

Química Computacional

**Per primera vegada
als Nobel**

- Trobada de TMR
i seminari de CAP
a Edimburg
- El V2250, eficaç amb
el Gaussian 94

L'OBJECTIU ERA INTERCANVIAR EXPERIÈNCIES I FER PLANS DE FUTUR

L'EPCC acull un seminari i una trobada de visitants

L'Edinburgh Parallel Computing Centre va convertir-se el passat mes de setembre en un centre neuràlgic de la computació a nivell europeu. D'una banda es va celebrar un seminari sobre HPC i de l'altra, una trobada de visitants del programa de mobilitat de la Unió Europea (TMR). Investigadors, estudiosos i professionals del món de la supercomputació van poder intercanviar experiències i fer plans de futur.

L'Edinburgh Parallel Computing Centre (EPCC) es va fundar el 1990 com un centre perquè la Universitat d'Edimburg pogués desenvolupar el seu treball en el camp de computació d'altres prestacions (CAP), però els seus orígens es remunten a uns anys abans, a principis dels anys 80. Per aquella data, els investigadors de la Universitat d'Edimburg, principalment en el Departament de Física, van començar a usar i comprar ordinadors per dur a terme la seva recerca. Va ser el 1987 quan un dels factors clau en l'èxit del centre va començar a desenvolupar-se: la unió entre la recerca acadèmica i els projectes industrials. A partir de llavors el centre va començar a ser conegut i això va permetre que el 1990 naixés l'EPCC.

El 1994 el centre va instal·lar el Cray T3D i, a partir d'aquell moment, el centre va guanyar en prestigi i es va convertir en una institució respectada. El 1995 es va fer un pas endavant amb els contactes industrials i es va convèncer dues empreses perquè portessin a la pràctica els resultats d'alguns dels projectes que s'estaven desenvolupant a l'EPCC. Després de tots aquests *petits passos*, el 1996 ja van començar a ser reconeguts com un centre capdavanter a Europa.

La tasca principal del centre és gestionar tota la potència de càlcul de la Universitat (una de les majors con-



Els assistents al TRACS Users Group Meeting.

centracions d'Europa) i ajudar al món acadèmic, industrial i del comerç a fer ús dels sistemes de computació paral·lela per obtenir els màxims avantatges. Per aconseguir aquests objectius el centre porta a terme activitats diverses: programes dedicats a graduats universitaris i a investigadors, provisió de serveis, contactes amb la indústria i participació en col·laboracions finançades per la Comissió Europea i el Govern britànic.

A més del suport directe per part de la indústria, l'EPCC rep suport, entre d'altres organismes, de l'Oficina

de Ciència i Tecnologia i del Departament de Comerç i Indústria. L'equipament de computació del centre, i el suport que ofereix, cobreix tot tipus de sistemes: des d'alguns dels superordinadors paral·lels més potents usats per proporcionar serveis d'abast nacional, fins a multiprocessadors més modestos per a treball comercial. El centre disposa actualment del següent maquinari de supercomputació:

- Cray T3D de 512 processadors
- Cray T3E-900 de 328 processadors



sobre HPC TMR

■ Cray Y-MP4E de 3 processadors que fa de *front-end* del T3D

■ Cray J916 de 10 processadors, aco-
blat al *front-end* del T3D

Un seminari per a la reflexió

Una mostra de les activitats de l'EPCC per potenciar la supercomputació és el seminari organitzat per tractar temes relacionats amb la CAP, anomenat *HPC in Europe*. Al *Seminar'98*, celebrat el 15 de setembre a l'Hotel Balmoral, van estar presents representants de centres de càlcul europeus, entitats vinculades al món del maquinari, grans usuaris, universitats i d'altres instituts de recerca. L'objectiu era posar en conjunt les novetats i els avenços en la CAP i fer entrar en contacte els usuaris, els mànagers i els tècnics dels centres de supercomputació d'arreu d'Europa. Al seminari van assistir gairebé un centenar de persones, que van escoltar les presentacions de les activitats de diversos centres europeus i les perspectives de futur que proposaven els seus responsables.

**La Universitat
d'Edimburg allotja una
de les majors
concentracions de
potència de càlcul a
Europa i aquesta és
gestionada per l'EPCC.**

Les àrees sobre les quals es va discutir són: previsions a llarg termini en el camp de la computació d'altres prestacions, visualitzacions, perspectives de la CAP, transferència de tecnologia, emmagatzematge de dades i *Grand Challenges*.

Reunió de TMR

Un dia després del seminari *HPC in Europe* va celebrar-se el tercer *TRACS Users Group Meeting 1998*. La trobada estava oberta a visitants TMR actuals del centre escocès i a investigadors que haguessin passat per l'EPCC formant part del programa TMR en edicions anteriors. L'objectiu de la reunió era facilitar la difusió de la feina feta a l'EPCC sota el TRACS (*Training and Research on Advanced Computing Systems*), i donar als joves investigadors l'oportunitat de divulgar els seus treballs d'una manera similar a com ho farien als congressos de debò. A més, tots els visitants van tenir l'oportunitat de conèixer-se i de contactar amb gent nova.

Durant la trobada es van celebrar un seguit de sessions paral·leles i es van exposar els treballs fets en àrees diverses: química teòrica, modelització molecular, astrofísica, geologia, informàtica, mètodes numèrics... A més a més es van presentar els resultats provisionals de la Mid-Term Review Survey of Users per a l'EPCC.

Si s'observa el perfil dels visitants TMR que rep Edimburg (que ja ha acollit 240 visitants en el marc dels Programes de Mobilitat) i el perfil dels que rebem nosaltres es comprova que els de l'EPCC són, normalment, més joves que els nostres i que procedeixen d'un nombre més ampli de països europeus.

Aula de Tardor

17 de novembre, de 9.30 a 13.30 h

Introducció a la Supercomputació
M. Huguet (CESCA)

18 de novembre, de 9 a 12 h

Entorn de Supercomputació
J. Cambras i Í. Bàrcena (CESCA)

Del 30 de novembre al 4 de desembre, de 9 a 14.30 h

Llenguatges i models de programació del sistema Exemplar
J. Vences Benito (Convex Supercomputer)

10 de desembre, de 9.30 a 14 h

MARC: una opció per a les simulacions complexes no lineals
R. Viola (Disseny Simulació i Prototips)

17 i 18 de desembre, de 9.30 a 14 h

Seminari d'introducció als algorismes genètics
Ll. Garrido i I. Latorre (UB), J. Vitrià (UAB), F. Comellas (UPC), N. B. Centeno (IMIM), N. Matos (CSIC), J. M. Garrell (URL) i R. Sala (Complex Systems)

Informació

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

Telèfon 93 205 64 64
(Clara Torreblanca)

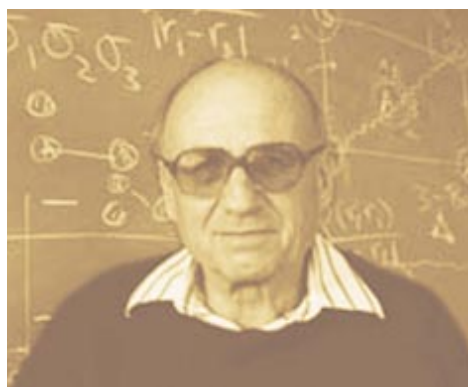
Joan Bertran,
Antoni Oliva.
Departament de Química.
Universitat Autònoma
de Barcelona

**"La Química ja no és una ciència purament experimental".
Són paraules de la Reial Acadèmia de Ciències Sueca amb motiu de l'atorgament del Premi Nobel de Química a Walter Kohn i John A. Pople per les seves contribucions al desenvolupament de la metodologia de la química quàntica.**

"La Química ja purament exp

■ Fa trenta anys, els esforços dels químics teòrics eren menyspreats per molts químics per considerar que tenien un impacte molt petit en la química real. Però les coses han canviat molt, tal com reconeixia Harry

La situació va experimentar un canvi substancial al començament dels anys 60 quan es va produir la revolució informàtica i la creació paral·lela de metodologies computacionals eficients per tractar sistemes d'interès químic.



Walter Kohn i John A. Pople, premis Nobel de Química 1998.

Gray, director de l'Institut Beckman de Caltech, quan, en una conferència pronunciada a Washington, ara fa cinc anys, va dir: "els químics experimentals acostumàvem a riure'ns dels químics teòrics, però ara ja no ens enriem més".

Aquest canvi de mentalitat té una llarga història que es remunta al naixement de la mecànica quàntica i desemboca, en l'actualitat, en els treballs que han merescut ser guardonats per l'Acadèmia Sueca.

La mecànica quàntica ja permetia, des dels seus inicis, la comprensió dels fenòmens químics, però, com Paul Dirac va afirmar encertadament l'any 1929: "Les lleis bàsiques per entendre el conjunt de la química són ja conegudes. La dificultat rau en el fet que l'explicació exacta d'aquestes lleis requereix la utilització d'equacions massa complicades per a ser resoltes."

Cal destacar la importància d'aquesta interrelació fructífera entre tecnologia i metodologia, interrelació que ha permès que els resultats teòrics hagin esdevingut cada cop més acurats i comparables a la precisió experimental. És aquí on s'insereixen els treballs de Kohn i de Pople i la seva evolució al llarg del temps.

D'una banda, Kohn va demostrar, l'any 1964, un important teorema que va significar el naixement d'una nova manera d'enfocar la química quàntica, i va jugar un paper decisiu en el desenvolupament de la teoria del funcional de la densitat (Density-Functional Theory, DFT). Els càlculs DFT van ser aplicats inicialment a l'estudi de l'estat sòlid, però l'augment de la potència dels ordinadors i la introducció d'importants avenços en la metodologia computacional han possibilitat la seva extensió al camp de la química mole-

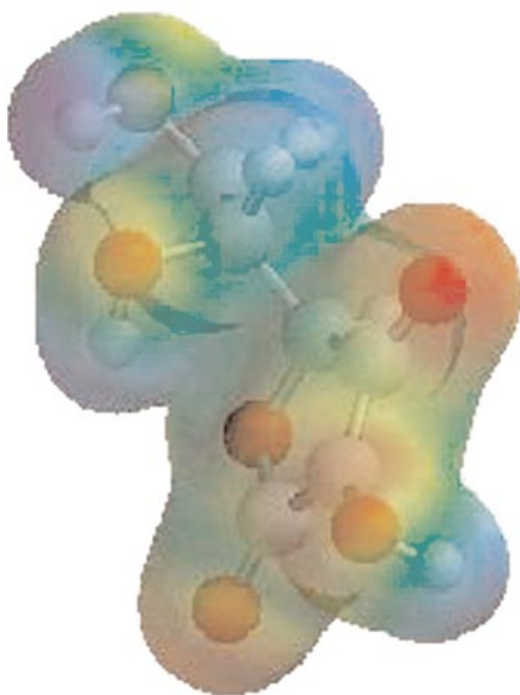
a no és una ciència experimental”

cular. El gran avantatge d'aquest mètode teòric és que permet l'obtenció de resultats acurats per a sistemes grans amb centenars d'àtoms.

D'altra banda, Pople ens ha anat sorprenent al llarg de moltes reunions internacionals per la seva capacitat de mantenir-se sempre al capdavant de l'evolució metodològica en el camp de la teoria d'orbitals moleculars. Les seves aportacions han quedat plasmades en un programa de càlcul, el GAUSSIAN, la primera versió del qual data de l'any 1970.

Aquesta primera versió ha estat contínuament enriquida amb la incorporació de tots els avenços posteriors assolits per Pople i el seu grup de treball. En una d'aquestes millores del programa ha participat un químic teòric català, Josep Lluís Andrés, durant la seva estada postdoctoral als Estats Units.

Un segon canvi substancial es va produir al començament dels anys 90 com a conseqüència, novament, de la interacció mútua entre metodologia i tecnologia informàtica. Aquest segon canvi ha donat lloc al que Siegbahn ha denominat l'era del pragmatisme: la metodologia existent es troba ja en condicions de poder fer front a tot tipus de problemes químics reals. Les aplicacions no han parat de créixer en tots els camps: disseny de fàrmacs a la indústria farmacèutica, estudi de la química atmosfèrica i de la química interestel·lar, recerca de solucions als problemes ambientals, etc. Això ha incorporat definitivament la química teòrica al corrent principal de la ciència química, i



Mapa de la densitat electrònica de la vitamina C.

es justifiquen així les paraules de l'Acadèmia Sueca que apareixen en el títol d'aquest article.

Aquesta era del pragmatisme ha donat lloc a una veritable explosió de programari cada cop més adaptat a la resolució de problemes concrets de les indústries del sector, tal com es pot veure a les fires que organitza l'American Chemical Society durant les seves reunions i als articles que apareixen regularment a la revista *Chemical and Engineering News*.

Un altre exemple d'aquesta mentalitat pragmàtica és la incorporació de la metodologia DFT a la versió de l'any

1992 del programa GAUSSIAN, la qual cosa permet la utilització de mètodes híbrids que treuen partit dels avantatges dels dos enfocaments. Tot això ha ocasionat que els càlculs basats en el funcional de la densitat hagin experimentat un gran apogeu en els darrers anys, tal com es va poder comprovar en el darrer Congrés Mundial de Química Quàntica celebrat a Atlanta l'any 1997.

A Catalunya, aquesta època de febril creativitat de la química teòrica també s'està produint gràcies, en bona part, a una afortunada coincidència: la creació del Centre de Supercomputació de Catalunya (CESCA) just a l'inici dels anys 90.

La química quàntica catalana ha tingut, des de fa anys, una presència notable en tots els camps temàtics de la química a nivell internacional. Els grups de recerca, que agrupen a més d'un centenar d'investigadors i que formen una de les xarxes temàtiques del Pla de Recerca de la Generalitat de Catalunya, tenen actualment un prestigi ben guanyat i publiquen regularment en les revistes de més elevat índex d'impacte mundial.

Catalunya, es troba, doncs, en una posició capdavantera en aquesta nova era en què la Química ha deixat de ser una ciència purament experimental. I això és gràcies a l'esforç de tots els seus investigadors, però també és degut al suport rebut de l'Administració, una de les mostres del qual és la creació i la consolidació del Centre de Supercomputació de Catalunya.

El V2250, eficaç amb el Gaussian

Un cop actualitzats l'IBM SP2 i l'SGI O2000, i instal·lat l'HP Exemplant V2250, el CESCA ha tornat a avaluar el rendiment de les màquines amb els benchmarks de Gaussian94 que es van presentar el passat mes d'abril (TERAFLOP núm. 31). De mitjana, el V2250 executa aquests benchmarks un 5% més ràpid que l'SP2 i un 20% més que l'O2000.

Figura 1. Benchmarks de Gaussian 94

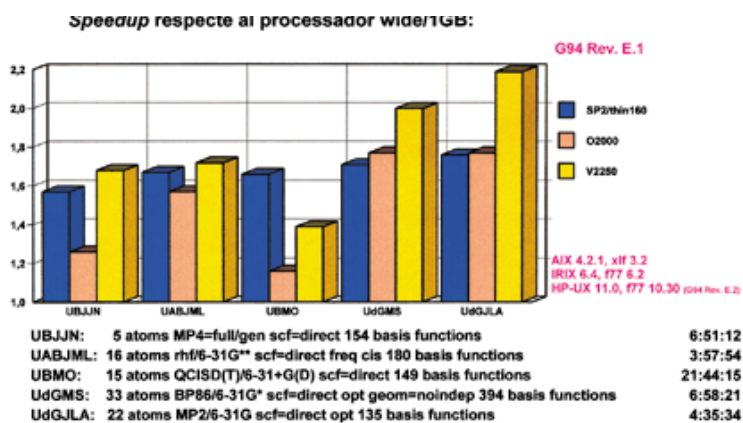


Figura 2. Speedup del Gaussian 94 en paral·lel

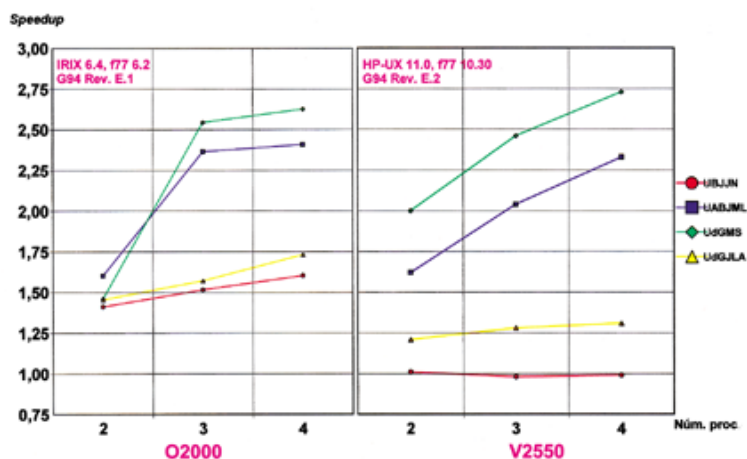
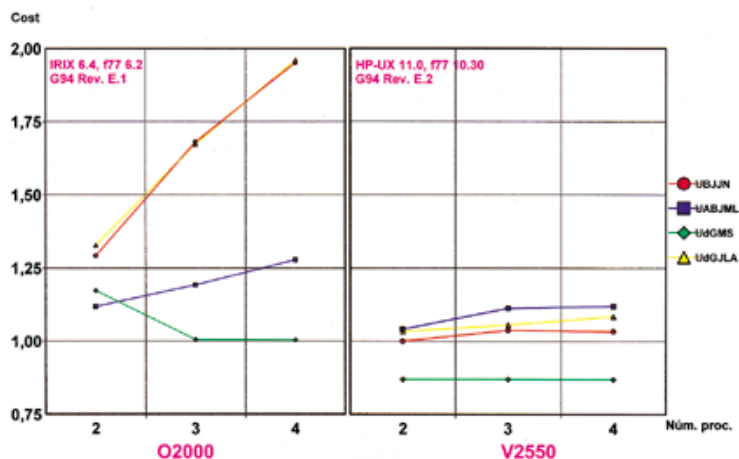


Figura 3. Cost del Gaussian 94 en paral·lel



Com ja s'esperava, aquest comportament no és uniforme per a tots els benchmarks (figura 1) que s'han usat*. Per exemple, l'UBMO s'executa millor a l'SP2 que al V2250. Quatre dels cinc benchmarks s'han executat en paral·lel al V2250 i a l'O2000. El cinquè (UBMO) s'ha descartat per la seva llarga durada. A més, l'SP2 no disposa de Gaussian paral·lel. Una primera conclusió obtinguda és que el link 913 (usat especialment pel benchmark UBJJN) no està paral·lelitzat al V2250 però sí a l'O2000. Actualment HP està paral·lelitzant aquest *link* i properament s'espera obtenir millors resultats.

Els benchmarks s'han fet amb un, dos, tres i quatre processadors (figura 2), perquè, com es va demostrar en les proves realitzades al març d'enguany, el Gaussian no escala significativament amb un nombre superior de processadors. El benchmark que escala millor és l'UdGMS: s'obté un *speedup* de 2,46 per a tres processadors a l'V2250 i de 2,54 a l'O2000. Curiosament, el temps total d'execució d'aquest benchmark en paral·lel és menor que si es fa en seqüencial, i per tant, la primera opció és més econòmica per als usuaris (figura 3). En distribuir les dades en diversos processadors es millora el rendiment de la memòria *cache* i el programa s'executa més ràpidament, no tan sols en temps de rellogte (*elapsed time*) sinó en el temps total de processador usat.

Les primeres dades fan pensar que el V2250 genera molt menys *overhead* (treball addicional que implica l'execució d'un programa en paral·lel respecte al seqüencial) que l'O2000 en codis paral·lels, malgrat que és difícil generalitzar només amb aquests benchmarks. Si la paral·lelització del Gaussian és la causa d'aquest fenomen, o si això és degut a les diferències d'arquitectura entre les màquines, és un tema de debat que queda obert.

*Aquests benchmarks són: UBJJN, UABJML, UBMO, UdGMS, UdGJLA

Les Jornades Tècniques de RedIRIS 1998 arriben a Barcelona

Com cada any, RedIRIS organitza les seves Jornades Tècniques com a punt de trobada entre les persones més directament implicades en les comunicacions de les seves institucions afiliades.

Enguany, les jornades tindran lloc a Barcelona i estaran coordinades pel CESCA, amb la col·laboració de la UPC. Les Jornades Tècniques se celebraran el 23 i el 24 de novembre a

l'Escola Tècnica Superior d'Enginyers Industrials de Barcelona (Av. Diagonal, 647) i les *Reuniones de los Grupos de Trabajo*, els dies 25 i 26 de novembre en el Campus Nord de la UPC.



Ponències dels proveïdors

- Yolanda Lamilla (CISCO Systems)
- Néstor Carralero (CISCO Systems)
- Carles Batalla (Unitronics)
- Sun Microsystems
- Luis Miguel García (Microsoft)
- Miguel Ángel Sant (Satec)
- Telefónica

Ponents de les organitzacions afiliades a RedIRIS

- Àngel Martínez Nistal (Uniovi)
- Artur Serra (UPC)
- Pedro Lizcano (CICYT)
- Rogelio Montañana (UV)
- F. Cruz, J. Centeno, P. de las Heras, J. M. González, V. Matellán, F. Ballesteros (UC3M)
- Jorge Dávila (FI. UPM)
- José L. González-Sánchez (UPC)
- Sergi Sánchez López (UPC)
- A. F. Gómez Skarmeta, F. Javier García, J. Gil, E. Martínez,

G. Martínez, O. Cánovas, A. Caja (UM)

- Joan Antoni Martínez, Àngel Jarabo (UAB)
- M. Marrero, A. Ocón, A. Álvarez, M. Galán, E. Rubio (ULPGC)
- Antoni Roure, Sílvia González (UOC), Josep Fernández (SDI-UDIAT.CHPT)
- Leandro Navarro, Víctor Sosa (UPC)
- Ramon Ros (CBUC)
- Miquel Huguet (CESCA)

Orador convidat

- Fernando Liello (INFN)

Grans temes de debat

- Distribució de serveis
- Formació
- Societat de la informació
- Seguretat en la xarxa
- Continguts en la xarxa

PROGRAMES DE MOBILITAT

Pascal Bonnet, de la **Universitat de Marseille III** (França), ha vingut convidat per Carles Jaime, del Departament de Química de la UAB, per treballar en el projecte *Study of the Ternary Complexes between Two Units of Cyclodextrin (Host) and Some Guests by MM and MD Computations*. Bonnet va arribar a Barcelona l'1 de setembre i marxarà al seu país el 28 de febrer de 1999.

Isidore Last, de la **Tel-Aviv University** (Israel), ha treballat en el projecte *Quantum Mechanical Study of the Electron Transfer Reaction $H+H_2^+ \rightarrow H_2+H^+$* del 3 de setembre al 3 d'octubre. Last va venir convidat per Antonio Aguilar, del Departament de Química Física de la UB.

Marta Filizola, de la **Seconda Università degli Studi di Napoli** (Itàlia), estarà entre nosaltres de l'1 d'octubre al 18 de desembre d'enguany per tal de desenvolupar el projecte *Ab Initio Computational Study of the Effect of the Solvent on the Conformational Space of Flexible Molecules*. Filizola ve convidada per Juan Jesús Pérez, del Departament d'Enginyeria Química de la UPC.

Mirko Vitiello, de la **Universit  di Milano** (Itàlia), treballar  en el projecte *Ab Initio Cluster Model Studies of the Interaction of Metal Particles with Regular and Defective Sites of SiO_2* , convidat per Francesc Illas del Departament de Qu mica F sica de la UB. La seva estada va comen ar el 15 d'octubre i s'acabar  el 15 de desembre.

Jochen K.W. D rring, de la **University of Kaiserslautern** (Alemanya), estar  entre nosaltres de l'1 de novembre de 1998 al 30 d'abril de 1999 per desenvolupar el projecte *Parallel Algorithms to Model the Generation and Processing of Full Three-Dimensional Light Bullets in Optical Devices and Cavities*. D rring ha estat convidat per Llu s Torner, del Departament de Teoria del Senyal i Comunicacions de la UPC.

Informaci : <http://www.rediris.es/rediris/difusion/JT/JT98/>

Novetats de comunicacions

■ **Connexió amb els EUA.** La capacitat de l'enllaç de RedIRIS amb els EUA va augmentar el passat 19 d'octubre en 4 Mbps. En aquests moments ja es disposa de 14 Mbps ATM, que equivalen a uns 12 Mbps IP. Abans del canvi aquestes dades eren 10 i 8,5 respectivament. Aquest augment suposa una millora de l'accés.

■ **FTP anònim.** Milers de programes de lliure distribució i versions de demostració comercials es troben al servidor d'FTP anònim del CESCA des del mes de setembre. Aquestes aplicacions ocupen un total de 13,5 GB d'espai en disc. Teniu a la vostra disposició *mirrors* de llocs tan visitats com ara gnu, linux, netscape o winsite. Si useu aquest ftp (<ftp://ftp.cesca.es>), us evitareu anar a buscar els mateixos programes a servidors més llunyans.

■ **La UB, de 10 a 155 Mbps.** La Universitat de Barcelona (UB) es connecta a l'Anella Científica mitjançant un commutador ATM anomenat Tosses, des del passat dia 15 d'octubre. Fins a aquesta data, la UB estava connectada a l'Anella per un *switch* Ethernet que es diu Montagut, a una velocitat de 10 Mbps. Ara, amb l'ATM, la UB ha passat a tenir una velocitat d'accés a l'Anella de 155 Mbps. Aquest canvi suposa un salt qualitatiu a l'hora d'accedir als diversos servidors del CESCA: supercomputadors, cerca de farmacòfors, *News*, *FTP mirror*, etc.

Edita

CESCA

AMB EL SUPORT DE



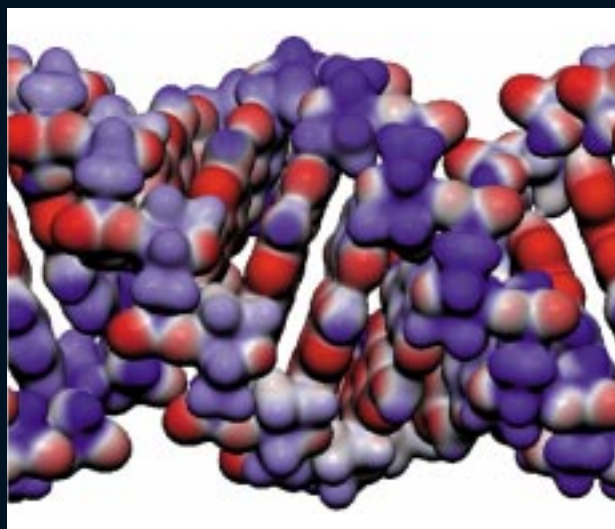
Generalitat
de Catalunya



FUNDACIÓ
CATALANA
PER A LA
RECERCA

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

F O T O / N O T Í C I A



Per localitzar les zones més reactives d'una molècula s'acostuma a representar el potencial electrostàtic amb un codi de colors (vermell: més negatiu; blau: més positiu). A la imatge, una cadena infinita d'A-ADN poly

dC-poly dG (cel·la unitat de 715 àtoms amb condicions periòdiques de contorn) estudiada amb el programa SIESTA. SIESTA (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms) implementa la metodologia DFT amb algorismes d'ordre-N, és a dir, que escalen linealment amb la mida del sistema, per la qual cosa és idoni per atacar sistemes d'un elevat nombre d'àtoms com els tractats a la física d'estat sòlid, la química física, la biologia molecular, la mineralogia, etc. Els propers dies 15 i 16 de desembre es farà al CESCA un curs d'introducció a l'ús d'aquest programa a càrrec de dos dels seus autors (Pablo Ordejón i Daniel Sánchez-Portal).

Més informació a <http://www.cesca.es/formacio>.

TERAFLOP

DIRECTOR

Miquel Huguet

COORDINADORA

Alicia Martínez

REDACCIÓ

Mònica Tudela

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

DIPÒSIT LEGAL: B-33512-94

ISSN: 1134-6671