



## JOCS'99, una visió al futur de la supercomputació

■ Santiago Olivella i el  
CIMNE reben Premis  
Narcís Monturiol

■ Nous serveis per a  
la comunitat científica

■ Més de 30 milions de  
peticions al *proxy-cache*

**A**ntoni Subirà, conseller d'Indústria, Comerç i Turisme, Antoni Caparrós, rector de la Universitat de Barcelona, i Rafael Español, president del CESCO, van ser els encarregats de donar la benvinguda als participants en la quarta edició de la JOCS. Una edició que ha estat possible gràcies a la tasca d'un comitè organitzador format per Jesús Labarta, Modesto Orozco, Xavier Oliver, Antoni Oliva, Carme Monserrat i Miquel Huguet.

La intenció de la jornada, segons Español, era "fer balanç de l'ús dels nostres recursos i escoltar les necessitats vers el futur". El president del CESCO va assegurar que "la competitivitat d'un país depèn en gran part de la seva capacitat d'innovació" i que "al llarg d'aquesta última dècada la FCR ha apostat per impulsar aquest camí, apropant la ciència a la societat civil i creant grans infraestructures de recerca". Segons Rafael Español ara cal fer "una aposta decidida per l'aplicació de la recerca al món de l'empresa", en aquest sentit, Español va anunciar la

## A LA JOCS ES VA DESTACAR LA NECESSITAT D'INVERSIÓ EN R+D I EN INNOVACIÓ TECNOLÒGICA PER A SER COMPETITIU

# JOCS 99

## Punt de trobada d'investigadors i empresaris

**La Jornada Catalana de Supercomputació (JOCS'99), celebrada el passat 28 d'octubre a l'Auditori del Parc Científic de Barcelona, va rebre la visita d'un centenar de persones del món acadèmic i empresarial.**



**D'esquerra a dreta, Antoni Caparrós (rector de la UB), Antoni Subirà (conseller d'Indústria, Comerç i Turisme) i Rafael Español (president del CESCO)**



**Juan Soto i Antoni Oliva**

constituïció el passat 14 d'octubre del Senat de la FCR, un organisme per promoure la innovació d'R+D en el teixit empresarial català.

El rector de la Universitat de Barcelona, Antoni Caparrós, va dir que hi era en representació de totes les universitats catalanes consorciades en el CESCO i va donar la benvinguda al nou espai del Parc Científic de Barcelona. Caparrós va coincidir amb Rafael Español en assenyalar la importància "de tots els projectes de recerca, desenvolupament i innovació".

Precisament, la inversió en R+D va ser l'eix central de la intervenció del conseller d'Indústria, Comerç i Turisme, Antoni Subirà. Per al conseller, els quatre grans reptes que té plantejada la indústria catalana són la internacionalització, la qualitat del sistema productiu i dels productes, la capitalització de les empreses, i finalment, la recerca, el desenvolupament i la innovació tecnològica. Subirà va destacar la importància "d'establir una relació de treball positiva entre les empreses i els centres que tenen un estoc important de coneixement i de tècniques", ja que la subcontractació d'aquests serveis posaria a l'abast de les empreses típiques del sistema industrial català el desenvolupament i la innovació tecnològica.

El president de Hewlett-Packard Espanyola, Juan Soto, va parlar de la innovació a la Societat del Coneixement. Segons Soto, "el gran forat que té Espanya és la despesa en R+D". L'Estat espanyol va gastar l'any 1998 el 0,9% del PIB en innovació de producte i investigació científica, un percentatge que s'ha duplicat des de 1981 però





que és inferior al de l'any 1992. Soto va recordar que "avui dia el que realment afecta la competitivitat d'una societat com l'espanyola o la catalana, són fonamentalment els factors de caràcter intangible, com la innovació, la formació en recursos humans i les tecnologies de la informació" i va afirmar que l'empresa "no tindrà excusa per no innovar en productes i serveis, treballant juntament amb les administracions públiques i els centres d'investigació, fent un *outsourcing* necessari per a les pimes", exemples d'aquestes estructures de suport a l'empresa en són el CESCA i el CEPBA.

El director de l'Institut d'Estudis Espacials de Catalunya (IEEC), Jordi Isern, va parlar de la simulació numèrica en el camp de la física i el paper de la supercomputació. Isern va destacar el paper que l'increment de la capacitat de càlcul està jugant a la física. Segons Isern, "tradicionalment aquest paper ha estat molt important, però sempre auxiliar, a partir d'ara el paper que poden jugar els ordinadors és fonamental perquè introdueix un canvi qualitatiu".



Jordi Isern

Isern va posar com a exemple algunes mostres de simulacions que s'estan fent al CESCA i al CEPBA. Dins del camp de l'astrofísica relativista, l'equip que encapçala Josep Maria Ibáñez, està investigant els fluids relativistes i la física d'objectes compactes. Una part de les simulacions han estat fetes al CEPBA, però l'estudi s'ha hagut de finalitzar al Max Planck (Alemanya).

Per a ser competitiu, Isern assenyala quatre vies: invertir en noves màquines; treballar en grups de PCs amb el sistema Beowulf (grups d'ordi-

cada quatre o cinc cicles de mitjana.

Per al 2012, les investigacions s'orienten a dissenyar processadors que puguin llançar a executar fins a 16 instruccions per cicle i que n'executin realment 10. La ISA (Industries Semiconductor Association) avança que la llei de Gordon Moore continuarà com a mínim fins al 2012. A partir d'aquest punt, la mecànica quàntica i la computació amb ADN haurien de prendre el relleu de l'evolució.

El subdirector general de Qualitat de l'Aire i Meteorologia, Oriol Puig, va fer un breu repàs a la història de la meteorologia i va destacar la importància de tenir un centre de supercomputació que doni resposta amb continuïtat. Segons Puig, el Servei de Meteorologia de Catalunya (SMC) aposta per "donar joc al centre de supercomputació i aprofitar els seus recursos". Actualment l'SMC té en marxa diferents projectes: l'adquisició d'un nou sistema de radar, la implementació operativa del Sistema d'Ingestió, Integració i Visualització d'Informació Meteorològica (SIIVIM), la construcció



### Els participants en la taula rodona de la JOCS'99

Isern va comparar els recursos amb què actualment estan treballant els projectes que es duen a terme al CESCA amb els internacionals. Segons Isern serà difícil competir internacionalment si no es millora la situació i va recordar que enguany el CESCA ha sortit del TOP500. Segons Isern, "en tenim suficient en aquesta primera etapa de desenvolupament, però en un futur les eines de què disposem no seran suficients". Isern va dir que "seria bo poder-se situar per sobre de Tabacalera", que actualment es troba a la posició 314.

nadors amb un sistema eficient de comunicació); construir processadors *ad-hoc* (dissenyar màquines específiques per treballar en investigacions concretes); o bé utilitzar nous algorismes per a cada problema.

El director del C<sup>4</sup>, Mateo Valero, va recordar els inicis de la computació i va parlar de la importància que els computadors seguissin la idea desenvolupada per Henry Ford per al disseny de cotxes: segmentació i paral·lisme. Els primers computadors segmentats fa 40 anys podien llançar a executar una instrucció cada cicle, encara que en realitat, se n'executava una

d'una nova base de dades, la visualització dels models de 3D del radar i la millora de la xarxa de comunicacions. Per dur-los a terme, l'SMC preveu que s'haurà d'augmentar un 50 per cent els recursos de computació en els propers 2 anys.

Dins la JOCS'99 també es va celebrar una taula rodona per parlar de la modelització molecular en el disseny de fàrmacs. Modesto Orozco (UB) en va ser el moderador i van participar-hi F. Javier Luque (UB), Juan Jesús Pérez (UPC), Roderic Guigó (UPF/IMIM), Víctor Segarra (Almirall-Prodesfarma) i José Luis Lavandera (Glaxo Wellcome).

**La despesa en R+D és una de les assignatures pendents que té l'economia.**

Juan Soto

**En tenim suficient en aquesta primera etapa de desenvolupament, però en un futur les eines de què disposem no seran suficients.**

Jordi Isern

**És més rendible tenir un centre de supercomputació que no pas fer una inversió a la pròpia empresa.**

Oriol Puig

**Part important perquè les expectatives de futur de la modelització molecular siguin una realitat serà que es treballi en unes condicions de computació adequades.**

Modesto Orozco

**A nivell d'arquitectura, s'ha d'enfocar el disseny de processadors perquè executin eficientment aquelles aplicacions realment utilitzades: servidors d'Internet i multimèdia.**

Mateo Valero

En la presentació, Modesto Orozco va parlar dels grups de treball que hi ha actualment en modelització molecular, 17 segons dades de la Xarxa Catalana de Modelització Molecular, dels quals, més del 55% són a Catalunya. Orozco va assegurar que la modelització molecular té unes expectatives de futur molt importants a Europa, Espanya i Catalunya, i "part important perquè aquestes expectatives siguin una realitat serà que es treballi en unes condicions de computació adequades".

El desenvolupament de nous fàrmacs va fer un canvi qualitatiu, segons F. Javier Luque (UB) gràcies a tres fets: La introducció de la robòtica en la química, que ha donat lloc a la química combinatorial el coneixement massiu de seqüències de gens; i la disponibilitat

d'una gran informació estructural.

Juan Jesús Pérez (UPC) es va centrar en el disseny de farmacòfors i l'exploració de bases de dades 3-D. Segons Pérez, un dels problemes fonamentals on els recursos de supercomputació hauran de donar suport és en la transformació de bases de dades 2D a bases de dades tridimensionals.

Per la seva banda, Roderic Guigó (UPF/IMIM) va parlar de la bioinformàtica i el disseny de fàrmacs. Guigó va destacar la transformació "radical" que ha experimentat la biologia en la última dècada, passant de ser una ciència essencialment descriptiva a generar una gran quantitat d'informació. Roderic Guigó va centrar gran part de la seva intervenció a parlar del potencial d'informació derivat del projecte de seqüenciament del genoma humà, una tasca "essencialment computacional", ja que l'única manera d'extreure informació a partir de la seqüència del DNA és mitjançant l'ús de la computació.



Mateo Valero

Victor Segarra, representant d'Almirall-Prodesfarma, va parlar de la modelització molecular des del punt de vista de l'empresa catalana. Segarra va fer un "ràpid passeig" per les diferents etapes en la proposta de nous fàrmacs. Els estudis de modelització molecular i química computacional contribueixen, segons Segarra, en les diferents etapes que porten a la proposta d'aquests nous fàrmacs, com pot ser la identificació de nous caps de sèrie, la seva expansió i utilització.

José Luis Lavandera, de Glaxo Wellcome, va mostrar el punt de vista d'una multinacional farmacèutica i va donar exemples concrets del que es fa en modelització molecular en la indústria farmacèutica actualment. Lavandera va destacar la "pressió" que hi ha

per aconseguir ràpidament nous productes que siguin "segurs" i que tinguin menys problemes de no progressar en posteriors fases de desenvolupament o d'investigació clínica.

Després de la intervenció dels ponents, Modesto Orozco en va destacar tres punts: la interdisciplinarietat, ja que la modelització molecular no es contempla com una tècnica única i aïllada; la riquesa metodològica, amb l'ús de diferents tècniques; i l'enorme requeriment de recursos computacionals.

Una de les preguntes que Modesto Orozco va plantejar en finalitzar la taula rodona, va ser fins a quin punt Espanya i Catalunya estan en condicions d'afrontar la revolució biològica que s'està produint actualment, sobretot pel que fa al genoma i a la bioinformàtica. La resposta, segons Roderic Guigó, no és gaire optimista, ja que "la bioinformàtica és una disciplina molt recent, molt poc sistematitzada i que no s'ensenya a les universitats". Roderic Guigó va afegir que "la bioinformà-



Oriol Puig

tica no és una disciplina més; en el futur no es podrà fer biologia sense computació".

El director general d'Universitats, Antoni Giró, va ser l'encarregat de tancar l'acte. Giró va destacar la importància de "fomentar trobades com la JOCS perquè del diàleg neixi un esperit obert que faci que els acadèmics siguin sensibles a les demandes del món empresarial i que el món empresarial confiï en l'oferta del món acadèmic".

Antoni Giró va recordar també que l'esforç que es va fer a Catalunya per crear el CESCA va ser molt positiu, però que "no s'ha de perdre el nord" perquè "la computació canvia molt ràpidament, és cara, i encara s'haurien de fer esforços importants si volem tenir eines potents i competitives".

# El CIMNE i Santiago Olivella, guardonats amb el Premi Narcís Monturiol



Fotos: JORDI REDMAR. Imatges cedides pel Departament de la Presidència de la Generalitat de Catalunya

**Esquerra: Eugenio Oñate, director del CIMNE, rep la placa Narcís Monturiol de mans de Jordi Pujol, president de la Generalitat de Catalunya.**

**Dreta: El president Pujol lliura la medalla Narcís Monturiol a Santiago Olivella.**

**El passat 3 de novembre es van lliurar els premis Narcís Monturiol al mèrit científic i tecnològic, uns premis que va iniciar la Generalitat de Catalunya el 1982. Enguany, el Centre Internacional de Mètodes Numèrics en Enginyeria (CIMNE) ha vist reconeguda la seva tasca amb una placa. Santiago Olivella, professor d'investigació del Consell Superior d'Investigacions Científiques (CSIC) i director del Centre de Recerca en Química Teòrica de la UB, ha estat guardonat amb una medalla, una distinció a la seva trajectòria en el camp de la química teòrica.**

El CIMNE ha estat guardonat amb una de les plaques Narcís Monturiol per la seva contribució al desenvolupament de nous mètodes, per l'anàlisi i el disseny de productes i processos en enginyeria, per l'impuls a la col·laboració entre el món de la recerca i el món industrial i per la seva tasca de formació avançada i a la promoció de la ciència i la tècnica en l'àmbit internacional.

El Centre Internacional de Mètodes Numèrics en Enginyeria és un centre de recerca creat l'abril de 1987 per la Generalitat de Catalunya i la UPC, sota els auspicis de la UNESCO. Precisament, el CIMNE és la seu de la Càtedra UNESCO de Mètodes Numèrics en Enginyeria de la Politècnica, la primera càtedra d'aquest tipus al món. Aquest centre és dirigit pel catedràtic Eugenio Oñate, qui anteriorment també havia



estat guardonat amb la medalla Narcís Monturiol a títol personal. Oñate també va ser president del Consell Científic del CIESCA del 1991 al 1995.

El CIMNE és un centre autònom de recerca i desenvolupament dedicat a impulsar els avenços en el desenvolupament i l'aplicació de mètodes numèrics i tècniques de càlcul per ordinador per tal de solucionar problemes d'enginyeria en un context internacional. És un centre punta en la re-

cerca i el desenvolupament de models numèrics per a l'anàlisi per ordinador de problemes en tot el camp de l'enginyeria. Aquests models matemàtics s'apliquen, per exemple, en l'estudi d'estructures i de problemes de mecànica del sòl i mediambientals, l'estudi aerodinàmic d'avions, de vehicles espacials i trens d'alta velocitat, de la hidrodinàmica de vaixells i el xoc d'automòbils.

El CIMNE organitza una àmplia gamma d'activitats de formació i difusió, com ara cursos, conferències i publicacions. També duu a terme diverses activitats de recerca i desenvolupament i ha pres part en un gran nombre de projectes de transferència de tecnologia en col·laboració amb més de cent cinquanta empreses i organismes de diferents països.

En el període entre 1987 i 1997 el CIMNE ha consolidat una política d'impuls d'activitats de formació, d'investigació i de transferència tecnològica en el camp dels mètodes numèrics i de les aplicacions en enginyeria en un context internacional.

Resultats d'aquesta política són:

- L'organització de 195 cursos i seminaris i 26 conferències de caràcter nacional i internacional.
- La publicació de 40 llibres, 5 programes educatius, 60 monografies, 2 revistes periòdiques i nombrosos treballs científics i tècnics.
- La participació del CIMNE en més de 290 projectes d'investigació i desenvolupament finançats per la Comunitat Europea, el Ministeri d'Indústria, el CIDEM (Centre d'Informació i Desenvolupament Empresarial), la CIRIT (Comissió Interdepartamental de Recerca i Innovació Tecnològica) i la CICYT (Comissió Interministerial de Ciencia y Tecnología), així com per empreses espanyoles i estrangeres.
- La posada en marxa de projectes d'investigació propis.
- El finançament d'estades al CIMNE de més de 380 investigadors i científics de prestigi internacional.
- L'actuació com a Secretariat de la Sociedad Española de Métodos Numéricos en Ingeniería (SEMNI).

**Web del CIMNE:**

<http://www.cimne.upc.es>



## Què representa aquesta distinció per a vostè?

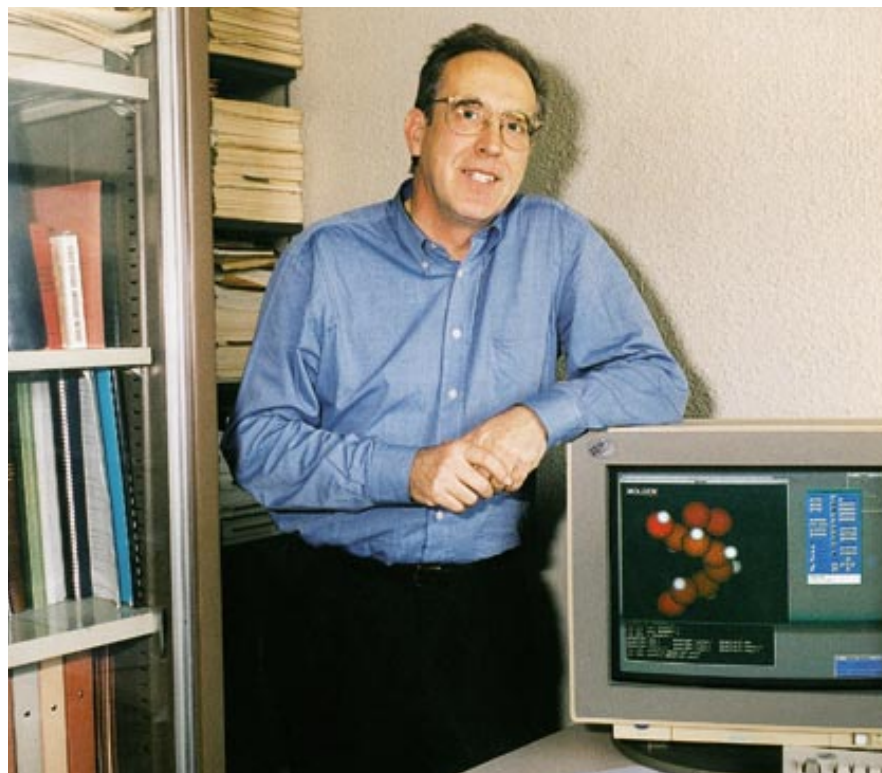
És un reconeixement a una feina feta al llarg de molts anys. Quan vaig començar a treballar en el camp de la química teòrica, a Catalunya es podien comptar amb els dits d'una mà les persones que treballaven en aquest camp. Concretament, a l'Institut Químic de Sarrià hi havia el professor Ramon Carbó, que ha estat el pare de la química teòrica a Catalunya.

Durant els darrers 25 anys, s'ha fet a Catalunya una tasca docent i formativa que ha permès que actualment hi hagi molts investigadors treballant en el camp de la química teòrica, que és un dels camps de recerca més actius a Catalunya. És important remarcar que la majoria dels químics teòrics catalans són coneguts arreu del món i tenen un gran prestigi. El fet d'haver contribuït, junt amb d'altres col·legues, al fet que la química teòrica arribés a arrelar tan bé a Catalunya em produeix una gran satisfacció personal.

## Quin és el principal objectiu que persegueix la química teòrica en general?

La química teòrica pretén resoldre problemes de la química que són difícilment abordables amb les tècniques experimentals, utilitzant eines essencialment computacionals, majoritàriament basades en la mecànica quàntica. Per exemple, estudiar experimentalment el mecanisme d'una reacció és molt complicat, sobretot perquè en les diferents etapes de la reacció es formen intermedis molt inestables, difícilment detectables amb les tècniques convencionals. En canvi, mitjançant els càlculs de tipus químicocuantic som capaços d'estudiar el mecanisme d'una reacció química en totes les seves etapes amb gran detall. La química teòrica aborda avui dia moltes línies de recerca que tenen a veure amb diferents camps de la química, per exemple són ben conegudes les aplicacions de la química teòrica en el modelatge de molècules bioactives que poden tenir aplicacions de tipus farmacològic, o bé en el disseny de nous catalitzadors. La química teòrica ha passat de ser una disciplina merament acadèmica a ser una nova manera de resoldre molts problemes que té plantejats la química actual.

# “El nivell de la química teòrica a Catalunya podria anar cap avall si no hi ha els mitjans computacionals necessaris per continuar sent competitius”



JORDI PARETC

Santiago Olivella, al seu despatx a la Facultat de Química

**Santiago Olivella i Nel·lo és professor d'investigació del Consell Superior d'Investigacions Científiques i director del Centre de Recerca en química teòrica de la Universitat de Barcelona. El Dr. Santiago Olivella ha estat guardonat amb una de les medalles Narcís Monturiol per la seva contribució decisiva al desenvolupament de la química teòrica a Catalunya i per la seva tasca docent i de recerca en el camp de l'estructura electrònica i reactivitat de les molècules orgàniques.**

## Com veu l'estat de salut de la recerca en química teòrica a Catalunya?

Molt bé. Dins de l'àmbit de la química, la recerca en química teòrica que es fa a Catalunya és una de les que més bé es coneix arreu del món. Realment, agafes qualsevol revista internacional de química d'alt nivell i normalment sempre hi trobes algun article d'algun grup teòric català. Cal tenir en compte

que hi ha molts investigadors treballant en química teòrica arreu del món. A Catalunya hi ha una xarxa de química teòrica integrada per prop de 140 investigadors, un nombre molt gran. L'embrió d'aquesta xarxa, al voltant de l'any 1984, van ser una vintena d'investigadors. La química teòrica a Catalunya té un nivell molt alt, però podria anar cap avall si no hi ha els mitjans computacionals necessaris per poder

continuar sent competitiu.

### **Cap a on va la recerca? Quines seran les àrees més significatives en els propers anys?**

Que tinguin una forta incidència en la química teòrica hi ha, per exemple, les àrees relacionades amb la biotecnologia. Avui dia, la química teòrica ofereix eines molt potents per modelar i dissenyar molècules que tinguin aplicacions farmacològiques o biomèdiques. Aquesta àrea de recerca és molt important, tant des del punt de vista de la millora de la salut com des del punt de vista econòmic. Darrera d'aquesta recerca, sobretot fora d'Espanya, hi ha empreses que hi estan invertint molts diners. Una altra àrea que és molt important, i que en el futur encara ho serà més, és la del disseny i caracterització de nous catalitzadors. De forma general, crec que en els propers anys la química teòrica tindrà un paper rellevant en tots els camps de recerca que són fronterers entre la química, la física, la biologia, la ciència dels materials... és a dir, en tots els camps que són interdisciplinaris.

### **Quin és l'objectiu que persegueix en la seva investigació actual?**

La meua línia de recerca en aquest moment té a veure amb la química atmosfèrica. El meu grup de recerca està estudiant el mecanisme de reaccions que tenen lloc a la troposfera, és a dir, a la baixa atmosfera. Concretament, estudiem el mecanisme de les reaccions de degradació de compostos aromàtics. Actualment s'utilitza cada cop més la gasolina sense plom, de forma que el que abans s'utilitzava com a antidetonant, el plom tetraetil, s'ha substituït per compostos aromàtics que no sabem com evolucionen a l'atmosfera. El que sí sabem és que donen lloc a una contaminació de l'aire urbà. Si esbrinem els mecanismes d'aquestes reaccions de degradació podrem formular models de simulació de la qualitat de l'aire ambiental. L'objectiu final de la nostra recerca és predir quin tipus de compostos aromàtics serien els més adients des del punt de vista de disminució del seu efecte contaminant a l'atmosfera.

### **Quin paper juga la computació en el seu treball diari?**

El 100% del meu treball es basa en la computació. La recerca en química teò-

## **El Centre de Recerca en química teòrica**

**El passat 26 d'octubre es va fer la presentació oficial del nou Centre de Recerca en química teòrica (CERQT) de la Universitat de Barcelona (UB) al Parc Científic de Barcelona. Aquest centre està constituït per set grups de recerca de la UB que treballen en l'àmbit de la química teòrica i que estan consolidats per la Generalitat de Catalunya o per la mateixa UB. Els tres objectius prioritaris del CERQT són:**

■ **Potenciar el caràcter interdisciplinari de la recerca que realitzen els seus grups per tal d'acostar-la als grups de recerca experimentals que treballen en l'àmbit de la química, la ciència de superfícies, els sistemes interfacials i col·loïdals, les macromolècules i el disseny de nous materials, i fer-la arribar, a la vegada, als diferents àmbits socials perquè en puguin gaudir indústries o centres de recerca i de desenvolupament públics o privats.**

■ **Afavorir la reflexió al voltant de problemes actuals en química.**

■ **Dur a terme un pla regular d'activitats de formació científica d'alt nivell.**

**Segons el seu director, Santiago Olivella, el CERQT serà "probablement l'usuari del CIESCA més important en hores de computació".**

rica sempre comporta la realització de càlculs intensius, per tant l'eina bàsica és l'ordinador. En el fons, la teoria en què es basen els nostres càlculs, la mecànica quàntica, és una teoria molt ben establerta des de fa molts anys, però la seva utilització pràctica no ha estat possible fins que es van desenvolupar

per els ordinadors moderns, i sobretot els supercomputadors. Els químics teòrics, normalment, som a tots els centres de supercomputació del món els usuaris més importants des del punt de vista del consum d'hores de càlcul intensiu.

### **Segons l'evolució que està tenint la química teòrica, són adequats els recursos computacionals existents?**

La potència de càlcul científic evoluciona molt ràpidament, d'any en any augmenta d'una forma espectacular. Avui dia som capaços d'afrontar problemes que fa pocs anys hauria estat impossible perquè el temps de computació era de mesos o d'anys. D'altra banda, arreu del món hi ha molts grups de químics teòrics que estan treballant en problemes punta similars als nostres i hi ha una gran competència. El problema actual és que avui es pot fer una inversió econòmica molt forta per adquirir el maquinari d'un centre de supercomputació i aconseguir que aquest centre doni els recursos computacionals que ens permetin ser competitiu, però que dintre de dos o tres anys poden quedar obsolets si no es continua fent la inversió econòmica. Aleshores quedarem en inferioritat de condicions per competir amb grups de recerca en química teòrica d'altres països. Si no es van actualitzant els recursos dels centres de supercomputació de forma molt dinàmica, hi ha el perill de quedar-se enrera. En certa manera, això és el que ens està passant amb el CIESCA darerament. Fins fa poc, el CIESCA estava dins la llista dels 500 centres de supercomputació més potents del món i, desgraciadament, aquest any ha deixat de ser-hi. Això vol dir que els químics teòrics catalans disposàvem d'un centre de supercomputació amb un bon nivell de maquinari, fins que els altres centres de la llista Top 500 han fet una actualització del seu maquinari que ha provocat que ens haguem quedat allunyats d'ells.

Al llarg dels últims 25 anys s'ha aconseguit crear a Catalunya uns grups de química teòrica que són molt competitiu a nivell internacional. Si no es manté una inversió continuada perquè aquests grups disposin dels recursos de supercomputació necessaris per poder competir, la química teòrica catalana anirà enrera.

# Connectades les xarxes europees i nord-americanes de recerca i d'educació

Dante i Internet2 han connectat les xarxes troncales d'altres prestacions de recerca i d'educació a través de l'oceà atlàntic. La interconnexió entre Abilene, una xarxa troncal d'Internet2, que connecta 156 universitats americanes, i TEN-155, la xarxa de recerca pan-europea que connecta les xarxes de 21 països europeus, farà possible la col·laboració entre els investigadors i els educadors americans i europeus, una col·laboració impossible avui a la Internet comercial. La interconnexió operarà a 45 Mbps, prop de 1.000 vegades més ràpid que un típic mòdem.

Segons Douglas E. Van Houweling, president i director executiu d'UCAID (University Corporation for Advanced Internet Development), "la interoperabilitat de les eines i tecnologies de la propera generació d'Internet farà possible la col·laboració entre els investigadors nord-americans i europeus a través de les xarxes d'investigació avui, i promourà la ràpida transmissió d'aquestes noves capacitats a la Internet comercial. La relació entre Internet2 i DANTE (Delivery of Advanced Networking Technology to Europe Ltd.) i la interconnexió de les nostres xarxes ajudarà a assegurar

aquesta interoperabilitat".

Aquesta interconnexió entre Abilene i TEN-155, es fonamenta en el Memoràndum d'Entesa (Memorandum of Understanding, MoU) que la UCAID ha signat amb DANTE i alguns dels seus socis europeus, com les xarxes de recerca nacional d'Espanya (RedIRIS), Bèlgica, la República Txeca, Alemanya, Grècia, Hongria, Irlanda, Itàlia, Israel, Luxemburg, Polònia, Portugal, Eslovènia i Suïssa.

La MoU entre DANTE i UCAID promou l'ús de la interconnexió per les xarxes de recerca europea que utilitzen el servei DANTE a Europa i als Estats Units. La MoU també encoratja la col·laboració entre les institucions membres, el traspàs de tecnologia a la indústria, i la col·laboració en el desenvolupament d'estàndards comuns i execucions tècniques. Això farà possible que les institucions europees i nord-americanes treballin a prop per dedicar-se als problemes de l'aplicació de la xarxa d'interès comú.

Els grups de recerca que necessitin establir circuits per desenvolupar projectes conjunts, cal que ens ho notifiquin a través dels seus serveis d'informàtica.

## Noves tecnologies... en català

### Correu caragol?

El gran èxit del sistema de correu electrònic i de les seves possibilitats provoca en algunes persones cert menyspreu cap al correu tradicional. En anglès aquest fet ha donat lloc a l'aparició del mot argòtic *snail mail* o *S-mail*, expressió pejorativa que posa èmfasi en la lentitud del correu corrent respecte a la rapidesa i immediatesa del correu electrònic.

En català no cal recórrer a la traducció directe de l'anglès (*correu caragol*) sinó que en podem continuar dient **correu** o, si el context ho requereix, **correu ordinari** o **correu postal**.

### El símbol @

El símbol @, que fins fa molt poc designava només una unitat de pes pràcticament obsoleta, va ser recuperat als anys setanta com a separador en les adreces de correu electrònic. Això li ha atorgat un protagonisme creixent en la nostra societat i ha significat també la proliferació de diversos noms sorgits espontàniament en totes les llengües.

El Consell Supervisor del TERM-CAT ha normalitzat en català el terme **arrova** (i **rova**), d'acord amb l'ús més generalitzat i anàlogament al castellà (*arroba*) i al francès (*ar[r]obas*). Tot i que coincideix amb la denominació d'aquest símbol en l'àmbit mètric, no és necessari d'introduir altres alternatives noves o amb menys ús. Així, des d'un punt de vista terminològic no són adequades designacions del tipus *ad* o *can*, sintagmes descriptius del tipus a *encerclada* o bé noms populars com ara *ensaimada*, més propis d'un registre informal.

<http://www.termcat.es>



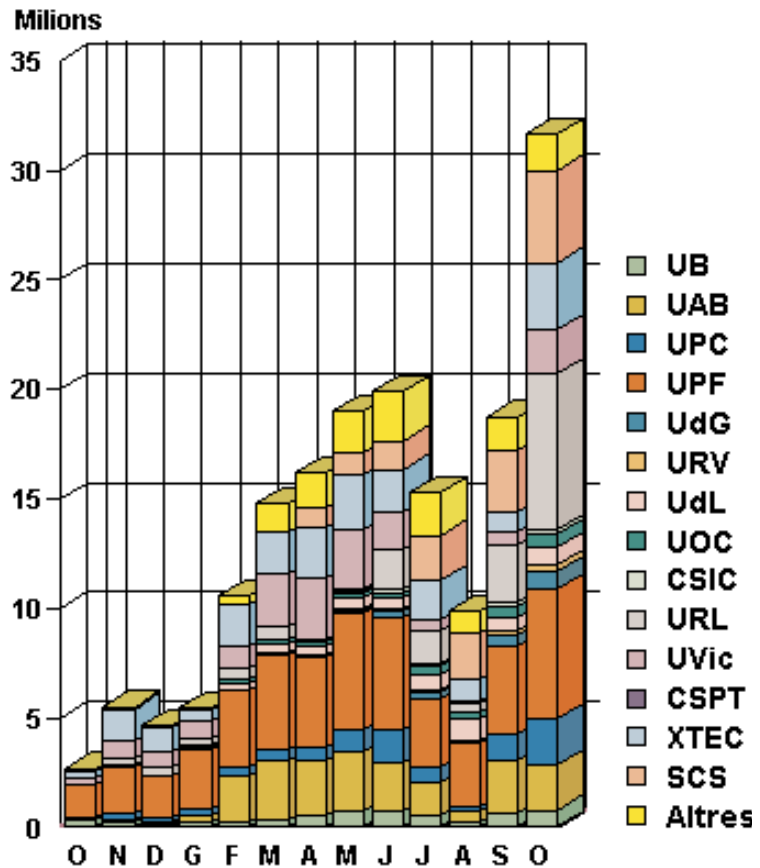


# Les peticions del proxy superen els 30 milions

L'èxit del servei de *proxy-cache* és evident un any després d'entrar en funcionament ja que l'octubre d'enguany s'han superat els 30 milions de peticions. Tots els usuaris que tenen el seu navegador configurat per usar aquest servei han vist satisfetes les seves sol·licituds d'accés en un temps raonable perquè, d'una banda, la informació sol·licitada pot estar disponible ja localment i, de l'altra, en el cas contrari, l'anirà a buscar per un dels tres camins disponibles, el qual proporcionarà el temps de resposta menor. Per això, l'ús d'aquest servei és imprescindible per a tots els internautes que busquen qualitat de servei.

Aquest èxit va forçar a augmentar a mitjan de juliol la línia directa als EUA dels 512 Kbps inicials a 1 Mbps, gràcies al patrocini del Comissionat per a Universitats i Recerca.

**Per configurar-vos el proxy-cache:**  
<http://www.cesca.es/proxy.html>



**Evluació de les peticions del servei de proxy-cache**

La gràfica mostra l'evolució creixent de peticions fetes per cada institució des de l'inici d'aquest servei. Com es pot observar, l'ús és molt irregular entre elles, i encara fa falta difondre'n els beneficis entre la comunitat universitària.

# Servidor amb accés directe als EUA



Amb el patrocini del Comissionat per a la Societat de la Informació, el CESCA ha adquirit un nou servidor, connectat directament a la línia internacional de Rete-net. Aquest servidor, un Sun Ultra 10 amb 512 MB de memòria principal i 18 GB en disc, proporciona un accés directe a l'exterior, independent de RedIRIS, un servei d'hostalatge de webs institucionals i de congressos, i codis per als grups de recerca que necessitin un accés directe als EUA.

A més, el dia 17 de setembre es va ampliar la capacitat d'emmagatzemament dels serveis de FTP anònim i de *proxy-cache* en 14,5 i 8,5 MB, respectivament. D'aquesta manera, el FTP anònim passa a disposar de 40 MB d'espai en disc, i el servei de *proxy-cache* de 28 MB. Això permetrà mantenir un nombre més elevat de fitxers, imatges i pàgines web, i facilitarà l'accés dels usuaris a un percentatge d'informació més elevat.

Aquestes accions estaven incloses en el projecte de potenciació de la connectivitat a Internet de l'Anella Cientí-

ca, dins el conveni "La Universitat Digital a Catalunya", signat el passat 8 de setembre pel Comissionat per a la Societat de la Informació, el Comissionat per a Universitats i Recerca, la Fundació Catalana per a la Recerca, les universitats públiques catalanes, el CBUC i el CESCA (vegeu TERAFL0P 44).

**Per sol·licitar-ne un codi, vegeu:**  
<http://www.cesca.es/comunicacions/addicionals.html>

# SGI, dels gràfics a la su



JORDI PARETO



A dalt: L'Origin del CEPBA, amb 64 MIPS R10000 processadors

A la dreta: Primer Power Challenge instal·lat al Servei d'Informàtica de la Universitat Jaume I de Castelló



**Quan l'any 1981 Jim Clark va fundar Silicon Graphics, Inc a Mountain View, California, ho va fer pensant en la fabricació d'unes estacions de treball amb gràfics dedicats molt potents que eren demandades per un ampli ventall de mercats: automoció, aviació, animació per ordinador, etc.**

**Amb l'aportació dels processadors adequats, els servidors clàssics de fitxers esdevenen l'any 1994 potents servidors de càlculs: és el naixement de la família Power Challenge.**

Amb el perfeccionament del primer disseny per atendre les necessitats dels usuaris, Silicon Graphics Inc es va adonar que a nivell informàtic els gràfics avançats porten associats gran quantitat de dades i, consegüentment, els fitxers esdevenen molt més grans que els fitxers de text contemporanis.

L'empresa va haver d'esmerçar fortes inversions en camps col·laterals dels purament gràfics per poder "bellugar" aquests grans fitxers: afegir temps real al sistema operatiu, dissenyar un sistema de fitxers nou que permetés el tractament de fitxers extraor-

dinàriament grans, emprar sistemes multiprocessadors, etc.

Una vegada creada l'arquitectura adient per a aquests propòsits SGI va veure que amb un esforç addicional, dissenyant un microprocessador potent en operacions de càlcul podria arribar a competir amb èxit a la gamma baixa dels grans computadors de càlcul. La compra de l'empresa MIPS va servir per a aquest objectiu.

Amb l'aportació de processadors adequats, els servidors clàssics de fitxers esdevenen l'any 1994 potents servidors de càlcul: és el naixement de la família Power Challenge.

La família Power Challenge es basava en una arquitectura de multiprocessadors simètrica recolzada en un bus de gran velocitat.

Els processadors emprats en principi eren els MIPS R8000 a 75 MHz capaços d'executar fins 4 instruccions de coma flotant per cicle. A més, ha-

# percomputació

vien estat dissenyats per executar seqüències d'instruccions *multiply-add* amb gran eficiència.

Hi havia versions des de 2 fins a 36 processadors.

Amb l'aparició d'aquest producte, Silicon Graphics es va situar, de sobte, al punt de mira de moltes decisions de compra de servidors de càlcul de gamma petita i mitjana.

Al MIPS R8000 a 75 MHz el va seguir el MIPS R8000 a 90 MHz l'any 1995 i el MIPS R10000 a 195 MHz l'any 1996.

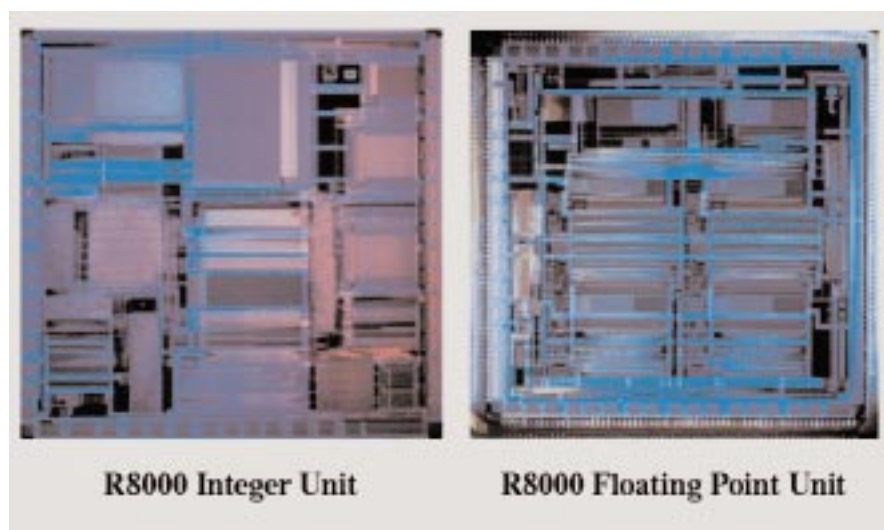
A nivell de l'Estat espanyol la família va gaudir d'una gran acceptació dins de l'àmbit universitari i de recerca. Les instal·lacions primeres es van fer al Servei d'Informàtica de la Universitat Jaume I de Castelló, al Dept. d'Estructures i Constituents de la Matèria de la Universitat de Barcelona, al CEPBA, al Centro Nacional de Biotecnologia a Madrid, al Centro de Servicios Informáticos de la Universidad de Granada i als Servicios Informáticos de la Universidad de Alcalá.

La instal·lació més gran estava a la Universitat Jaume I de Castelló, amb 24 processadors MIPS R10000 en dos Power Challenge XL.

Avui dia encara hi ha un nombre considerable de servidors Power Challenge en producció: a la Universitat Jaume I amb un Power Challenge XL, 16 processadors MIPS R10000 i 3 GB de memòria, a SEAT amb dos Power Challenge XL i un total de 24 processadors MIPS R10000, a SENER amb 8 processadors MIPS R10000, a la Universidad de Granada amb 12 processadors MIPS R10000, etc., fins a 19 sistemes.

**Els processadors  
emprats en principi  
eren els MIPS R8000  
a 75 MHz.**

**Avui en dia s'ha  
evolucionat fins arribar  
als MIPS R12000  
a 400 MHz.**



Els dos xips de l'R8000

## PROGRAMES DE MOBILITAT

David Cooper, de la **University of Liverpool** (Regne Unit), va venir convidat per Ramón Carbó, de la Universitat de Girona, per treballar en el projecte *Studies on Momentum Space Similarity*. Cooper va estar a Catalunya del 21 de juny al 19 de juliol d'enguany.

Dimitrios Nokolopoulos, de la **University of Patras** (Grècia), ha treballat en el projecte *Hardware Software Mechanisms for Memory Managements* de l'1 de juliol a l'1 d'octubre. Nokolopoulos ha vingut convidat per Eduard Ayguadé, de la UPC.

Nicolas Foloppe, del **Karolinska Institutet** (França) va venir convidat per Leonardo Pardo, de la UAB, per participar en el projecte *Analysis of Structural and Energetic Factors of Minor Groove-intercalating DNA-Bending Proteins*. Foloppe va estar entre nosaltres de l'1 al 31 de juliol d'enguany.

Stefano Giorgini, de la **Università di Trento** (Itàlia), ha treballat en el projecte *Disorder in Homogenous Bose-condensed Gases: a Diffusion Monte Carlo Approach* de l'1 al 30 de setembre. Giorgini ha vingut convidat per Joaquim Casulleras, de la UPC.

Nils Jönsson, de la **Kungl Tekniska Hogskolan** (Suècia), va venir convidat per Jesús Labarta, de la UPC, per treballar en el projecte *Parallelising a Non-linear Fem Program*. Jönsson ha estat a Barcelona del 30 de setembre al 30 de novembre d'enguany.



# L'emmagatzematge de dades, en marxa



JORDI PARETO

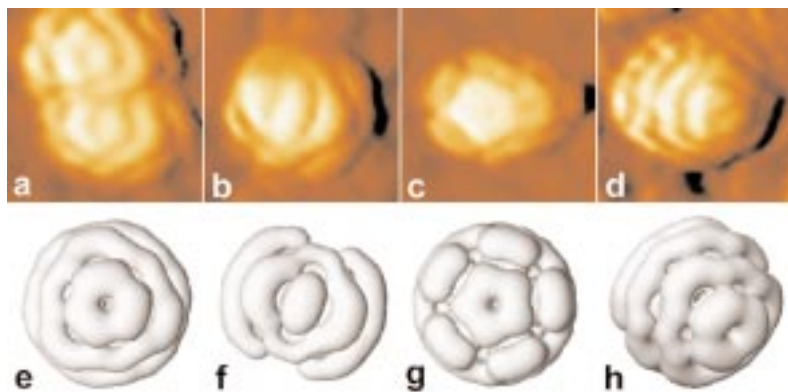
El president del CESCA, Rafael Español, posa en funcionament el nou StorageTek.

El passat 12 de novembre el president del CESCA, Rafael Español, va inaugurar el nou servei d'emmagatzematge de dades per a còpies de seguretat i arxiu, acompanyat pel Comissionat d'Universitats i Recerca i altres autoritats.

Durant l'acte es va fer una demostració del funcionament d'aquests nous serveis (vegeu també la pàgina 9), i es va comentar l'estat actual de la nova màquina N4000, encara en fase de proves, i de l'actualització tecnològica del V2250, que ha passat a ser el V2500.

## F O T O / N O T Í C I A

*El concepte d'orbital molecular és fonamental en la comprensió de l'enllaç químic. Malgrat això, la seva observació experimental directa ha estat fins ara pràcticament impossible. Científics de la Universidad Autónoma de Madrid (I. Pascual, J. Gómez i A. Baro) han aconseguit observar experimentalment els orbitals moleculars del C<sub>60</sub>. L'experiment utilitza un microscopi d'efecte túnel per explorar els estats electrònics de molècules de C<sub>60</sub> depositades sobre una superfície de silici. Càlculs de primers principis realitzats per D. Sánchez-Portal, E. Artacho i J. Soler (Universidad Autónoma de Madrid) y P. Ordejón (Institut de Ciència de Materials de Barcelona, CSIC), demostren que els estats observats corresponen efectivament als orbitals moleculars del C<sub>60</sub>, com es pot veure a la figura, que mostra les imatges experimentals (a la part superior) i els resultats dels càlculs (a la part inferior), realitzats amb el programa SIESTA*



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

REDACCIÓ

Teresa Via

COL-LABORACIÓ

Gemma Mas (TERMCAT)

Narcís Fornés (SGI)

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](mailto:teraflop@cesca.es)

DIPOÏT LEGAL: B-33512-94

ISSN: 1134-6671

Bon Nadal  
i Felç any  
2000

