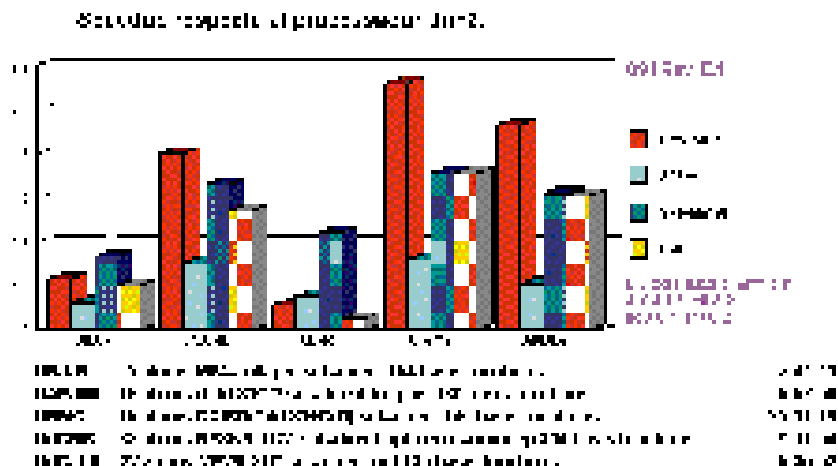


Figura 2: Speedup dels principals links

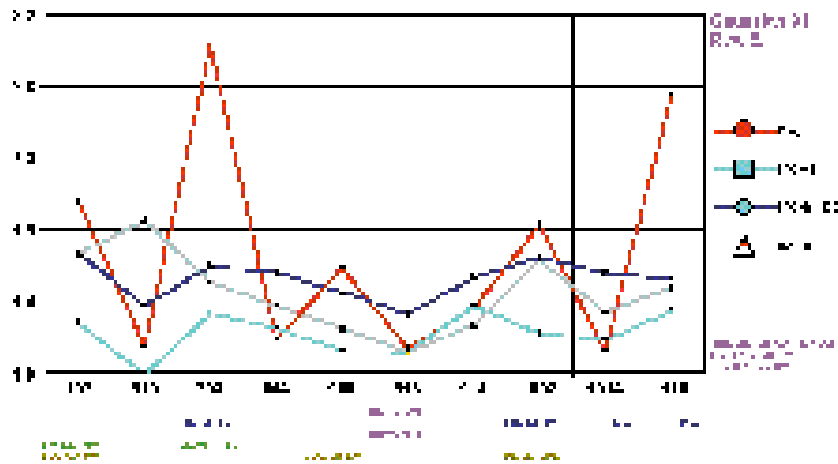
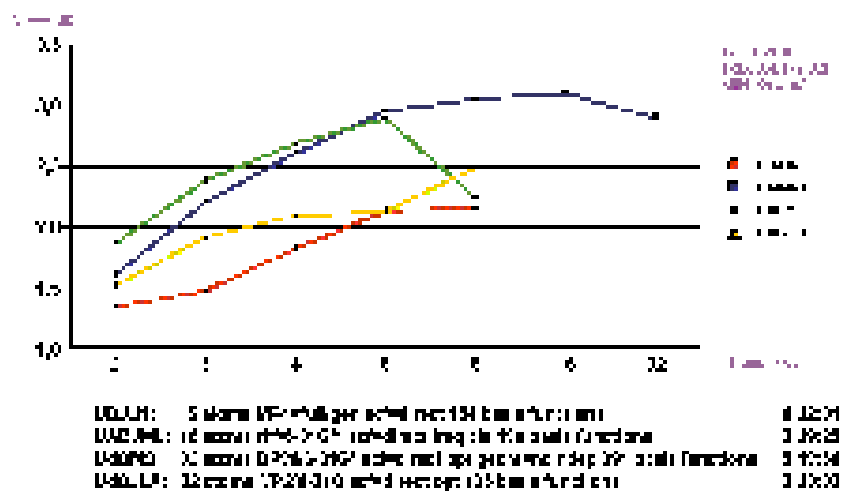


Figura 3: Speedup del Gaussian 94 en paral·lel



Agraïm la col·laboració dels usuaris següents i dels seus grups de recerca: Juan José Novoa i Modesto Orozco, de la UB; Josep M. Lluch, de la UAB; i Miquel Solà i José Luis Andrés, de la UdG.



Un pas endavant en la cooperació interbibliotecària

El CBUC té poc més d'un any de vida i agrupa les vuit universitats públiques catalanes i la Biblioteca de Catalunya. El Catàleg Col·lectiu d'Universitats de Catalunya (CCUC) inclou tots els registres automatitzats de les biblioteques de les institucions del Consorci i dona accés a més de 2.700.000 documents bibliogràfics. Tota aquesta informació es troba en un ordinador que el CES CA gestiona des de l'octubre de l'any passat.

El Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya (CBUC) és un organisme sense afany de lucre que té per missió millorar la qualitat dels serveis bibliotecaris a través de la cooperació interbibliotecària. El CBUC es va constituir formalment el 7 de novembre de 1996 amb un seguit d'objectius:

■ Crear i gestionar el catàleg col·lectiu de les biblioteques del Consorci per tal de fer més efectiva la investigació i l'ensenyament en augmentar els recursos bibliotecaris disponibles de forma immediata.

■ Incrementar la productivitat científica en millorar l'accés de la comunitat universitària catalana a les col·leccions bibliogràfiques existents.

■ Millorar els serveis bibliotecaris existents i estalviar costos en catalogació, gràcies al fet de compartir recursos.

■ Promoure plans de cooperació i serveis bibliotecaris conjunts.

■ Afavorir l'ús de les noves tecnologies de la informació als serveis bibliotecaris.

■ Col·laborar amb iniciatives que sorgeixin en cooperació interbibliotecària, especialment en l'àmbit català.

El CBUC té poc més d'un any de vida. Els seus antecedents es troben en les diverses activitats de treball conjunt que les biblioteques catalanes van començar a fer fa alguns anys. El setembre de 1996, per exemple, abans de la constitució formal del CBUC ja s'havia creat un grup de treball que fes propostes per millorar el préstec interbibliotecari entre les biblioteques consorciades. Les propostes d'aquest grup van estar a punt a principis de 1997 i això va permetre iniciar el segon programa del Consorci, el de préstec interbibliotecari.

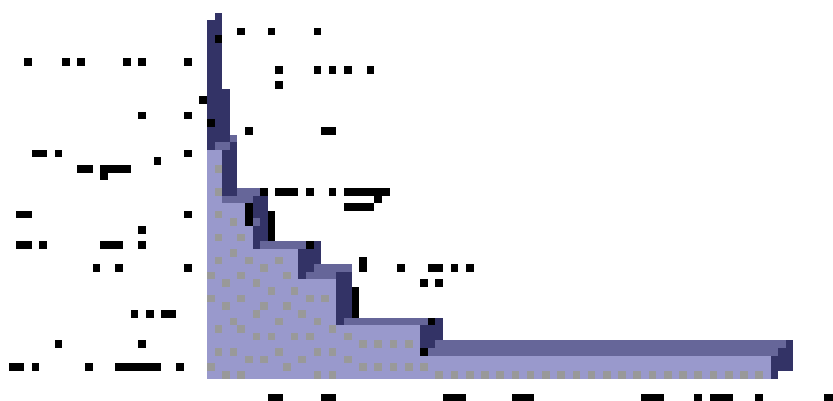
El CBUC promou plans de cooperació i serveis bibliotecaris conjunts

Així, a l'abril de 1997, es va fer un reglament i es va posar en marxa un sistema de missatgeria de tramesa de documentació, pioner en el context europeu però usat habitualment als EUA. A finals de 1997 s'ha vist que el programa ha incrementat el moviment de préstec interbibliotecari i que ha reduït els terminis en què es rebien aquests documents.

A l'inici de 1997 es van completar les darreres càrregues de registres procedents de les institucions consorciades al CCUC i amb això podem dir que aquest va funcionar de forma completa. Avui el CCUC inclou la totalitat dels registres automatitzats de les biblioteques de les institucions que formen el Consorci i dona accés a més de 2.700.000 documents bibliogràfics entre llibres, revistes, vídeos, documents electrònics... Els seus serveis s'han ampliat amb una base de dades de registres que facilita la catalogació per còpia.

Els objectius del CBUC, però, van més enllà de la formació del CCUC i del préstec interbibliotecari. També s'intenta facilitar l'accés a les biblioteques, plantejar adquisicions conjuntes i explorar conjuntament temes de futur.

Al llarg de 1997 s'ha avançat bàsicament en dos aspectes: en l'accés compartit a bases de dades, i en la creació d'una base de dades amb els sumaris electrònics de les revistes subscriïdes per les institucions



La gràfica mostra el tipus de material —excepte l'escrit imprès— de què disposa el Catàleg (dades de gener de 1998).

Documents escrits impresos	1.244.816	92,5 %
Enregistraments sonors musicals	45.058	3,4 %
Documents projectables	17.179	1,3 %
Microformes	10.428	0,8 %
Documents escrits, manuscrits	10.337	0,8 %
Música impresa	7.587	0,6 %
Documents gràfics bidimensionals no projectables	3.885	0,3 %
Documents cartogràfics impresos	3.633	0,3 %
Enregistraments sonors no musicals	1.390	0,1 %
Fitxers de dades en llenguatge màquina	1.351	0,1 %
Objectes tridimensionals	426	0,0 %
Multimèdia	317	0,0 %
Documents cartogràfics manuscrits	10	0,0 %
Materials especials educatius	9	0,0 %
Música manuscrita	7	0,0 %

Els diversos suports en què estan emmagatzemats els fons del CCUC (dades de gener de 1998).

membres. Durant aquest any també es va encetar una nova línia de treball: organitzar trobades d'intercanvi d'informació sobre problemàtica comuna que se sol resoldre de forma diferenciada i per la qual el coneixement del que es fa a d'altres biblioteques pot suggerir millores en la pròpia biblioteca.

El 30 d'octubre de l'any passat el CBUC i el CESCO van signar un acord de col·laboració que suposa que el manteniment de l'ordinador del CCUC i el suport de comunicacions deixen de ser donats per la UPC (que és la institució

que l'havia donat des del seu inici) per ser proporcionats pel CESCO. Aquest canvi permet millorar les comunicacions entre el CCUC i les institucions consorciades així com utilitzar el domini informàtic 'cbuc.es' a les adreces dels ordinadors del CBUC. El nou suport va suposar el trasllat de l'ordinador del CCUC a les instal·la-

cions del CESCO i el canvi de la web.

De cara a 1998, el CBUC preveu finalitzar la tasca d'integració iniciada el 1997 (i continuada el març d'aquest any amb la incorporació de la Universitat Jaume I) d'aquelles institucions que ho hagin sol·licitat (Departament de Medi Ambient de la Generalitat de Catalunya, Institut del Teatre, entre d'altres). També es preveu iniciar la integració de, com a màxim, 4 noves institucions i començar contactes amb d'altres biblioteques.

Al si del CBUC, la presa de decisions i la posada en marxa dels programes sempre ha estat fàcil i ràpida a causa de l'esperit cooperatiu i la voluntat de servei que formen part de la cultura de les biblioteques. Els serveis cooperatius endegats amb

aquesta voluntat incrementen la cohesió del sistema universitari de Catalunya ja que permeten que la comunitat universitària catalana pugui disposar d'una plataforma homogènia de recursos documentals.

Es proporciona a la comunitat universitària catalana una plataforma homogènia de recursos documentals

CCUC: un catàleg amb més de 1.400.000 títols

El Catàleg Col·lectiu de les Universitats de Catalunya (CCUC) és una base de dades multidisciplinària que conté més de 1.400.000 títols de documents de quasi cent localitzacions diferents de les biblioteques universitàries de Catalunya i la Biblioteca de Catalunya. Es tracta d'una eina que localitza cada document i que incorpora els registres a través d'un programa de

control de duplicats. Serveix per tenir millor accés a la informació bibliogràfica de les biblioteques cooperants, per estalviar recursos de catalogació mitjançant la còpia de registres i per facilitar la gestió del préstec interbibliotecari. L'any 1991 es va iniciar un projecte de cooperació bibliotecària que en una primera fase permetés interconnectar els catàlegs de les bibliote-

ques universitàries de Catalunya. L'any 1994 aquestes biblioteques estaven automatitzades i interconnectades amb les xarxes informàtiques de les mateixes universitats. El CCUC és la segona fase d'aquest projecte: un catàleg col·lectiu en una base de dades comuna que ofereix en una sola consulta la totalitat dels fons bibliogràfics de les biblioteques cooperants.

“És molt important que hi hagi centres on es puguin compartir recursos per obtenir un millor servei”



“Amb la incorporació de totes les universitats públiques, s’ha aconseguit que totes elles sentin el CESCA més seu i s’hi identifiquin”, explica el Dr. Albaigés.

Joan Albaigés i Riera, el vicepresident del CESCA, és comissionat per a Universitats i Recerca i president de la CIRIT. En la seva trajectòria ha ocupat diversos càrrecs de responsabilitat: va ser director del Centre d’Investigació i Desenvolupament del CSIC a Barcelona (1984-1991), delegat del CSIC a Catalunya (1992-1993) i director general de recerca de la Generalitat de Catalunya (1993-1995). En la següent entrevista, el Dr. Albaigés reflexiona sobre la compartició de recursos per part de les universitats i sobre les comunicacions entre institucions.

El Consell de Govern del passat 15 de gener, que vostè va presidir, va finalitzar les reformes impulsades per la CIRIT l’any 1995. Quin balanç global en fa?

Hi ha diversos aspectes que cal remarcar. D’una banda el nou organigrama permet una millor gestió i coordinació dels principals recursos de supercomputació que hi ha a Catalunya: el CESCA i el CEPBA i per tant, donar un millor servei a l’usuari. Si es miren les estadístiques es veu que l’evolució és molt favorable. Només cal recordar que el darrer any s’ha duplicat la potència disponible i s’ha pogut dispo-

sar d’un 64% més d’hores de càlcul.

D’altra banda, ha permès prendre decisions importants en la línia de millorar les prestacions i reduir els costos, és a dir, tenir més capacitat de càlcul a menys cost. Amb la nova estructura de govern i amb la incorporació de totes les universitats públiques, s’ha aconseguit una major identificació de les universitats amb el CESCA i reforçar el seu lideratge en el camp de la supercomputació. Avui els nostres investigadors disposen de la primera i de la tercera màquina més potent de tot l’Estat, que ocupen el lloc 173 i 284 en la llista TOP500.

La política de compartir els recursos computacionals rendibilitza significativament les inversions realitzades. No obstant això, els grups de recerca prefereixen disposar del seu propi maquinari. Com poden les institucions financeres (CIRIT i CICYT) fomentar aquesta compartició de recursos?

La comunitat acadèmica, universitària i investigadora ha d’aprofundir en la cultura de compartir recursos i experiències. S’hi ha d’anar progressant i això costa. Però cal insistir en el fet que, de la mateixa manera que no es pot progressar en ciència i tecnologia sense enfocar el treball amb òptiques complementàries i multidisciplinars, només es pot disposar de grans infraestructures si els possibles usuaris hi donen suport. Concentrar els recursos presenta a més l’avantatge del seu manteniment i de la seva reposició ja que el maquinari té un cicle de vida relativament curt.

També els grans centres de recursos poden assessorar millor els investigadors a l’hora d’utilitzar-los i de prendre determinades decisions. Em sembla, doncs, molt important que hi hagi centres on es puguin compartir recursos per obtenir un millor servei.

A més dels recursos de càlcul, hi ha d’altres recursos o serveis que es podrien compartir entre les universitats?

El que he dit per als investigadors val també per a les universitats. És legítim que cada institució vulgui tenir els seus recursos i els seus propis mitjans de connexió amb els estudiants, professors, etc. Som en un món en el qual la competència és un factor de progrés.

Però també cal impulsar la creació de recursos col·lectius. Un exemple és el que ha representat la creació del Catàleg Col·lectiu de Biblioteques. És evident que posar els fons documentals en comú té un valor afegit indubtable. S'eviten duplicitats, es poden optimitzar les adquisicions i es fa més fàcil i eficient l'accés i la consulta. És un tema que s'ha d'anar treballant i estic segur que el temps ajudarà a consolidar aquest tipus de plantejament en d'altres àmbits.

L'èxit de la UOC ha impulsat que les altres universitats també vulguin donar accés a Internet als seus estudiants a través de RedIRIS. No hi ha el risc que RedIRIS es col·lapsi ?

Hi ha un procés irreversible en la utilització de les eines telemàtiques al servei de la formació. La UOC n'és l'exemple més singular, però aquesta experiència s'estendrà a les altres universitats i farà que activitats acadèmiques que avui dia es fan de manera presencial es puguin fer de manera no presencial. S'ha d'advertir, però, que la majoria d'aquestes activitats no necessàriament s'han de fer a través de RedIRIS, sinó de xarxes internes. Caldrà, doncs, donar instruccions i fer un seguiment del tema sense descartar de prendre d'altres mesures com un enllaç directe amb els EUA, sense passar per RedIRIS, per millorar el nostre accés a Internet.

La Generalitat ha impulsat la creació de les universitats públiques "territorials" en un moment que les comunicacions tant físiques com virtuals han eliminat la barreira de la localització. Creu, doncs, que a llarg termini, amb una població estudiantil decreixent, totes tenen garantides el seu futur?

La idea que en el desplegament del mapa universitari de Catalunya es donés resposta a una demanda creixent d'estudis universitaris, i que es fes amb criteris d'equilibri territorial ha estat plenament assolida. És cert que en el futur hi haurà menys alumnes però el model ja està implantat i seguirà vigent, donant satisfacció a les aspiracions de formació dels nostres joves. Una formació que farà ús d'aquestes noves tecnologies, que certament ofereixen noves possibilitats, faciliten la feina, però que no substitueixen l'activitat presencial que seguirà sent necessària. La feina acadèmica, docent i d'investigació, seguirà necessitant el contacte directe professor-alumne, perquè la vivència personal, tan important en l'educació,

no pot ser substituïda per la màquina.

Un altre tema és la necessitat que hi hagi de reordenar l'oferta per adequar-la als canvis en la demanda. Així, estudis que ara es fan a totes les universitats potser no caldrà que es facin a totes elles. O potser no caldrà que totes les universitats els imparteixin en tota la seva extensió, sinó que serà millor que es generalitzin els primers cicles i s'especialitzin els segons i tercers.

No cal oblidar tampoc el paper creixent que anirà tenint la formació continuada. Hi ha, doncs, tot un seguit de possibilitats per tal que les universitats encaixin aquesta davallada demogràfica, però totes elles tenen un futur garantit en aquest context.

La recerca és bàsica per al progrés d'un país.

Com equilibrar la inversió a realitzar a llarg termini amb les necessitats de l'Estat del Benestar?

És cert que ens trobem en uns moments de canvi. Hem parlat d'una davallada demogràfica i també detectem una menor presència de l'Administració en determinats serveis. Hi haurà

"Tot allò que expliciti una voluntat d'anar conjuntament és benvingut perquè ofereix d'altres oportunitats per accedir a àmbits més amplis als quals no es pot arribar de manera individual"

Què hauria estat dels grups de recerca que vostè va dirigir al llarg de la seva carrera científica si llavors s'hagués comptat amb els recursos de supercomputació que tenim ara?

La meua etapa investigadora es va centrar en la química ambiental, en la identificació de la presència, el transport i els efectes dels contaminants en el medi ambient, principalment a l'aire i a l'aigua. Molt sovint, la química ambiental ha consistit només a fer mesures i recollir dades. Les modernes tecnologies analítiques són capaces de proporcionar-nos informació

Una etapa investigadora centrada en la química ambiental

detallada sobre la naturalesa dels contaminants, i detectar-los en concentracions baixíssimes.

Les mateixes metodologies permeten fer mesures i mesures que omplen els arxius i les bases de dades però darrera de les quals moltes vegades manca una interpretació. I

aquesta és la crítica que encara avui podem fer a alguns grups que treballen sobre el medi ambient. Per avançar en la interpretació d'aquestes dades es necessita, per exemple, conèixer la distribució dels contaminants en el medi. En aquest sentit, els progressos que hi ha avui dia en el modelatge de sistemes ambientals, de les masses d'aire o aigua, ens permeten anar més lluny en aquest coneixement i en la interpretació dels seus efectes. Avui, en aquest camp, amb les eines de supercomputació de què disposem, podem fer simulacions i amb menys esforç de laboratori treure millors resultats.



El Dr. Joan Albaigés en un moment de l'entrevista al seu despatx.

contenció de la demanda i de la despesa pública, i això obliga a racionalitzar els serveis, també els universitaris, a fer-los més eficients, a posar en pràctica allò de fer més amb els recursos que es tenen. De totes maneres ha de quedar clar que l'Estat de Benestar s'assenta sobre les bases de la societat del coneixement i, en aquest sentit, l'educació i la recerca seguiran sent uns dels seus fonaments principals.

La recerca assegura la renovació de les idees, la millora de la formació i dels recursos humans i la competitivitat de les nostres empreses. Per tant, ha de ser una prioritat en les polítiques futures. Per assegurar-ho cal, però, estrènyer el diàleg i la relació entre el món científic, el polític i la mateixa societat, perquè no estic segur que aquesta tingui una percepció precisa del que això significa.

En aquests dos últims anys el CESCA ha participat en el projecte HOISE-NM per desenvolupar una revista virtual sobre computació d'altres prestacions a Europa. Les eines desenvolupades ja s'han usat en dues revistes més. D'altra banda, cada universitat té la seva pròpia revista i els seus propis mitjans de comunicació. Però, què

“La recerca assegura la renovació de les idees, la millora de la formació i dels recursos humans i la competitivitat de les nostres empreses. Per tant, ha de ser una prioritat en les polítiques futures”

li semblaria la creació d'una revista virtual inter-universitària (a través d'Internet) on s'agrupessin informacions diverses de totes les universitats, usant les eines ja disponibles al CESCA?

Nosaltres no podem coordinar-ho tot, però sí que tenim voluntat d'impulsar iniciatives d'aquest tipus

que puguin vertebrar el sistema universitari català, que necessita recursos que demostrin que existeix com a sistema. De la mateixa manera que es coordinen esforços en temes com la inscripció universitària o les biblioteques, tot allò que ajudi a donar una imatge d'oferta col·lectiva és positiu, perquè es facilita la vida al possible client o usuari. Després ja serà ell mateix qui arribarà al detall que li interessi. Per tant, hauria de ser el CESCA qui implementés aquesta iniciativa. Tot el que vagi en aquesta direcció és positiu si es fa amb esperit de col·laboració per part de tothom i de manera que ningú no interpreti que això substitueix d'altres elements o instruments propis de difusió. Cada universitat o institució pot endegar les seves iniciatives, però tot allò que expliciti aquesta voluntat d'anar conjuntament també és benvingut, perquè ofereix d'altres oportunitats per accedir a àmbits més amplis als quals no es pot arribar de manera individual.

PROGRAMES DE MOBILITAT

Bernd Wender, de la *University of Vienna* (Àustria), ha vingut de l'1 al 28 de febrer d'enguany per desenvolupar el projecte *Compilation and Runtime Support for Shared Address Space Architectures* convidat per Eduard Ayguadé, del Departament d'Arquitectura de Computadors de la UPC.

Friedrich M. Bickelhaupt, de la *Free University of Amsterdam* (Holanda), ha estat convidat per Miquel Solà, de l'Institut de Química Computacional de la UdG, per desenvolupar el projecte *Theoretical Organomagnesium Chemistry*. Bickelhaupt va arribar l'1 de març de 1998 i s'entrevistarà entre nosaltres fins al 31 de maig del mateix any.

Fabrizia Fabrizi, de la *Università degli Studi di Siena* (Itàlia), ha estat convidada per Santiago Álvarez, del Departament de Química Inorgànica de la UB per treballar en el projecte *Semi-empirical and Density Functional Calculations in Hexacyanometallate Derivatives: Molecular and Solid State Calculations*. Fabrizi va arribar l'1 de març i marxarà el 31 de maig.

Marie Pierre Habas, de la *Università di Torino* (Itàlia), va arribar a Barcelona l'1 de març per desenvolupar el projecte *Magnetic Interaction in Cu-O-Cu Containing Systems as Studied from Cluster and Periodic Ab Initio Methods*. Habas ve convidada per Francesc Illas, del Departament de Química Física de la UB, i marxarà el 30 de juny d'enguany.

Peter Reinhardt, de la *Université Paul Sabatier de Toulouse* (França), ha estat convidat per Francesc Illas, del Departament de Química Física de la UB, per desenvolupar el projecte *The Metal-Insulator Interface Studied by Means of Periodic Ab Initio Calculations*. L'estada de Reinhardt va començar el passat 1 de març i s'acabarà el 30 de juny.

AMB AQUESTA ADQUISICIÓ EL CENTRE VOL APROPAR-SE A LES NECESSITATS DEL MÓN DE L'EMPRESA

Nou Parsytec CCI al CEPBA

Un Parsytec CCI està instal·lat al CEPBA des del passat mes de febrer. Aquest PC Cluster interconnectat amb diverses xarxes d'alta velocitat permetrà al Centre apropar-se a les necessitats del món de l'empresa que, de vegades, mira els superordinadors amb cert recel. Una peculiaritat més d'aquesta màquina que ha comprat el CEPBA és que és la primera de la seva família que s'instal·la a Espanya.

El CEPBA ha comprat una nova màquina: una Parsytec CCI, un PC cluster amb arquitectura basada en vuit plaques duals de Pentiums Pro (en aquest cas a 266 MHz). Cada processador té una cache de 512 KB i una potència punta de 266 Mflop/s. Cada placa de dos processadors té 128 MB de memòria. Es tracta, en definitiva, d'uns PC però connectats per diferents xarxes d'alta velocitat. La màquina en té tres d'interconnectades amb amples de banda diferents: Fast-Ethernet (a 100 Mb/s), HS-Link (a 600 Mb/s) i Myrinet (a 1,2 Gb/s).

La màquina té tres xarxes d'alta velocitat interconnectades: Fast-Ethernet, HS-Link i Myrinet



El Parsytec CCI recentment instal·lat al CEPBA.

La disponibilitat de tres xarxes d'interconnexió és útil en el sentit que un usuari que vulgui treballar amb la màquina pot triar amb quina d'elles li és més rendible fer-ho: "Va bé que tingui 3 xarxes perquè permet experimentar. La gent de les empreses pot fer proves amb les tres i triar la que més li convingui. Busquem poder demostrar a usuaris d'empreses o a gent que usi codis acadèmics que amb els PC es poden fer moltes coses en paral·lel i ells poden triar entre les tres possibilitats", explica Jesús Labarta, director del CEPBA.

Aquest tipus de màquina es va presentar a principis de l'any passat, i

El Parsytec CCI del CEPBA és el primer de la seva família que s'instal·la a Espanya

la de tipus CCI-D, al setembre de 1997. Ara per ara, hi ha unes 100 màquines d'aquestes dues classes instal·lades a tot el món. El nou Parsytec CCI del CEPBA és important també perquè és el primer de la seva família que s'instal·la a Espanya. També és la primera màquina amb Windows NT instal·lada en un centre de supercomputació a l'Estat.

"El que volíem amb l'adquisició d'aquest cluster era precisament apropar-nos a l'entorn més realista en la indústria", explica Jesús Labarta.

El Centre es va decidir pel Parsytec CCI perquè, segons el director del CEPBA, "en la gran majoria de casos allò que la gent pot usar en les empreses són els PC. La resta de màquines queden molt llunyanes a aquest tipus d'usuaris".

El Parsytec CCI integra plaques mare basades en Pentium Pro estandard i sistemes operatius convencionals com el WindowsNT i el Unix en sistemes de fins a 200 nodes. La nova màquina va arribar al CEPBA el passat 19 de febrer.

Simulació computacional en enginyeria de proteïnes



“Desenvolupament i aplicació d'aproximacions computacionals per a l'anàlisi estructural-funcional i disseny de proteïnes i fàrmacs”

Francesc X. Avilés

Cap

Francesc X. Avilés

Integrants

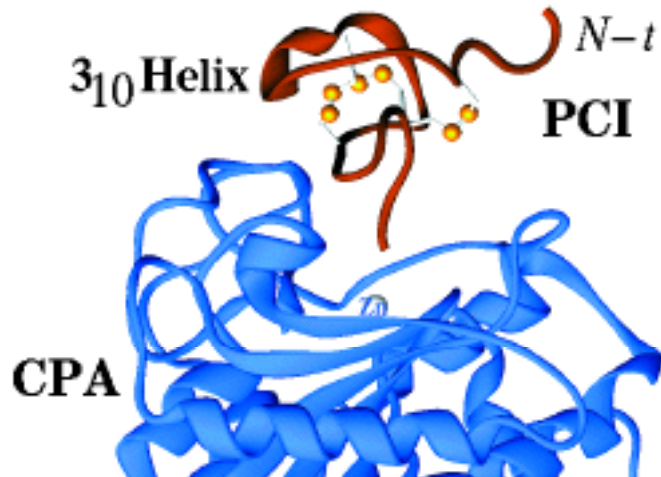
Enric Querol, Baldomero Oliva, Marc Martí, Josep M. Mas, Juan Cedano, Patrick Aloy

Període

1997-1998

Publicacions

- “Computational Analysis of the Relation between Amino Acid Composition and Cellular Location of Proteins.” (1997) *J. Mol. Biol.* 266, 594-600.
- “An Automatic Classification of the Structure of Protein Loops”. (1997) *J. Mol. Biol.* 266, 814-830.
- “TransMem: a Neural Network Implemented in Excel Spreadsheets for Predicting Transmembrane Domains of Proteins”. (1997) *Comp. Appl. Biosci.* (CABIOS) 13, 231-234
- “The Three-dimensional Structure of Human Procarboxypeptidase A2. Deciphering the Basis of the Inhibition, Activation and Intrinsic Activity of the Zymogen.” (1997) *EMBO J.* 16, 6906-6913.
- “A Theoretical Study of the Role of Arginine127 in the Water-promoted Mechanism of Peptide Cleavage by Carboxypeptidase A”. (1998) *New. J. Chem.*, in press.
- “Analysis of Conformational Characteristics Related to Protein Thermostability.” (1996) *Prot. Engin.*, 9, 265-271.
- “A Pascal Microcomputer Program for Prediction of Protein Secondary Structure and Hydrophobic Segments.” (1996) *Comput. Appl. Biosci.*, 2, 211-215.



Amb aquest projecte es pretén desenvolupar i implementar noves aproximacions computacionals per a predir l'estructura tridimensional, fluctuacions conformacionals i funcionalitat de proteïnes, i dels complexos amb lligands (*docking* d'inhibidors, fàrmacs, etc.). També es vol desenvolupar i implementar noves aproximacions per a simular els efectes de l'enginyeria d'aquestes molècules, sobretot el redisseny (mutagènesi) i la minimització, i per a dissenyar/seleccionar lligands. D'altres objectius són la classificació estructural (taxonomia) automàtica de proteïnes basada en homologia estructural, i el seu modelatge.

Totes aquestes metodologies seran revisades i aplicades sobre diferents tipus de proteïnes i complexos, i molt especialment sobre inhibidors de proteases (particularment carboxipeptidases i els seus precursors, o a dominis d'ells) i glucosidrolases. Els sistemes proteics més emprats seran el de l'inhibidor proteic de carboxipeptidases (PCI), el de les metal·lo-carboxipeptidases (CPs; tipus A1, A2, B, de plasma, reguladores o altres), i el de complexos. S'estudiaran els mecanismes enzimàtics, d'inhibició i d'activació d'aquestes molècules mitjançant combinació de metodologies de

La figura representa l'estructura tridimensional del complex entre l'inhibidor proteic de carboxipeptidasa (PCI) i la carboxipeptidasa A1 (CPA1). Aquest complex proteic és un dels sistemes models objecte de la investigació.

mecànica quàntica, mecànica i dinàmica molecular, i de pertorbació diferencial.

Un altre objectiu serà la simulació dels processos de plegament d'aquestes molècules. Algunes de les aplicacions van dirigides al disseny de fàrmacs peptidomimètics i organomimètics per a la indústria farmacèutica i veterinària.

El gran nombre d'àtoms implicats en els càlculs (400 en PCI, 4000 en CP i al voltant de 45.000 en complexos CP/PCI quan es fan simulacions en presència d'aigua) requereix l'ús de superordinadors que preferiblement treballin en paral·lel per al seu estudi. Concretament, 1 nanosegon de simulació dinàmica per aquests complexos requereix al voltant de 1400 hores de CPU en la Origin 2000. Pel fet que s'han de fer diverses simulacions d'1-2 nanosegons per a diferents variants proteiques o complexos, es calcula que es necessita un mínim de 12.000 hores de CPU en l'Origin 2000.



Tècniques algorítmiques paral·leles: disseny i eines

“La computació en paral·lel a la Universitat de La Laguna se centra en tres àrees: models de rendiment, disseny d’algoritmes paral·lels i eines de desenvolupament”

Casiano Rodríguez

Cap
Casiano Rodríguez León

Integrants

Coromoto León Hernández, Francisco Almeida Rodríguez, Félix García López, José Luis Roda García, Daniel Morales González, Francisco de Sande González, Justo Luna López, Luis García Forte, Manuel Sánchez Felipe, Ignacio Coloma Escribano, Pablo Pulido Lorenzo, José Damián Dorta, Alejandro Delgado.

Període
1996 - 1999

Publicacions

- “A Parallel Algorithm for the Integer Knapsack Problem for Pipeline Networks”. *Journal of Parallel Algorithms and Applications* 6 (3/4). 1994.
- “A PRAM Oriented Programming System”. *Concurrency: Practice and Experience*. Vol. 9, n. 3, March 1997, pp. 163-179
- “Integral Knapsack Problems: Parallel Algorithms and their Implementations on Distributed Systems”. *Proceedings of the 1995 International Conference on Supercomputing*. 218-226. ACM Press. Barcelona 1995.
- “A Parallel Algorithm for the Integer Knapsack Problem”. *Concurrency: Practice and Experience*. Vol. 8(4), p. 251-260, May 1996.
- “The 11 Parallel Programming System”. *IEEE Transactions on Education*, Vol. 39, n. 4, November 1996, p. 457-464.
- “Expanding The Message Passing Library Model with Nested Parallelism”. *Proceedings of the 20th World Occam and Transputer User Group Technical Meeting*. IOS Press. 13-16 April 1997. Enschede, The Netherlands. p. 244-251

Aquest projecte tracta del desenvolupament de noves metodologies destinades a cobrir els objectius següents:

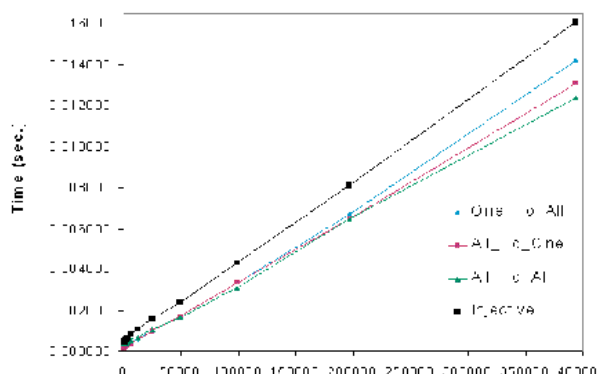
- 1) Estendre el model de llibreria de pas de missatges amb paral·lisme niat. Aquest tipus de paral·lisme sorgeix de manera natural en un gran nombre d’aplicacions. Es requereix sempre que una rutina paral·lela necessita cridar a una subrutina que, alhora, usa el paral·lisme. Un exemple particular el constitueix el cas en què la rutina és recursiva. El paral·lisme niat és a la programació paral·lela el mateix que el niament de bucles a la programació seqüencial.
- 2) Produir assignacions mixtes cíclics i per blocs dels processos virtuals que siguin òptimes per a l’arquitectura subjacent.
- 3) Aconseguir un equilibratge de càrrega perfecte. A més de les clàssiques tècniques de difusió i equilibratge hipercúbic, l’equilibratge de la càrrega s’aconsegueix mitjançant l’ús de noves sentències d’assignació de processadors. Els patrons de comunicació d’aquestes sentències associades amb aquests motiven l’aparició de dues noves topologies: els hiper-cubs dinàmics i els hiper-cubs dinàmics ponderats.
- 4) Traduir algoritmes PRAM a sistemes distribuïts usant llibreries de pas

de missatges. La utilització d’operacions col·lectives (tots a tots) síncrones pot substituir eficientment el mode altament síncron i el requeriment de memòria compartida dels algoritmes PRAM. El paral·lisme niat contribueix a facilitar aquest procés de traducció.

5) Contrastar la validesa dels models BSP i LogP així com l’elaboració de models per predir el rendiment dels algoritmes paral·lels quan s’utilitzen les eines de programació paral·lela actuals sobre les arquitectures paral·leles actuals.

6) Desenvolupar eines basades en Marcs o Esquelets que facilitin l’escriptura de versions paral·leles de la majoria de les tècniques generals de resolució de problemes, com ara: ramificació i acotació, programació dinàmica, divideix i guanyaràs, i heurístiques aleatòries.

Els nostres experiments demostren que el rendiment que ofereixen les eines construïdes utilitzant les nostres metodologies és comparable al que obtenen programadors experimentats utilitzant les tècniques i eines clàssiques de pas de missatges. Atès que la metodologia no força el programador a abandonar l’entorn de la llibreria de pas de missatges (MPL), el programador continua disposant de tota l’eficiència i portabilitat del model MPL.



Corbes de rendiment de l’IBM SP2 per a diferents patrons de comunicació.

En l’eix horitzontal es representa el valor de la h-relació, això és, el nombre màxim d’octets comunicats (enviats i rebuts) per un dels processadors a la xarxa.

El CESCA renova les bateries del SAI

El CESCA ha renovat les bateries del Sistema d'Alimentació Ininterrompuda (SAI) i ha instal·lat 2x96 blocs nous de bateries CHLORIDE "Powersafe" tipus 2VB25 de 4V i 2x225Amp de capacitat en 10 hores. Les bateries han estat instal·lades per la companyia Cener Coalba Energia S.A., tenen una garantia de 2 anys i 10 anys de vida (com a mínim) segons l'índex Eurobat. Les noves bateries tenen una autonomia d'una hora consumint 100 kW.

El SAI és un sistema que té una doble utilitat. D'una banda estableix el corrent elèctric que arriba de l'exterior, de manera que les alteracions (pujades i baixades) de tensió no es



El responsable de manteniment del CESCA a la sala de bateries.

percebin ni afectin les màquines; i de l'altra s'encarrega de mantenir les màquines del Centre amb el corrent elèctric de les bateries quan no funciona el subministrament normal.

Les bateries anteriors havien estat funcionant al CESCA des de la seva fundació i van esgotar la seva vida útil a finals de l'any passat, cosa que va motivar el seu canvi.

Edita



AMB EL SUPORT DE



Universitat de Barcelona
Universitat Autònoma de Barcelona
Universitat Politècnica de Catalunya
Universitat Pompeu Fabra
Universitat de Girona
Universitat Rovira i Virgili
Universitat de Lleida
Universitat Oberta de Catalunya
CSIC

TERAFLOP

DIRECTOR

Miquel Huguet

COORDINADORA

Alicia Martínez

REDACCIÓ

Mònica Tudela

COL-LABORADORS

Albert Boada

Oriol Riu

FOTOGRAFIES

Jordi Pareto

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà & Associats

CESCA

Gran Capità, 2-4

08034 Barcelona

Tel. 93 205 64 64

Fax: 93 205 69 79

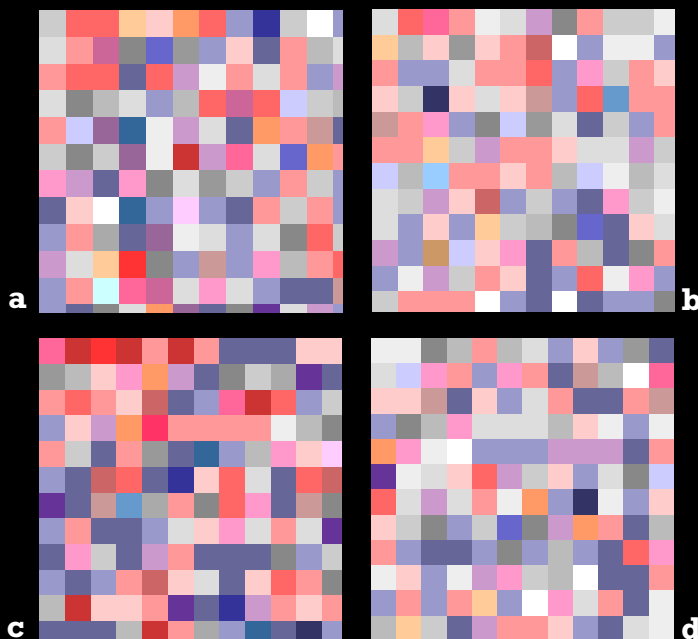
<http://www.cesca.es>

teraflop@cesca.es

DIPOÏT LEGAL: B-33512-94

ISSN: 1134-6671

F O T O / N O T Í C I A



Simulacions bidimensionals de diferents mecanismes de mescla aplicats a sistemes reactius binaris. Les lleis cinètiques formals basades en la hipòtesi d'homogeneïtat del sistema reactiu es revelen inexactes per a certes reaccions controlades per difusió. Els corresponents efectes de segregació espacial per un sistema binari (a) s'analitzen en relació amb l'eficiència de certs mecanismes de mescla (flux de remolins (b), flux de cisallament (c) o flux turbulent (d)), per tal de recuperar les lleis cinètiques clàssiques. Els càlculs han estat realitzats pel Dr. Ramon Reigada del grup de recerca del Dr. Francesc Sagués (UB), gràcies a l'SP2.