

ELS ASSISTENTS VAN COINCIDIR A DESTACAR EL PAPER CLAU QUE JUGA LA UNIVERSITAT EN EL DESENVOLUPAMENT CIENTÍFIC I TECNOLÒGIC

Brainstorming de comunicacions

Si en el món de les comunicacions espanyoles es produeix alguna innovació o algun progrés en els propers mesos és molt probable que la idea es comencés a pensar el passat novembre durant la celebració de

les Jornades Tècniques de RedIRIS 98, celebrades del dia 23 al 27. Unes 350 persones es van aplegar a l'Escola Superior d'Enginyers Industrials de Barcelona per posar en comú les seves experiències.

Ja des de la inauguració i la presentació de les jornades va quedar ben clara la voluntat de progrés que es desitja per a les comunicacions des de les institucions catalanes i les de l'Estat; i el paper dinamitzador que juga la Universitat per donar impuls a tots els avenços. Els assistents eren tècnics i responsables de comunicacions de les institucions afiliades a RedIRIS (universitats espanyoles i centres d'R+D públics espanyols). De dimecres a divendres, com a complement de les jornades, van tenir lloc, a l'Aula Màster de la UPC i a la sala de conferències del CESCA, les reunions dels Grups de Treball per tal de debatre temes més concrets entre els especialistes de cada matèria.

En l'acte de presentació de les jornades, Miquel Puig, Comissionat per a la Societat de la Informació, va explicar els plans del govern de Catalunya per modernitzar el país des de la Societat de la Informació i va reiterar la intenció del Comissionat de fer arribar Internet a totes les escoles de Catalunya. El Comissionat va dir que en el camp de la recerca i el progrés, la Universitat és "el laboratori de Catalunya". Gonzalo León, subdirector general de Planificación y Seguimiento de la Oficina de Ciencia y Técnica de Presidencia de Gobierno, va destacar que ens trobem en un moment d'inflexió pel que fa a la Societat de la Informació perquè a nivell europeu s'està enllentint el V Programa Marc i a nivell estatal s'està definint el IV Plan Nacio-



Miquel Huguet, director del CESCA, durant la seva intervenció.



Un moment de la inauguració de les jornades a la sala d'actes de la ETSEIB.

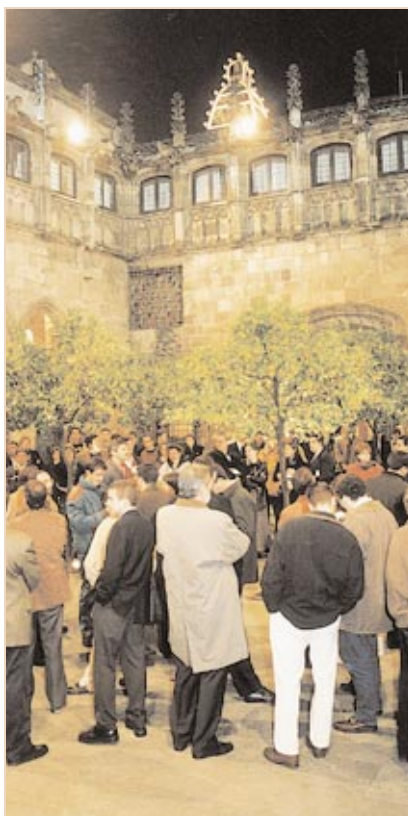


nal. León va apostar per potenciar els recursos humans, per tal de no perdre el tren del progrés cap a la Societat de la Informació. Emilio Lora-Tamayo, vicepresident d'Investigació Científica i Tècnica del CSIC, va destacar el paper bàsic que té la xarxa per a l'investigador: "És imprescindible", va dir. "RedIRIS és a la base de la transformació de la societat ja que, a més de donar servei, vehicula nous mètodes d'aprenentatge, i és suport de transaccions i de teletreball", va afegir. Jaume Pagés, rector de la UPC, va apuntar en aquest sentit que la Universitat tindrà "un paper clau a l'hora de difondre les noves tecnologies i evitar les ruptures culturals".

El director general d'Universitats, Antoni Giró, va comentar en la cloenda que el sistema universitari català ja s'havia consolidat i que a la Universitat s'ha de consolidar la investigació, la docència i els serveis, més que no pas ampliar-los. "Les comunicacions són necessàries per a això i la formació, també", va concloure.

L'informe de gestió de RedIRIS

Víctor Castelo va presentar les dades més importants de RedIRIS el 1998: l'augment en amplades de banda externes, l'estabilitat de la xarxa TEN-34, la duplicació del tràfic global que porta la xarxa, la connexió amb els Estats Units (que ha evolucionat de 4 a 8 i a 12 Mbps en valors IP), la connexió amb la nova Anella Científica. Castelo també va fer una previsió de futur i va explicar que s'està evolucionant cap a la xarxa successora de TEN-34, la TEN-155, materialització del projecte Quantum, que permetrà fer reserves d'amplada de banda gràcies a la utilització de la tecnologia IP. Pel que fa a les llistes de distribució, RedIRIS en té més de 150 i més de 51.000 subscriptors. També disposa del servei de *news*, *proxy*, *cache*, *ftp* anònim i *MBone*. De cara al futur, s'espera fomentar TEN-155, la xarxa del projecte Quantum, i tendir cap a RedIRIS2 (QoS), que seria l'esbós de la xarxa que funcionaria del 2000 al 2003.



La vessant cultural

Les Jornades Tècniques han tingut també la seva vessant cultural on s'ha intentat que els convidats, i especialment aquells que venien de fora de Catalunya, coneguessin una mica millor la cultura i la forma de fer catalanes. Amb aquest objectiu es va convidar tots els inscrits al Palau de la Generalitat. Els assistents van poder gaudir de la música del carilló i d'un concert de la mà del Cor de la Universitat de Barcelona. Joan Albaigés, Comissionat per a Universitats i Recerca, va fer un breu resum de la història de la Generalitat i va destacar la capacitat d'integració social i de contribuir a les idees futures dels catalans. "Les tecnologies trenquen les barreres de temps i d'espai i espero que construeixin punts de trobada com un valor que enriqueixi a tothom".

Les necessitats dels usuaris

Diversos grups d'usuaris van exposar què necessitaven de RedIRIS, en les seves especialitats. Sergi Casamiglia (UAB) va comentar que la xarxa li calia per a realitzar simulacions a distància i va posar l'exemple d'una granja virtual. Mariano Barbacid (Centro Nacional de Investigaciones Oncológicas) va dir que el seu centre tenia la idea d'arribar a funcionar al 100% amb mitjans informàtics. Javier Arántegui (UdL) va alertar sobre el fet que molts cops l'usuari està oblidat i va demanar una manera única de resoldre els problemes perquè la gent no es perdi buscant solucions complicades. Enrique

Marquina (UV) va dir que les necessitats dels estudiants i dels usuaris en general no estaven ben ateses i que calien més recursos informàtics i més formació per usar-los. Jesús Sanz de las Heras, tècnic de RedIRIS, va recollir l'opinió dels ponents i va admetre que "de vegades, el fet de no voler deixar passar el tren tecnològic fa perdre de vista l'usuari". "El que cal fer és adequar les noves tecnologies a les necessitats dels usuaris i oferir eines útils i poc complexes". De las Heras també va destacar que l'autèntic desafiament és la integració de les eines existents en l'actualitat: "Es pretén que els usuaris treballin en allò en què han de treballar. Volem que la informàtica sigui transparent a l'usuari".

Els estands dels proveïdors

A tocar de les sales de conferències es van instal·lar durant els dos dies de les Jornades un seguit d'estands de proveïdors que van mostrar al públic els productes que ofereixen. 3 Com, Retevisión, KernDatanet, Compaq, Microsoft, Unitronic, Sun i Satec, estaven entre els presents.



El repte de la Societat de la Informació

Artur Serra (UPC) va fer èmfasi en la seva intervenció en les xarxes ciutadanes, un nou concepte de comunicació a través de la xarxa que va més enllà de la simple suma d'ordinadors a la ciutat, basat en la participació i la comunitat. Hi ha dos elements que les configuren: els ordinadors i l'associació que els manté donant suport de manera legal, jurídica i ciutadana. També va parlar de les xarxes ciutadanes de segona generació o localnet: és una Internet lògica, pública, dissenyada per facilitar l'accés del conjunt de la població a la Societat de la Informació. En aquest context cada ciutadà tindria

la seva direcció d'Internet i sumant-les totes, es podria fer un directori.

Joaquín Soler, del Instituto Cervantes, va fer una descripció de la "societat de l'aprenentatge", on l'educació continuada i l'actualització de coneixements són claus. En aquest tipus de societat, el ritme de l'evolució tecnològica és més gran que el cultural i "la qualitat de vida depèn de la sensatesa en l'ús de la tecnologia". Soler va vaticinar una tecnificació de les ciències socials i de les humanitats i una humanització tècnica.

L'Ethernet

Rogelio Montañana (UV) va oferir una xerrada sobre la història de la tecnolo-

gia Ethernet, el naixement de la qual se situa a Hawaii l'any 1970 de la mà d'una xarxa anomenada Alohanet. Al 1973, Robert Metcalfe va perfeccionar l'Alohanet i ja li va donar el nom d'Ethernet. A més d'una mica d'història, el conferenciant també va parlar dels suports físics d'Ethernet: estàndards de cablatge, fibra òptica, topologies, fiabilitat i rendiment.

El diari electrònic

Vicente Luque Centeno, de la Universitat Carles III de Madrid, va parlar de la problemàtica d'aquest tipus de publicacions en l'actualitat, pel fet que, molts cops, no s'adapten a les necessitats dels lectors. Va presentar les noves eines que s'usen per treballar en aquest camp: els estàndards XML o DHTML. Luque creu que la situació actual de la premsa electrònica és "bastant decepcionant" perquè, segons va dir, "els diaris actuals són pàgines HTML amb imatges", són edicions diàries, permeten la recerca per paraules però no per temes, no s'identifica el lector i no se li pot personalitzar la informació. El conferenciant va apostar per la personalització de les publicacions com a element d'èxit dels diaris del futur a la xarxa.

Seguretat en les comunicacions a les universitats

Aurelio Herrero (CSIC) va explicar que, en aquest camp, l'objectiu és "evitar que ningú no faci un ús indegut dels recursos i les màquines" i va apuntar que es destinen "més diners a comprar-ne de noves que a protegir la



Jaume Pagés i Miquel Puig.



Gonzalo León, Antoni Giró i Mateo Valero.

PROGRAMES DE MOBILITAT

Irene Nobeli, del **University College London** (Regne Unit), va arribar a Barcelona el passat 1 de novembre per dur a terme el projecte *Theoretical Study of the Packing of Molecular Crystals Presenting Magnetism*. Nobeli ha vingut convidada per Juan José Novoa, del Departament de Química Física de la UB, i marxarà el 30 de gener de 1999.

Marie Pierre Habas, de la **Universitat de Pau** (França), ha vingut convidada per Josep Manel Ricart, del Departament de Química Física i Inorgànica de la URV per tal de treballar en el projecte *Adsorption and Activation of CO₂ on Metallic Pt(111) and Bimetallic PdCu and SnPt Surfaces*. Habas va arribar l'1 de novembre i marxarà el 30 d'abril de 1999.

Laure Catala, de l'**Institut Charles Sadron d'Strasbourg** (França), treballa en el projecte *Rationalization of the Magnetic Properties of some Diradicals Using Ab Initio Methods*, convidada per Juan José Novoa, del Departament de Química Física de la UB. Catala va estar entre nosaltres del 15 de novembre a l'1 de desembre. La investigadora farà una segona estada amb el mateix grup d'investigació de l'1 al 15 de febrer de 1999.

Barbara Lax, de la **University of Karlsruhe** (Alemanya), va arribar a Barcelona el passat 1 de novembre per treballar amb Eugenio Oñate, del CIMNE (UPC). Lax desenvoluparà el projecte *Development and Validation of Finite Element Models for Large Scale Thermo-mechanical Analysis* fins a l'1 de juny de 1999.



La xerrada de Fernando Liello es va transmetre per MBone.

seguretat". Rubén Martínez (RedIRIS) va apuntar que "els costos pugen de forma logarítmica i cada cop costa més mantenir la seguretat", tant en diners com en hores de treball del personal. Manuel Medina (UPC) va presentar estadístiques sobre seguretat a la xarxa. La dificultat inicial és més detectar els problemes més que no pas protegir-los. Una de les dades curioses que va exposar va ser que només un 47% dels atacs tenen com a origen Internet. Rubén Martínez (RedIRIS) va destacar que la xifra de problemes de seguretat pot ser més gran perquè hi ha moltes institucions que ho resolen de forma bilateral amb la institució que ha originat el problema i això no consta en les estadístiques. Tots els convidats van destacar que el tema de la seguretat és molt relatiu i que la importància de l'incident determinarà les mesures que es prenguin.

L'MBone

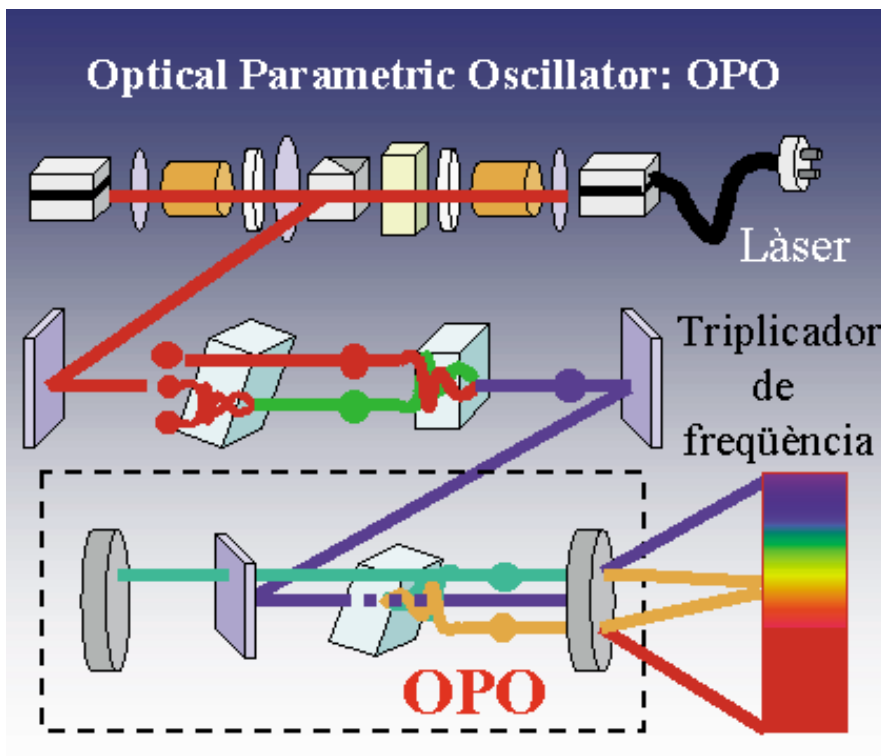
Una mostra de la importància que els experts en comunicacions atorguen a aquest mitjà és el fet que totes les xerrades i taules rodones de les jornades es van oferir en directe per MBone. De la seva banda, Francisco Cruz, de la Universidad Carlos III de Madrid, va oferir una xerrada sobre el tema, en la qual hi va haver intervencions per aquest mitjà. Es va parlar de la necessitat de connectar de forma adient el maquinari i el programari per a una bona sessió d'MBone. Es va presentar



una experiència de professor i alumne a distància, es van exposar els problemes més comuns que apareixen i les eines per solucionar-los. Una conclusió obtinguda és que l'MBone ja està estable per a la docència i que cal personal qualificat i inversions no costoses. També es va apuntar la possibilitat de crear canals permanents d'MBone.

El convidat estrella

Fernando Liello, de la Universitat de Trieste, autor de molts treballs en la Xarxa Nacional Italiana, Chairman del Programa Quantum i de la Red TEN-155 va ser el convidat especial de les jornades. Liello va explicar les característiques de la xarxa italiana en la seva xerrada *GARR-B: The National Italian Research Network. A European Perspective*. GARR-B és la xarxa italiana creada el març de 1988 i el convidat va comparar les seves característiques amb les de la xarxa europea TEN-155. Una de les conclusions obtingudes és que les xarxes de recerca internacionals i nacionals s'han de coordinar d'una manera més adient, i que és necessària la cooperació.



**Lluís Torner, Juan Pérez,
David Artigas i
Concepción Santos**
ETSETB, Laboratori de Fotònica
Departament de TSC, UPC

per dispositius fotònics.

Per a fer-se una idea del salt quantitatiu i qualitatiu que l'impacte d'aquests sistemes tindrà a la nostra societat, cal tenir present que els sistemes de comunicacions no òptics operen amb capacitats inferiors a un Giga-bit per segon. Aquests sistemes s'usen actualment, per exemple, a totes les xarxes d'àrea local amb l'excepció d'entorns de tecnologia punta com ara anelles científiques i tecnològiques. Els sistemes de comunicacions òptiques són els que han de fer possible l'establiment d'una xarxa de comunicacions potent, flexible i transparent al voltant del món, capaç d'absorbir els volums gegants de dades que requereixen la gran varietat de serveis multimèdia d'accés universal, sense barreres geogràfiques, que la xarxa Super-Internet ha d'oferir. L'objectiu és que aquesta xarxa ofereixi capacitat "il·limitada" a la majoria d'usuaris individuals, en el mateix sentit que la potència elèctrica o el cabal d'aigua o gas que es contracta a cada domicili particular en funció de les necessitats i tipus de vida de l'usuari. Alguns d'aquests sistemes estan disponibles, però l'assoliment de l'objectiu global constitueix una fita fascinant a escala mundial per a les properes dècades.

Dins d'aquest programa d'investigació, la simulació i en particular la supercomputació, és una de les eines claus per dos motius. El primer és l'altíssim i molt sovint prohibitiu cost econòmic dels prototips i sistemes experimentals reals. Aquest és el cas, per exemple, dels enllaços de fibra òptica intercontinentals submarins o terrestres de gran distància, que contenen uns quants milions de metres de fibra òptica, centenars d'amplificadors òptics, i milers de dispositius fotònics i electrònics d'altas prestacions. Actualment hi ha instal·lats uns 500.000 km de cable de fibra òptica a enllaços submarins que suporten la immensa majoria de les comunicacions inter-

La fotònica revoluciona les telecomunicacions

L'extraordinari potencial dels sistemes de comunicacions òptiques pot fer possible Super-Internet. Les simulacions massives i la supercomputació permeten descobrir i desenvolupar alguns dels ingredients necessaris.

L'òptica i la fotònica són un ingredient essencial de les tecnologies de la informació i de les comunicacions actuals. Això és degut al gran potencial de les tecnologies basades en la llum per transmetre i processar informació, i per a la detecció remota d'una gran varietat d'espècimens a medicina, biologia, medi ambient, i diversos camps de l'enginyeria. En el cas dels sistemes de comunicacions, l'objectiu actual és utilitzar tot el potencial de les tecnologies òptiques i fotòniques desenvolupant sistemes anomenats Totalment Òptics de màxima flexibilitat i transparència,

amb capacitats de transmissió superiors al Terabit per segon (Tbps). Un Terabit són 1.000 Gigabits i la capacitat potencial d'un sol cable de fibra òptica és d'unes desenes de Terabits. Malgrat el seu nom, l'objectiu no és fer sistemes exclusivament òptics, sinó ben al contrari, sistemes que es basen precisament en el potencial, avui per avui incomparable, de les tecnologies electròniques per generar i processar quantitats ingents de dades. De fet, utilitzen massivament dispositius electrònics per a moltes funcions, però que substitueixen alguns components essencials que en limiten les prestacions

continentals. Per a l'any 2003 està previst doblar aquesta xifra, amb una inversió de decenes de bilions de PTA. Els potents simuladors que s'han desenvolupat durant els darrers anys fan possible la simulació d'enllaços virtuals i són imprescindibles per als investigadors a l'hora de dissenyar els nous sistemes.

Les investigacions actuals en aquest terreny se centren en enllaços terrestres i transoceànics de màxima capacitat, amb multiplexació massiva en temps, polarització i longitud d'ona (TDM+ PDM+ WDM), en sistemes sense regeneradors de senyal i amb amplificació totalment òptica. Una altra àrea clau, on la simulació ha jugat i juga un paper determinant, és en el desenvolupament de sistemes basats en la transmissió dels anomenats "solitons òptics". Els solitons són paquets molt estrets i robustos de llum que no es dispersen ni es difracten, que viatgen inalterables durant distàncies molt llargues, i es comporten de manera anàloga a compactes boles de billar. Per això constitueixen els bits naturals d'informació. Els solitons són entitats que apareixen a totes les àrees de la ciència no lineal, des de la biologia fins a la meteorologia passant per l'astrofísica, i es basen en la compensació mútua de diversos efectes que separadament són no desitjats. En el cas dels solitons òptics, les simulacions s'estan utilitzant per a investigar el seu potencial i avantatges davant dels formats NRZ de transmissió de dades tradicionals.

Els descobriments numèrics realitzats mitjançant les simulacions d'enllaços òptics han permès fa pocs mesos a laboratoris americans, japonesos i europeus, per exemple, la demostració experimental de la propagació de 100 canals multiplexats en freqüència de 10 Gbps cadascun a un enllaç totalment òptic, fent un total de 1 Tbps, o la demostració experimental de la propagació de trames solitòniques a 40 Gbps per canal a un enllaç totalment òptic de 8.500 km.

Un altre exemple fascinant ve donat pel projecte d'escala mundial OXYGEN que s'ha desenvolupat i dissenyat numèricament. El projecte consisteix en la instal·lació d'uns 160.000 km de fibra òptica al voltant de tots els continents amb l'excepció de l'Antàrtida,

amb quatre parells de fibra als trams submarins intercontinentals amb capacitat de 640 Gbps, i dotze parells als trams terrestres de curta distància amb capacitats de 1.200 Gbps. La figura d'aquesta plana mostra l'esquema que tindrà la primera fase de la xarxa projectada. La implementació del projecte s'iniciarà durant el mes de de-

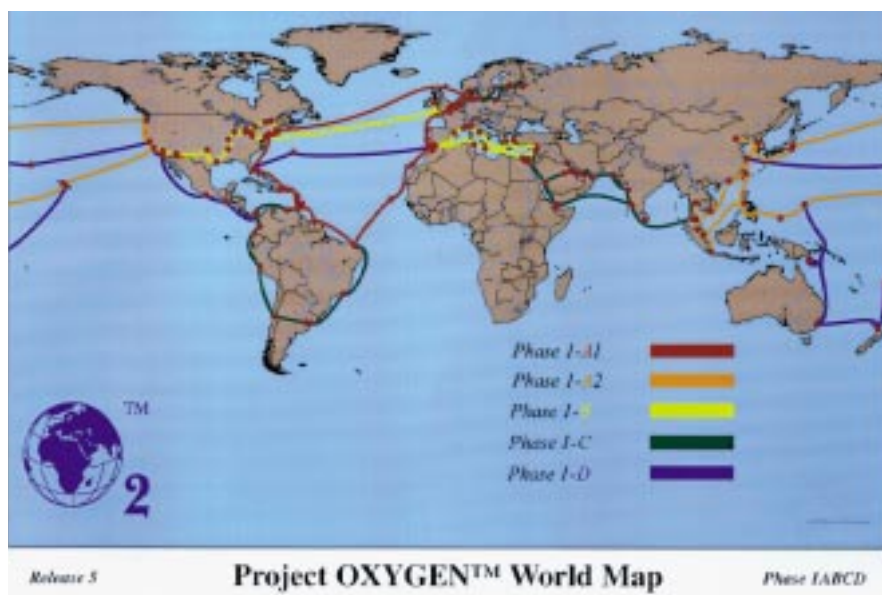
Els Sistemes de Comunicacions Òptiques són els que han de fer possible l'establiment d'una xarxa de comunicacions potent, flexible i transparent al voltant del món

sembre de 1998 al mateix temps que la reunió periòdica dels seus participants se celebrarà a Barcelona.

El segon motiu que fa les eines de simulació imprescindibles és la necessitat de descobrir nous fenòmens físics i noves estratègies de control de llum amb la pròpia llum. Aquesta tasca és difícilment realitzable directament al laboratori ja que els fenòmens en qüestió són rarament observables experimentalment abans que s'hagin descobert numèricament les condicions adients. Bons exemples d'aquesta situació es troben en el comportament de siste-

mes làser de generació de llum, i en la propagació de polsos i feixos de llum intensos a materials òptics. Tots aquests són sistemes complexos, de comportament no lineal, amb importants aplicacions a diversos camps més enllà de les comunicacions, com ara la teledetecció, la medicina i la biociència en general. Tanmateix, alguns d'aquests sistemes constitueixen un bon exemple de sistemes la simulació realista dels quals no ha estat possible fins fa poc temps, quan la capacitat de càlcul i la memòria dels superordinadors han permès la implementació dels algorismes tridimensionals necessaris. La figura que encapçala l'article mostra l'esquelet d'un sistema de generació de llum làser de freqüència sintonitzable com els que s'utilitzen, per exemple, a sistemes d'espectroscòpia i detecció remota. La simulació acurada de la generació de polsos de llum tridimensionals, anomenats *light bullets*, en aquests sistemes és encara un repte, fins i tot en els superordinadors més potents.

Tant se val si l'àrea de treball són els enllaços transoceànics submarins, els solitons, nous tipus de làsers o xips òptics integrats. Els investigadors que treballen en aquesta àrea de les tecnologies fotòniques tenim la gran motivació de saber que el resultat de la recerca oferirà oportunitats que fa ben poc eren difícilment imaginables per a la manera en què la humanitat treballa, crea, s'entreté, interacciona mútuament, i gestiona el seu futur.



Cinc centres de l'Estat repeteixen a la llista dels TOP500

Es centres de l'Estat que apareixen a la llista publicada el 5 de novembre són, per ordre d'aparició, el CEPBA, el CIEMAT, l'INEM, la Universitat de València i el CESCA. El CEPBA es col·loca al capdamunt dels centres espanyols (275) amb el seu SGI Origin 2000 amb 64 processadors i un R_{max} de 26,24 Gflop/s. A continuació trobem (a la posició 306) el SGI T3E900 de 38 processadors del CIEMAT, amb un R_{max} de 24,73 Gflop/s. En tercera posició (lloc 351) es troba el Sun HPC 10000 de 52 processadors de l'INEM amb un R_{max} de 21,68 Gflop/s. L'SGI Origin 2000 amb 64 processadors i un R_{max} de 20,75 Gflop/s de la Universitat de València (posició 402) ve a continuació. El CESCA, finalment, apareix en la posició 439 de la llista amb l'IBM SP2 de 44 processadors i un R_{max} de 19,46 Gflop/s. La llista es pot consultar a la web:

<http://www.top500.org>

La llista del mes de novembre dels TOP500 continua en la línia de la passada edició i conserva entre els seus ordinadors els dels cinc centres que ja apareixien a l'edició del mes de juny. Sense noves incorporacions i sense baixes.

Una altra dada destacada, tot i que no directament referida als centres de l'Estat, és que els Estats Units continuen guanyant terreny a la llista dels TOP500. Estats Units i Canadà ocupen 298 de les 500 posicions (un 59%), 12 més que en l'edició del mes de juny (286). Els centres europeus ocupen 120 posicions i els japonesos, 69 (i baixen significativament des de les 83 que ocupaven al juny). De les 12 llistes publicades fins ara, per primera vegada Japó, que n'ha encapçalat la meitat amb la màquina més potent, no té cap supercomputador en les primeres 10 posicions. Entre aquestes es troben les tres màquines americanes del projecte ASCI i dues màquines instal·lades al Regne Unit.

Pel que fa a la distribució dels

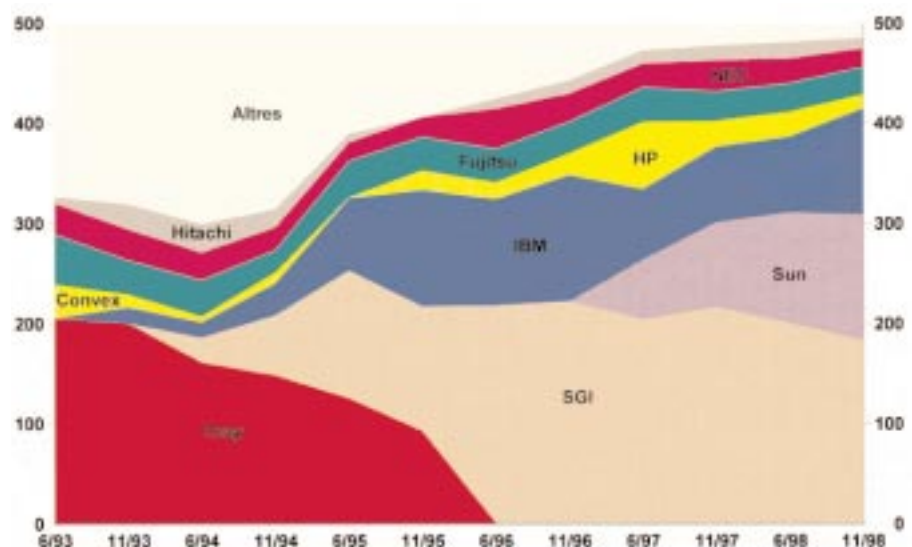
ordinadors segons els fabricants, SGI/Cray ocupa la primera posició amb 183 màquines; Sun ve a continuació amb 127 instal·lacions; i IBM té actualment 104 dels 500 ordinadors més potents del món. De manera global, els TOP500 ens mostren que, a tot el món, el total de potència instal·lada és de quasi 30 Tflop/s, una xifra sensiblement superior a la del juny: 22 Tflop/s.

La llista dels TOP500 està elaborada per Jack Dongarra i Erich Strohmaier, de la Universitat de Tennessee (EUA), i Hans Meuer, de la Universitat de Mannheim (Alemanya), i classifica els 500 ordinadors més potents del món segons la màxima potència de càlcul (R_{max}) que s'obté en resoldre un sistema d'equacions lineal (LINPACK).

Màquines per fabricant al TOP500

La gràfica ens mostra l'evolució del nombre de màquines per fabricant a la llista TOP500 i reflecteix alguns dels canvis que s'han produït en el mercat de la supercomputació:

- L'adquisició de Convex per Hewlett-Packard.
- La compra de Cray per part de Silicon Graphics i la revenda d'una de les tres línies de productes de Cray a Sun.
- La reducció del nombre d'equips vectorials: dels 344 al juny de 1993 s'ha passat als actuals 38.
- El fort creixement dels multiprocessadors SMP que en dos anys han passat de 73 a 133.



UN CONGRÉS AMB MOTIU DEL 5è ANIVERSARI DEL CENTRE FRANCÈS VA REUNIR A 170 PERSONES A PARÍS

L'IDRIS, de celebració

L'IDRIS ha viscut un mes de novembre festiu. El passat dia 19 el centre va celebrar el seu cinquè aniversari a París en un congrés que va reunir destacades personalitats del món de

la supercomputació. En total, 170 persones es van aplegar al Palau de Congressos, per analitzar el panorama actual de la supercomputació i fer prediccions de futur.

■ L'Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique (IDRIS) es va fundar el novembre de 1993 i és un dels dos centres de supercomputació francesos, juntament amb el CNUSC, de Montpel·lier. L'Institut, situat al campus de la Facultat de Ciències d'Orsay, és el centre de supercomputació del Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS). Un dels objectius del centre és donar suport als projectes dels grups d'investigació francesos que necessiten una gran quantitat de càlcul numèric per resoldre els seus problemes. Per tal de dur això a terme, l'IDRIS permet accedir a supercomputadors d'última generació i dona suport per a la seva utilització. L'IDRIS, centre de referència en la seva especialitat, ofereix als seus usuaris els següents superordinadors: un Cray C94, un Cray C98, un Fujitsu VPP300 de 6 processadors i un Cray T3E de 256 processadors. En total, el rendiment punta instal·lat és de 178,8 Gflop/s.

El sistema d'emmagatzematge del centre disposa de dos robots i té 900 TB de capacitat. Cada dia registra un moviment d'uns 400 GB i emmagatzema 50 GB nous. En dos mesos s'espera que la seva capacitat augmenti 400 TB. L'IDRIS allotja en aquests moments 500 projectes científics, el 20% dels quals es renova cada any, i té treballant a les seves instal·lacions 45 tècnics informàtics.

El sistema d'emmagatzematge del centre disposa de dos robots i té 900 TB de capacitat. Cada dia registra un moviment d'uns 400 GB i emmagatzema 50 GB nous

Prediccions de futur

El col·loqui del cinquè aniversari del centre, que es va celebrar el passat 19 de novembre, portava per nom *HPC: cap al segle XXI*. Entre les diverses xerrades es van apuntar algunes prediccions per al futur de la supercomputació.

The National Academic Supercomputing Initiative in the USA, a càrrec de Mélanie Loots, directiva de l'NCSA. Va fer una explicació de la política de supercomputació que regeix als Estats Units sota la direcció de la NSF i va comentar l'existència dels dos centres principals: el NCSA i el NPACI (vegeu TERAFL0P 23).

The HPC Technologies: Present and Future, a càrrec de Tadashi Watanabe, director general de la divisió de Supercomputació de NEC al Japó. Va predir que d'aquí a 10 anys hi haurà xips amb 520 milions de transistors, amb 6 GHz i que arribaran als 24 Gflop/s.

The Future of Vectors in Scalable Architectures a càrrec de Steve Oberlin, vicepresident de Hardware de Silicon Graphics als EUA. Oberlin va augurar que, d'aquí a 5 anys, la línia vectorial de SGI (SV2), és a dir, els antics Cray, i la línia SMP amb processadors amb arquitectura NUMA tindran el mateix sistema operatiu, que serà IRIX, i el mateix entorn de programació.

Simulation numérique du climat et de ses variations, a càrrec d'Hervé Le Treut, de l'IDRIS. En la seva xerrada va apuntar que en els propers 5 anys la necessitat de càlcul en aquest camp s'haurà multiplicat per 90.

HPC: the Next Generation of Architectures and Applications, per Paul Messina del California Institute of Technology (Califòrnia, USA). Després de revisar i analitzar les instal·lacions novedoses i experimentals actuals com són l'ASCI Red i l'ASCI Blue, preveu que la màquina del Pflop estarà a punt per a l'any 2004.

XTEC-PIE

La Xarxa Telemàtica Educativa de Catalunya (XTEC) estava, des de l'abril del 1995, connectada a la Xarxa Científica. Des de principis de desembre ha passat d'estar connectada a 2 Mbps a tenir una connexió directa amb l'Anella Científica a 34 Mbps. L'XTEC va demanar aquesta ampliació el passat mes d'octubre degut a la bona acollida que tenen els serveis Internet a la seva comunitat.



Jornada de Portes Obertes '98

En l'edició d'enguany, que es va celebrar el 16 i el 20 de novembre, en el marc de la Setmana de la Ciència, el CESCA va rebre la visita de prop de 100 persones interessades en conèixer com funcionava el centre i quines màquines estan a disposició dels usuaris. La majoria dels visitants d'aquest any eren estudiants de Telecomunicacions, Informàtica, Matemàtiques i Enginyeria Industrial. Un institut de secundària de Mataró i un col·legi de la Garriga també van acostar-se a l'Edifici Annexus per descobrir com funciona l'entrellat del CESCA. TV-3 es va fer ressò de l'acte i va emetre, el dilluns dia 16, una notícia en el seu informatiu del migdia.

UPC

Des del passat 5 de novembre, la Universitat Politècnica de Catalunya (UPC) es connecta a l'Anella Científica mitjançant un commutador ATM a una velocitat de 155 Mbps. Fins ara, la UPC estava connectada per un commutador Ethernet a 10 Mbps. Des del canvi de connexió el tràfic enviat i rebut per aquesta institució ha augmentat significativament.

GAUSSIAN 98 i Jaguar

L'IBM SP2 i l'HP V2250 tenen instal·lat des de mitjan de novembre el programa de química computacional Gaussian 98 Rev. A.5. A l'SP2 aquesta nova versió permet la generació de fitxers de grandària superior als 2 GB, per la qual cosa ja no és necessari utilitzar la partició de disc. La versió disponible al V2250 és la paral·lela.

Gaussian 98 incorpora nous algorismes i tècniques especialment dissenyats per al tractament de grans sistemes moleculars, com càlculs de mecànica molecular. A més, augmenta el nombre de propietats moleculars predictibles: apantallaments i desplaçaments de RMN, intensitats VCD i intensitats Raman, tant a nivell HF i DFT com a nivell MP2

(excepte per al VCD), i implementa noves metodologies per al tractament d'estats excitats (RPA). Finalment, millora els models per a l'estudi de sistemes en dissolució, inclou nous funcionals DFT i nous conjunts de funcions de base, i augmenta el nombre d'ECP.

Amb vista a complementar l'oferta de programes per a l'estudi de l'estructura electrònica, s'acaba d'adquirir Jaguar. Aquest programa fa servir mètodes pseudoespectrals per aconseguir que el càlcul a nivells HF, DFT, MP2, GVB i GVB-RCI escali per sota de N^3 . Per això és idoni per tractar sistemes grans com oligòmers, catalitzadors, clústers de metalls o moleculars, amb precisió superior a la dels mètodes semiempírics.



Reactivitat d'antibiòtics beta i gamma lactàmics

“L'estudi teòric de la reactivitat química permet trobar noves estructures d'interès biològic”.

Francisco Muñoz

Cap

Francisco Muñoz

Integrants

Josefa Donoso, Joan Frau, Bartomeu Vilanova, Antoni Linàs i Miquel Coll

Període

1995-1999

Publicacions

- *Helv. Chim. Acta* (1996) 79, 353-362
- *Helv. Chim. Acta* (1996) 79, 1793-1802.
- *THEOCHEM.* (1997) 390, 255-263.
- *THEOCHEM.* (1997) 390, 247-254.
- *Theo. Chem.* (1997) 2, 56-65.
- *Helv. Chim. Acta* (1997) 80, 739-747.
- *THEOCHEM* (1998) 426, 313-321.
- *THEOCHEM* (1998) 426, 323-329.
- *Biopolymers* (1998) 45, 119-133.
- *J. Phys. Chem.* in press.
- *Int. J. Chem.* in press.

Des de la fi de la Segona Guerra Mundial els antibiòtics b-lactàmics han estat utilitzats àmpliament en el tractament de malalties produïdes per bacteris. L'efecte causat pels antibiòtics b-lactàmics en el creixement de bacteris està relacionat amb l'habilitat d'aquests antibiòtics per inactivar certs enzims relacionats amb la síntesi de la paret cel·lular. Segons Tipper i Strominger (*Proc. Natl. Acad. Sci. USA* [1965] 54, 1133) els antibiòtics s'assemblen als fragments D-alanil-D-alanina i l'enzim equivoca l'antibiòtic pel seu substrat.

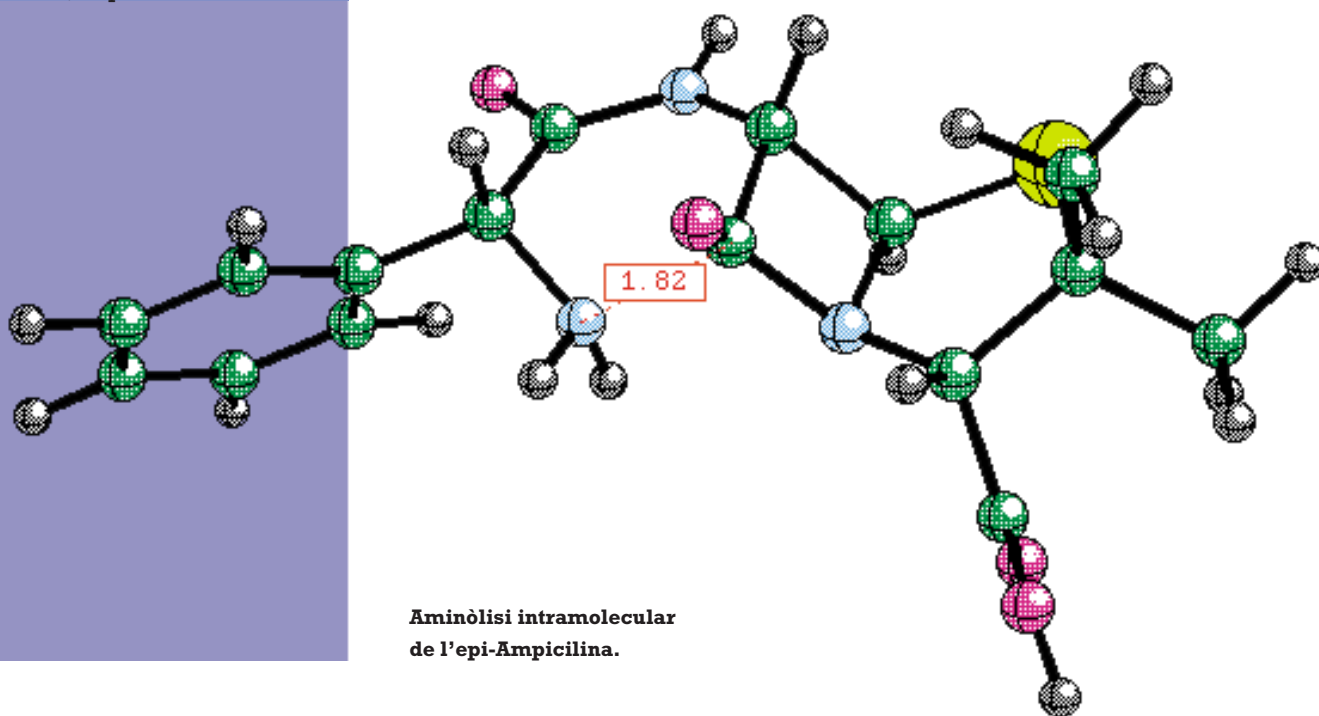
L'activitat antibacteriana requereix un anell b-lactàmic suficientment tensionat i la possibilitat que els electrons es deslocalitzin cap al defora de l'anell b-lactàmic. També requereixen algunes característiques conformationals.

La forma tri-dimensional d'un inhibidor és un dels factors més importants que determinen la seva fixació en el lloc actiu enzimàtic. Cohen (*J. Med.*

Chem. [1983] 26, 259) va proposar que el primer paràmetre que governa l'activitat biològica ha de ser la bona fixació de l'antibiòtic b-lactàmic a la cavitat enzimàtica, malgrat això per l'activitat antibacteriana és important la reactivitat química.

Per un conjunt homogeni d'estructures, on la forma molecular és invariant a les regions importants, la reactivitat química esdevé el factor fonamental a l'activitat antibacteriana. Baixes reactivitats químiques es corresponen en pobres activitats antibacterianes i els compostos b-lactàmics actius presenten sempre altes constants d'hidròlisi. Per aquesta raó s'han realitzat múltiples estudis sobre la relació estructura-activitat química com a primer pas per a la predicció d'activitat antibacteriana.

En el present projecte es realitzarà un ampli estudi teòric sobre la reactivitat química i activitat antibacteriana de compostos beta i gamma lactàmics així com azo-derivats dels anteriors.



Aminòlisi intramolecular de l'epi-Ampicilina.

El CCUC, premi IWE-ASADIE 1998

El Catàleg Col·lectiu de les Universitats de Catalunya (CCUC) ha estat guardonat recentment amb un dels premis IWE-ASADIE 1998 perquè integra "de forma completament transparent, com a un únic catàleg, els fons de la UB, UAB, UPC, UPF, URV, UdL, UdG, UOC, UJI i la Biblioteca de Catalunya", en paraules del jurat, integrat per la redacció i el Consell Assessor de la revista *IWE-El Profesional de la Informació*. També es va destacar la important tasca de "gestió i coordinació" del Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya (CBUC) i dels seus membres.

Els premis es van lliurar durant les VI Jornadas Españolas de Documentación celebrades el 31 d'octubre al Palacio de Congresos de Valencia, organitzades per la Federación Española de Sociedades de Archivística, Biblioteconomía y Documentación (Fesabid). Els votants van destacar del CCUC que "conté 1,6 milions de registres que equivalen a 2,7 milions de volums" i que "és el primer catàleg col·lectiu on line d'accés públic a Espanya".

D'altres productes premiats van ser: l'Enciclopèdia Universal, de Micronet; MyNews; SOD, de Kronos; TTM, de J. R. Prous SA.

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

TERAFLOP

DIRECTOR

Miquel Huguet

COORDINADORA

Alicia Martínez

REDACCIÓ

Mònica Tudela

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

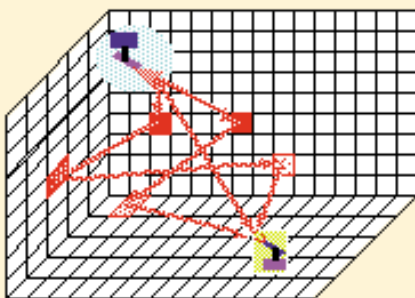
<http://www.cesca.es>

teraflop@cesca.es

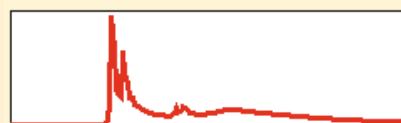
DIPOÏT LEGAL: B-33512-94

ISSN: 1134-6671

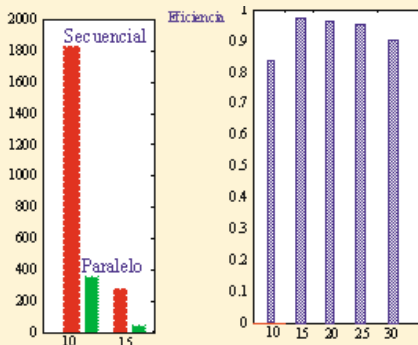
F O T O / N O T Í C I A



A



B



C

D

La simulació de la resposta impulsional de canals infrarojos difusos en interiors (A) per computador es realitza dividint les parets de l'habitació en cel·les de mida petita. El nombre de càlculs a realitzar és tan gran que aquesta simulació únicament és viable en computadors paral·lels. El treball està emmarcat en el disseny de Xarxes d'Àrea Local inalámbricas amb portadora infraroja (en expansió en l'actualitat). Es tracta de dimensionar els dispositius físics emissors i receptors de llum infraroja per aconseguir una bona amplada de banda de comunicacions (B). El treball de paral·lelització d'un algorisme seqüencial ha estat realitzat per Elsa María Macías López (del Grupo de Arquitectura y Concurrencia que lidera Álvaro Suárez Sarmiento) en l'SP2 (usant el llenguatge C i la llibreria MPI), i s'ha obtingut una reducció considerable del temps d'execució (C) i un ús eficient dels processadors (D).

