

TERAFLOP

CESCA

REVISTA DEL CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA

Núm. 39 • Març 1999





**El Consell de Govern del CESCA,
reunit el 15 de gener de 1998.**

Consell de Govern

President

Rafael Español i Navarro

Vicepresident

Joan Albaigés i Riera

Secretari

Josep A. Plana i Castellví

Vocals

David Serrat i Congost

Antoni Giró i Roca

Antoni Gurguí i Ferrer

Antoni Caparrós i Benedicto

Carles Solà i Ferrando

Jaume Pagès i Fita

Enric Argullol i Murgades

Josep M. Nadal i Farreras

Lluís Arola i Ferrer

Jaume Porta i Casanellas

Gabriel Ferraté i Pascual

Jaume Josa i Llorca

■ El CESCA va canviar de president el 14 de desembre: Rafael Español, president de La Seda de Barcelona, ocupa el càrrec de Xavier Trias (qui apareix a la foto), que ha passat a ser president d'honor de la Fundació Catalana per a la Recerca. A més a més, el Consell de Govern ha experimentat dos canvis. Lluís Arola ha substituït Joan Martí com a vocal de la URV, i Gabriel Ferraté forma part del Consell com a representant de la UOC, que va incorporar-se al Consorci el 15 de gener de l'any passat.



Presentació

El passat 14 de desembre vaig assumir la presidència de la Fundació Catalana per a la Recerca i les seves institucions associades (CESCA i IEEC), en substitució de Xavier Trias, conseller de la Presidència, que havia estat president des de l'octubre de 1997. Així doncs, avui em toca presentar-vos les activitats desenvolupades pel Consorci Centre de Supercomputació de Catalunya al llarg de l'any 1998 sota la Presidència del meu antecessor.

Les activitats del CESCA s'han caracteritzat per la seva continuïtat i creixement. D'una banda, continuïtat en els serveis oferts centrats en la supercomputació, les comunicacions i la promoció científicotècnica. De l'altra, s'ha augmentat la potència de càlcul, s'ha renovat la tecnologia de l'Anella Científica i s'han incrementat els seus serveis addicionals per optimitzar el tràfic d'Internet i per facilitar el desenvolupament de la Societat de la Informació, tal com es comentarà en detall a les pàgines que segueixen.



Amb vista al futur, l'objectiu inicial de la Fundació, impulsar la recerca a Catalunya des de dues grans òptiques: l'apropament de la ciència al ciutadà i la promoció de la innovació en el món de l'empresa, continua sent plenament actual.

Aquesta és la tasca que la Fundació ha desenvolupat al llarg de l'última dècada i que sens dubte tots els patrons volem que continuï realitzant. El fet que fins ara el president de la Fundació hagués estat un conseller de la Generalitat era una mostra del recolzament d'aquest projecte pel Govern. No obstant això, un cop s'ha consolidat aquesta etapa, ja no és necessària la protecció de l'Administració pública i la presidència pot passar a un representant de la societat civil.

Fins ara, la Fundació ha fet de pont entre el món de la recerca i la societat civil i ha posat en marxa infraestructures de suport per a la recerca com el CESCA, l'Anella Científica o l'IEEC. Ara ens hem de plantejar altres reptes. No només

hem de ser coneguts pel món empresarial i industrial, sinó també ser útils per a ells. És a dir, hem de fer una aposta decidida per l'aplicació de la recerca al món de l'empresa. La Fundació s'ha de constituir com un punt de referència per al teixit empresarial català.

Aquest nou èmfasi no ha d'implacar abandonar el nostre posicionament actual en el món universitari, acadèmic i de recerca. Malgrat la rapidesa dels canvis tecnològics, les necessitats que hi havia en el moment de crear el CESCA continuen vigents. No obstant això, en obrir una nova etapa és important també obrir un període de reflexió conjunt amb les institucions consorciades, totes les universitats públiques catalanes, per avaluar, i esperem que renovar, el nostre interès a continuar cooperant i compartint els serveis del CESCA.

Rafael Español i Navarro

President de la FCR i del CESCA

En els últims tres anys, a iniciativa de la CIRIT, els serveis del Consorci Centre de Supercomputació de Catalunya s'han centrat en tres eixos d'actuació: els serveis de supercomputació, les comunicacions i la promoció científicotècnica. En aquest TERAFLIP especial trobareu un resum de què hem fet al llarg de 1998 en cadascun d'aquests àmbits.

L'Anella Científica, patrocinada per la Fundació Catalana per a la Recerca (FCR), s'ha renovat tecnològicament cap a ATM; les seves prestacions han augmentat, la velocitat del troncal ha passat de 34 a 622 Mbps i la dels punts d'accés metropolitans de 10 a 34 o 155 Mbps; i el nombre d'institucions connectades ha continuat creixent amb la incorporació de la Universitat Ramon Llull, la Universitat de Vic i la Xarxa Telemàtica Educativa de Catalunya. El tràfic ha augmentat un 40% respecte a l'any anterior i ha sobrepassat els 10 TB.

Les 50 institucions connectades a la Xarxa Científica, patrocinada per la CICYT, continuen important més informació (11,45 TB) que no pas exportant-ne (4,26 TB). És a dir, es manté la

tendència de l'any anterior, un factor de 2,69 versus 2,58 al 1997. Aquest diferencial ha de reduir-se a mesura que es desenvolupi la Societat de la Informació i augmentin els continguts disponibles. La nostra contribució en aquest aspecte ha estat el trasllat al CIESCA de les revistes virtuals en anglès del Consorci HOISE-NM des del SARA (Amsterdam).

El servei de *proxy-cache* i el *ftp mirror* s'han posat en marxa per tal d'optimitzar el tràfic internacional i la seva eficàcia l'han comprovat les institucions que han usat aquests serveis quan han accedit més ràpidament a les planes web més populars. El nombre de peticions i de grups al servidor de News, operatiu des de la fi de 1997, ha augmentat a mesura que es difonia la

seva disponibilitat, però el seu ús és encara molt irregular entre els membres de la Xarxa Científica.

El rendiment punta del nostre maquinari de supercomputació s'ha duplicat (de 19,88 Gflop/s a 42,77 Gflop/s) amb l'actualització tecnològica de l'IBM SP2 i l'arribada de l'Exemplar V2250, un servidor de 16 processadors superescalars amb memòria compartida. La nova màquina de Hewlett-Packard substitueix l'antic Cray Y-MP. El programari també s'ha renovat amb quatre adquisicions (CASTEP, Jaguar, MARC i NCAR) i quatre actualitzacions (Catalyst, GAMESS, Gaussian i UniChem).

Tots els servidors, tant els de supercomputació com els de serveis addicionals de l'Anella, s'han connectat directament a un commutador ATM de manera que la seva connexió ha passat de 10 Mbps compartits a un màxim de 155 Mbps commutatats.

Els serveis de supercomputació s'han continuat proporcionant amb la col·laboració del Centre Europeu de Paral·lelisme de Barcelona (CEPBA), sota la coordinació del Centre de Computació i Comunicacions de Catalunya (C⁴). En total s'han usat 605.117 hores computacionals en el CIESCA-CEPBA, un 36% més que l'any anterior.

El programa *Training and Mobility of Researchers* (TMR) d'accés a Grans Instal·lacions Europees, finançat per la Comissió Europea i prorrogat fins a l'abril del 2000, ha permès que 38 investigadors hagin vingut a usar les màquines del CIESCA i del CEPBA, convidats per 17 grups de recerca diferents.

I finalment, dues aules de supercomputació, tres jornades, tres seminaris, 40 conferències, la publicació de nou números de la revista TERAFLIP, diversos articles a les revistes electròniques *Primeur* i *Directions* i altres col·laboracions a diversos mitjans de comunicació han estat la *finestra* cap a l'exterior que hem usat per oferir i mostrar al món tot allò que hem fet durant aquest any 1998.

Els membres del CIESCA han treballat plegats al llarg de 1998 per millorar la qualitat dels serveis del centre.



Les principals dades de l'any

	1995	1996	1997	1998
Supercomputació				
CESCA-CEPBA				
Rendiment punta (Gflop/s)		23,92	44,96	87,83
Hores computacionals		270.183	443.864	605.117
Nombre d'usuaris		363	579	592
Nombre de projectes		179	112	121
Visites programes de mobilitat	62	54	35	39
CESCA				
Rendiment punta (Gflop/s)	3,83	13,04	19,88	42,77
Hores computacionals	30.258	145.043	199.347	282.584
Consultes		809	872	1.072
Comunicacions				
Tràfic Anella Científica (TB)	1,79	4,15	6,88	>10,00
Tràfic enviat a RedIRIS (TB)	n/d	n/d	1,77	4,26
Tràfic rebut de RedIRIS (TB)	n/d	n/d	4,56	11,45
Peticions al proxy-cache (x10 ⁶)				12,84
Articles llegits (x10 ⁶)				2,91
Pàgines llegides a la web			115.061	128.813
Consultes			288	673
Promoció				
Aula de Supercomputació	467	283	47	179
Conferències	42	29	33	40
Jornades i seminaris (assistents)		1 (258)	3 (168)	6 (487)
Visites al Centre (visitants)		9 (>157)	15 (253)	10 (168)
TERAFLOP	10	8	8	9

Comissió Permanent del CESCA

President

Antoni Giró i Roca

Vicepresident

Josep A. Plana i Castellví

Vocals

Enric Isidre Canela i Campos

Montserrat Llinés i Soler

Sebastià Xambó i Descamps

Secretari

Miquel Huguet i Vilella

Consell Assessor del C⁴

President

Mateo Valero i Cortés

Vicepresident

Jesús Labarta i Mancho

Vocals *ex officio*

Enric Isidre Canela i Campos

Montserrat Llinés i Soler

Sebastià Xambó i Descamps

Francesc Pedró i García

Miquel Duran i Portas

Josep Antoni Ferré i Vidal

Joan Xavier Comella i Carnicé

Imma Tubella i Casadevall

Jaume Josa i Llorca

Vocals experts

Antoni Oliva i Cuyàs

Xavier Oliver i Olivella

Secretari

Miquel Huguet i Vilella

La Comissió Permanent ha experimentat diversos canvis enguany. D'una banda, Antoni Giró ha substituït David Serrat com a president, i de l'altra, els tres vocals s'han renovat i ara són Enric Canela (vicerector d'Economia i Organització de la UB), Montserrat Llinés (vicerectora de Tecnologies de la Informació i la Comunicació de la UAB) i Sebastià Xambó (vicerector de Sistemes d'Informació i Documentació de la UPC), que no apareix en la foto.



El maquinari

Durant l'any 1998 el CESCA ha duplicat la potència de càlcul de què disposava l'any anterior, en xifres globals. Aquesta millora s'ha produït gràcies a dos fets. D'una banda, l'arribada al Centre, el mes de juliol, d'un servidor de càlcul d'Hewlett-Packard, l'Exemplar V2250 de 16 processadors superescalars PA8200 a 960 Mflop/s cadascun connectats a 8 GB de memò-

ria principal i a 216 GB de disc mitjançant un *crossbar* de 8x8 i amb un *throughput* de 15,3 GB/s. Aquesta màquina, amb un rendiment punta de 15,36 Gflop/s, ha substituït el Cray Y-MP de 1,33 Gflop/s.

De l'altra, els 10 processadors *thin2* a 266 Mflop/s i els 32 processadors *thin120* a 480 Mflop/s de l'IBM SP2 es van substituir al juny per 42 processadors *thin160* a 640 Mflop/s. L'espai en disc a l'SP2 ha augmentat en 63 GB, connectats a l'anell SSA, i

ha passat a ser un total de 494 GB. Amb aquestes millores, el rendiment punta de l'SP2 ha augmentat fins a 22,29 Gflop/s (un 20% més). Ambdós servidors s'han connectat via ATM a 155 Mbps.

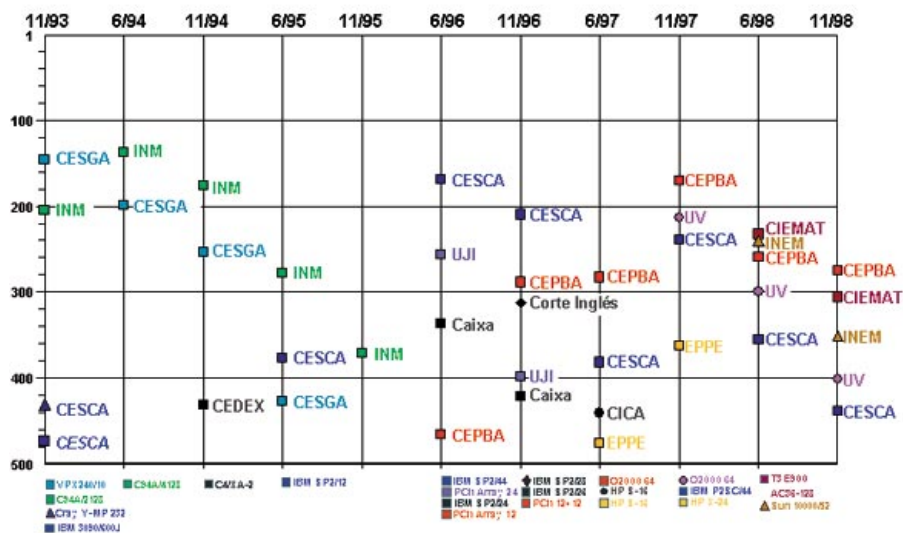
L'HP V2250 ha estat la màquina estrella del CESCA el 1998. En la foto de sota, tècnics d'HP la porten, encara a la capsa, cap a l'edifici Annexus. A l'esquerra, un moment de la jornada d'inauguració del supercomputador.



MÓNICA TUDELA

Centres de l'Estat a la llista TOP500

L'IBM SP2 ocupa actualment la posició 439 en la llista TOP500, que classifica les 500 màquines més potents en el món segons la màxima potència de càlcul (R_{max}) que s'obté en resoldre un sistema d'equacions lineal (LINPACK). L' R_{max} per a l'SP2 és de 19,46 Gflop/s. Al juny, la màquina ocupava la posició 356.



J.J. Dongarra, H.W. Meuer, E. Strohmaier, TOP500 Supercomputer Sites

El programari

El programari de supercomputació especialitzat de què disposa el CESCA és de dos tipus:

■ Programari de base

Està constituït pels diferents compiladors (FORTRAN, C, C++...), les llibreries de càlcul numèric (ESSL, NAG, LAPACK, BLAS...) i les llibreries de paral·lelització (MPI, PVM...). El 1998, i per l'adquisició del nou servidor de càlcul, l'Exemplar V2250, es va ampliar aquesta gamma amb totes les utilitats pròpies de Hewlett-Packard (HP-UX 11.0, HP Fortran, HP C, C++, HP MPI, MLIB...).

També es va actualitzar el sistema operatiu de l'IBM SP2 (AIX 4.2.1, PSSP 2.4), les llibreries numèriques (ESSL

3.1, PESSL 2.1) i el compilador de FORTRAN (XLF 5.1). A més, es van instal·lar diverses utilitats (Autoconf, m4, info, flex, Tcl/Tk, gnuplot, xtpanel, gmake, pine, tcsh i pdksh), així com les llibreries de paral·lelització BSPlib i MPICH.

■ Aplicacions

El CESCA en té, ara per ara, 24. S'han fet quatre adquisicions de tres camps de programari ben diferents:

Visualització

S'ha adquirit el paquet NCAR, un programa desenvolupat per la University Corporation for Atmospheric Research (UCAR) que proporciona un entorn integrat de processament de grans volums de dades i la seva visualització.

Química

S'han comprat els programes Jaguar i Cerius2-CASTEP. El Jaguar realitza càlculs mecanoquàntics a nivell *ab ini-*

tio utilitzant mètodes pseudoespectrals i tècniques de correlació local. El Cambridge Serial Total Energy Package (CASTEP) és un dels programes de mecànica quàntica més utilitzats en ciència de materials. Està integrat dins del paquet Cerius2 de modelatge molecular de MSI, del qual s'han adquirit els mòduls C2-Visualizer, C2-SDK, C2-Crystal Builder i CASTEP-Interface.

Enginyeria

S'ha instal·lat el programa MARC d'elements finits per a l'anàlisi estructural i la dinàmica de fluids, gràcies al conveni signat amb MARC Analysis Research Corporation (Europe) i Disney Simulació Prototips SL.

A més a més, els programes de química computacional també han millorat amb diverses actualitzacions: Catalyst 4.0, GAMESS 98, Gaussian98 i UniChem 4.1.

El Centre ha rebut dues donacions per guardar màquines de tecnologia obsoleta avui dia però grans supercomputadors en el passat. La primera és un C1, el primer equip vectorial de Convex instal·lat a l'Estat, concretament al MOPU l'any 1987.

Aquest supercomputador tenia un únic processador vectorial de 20 Mflop/s i 64 MB de memòria principal. La segona és un C240, la segona gene-

Un tros d'història al CESCA

ració de màquines vectorials de Convex i la primera de multiprocessadors simètrics amb memòria compartida del fabricant. Aquesta màquina tenia 4 processadors de 50 Mflop/s cadascun, 256 MB de memòria principal i un crossbar de 4x4 i havia estat adquirida conjuntament pel Departament de Resistència de Materials i Estructures a l'Enginyeria de la UPC i el CIMNE.



Gener

La UOC entra al Consorci.

L'UniChem 4.0, disponible.

Antoni Giró és nomenat president de la Comissió Permanent.

Febrer

L'Oracle 8.0, també disponible.

Març

L'Intelligent Miner ja és a disposició dels usuaris. ▶



Abril

◀ Es comença a desenvolupar el RECERCAT.

Maig

La nova Anella Científica entra en funcionament. ▶



Juny

Aula de Primavera.

Actualització de l'SP2.

Juliol

El CESCA col·labora en les jornades Centre de Física de Benasque (Osca).

L'Hospital General de Vic es connecta a l'Anella mitjançant la Universitat de Vic.

Seminari d'aplicacions del programa ADF.

◀ Trobada de l'Anella Científica (TAC'98).

Posada en servei de l'HP Exemplar V2250. ▼



Agost

Presentació dels resultats de l'enquesta d'avaluació del programa TMR.

Setembre

El TERMCAT es connecta amb una línia punt a punt de 256 Kbps.

Es posen en marxa els serveis de *proxy-cache* i *ftp mirror*.

La RACAB passa a formar part de la Xarxa Científica.

Es completa la connexió dels tres punts d'accès a l'Ànella de la URL.

Jornada d'Experimentació en Noves Tecnologies de Supercomputació (ENTS'98).

Seminari *Density Functional Theory: From Fundamentals to Applications*.

El programa TMR es renova fins a l'abril del 2000 amb 335 Kecsus addicionals. ▼



Octubre

La UB es connecta a l'Anella Científica amb ATM a 155 Mbps.

Augmenta la capacitat d'enllaç de RedIRIS amb els EUA en 4 Mbps.

Novembre

La UPC es connecta amb ATM a 155 Mbps.

Aula de Tardor.

Jornades Tècniques de RedIRIS'98. ►

El Gaussian 98, disponible.



Desembre

La XTEC passa a tenir una connexió directa a 34 Mbps amb l'Ànella Científica.

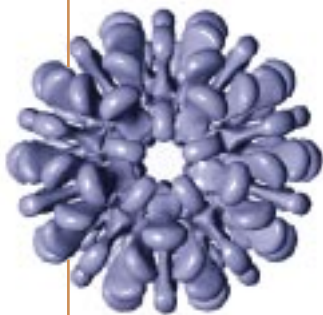
◀ Seminari *SIESTA: càlculs DFT per sistemes molt grans*.

Enregistrament del programa *Escape*, de Canal C: (del Canal Satèl·lite Digital).

Signatura del conveni per al Servei d'Accés Remot.

Rafael Español, nomenat nou president de la FCR i del CESCA.

Els programes MARC K7.3 i Mentat 3.3, d'elements finits no lineals, disponibles



El Departament d'Assistència Tècnica gestiona i manté el maquinari i programari de supercomputació. A més, també assessora els usuaris en la utilització eficaç dels recursos disponibles i en els problemes que puguin aparèixer en el dia a dia, i elaboren la documentació on-line sobre aquests i la millor manera d'usar-los.



Les **hores computacionals** usades han estat 282.584, un 42% més sobre les 199.347 HC de 1997. La gran majoria de projectes són acadèmics, tant de recerca bàsica com de transferència de tecnologia. Cal esmentar també el servei de predicció del temps a Catalunya que es realitza diàriament en el CESCA, amb la col·laboració de la Universitat de Barcelona, patrocinat pel Departament de Medi Ambient i la FCR.

Les **consultes telefòniques** al CESCA el 1998 (1.072) han superat les de l'any anterior (872). Un 38% s'ha resolt al mateix moment de la trucada. Les consultes més freqüents han estat sobre els gestors de cues (21%), codis (20%), les aplicacions (9%), la paral·lelització (7%) i els sistemes operatius (5%).

S'ha recopilat la descripció de **80 projectes**, amb 874 publicacions generades, 43 dels quals s'han publicat al TERAFLOP (vuit durant el 1998). La descripció de cada projecte s'ha incorporat a la web (<http://www.cesca.es>) on

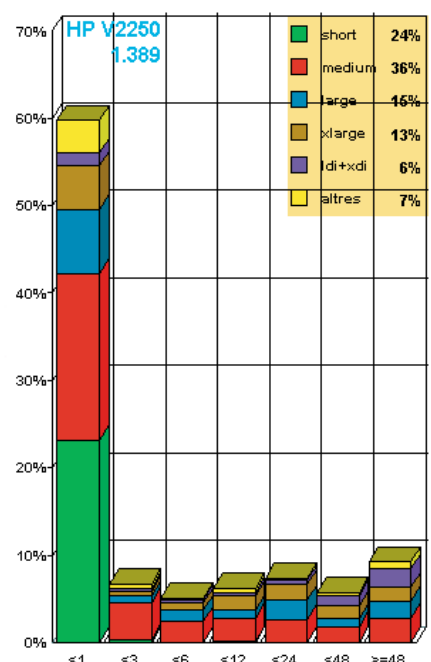
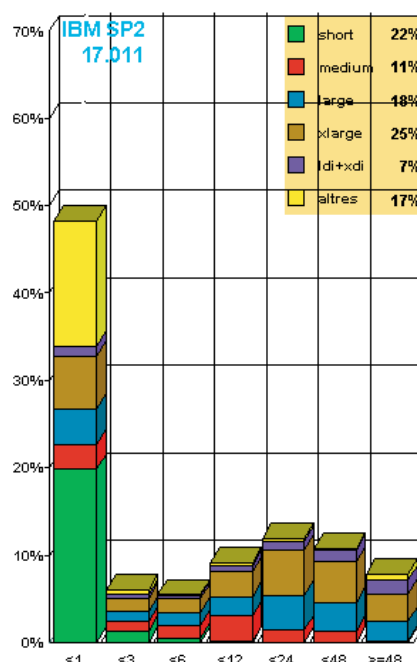
Mateo Valero (C⁴), Joaquim Capellades (IDESCAT) i Manuel Rebollo (IBM) conversen durant l'ENTS'98.

Temps d'espera per màquina i cua

El temps de resposta va millorar cap a finals d'any, un cop la nova màquina va entrar en funcionament. De mitjana, a l'SP2 la meitat de treballs han hagut d'esperar més d'una hora en cua. No obstant això, un 19% de treballs a l'SP2 i un 15% al V2250 han hagut d'esperar més de dos dies per iniciar la seva execució. Malgrat que el nombre total de treballs executats ha estat menor (18.400 versus 23.803), la durada mitjana d'un treball a l'SP2 ha augmentat a 13,0 hores, un 24% més que el 1997 i amb una potència de càlcul 33% superior, mentre que al V2250 ha estat de 12,5 hores, en oposició a les 2,4 del Cray. Per tant, s'ha posat de manifest que els treballs necessiten cada cop més recursos, tant de càlcul com de memòria i disc.

Treballs

1997: 23.803 1998: 18.400



es pot generar automàticament una pàgina amb tota la informació disponible (títol, cap de projecte, descripció, publicacions, visitants, etc.).

Un cop actualitzat l'IBM SP2 i instal·lat l'HP Exemplar V2250, s'ha tornat a avaluar el rendiment d'ambdues mà-

quines amb els **benchmarks de Gaussian94** proporcionats pels nostres usuaris. En conclusió s'ha observat que de mitjana el V2250 executa aquests benchmarks un 5% més ràpid que l'SP2.

D'altra banda, en col·laboració

amb l'Institut d'Estadística de Catalunya i IBM, s'ha realitzat una experiència conjunta usant tècniques de **mineria de dades** sobre la informació continguda en el Cens de Població i Habitatge de 1991. Novedoses i reveladores relacions entre les diferents variables demogràfiques han sortit a la llum gràcies a aquest estudi.

El Departament d'Assistència Tècnica ha realitzat **diverses millores**:

■ **Juny**: Canvi en la gestió del conjunt de nodes interactius de manera que acceptessin treball batch. L'opció d'executar treballs interactius amb exclusivitat de processadors es manté sota petició prèvia.

■ **Setembre**: Sincronització dels rellotges dels processadors de l'SP2 mitjançant el *Network Time Protocol* (NTP), un mecanisme utilitzat a Internet per distribuir informació molt acurada de temps. L'SP2 se sincronitza mitjançant quatre rellotges situats a França (INRIA), Alemanya (University Erlangen-Nürnberg), Suïssa (Integrated Systems Laboratory) i Itàlia (CSTV of National Research Council).

■ **Desembre**: Incorporació de tres controladors d'E/S addicionals al V2250. Aquest canvi ha permès ampliar l'àrea de treball del batch des de 49 a 66 GB i augmentar eficientment la càrrega de la màquina, usant la totalitat de la configuració de disc (24 discos, 216 GB).

A més, s'han signat **convenis** amb Disseny Simulació i Prototips S.L. i Quantech ATZ, dues empreses de distribució de programari per a l'enginyeria, per instal·lar les seves aplicacions en el nostre maquinari i donar a conèixer els nostres serveis entre els seus usuaris.

Finalment, s'han avaluat diverses alternatives d'emmagatzematge de dades per poder fer migració automàtica de fitxers, arxius i *backups* i s'ha sol·licitat una ajuda a la CIRIT, en el marc del II Pla de Recerca de Catalunya (1997-2000), que ha estat parcialment concedida de manera que enguany es procedirà a la seva adquisició.



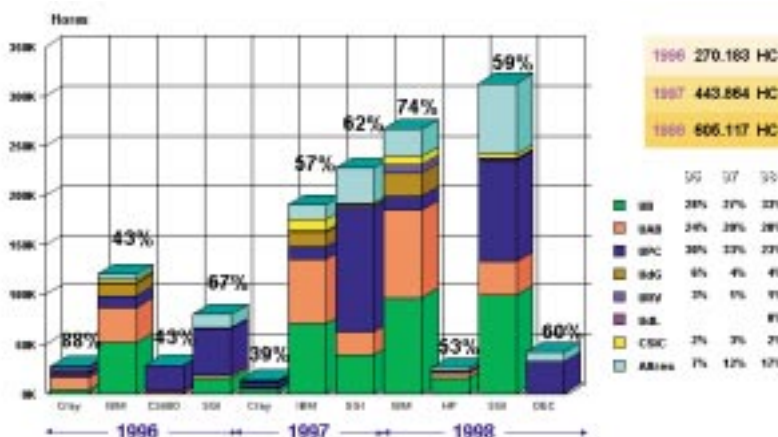
Des del novembre de 1995, el C⁴ coordina les activitats conjuntes del CESCO i el CEPBA, centrades en els serveis de supercomputació i la gestió dels programes de mobilitat d'accés a Grans Instal·lacions Europees.

La compartició de recursos entre ambdós Centres ha permès obtenir el màxim rendiment en l'ús del respectiu maquinari i augmentar la potència total disponible fins a 87,83 Gflop/s. A més de les màquines que s'han mencionat abans els usuaris han tingut accés a: l'Origin 2000 de 64 processadors, 8 GB de memòria principal, 288 GB en disc i un rendiment punta de 32 Gflop/s; l'AlphaServer 8400 de 10 processadors, 2 GB de memòria principal, 60 GB en disc i un rendiment punta de 8,80 Gflop/s; i el Parsytec CCI de 16 processadors Pentium, 1 GB de memòria principal, 26 GB en disc i un rendiment punta de 4,26 Gflop/s.

El nombre d'usuaris durant l'any 1998 ha augmentat respecte a l'any anterior de 579 a 592, i el de projectes ha passat de 112 a 121. Les hores computacionals (HC) usades han estat 605.117, un 36% més sobre les 443.864 HC de 1997. Un grup reduït de projectes, com ja és habitual, es reparteix la major part del consum: els 10 primers projectes consumeixen el 55% de les hores i els 20 primers, el 74%.

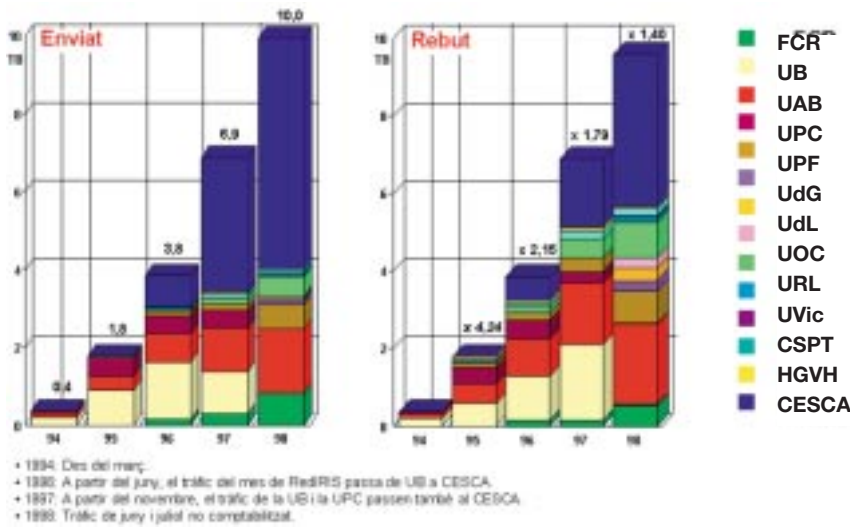
Consum per institució i màquina

El gran consum per a ambdós centres ha continuat concentrat en tres institucions: la UB (un 33% de les hores usades), la UPC (un 23%) i la UAB (un 20%). Cal remarcar el constant creixement del consum que s'està fent de fora de Catalunya.



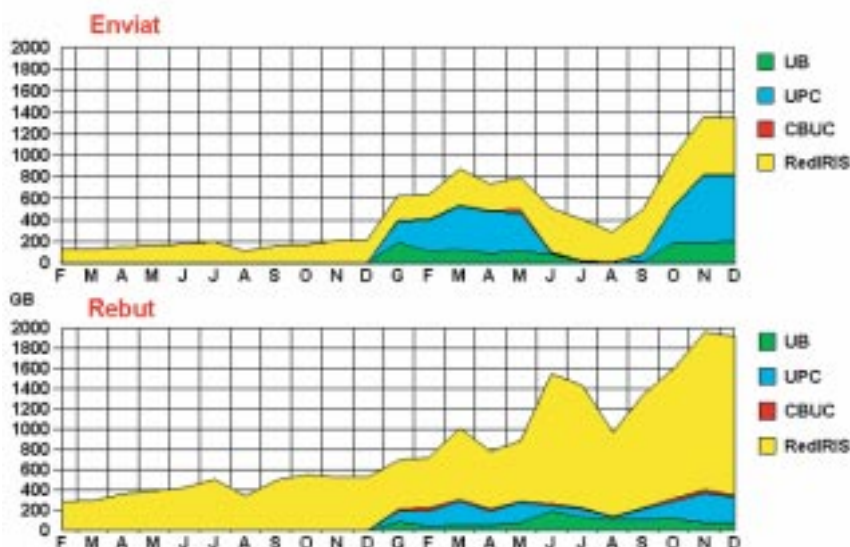
Evolució del tràfic a l'Anella Científica

El tràfic total que ha circulat per l'Anella ha estat superior als 10 TB, però manquen les dades estadístiques de juny i juliol, a causa del buit de dades que va originar el canvi tecnològic de l'Anella. Si s'assumeix un tràfic similar al de setembre, llavors el total pujaria a 12,34 TB, un increment d'un 79% com l'experimentat l'any anterior. Amb la nova Anella, el tràfic rebut (9.824 GB) i enviat (10.207 GB) no coincideixen com feien en el passat com a conseqüència d'usar diferents protocols (ATM i Frame Relay).



Tràfic dels commutadors

La gràfica mostra el tràfic enviat i rebut pel commutador ATM, posat en funcionament el gener de 1998. També, per tenir una visió històrica, inclou el tràfic de RedIRIS des que es va començar a recopilar (febrer de 1997). En total, s'han importat 11,45 TB d'informació (versus 4,56 l'any anterior) i s'han exportat 4,26 (versus 1,77).



El departament de Comunicacions i Operacions gestiona l'Anella Científica, els seus serveis addicionals i el nus de RedIRIS a Catalunya, i dóna assistència a totes aquelles organitzacions que s'hi connecten. També és responsabilitat seva la infraestructura bàsica del Centre (servidors de correu, llistes de distribució i web, xarxa local, instal·lacions tècniques, etc.) i la realització de còpies de seguretat de tot el maquinari del CESCA.

L'any 1998 ha suposat l'actualització tecnològica de l'Anella Científica. La primera Anella, basada en tecnologia DQDB i operada per Telefónica, ha estat en funcionament des del desembre de 1993 fins al maig de 1998. La nova Anella, basada en tecnologia ATM i operada pel Centre de Telecomunicacions de la Generalitat de Catalunya, ha suposat augmentar la velocitat del troncal des de 34 a 622 Mbps i la dels accessos metropolitans de 10 a 34 o 155 Mbps. També s'ha incrementat el nombre d'institucions connectades amb la incorporació de la Universitat Ramon Llull, la Universitat de Vic i la Xarxa Telemàtica Educativa de Catalunya.

La nova Anella està suportada per una xarxa de més de 90 km de fibra òptica estesa a la ciutat de Barcelona. Sobre aquesta infraestructura física s'ha implementat una xarxa de transport basada en tecnologia SDH, formada per dos anells a 622 Mbps (principal i secundari) que recorren per traçats diferents, i que permeten, en cas de tall de l'anell principal, disposar d'un camí alternatiu. Aquesta característica dota els accessos a l'Anella d'una alta disponibilitat.

Les institucions connectades a la Xarxa Científica han continuat fent un gran nombre de **consultes** (673) que, en la seva majoria, han estat sobre interrupció del servei i de routing. D'altra banda, a la **nostra web** hi ha hagut 17.608 accessos a la plana principal que provenen de 19.815 hosts diferents, els quals han accedit a un total de 128.813 pàgines, un 31% de les quals són d'informació sobre els serveis de supercomputació a l'usuari, i han transmès 1,63 GB de dades.

L'any 1998 el CESCA ha incorporat dos nous serveis addicionals per a la Xarxa Científica, **proxy-cache** i **ftp mirror**, que s'afegeixen als que ja es-

Obres d'instal·lació de fibra òptica a la UOC per la nova Anella Científica.

taven disponibles (*News*, *Mbone* i servidor secundari del domini *.es*). Ambdós serveis optimitzen el tràfic internacional i s'han implementat sobre una nova Sun E3500, amb dos processadors Ultra SPARC (de 336 MHz) i 12 GB de memòria principal.

Durant el 1998, s'ha ampliat el nombre de **servidors virtuals de web i dominis** que el CESCA hostatja. A més del *cbuc.es*, disponible des del 1997, s'han incorporat el *hoise.com* i el *racab.es*. El primer conté tres revistes virtuals en anglès: *Primeur*, *Virtual Medical Worlds (VMW)* i *EuroInfoTech*. El segon pertany a la Reial Acadèmia de les Ciències i les Arts de Barcelona (RACAB). També s'ha continuat allotjant el servidor del Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya (CBUC).

Les **eines d'edició de revistes virtuals**, desenvolupades amb el projecte europeu HOISE-NM (1996-1997), s'han adaptat al català per poder usar-les amb la nostra llengua. Sota la direcció del Comissionat per a Universitats i Recerca s'ha desenvolupat un primer prototip per a una revista de recerca, RECERCAT, sobre "ciència, tecnologia i innovació per al demà" (<http://www.recercat.com>).

A més a més, s'ha col·laborat amb el projecte SABA, coordinat a Catalunya per la UPC i on també hi participen la UdG i la UOC, que investiga diverses eines de reserva d'amplada de banda i videoconferència.

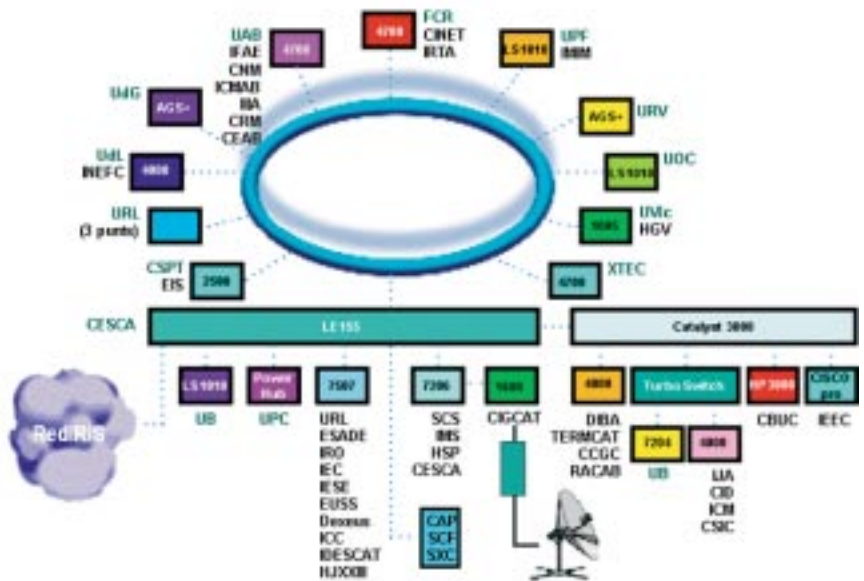
Un any més, el CESCA també ha contribuït a la celebració de les jornades Centre de Física de Benasc (Osca) proporcionant el suport tècnic a la instal·lació d'una línia punt a punt de 64 Kbps que connectava l'Annexus amb la petita població dels Pirineus.

Finalment, al llarg de l'any 1998 s'ha estat estudiant la posada en marxa del Servei d'Accés Remot a l'Anella Científica, que serà operatiu des del febrer de 1999, segons el conveni signat el 14 de desembre entre el Comissionat per a Universitats i Recerca, la FCR, la Fundació Retevisión i el CESCA.



La Xarxa Científica: 50 institucions connectades

Durant l'any 1998 s'han incorporat dues noves institucions a la Xarxa Científica: la Universitat de Vic (UVic) i la Reial Acadèmia de les Ciències i les Arts de Barcelona (RACAB). D'altra banda, el Consorci Hospitalari Parc Taulí i la Unitat de Diagnòstic per a la Imatge d'Alta Tecnologia s'han fusionat i s'han convertit en la Corporació Sanitària Parc Taulí (CSPT). Les baixes han estat dues: l'Institut Català de Telemàtica Aplicada i l'Hospital General de la Vall d'Hebron. A més d'aquests canvis, s'han realitzat diverses modificacions per tal de millorar la connectivitat de les diferents institucions. S'ha augmentat la velocitat fins a 256 Kbps del TERMCAT i l'Hospital General de Vic (HGV) ha millorat la seva connexió passant de XDSI a una línia punt a punt a través de la Universitat de Vic. S'ha adquirit un commutador ATM (Fore LE155) per connectar la UB, la UPC, la línia de Gigacom del nus de RedIRIS a Catalunya i el nostre maquinari de supercomputació (CAP), de serveis addicionals a la Xarxa (SXC) i el servei de cerca de farmacòfors (SCF). També un encaminador CISCO 7206 que dona servei a totes les institucions connectades amb Frame Relay (UdG, URV, UdL, URL, UVic i CSPT). Al setembre es va completar la connexió dels tres punts d'accés a l'Anella de la URL i al desembre la Xarxa Telemàtica Educativa de Catalunya es va connectar a l'Anella amb ATM a 34 Mbps.



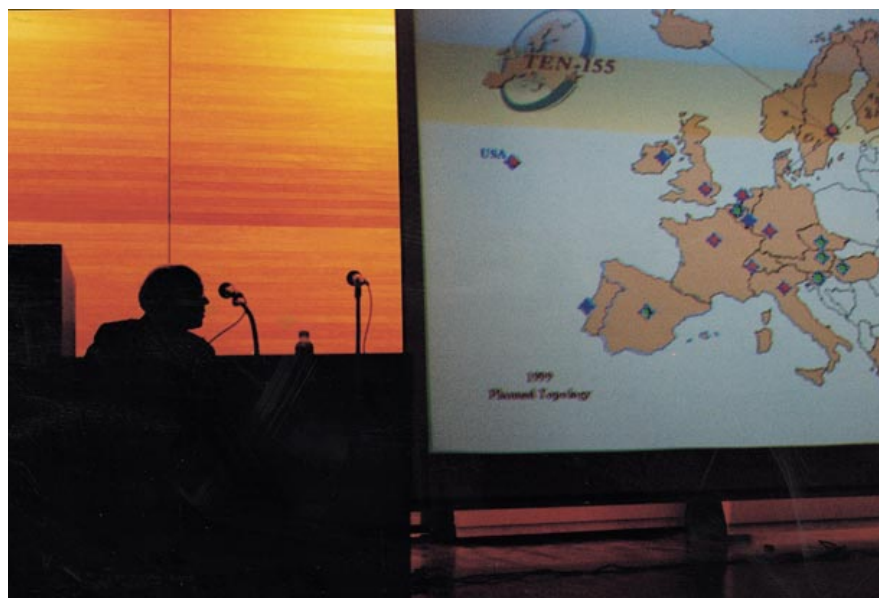
Informació servei proxy-cache
<http://www.cesca.es/proxy.html>

Les activitats del CESCO en els camps de la supercomputació i les comunicacions han arribat als usuaris i a tots els interessats a través del Departament de Promoció. La difusió que se n'ha fet s'ha materialitzat en activitats de formació, de participació en projectes institucionals, i de promoció a través dels mitjans de comunicació.

Pel que fa a la **formació**, el CESCO ha celebrat dues edicions de l'Aula de Supercomputació. La primera, destinada a difondre les novetats en els serveis de supercomputació i comunicacions incorporades al Centre en el darrer any, va rebre 68 estudiants. La segona, amb 111 assistents, va presentar noves metodologies de càlcul d'utilitat per a la comunitat científicotècnica (algorismes genètics i elements finits no lineals).

Tres seminaris sobre eines de la química computacional han complementat les activitats de formació: Aplicacions del programa ADF; *Density Functional Theory: from Fundamentals to Applications*, i SIESTA: càlculs DFT per sistemes molt grans, amb 19, 17 i 33 assistents respectivament.

A més de les accions de formació, el Departament ha donat suport a diverses **activitats** amb vista a ampliar el ressò i el coneixement de les noves tecnologies. Un exemple és la segona Trobada de l'Anella Científica (TAC'98), que va aplegar els representants de gairebé totes les institucions connectades. També en són una mostra les conclusions de l'anàlisi amb tècniques de mineria de dades del Cens



de Població i Habitatge de Catalunya, conjuntament amb IBM i l'IDESCAT, esmentades més amunt, que es van presentar a la Jornada d'Experimentació en Noves Tecnologies de Supercomputació (ENTS'98) celebrada al setembre.

També d'acord amb aquesta filosofia, el CESCO va participar en l'organització de les *Jornadas Técnicas de RedIRIS'98* el passat novembre a Barcelona. Les *Jornadas* juntament amb la

reunió anual dels *Grupos de Trabajo*, van aplegar unes 350 persones entre tècnics i responsables de comunicacions de les institucions afiliades a RedIRIS per posar en comú les seves experiències en el camp de les comunicacions.

El **servei de cerca de farmacòfors**, finançat per la CIRIT, ha estat regularment accedit pels laboratoris Almirall-Prodesfarma, Dr. Esteve i Menarini, i per tres grups de recerca de la

Les Jornadas Técnicas de RedIRIS van combinar les conferències i presentacions (a dalt, Fernando Liello, durant la seva intervenció) amb la vessant cultural, un exemple de la qual és el concert que el cor de la Universitat de Barcelona va oferir als assistents al Palau de la Generalitat (a la dreta).



UB, la UPC i la UPF. El nombre d'usuaris s'ha mantingut estable malgrat la campanya de difusió que es va realitzar entre 14 empreses farmacèutiques catalanes.

S'ha seguit col·laborant en temes de difusió amb el **consorci HOISE-NIM** i dins de l'acció concertada de la DGXII, Direct, com a integrants del grup de treball de *Data Storage and Management*.

El **TERAFLOP**, la revista mensual del CESCA, ha pres forma definitiva amb nou edicions anuals a tot color (no surt als mesos de gener, agost i setembre). En la redacció de la revista col·laboren activament la resta de departaments del centre, alguns dels nostres usuaris, i experts i institucions d'arreu l'Estat vinculats a la supercomputació i les comunicacions. A més a més, per recopilar i publicar les dades a nivell de tot l'Estat de les vendes realitzades per cada proveïdor s'han signat **convenis** de col·laboració amb Convex, Silicon Graphics i Sun.

Per **apropar la CAP a d'altres sectors de la societat**, el CESCA ha estat present a l'exposició *Ara és demà* i ha participat com a ponent a tres congressos d'àmbit estatal i dos internacionals. També cal destacar la col·laboració, un any més, en les activitats de la Setmana de la Ciència 1998 amb dues **Jornades de Portes Obertes** que han permès que tots aquells que ho desitjaven passessin per les nostres instal·lacions a conèixer de més a prop el món de la supercomputació.

Un exemple de la presència del Consorci als **mitjans de comunicació** ha estat l'aparició al programa *Escape* de Canal C: (de Canal Satélite) el dia 6 de gener de 1999. Al desembre de 1998 periodistes d'aquest canal van visitar diverses vegades les instal·lacions del CESCA i el CEPBA per tractar d'aprofundir en el món de la supercomputació i entrevistar responsables i usuaris d'ambdós centres. El resultat ha estat un programa d'uns 25 minuts.

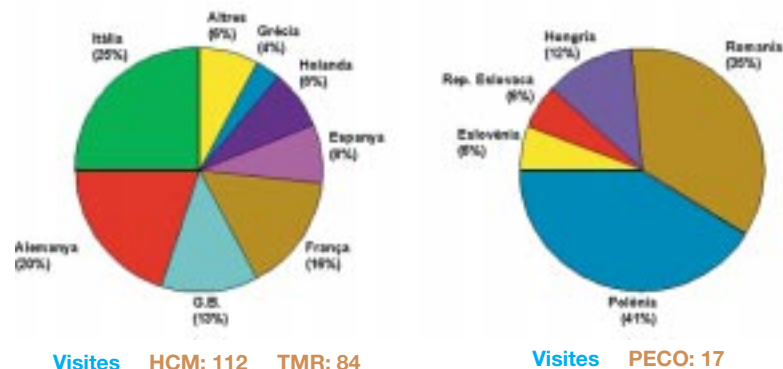
Una altra mostra la trobem a l'aparició cada cop més freqüent de notícies relacionades amb les activitats del CESCA a la premsa escrita, amb un total de 17 articles apareguts al llarg de l'any als diaris *Expansión*, *Dossier Econòmic de Catalunya*, *La Vanguardia*, *El Periódico*, *Avui*, *El País*, etc.

El C⁴ gestiona els programes de mobilitat d'accés a Grans Instal·lacions, finançats per la Comissió Europea. Al setembre, el CESCA i el CEPBA van rebre el visitant número 200. El programa vigent, TMR, ha estat renovat fins a l'abril del 2000 amb 335 Kecus addicionals, i ha permès fins ara que 70 investigadors europeus facin 84 estades d'una durada mitjana de 10,85 setmanes convidats per 25 grups de recerca catalans. Des de l'inici dels programes l'any 1993, hi ha hagut 171 convidats que han fet 213 estades a 46 grups. Si mirem només dades de 1998, han vingut 38 investigadors (39 visites) de la mà de 17 grups de recerca.

Els resultats de l'enquesta endegada per la Comissió Europea per valorar la qualitat de l'estada i del programa a nivell de les respectives Grans Instal·lacions van ser força positius per al CESCA i el CEPBA. Malgrat que el perfil dels nostres visitants no es corresponia exactament amb la mitjana del programa (en edat i categoria professional) la majoria declaraven que sense el suport del programa els hauria estat impossible dur a terme la seva recerca a les nostres instal·lacions. A més, els nostres serveis i suport han estat qualificats de "bons", i s'ha valorat molt especialment l'entorn intel·lectual en què els visitants s'han vist immersos, la qual cosa també es veu reflectida en l'elevat nombre de publicacions produïdes com a resultat de la seva estada.

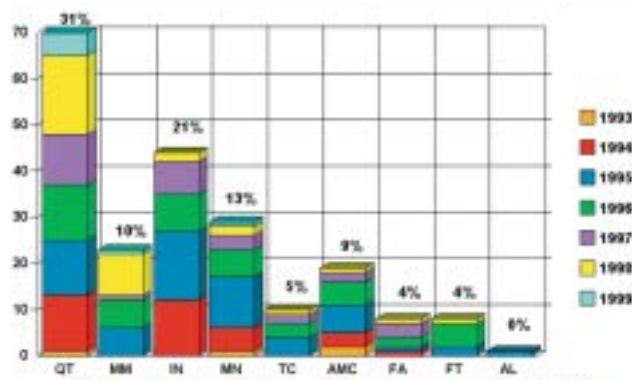
Visites per països

Es manté la tendència que la majoria de visitants continuen venint dels països més grans: Itàlia, Alemanya, Regne Unit i França. El percentatge de visitants de l'Estat va disminuint perquè, mentre que el HCM pagava les despeses de manutenció i d'hores usades, però no les de viatge, per als investigadors espanyols, el TMR només sufragava el consum d'hores realitzat.



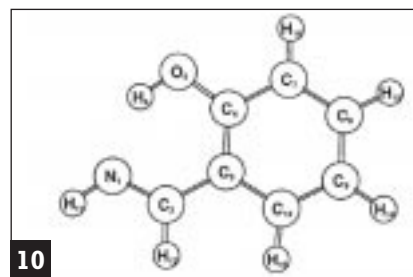
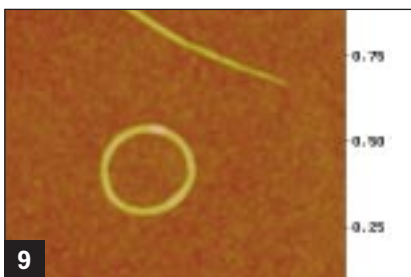
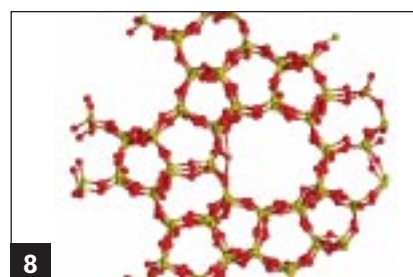
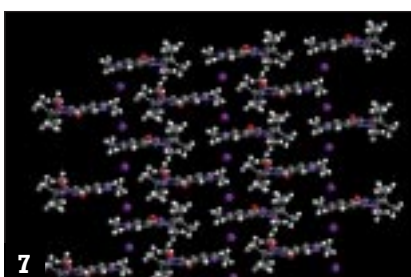
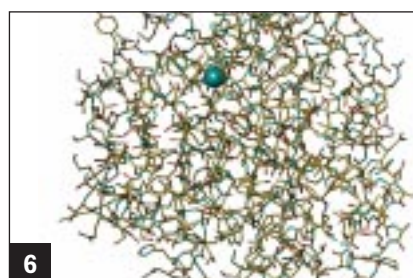
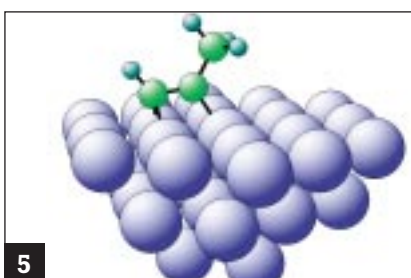
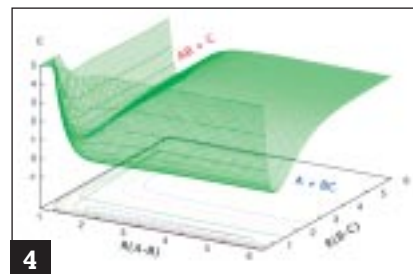
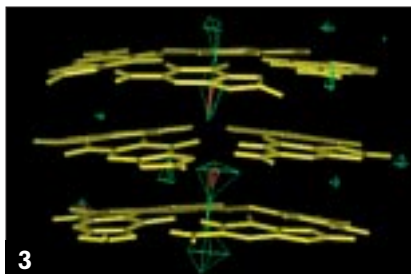
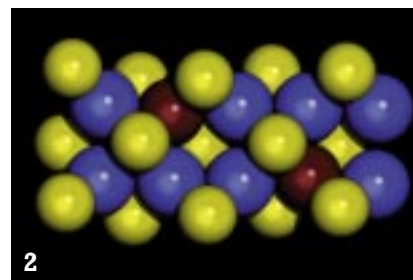
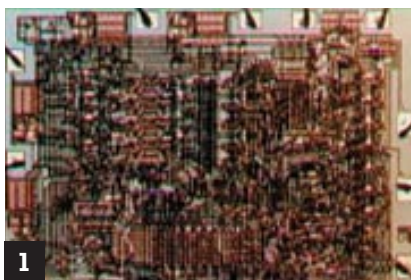
Visites per àrea d'especialitat

Les àrees on hi ha hagut un major creixement de visitants en el darrer any són les de química teòrica i modelització molecular, mentre que la davallada s'ha produït a informàtica i mètodes numèrics.



Els 10 projectes de més consum al CESCA-CEPBA

1. Simulació d'arquitectures i benchmarks
Mateo Valero (UPC, 11%)
2. Estructura electrònica de molècules i sòlids inorgànics
Santiago Álvarez (UB, 7%)
3. Reconeixement molecular
Modesto Orozco (UB, 5%)
4. Dinàmica de reaccions químiques elementals
Antoni Aguilar (UB, 5%)
5. Models *ab initio* en catàlisi heterogènia i ciència de materials
Francesc Illas (UB, 5%)
6. Reaccions de transferència protònica i d'hidrogen
Josep Maria Lluch (UAB, 5%)
7. Enginyeria de cristalls moleculars d'interès tecnològic
Juan José Novoa (UB, 5%)
8. Estructura i reactivitat de complexos metàl·lics. Aplicacions en síntesi orgànica i en química ambiental
Antoni Oliva (UAB, 4%)
9. Simulació *ab initio* de les propietats estructurals i electròniques de nous materials amb aplicacions tecnològiques: nanotubs i semiconductors
Ángel Rubio (UVA, 4%)
10. Estudi de les transferències protòniques intramoleculares en l'estat fonamental i l'excitat de diferents sistemes per a la determinació teòrica de molècules amb capacitat per actuar com a memòries òptiques
Miquel Duran (UdG, 4%)



Edita

CESCA

Gran Capità, 2-4
08034 Barcelona
Tel. 93 205 64 64
Fax: 93 205 69 79
<http://www.cesca.es>
teraflop@cesca.es

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

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà & Associats

FOTOGRAFIES

Jordi Pareto