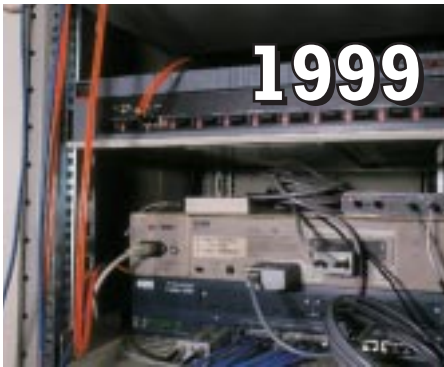


TERAFLOP

CESCA

REVISTA DEL CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA

Núm. 48 • Març 2000



1999



Memòria d'activitats





**El Consell de Govern del CESCA,
reunit el 22 de març de 1999.**

Consell de Govern

President

Rafael Español i Navarro

Vicepresident

Andreu Mas-Colell

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 4 d'abril el president de la Generalitat de Catalunya va nomenar al Dr. Andreu Mas-Colell nou comissionat per a Universitats i Recerca, esdevenint automàticament el vicepresident del nostre Consell de Govern. En la seva reunió de 22 de març, la primera sota la presidència del Sr. Rafael Español, es va aprovar la liquidació del pressupost del 1998, el pressupost per al 1999 i el Pla estratègic 1999-2001. També es va acordar ampliar el nombre de vocals de la Comissió Permanent de tres a quatre de manera que dues vocalies es compartien entre les universitats UB, UAB i UPC, renovant un vocal cada any, i les altres dues, entre les altres cinc universitats, renovant ambdós.



Presentació

Com ja és habitual, un any més usem aquesta edició especial del TERAFLUP per presentar-vos les tasques desenvolupades pel CESCA, les millores introduïdes i els beneficis obtinguts per la comunitat universitària.

D'acord amb els seus objectius originaris, la Fundació Catalana per a la Recerca ha continuat impulsant el desenvolupament d'infraestructures de recerca al servei de la comunitat científica i tecnològica de Catalunya. D'una banda, la demanda creixent de càlcul d'altres prestacions ens ha estimulat a augmentar la potència disponible, encara que a hores d'ara ja estigui de nou saturada, complementada per un nou servei d'emmagatzematge de dades que serà ben útil per a tots els grups de recerca que en manipulen una gran quantitat.



D'altra banda, per facilitar l'accés a aquestes màquines i per promoure la Societat de la Informació, també hem incorporat tres noves institucions a l'Anella Científica i hem preparat l'ampliació de la velocitat d'accés de les universitats de Girona, Tarragona i Lleida, entre d'altres millores. Per connectar-se amb l'exterior més ràpidament, hem posat en marxa nous serveis, com per exemple el CATNIX, el Punt Neutre d'Internet a Catalunya, i s'ha habilitat l'Anella per permetre que els investigadors puguin treballar des de casa, amb qualitat de servei.

Tots som conscients que la competitivitat d'un país depèn en gran part de la seva capacitat d'innovació. Al llarg d'aquesta última dècada la Fundació ha apostat fortament per impulsar aquest camí, apropant la ciència a la societat civil i creant centres o grans infraestructures de recerca. Ara volem fer un pas més endavant, una aposta decidida per

l'aplicació de la recerca al món de l'empresa. Per això, hem constituït el Senat de la FCR, un organisme per promoure la innovació i l'R+D en el teixit empresarial català.

Aquest òrgan consultiu detectarà i quantificarà les necessitats del teixit empresarial així com actuarà com a *lobby* empresarial proposant actuacions conjuntes entre les empreses catalanes. A més, la realització de trobades empresarials per intercanviar informació i experiències, l'establiment de grups d'interès especialitzats, el suport logístic, l'establiment d'una xarxa telemàtica de departaments d'R+D empresarial per tal de tenir una comunicació fluida i eficient, són algunes de les activitats que els membres del Senat portaran a terme i que confiem que ajudin a apropar la comunitat universitària i l'empresarial.

Rafael Español i Navarro

President de la FCR
i del CESCA



L'any 1999 ha suposat per al Consorci Centre de Supercomputació de Catalunya la posada en marxa de cinc nous serveis, el d'Accés Remot a l'Anella Científica, el Punt Neutre d'Internet a Catalunya, el d'Accés Directe als servidors dels EUA, el d'Emmagatzematge de Dades i el de 24x7, a més de la continuïtat dels anteriors (CAP, SCF, ENTS, SxAC, SAHS, AS, TAC, JOCS...) a plena satisfacció de la comunitat universitària, tots ells centrats en els ja tradicionals tres eixos d'actuació: supercomputació, comunicacions i promoció científicotècnica.

Per ordre cronològic, el primer servei a posar-se en marxa, al febrer, va ser el d'Accés Remot a l'Anella Científica per proporcionar accés a Internet als estudiants i facilitar el teletreball als investigadors. El segon, el Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX), operatiu des del juny, afavoreix l'intercanvi de tràfic d'Internet entre diferents proveïdors presents en una mateixa àrea geogràfica.

Els serveis d'Accés Directe i d'Emmagatzematge de Dades es van inaugurar al novembre. El primer proveeix un accés més ràpid als servidors d'Internet dels EUA per als investigadors catalans i el segon permet guardar còpies de seguretat i arxivar aquella informació rellevant de la seva recerca. L'últim que va entrar en funcionament, el Servei de 24x7, al desembre, augmenta la disponibilitat i fiabilitat dels nostres serveis en permetre que personal extern els restableixi en cas de fallida fora de l'horari laboral del CESC.

Enguany, per primer cop, s'ha usat l'estructura jurídica del CESC

com a consorci de totes les universitats públiques per negociar un acord amb Microsoft que afavoreix la modernització i l'optimització de recursos per a totes les universitats catalanes en l'ús de les tecnologies de la informació i les comunicacions. Aquest acord ofereix unes condicions globals més avantatjoses i l'ús de tres diccionaris (català, castellà i anglès) en comptes d'un de sol previst a la llicència estàndard.

La demanda creixent dels serveis de supercomputació ha estat satisfeta amb l'adquisició d'una nova màquina, l'HP N4000, i amb l'actualització tecnològica de l'HP V2250 a un V2500, la qual cosa ha augmentat la potència total un 65% addicional (de 42,77 a 69,65 Gflop/s). També s'han instal·lat cinc noves aplicacions, augmentant el nombre d'aquestes a 28, la majoria d'elles (20) en l'àrea de química. En total s'han usat 393.188 hores computacionals (HC) en el CESC, un 39% més que l'any anterior.

El maquinari del Centre Europeu de Paral·lelisme de Barcelona (CEPBA) ha continuat accessible als nostres usuaris gràcies al Centre de Computació i Comunicacions de Catalunya (C⁴). La potència combinada d'ambdós centres és de 120,91 Gflop/s i han proporcionat 840.830 HC a la comunitat científicotècnica catalana. Enguany el CEPBA, dins de la seva nova línia de serveis, ha assumit la comptabilitat del seu propi maquinari.

Tres noves institucions s'han connectat a l'Anella Científica, l'Institut Botànic de Barcelona, la Biblioteca de l'Abadia de Montserrat i la UAB-Casa de Convalescència, elevant a 53 el nombre d'institucions de recerca a les quals es proporciona accés a Internet i

altres serveis addicionals. El tràfic a l'Anella s'ha duplicat respecte a l'any anterior superant els 24 TB.

Els dos serveis addicionals de l'Anella Científica posats en marxa l'any 1998, *proxy-cache* i *ftp mirror*, s'han consolidat amb èxit d'ús. El primer va superar els 40 milions de peticions tant al novembre com al desembre, mentre que el segon va transferir més de 16.000 fitxers al març. El de *news*, operatiu des del 1997, ha triplicat el nombre d'articles llegits. L'Accés Remot ha complert les expectatives inicials proporcionant servei a 20.016 usuaris.

La comunitat científica catalana ha continuat éssent importadora de tràfic a través de RedIRIS, amb una ràtio 1:2,4, però és exportadora per a les entitats connectades al CATNIX, amb una ràtio 1,9:1. A finals d'any hi havia nou entitats intercanviant informació a través del CATNIX, on l'Anella ha proporcionat el 47% del tràfic i n'ha rebut el 25%.

El programa *Training and Mobility of Researchers* (TMR) d'accés a Grans Instal·lacions Europees, finançat per la Comissió Europea i enguany coordinat pel CEPBA, ha permès que 46 investigadors hagin vingut a usar les màquines del CESC-CEPBA, convidats per 24 grups de recerca diferents. A més, s'ha signat l'extensió d'aquest programa per tres anys més i un finançament de 721.740 € (120 MPTA).

I finalment dues aules de supercomputació, dues jornades, quatre seminaris, 34 conferències, la publicació de la revista TERAFLOP i la participació en altres mitjans de comunicació han estat la *finestra* cap a l'exterior que hem usat per oferir i mostrar tot allò que hem fet durant aquest any 1999.



Els membres del CESC han treballat en equip per ampliar els serveis del Centre.

	1996	1997	1998	1999
Supercomputació				
CESCA-CEPBA				
Rendiment punta (Gflop/s)	23,92	44,96	87,83	120,91
Hores computacionals	270.183	443.864	605.117	840.830
Nombre d'usuaris	363	579	592	830
Nombre de projectes	179	112	121	159
Visites programes de mobilitat	54	35	39	50
CESCA				
Rendiment punta (Gflop/s)	13,04	19,88	42,77	69,65
Hores computacionals	145.043	199.347	282.584	393.188
Treballs en espera < 1 hora	65%	66%	49%	53%
Treballs en espera > 24 hores	14%	10%	19%	19%
Consultes	809	872	1.072	607
Comunicacions				
Tràfic Anella Científica (TB)	4,15	6,88	>8,86	24,01
Tràfic enviat a RedIRIS (TB)	n/d	1,77	4,26	>9,50
Tràfic rebut de RedIRIS (TB)	n/d	4,56	11,45	>23,10
Articles llegits (x10 ⁶)		0,07	2,91	9,49
Peticions al proxy-cache (x10 ⁶)			12,84	248,62
Peticions al ftp mirror (x10 ³)			3,00	41,65
Servidors allotjats + hostatjats	2+3	3+4	3+8	5+12
Pàgines llegides a la web		115,06	128,81	197,86
Consultes		288	673	776
Promoció				
Cursos Aula Supercomp. (*)	11 (283)	4 (47)	11 (179)	4 (61)
Conferències	29	33	40	34
Jornades i seminaris (*)	1 (258)	3 (168)	6 (487)	6 (224)
Visites al Centre (visitants)	9 (>157)	15 (253)	10 (168)	9 (162)
TERAFLOP	8	8	9	9

*(assistents)

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

Francesc Pedró i García

Carles Abellà i Ametller

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

Carles Abellà i Ametller

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

Modesto Orozco i López

Secretari

Miquel Huguet i Vilella

Comissió Permanent



Enguany els vocals han estat Enric Isidre Canela i Campos, vicerector d'Economia i Organització de la Universitat de Barcelona; Montserrat Llinés i Soler, vicerectora de Tecnologies de la Informació i la Comunicació de la Universitat Autònoma de Barcelona; Francesc Pedró i García, delegat del Rector de la Universitat Pompeu Fabra per a la Innovació Docent; Miquel Duran i Portas, vicerector de Personal Acadèmic de la Universitat de Girona, que va ser substituït l'11 de juny per Carles Abellà i Ametller, vicerector de Recerca i Relacions Institucionals. Aquesta comissió s'ha reunit en quatre ocasions: 5 de març, 13 de maig, 23 de juliol i 22 d'octubre.

El CESCA posa a disposició dels seus usuaris un **programari** de supercomputació molt especialitzat que respon a llurs necessitats de càlcul. Es poden distingir dues grans categories: programari de base i aplicacions.

El programari de base és homogeni per a totes les màquines i el constitueixen els diferents compiladors (FORTRAN, C, C++...), les llibreries de càlcul numèric (ESSL, NAG, LAPACK, BLAS...), les llibreries de paral·lelització (MPI, PVM...) i els gestors de cues de *batch* (LoadLeveler i LSF). El 1999 es va adquirir el gestor de cues de *batch* Load Share Facility (LSF) i el programa d'anàlisi de rendiment HP Gance Plus/UX per als servidors HP V2500 i HP N4000. També es va actualitzar el sistema operatiu d'aquests dos servidors, l'HP-UX 11.0, amb les correccions del maig de 1999. Pel que fa a l'IBM SP2, es varen renovar les llibreries de càlcul numèric NAG a la versió Mark 18. A més, va quedar instal·lada la nova versió del compilador de GNU, GCC, les eines de desenvolupament d'aplicacions en llenguatge Java, JDK i el sistema de compilació HPF Adaptor, així com diverses utilitats (pgplot, gmake).

Pel que fa a la segona categoria, el CESCA disposa actualment de 28 aplicacions, cinc més que el 1998. Per posar en servei el nou sistema d'emmagatzematge massiu de dades, es va adquirir el programa VERITAS NetBackup encarregat de la gestió, administració i control del maquinari d'emmagatzematge. També es va adquirir el programa de modelatge molecular AMBER 5.0, les llibreries de visualització OpenGL i el programa Objectivity/DB per a l'IBM SP2 i es va instal·lar el programa de càlcul quàntic Gamesol. AMBER és el nom col·lectiu d'un conjunt de programes de modelatge molecular (*molecular mechanics/molecular dynamics*) per a la simulació biomolecular que utilitza el camp de forces AMBER. OpenGL és una llibreria gràfica que pot ser utilitzada per generar aplicacions gràfiques tridimensionals. Objectivity/DB és un sistema de bases de dades distribuïdes orientades a objectes per a altes prestacions. Finalment, Gamesol és un paquet de càlcul de química quàntica basat en el programa GAMESS al qual afegeix no-



D'esquerra a dreta, l'V2500, l'N4000 i l'StorageTek.

ves funcionalitats que permeten realitzar càlculs de solvatació.

A més, es van renovar les versions disponibles de les següents aplicacions: Gaussian98, ADF, Cerius2, NCAR, Catalyst i els mòduls d'Oracle, Oracle Server, Oracle Developer Server i Oracle Application Server.

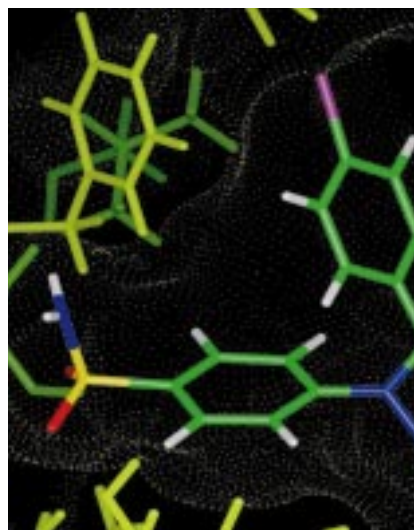
Durant l'any 1999 el CESCA ha augmentat un 63% la potència de càlcul de **maquinari** que disposava l'any anterior, gràcies al continuat suport de la Fundació Catalana per a la Recerca. El rendiment punta agregable ha passat de 42,77 a 69,65 Gflop/s. Aquesta millora s'ha produït gràcies a dos fets. D'una banda, el 2 de novembre l'Exemplar V2250 de Hewlett-Packard, ano-

menat Puigcerver, va ésser actualitzat a un V2500 amb la substitució dels 16 processadors PA8200 a 240 MHz per 16 processadors PA8500 a 440 MHz. Els nous processadors estan fabricats amb una tecnologia CMOS de 0,25 μm , amb 5 nivells d'interconnexió i alimentació de 2 V. La grandària del xip és de 21,3 mm x 22 mm i conté 140 milions de transistors.

El rendiment punta (R_{punta}) ha passat de 15,36 a 28,16 Gflop/s, un 83% d'augment, i el rendiment màxim per a resoldre un sistema d'equacions lineal (R_{max}), de 10,65 a 17,47, un 64%. El PA8500 té la meitat de memòria *cache* per a dades (1 MB) que el seu antecessor però aquesta és interna al xip i amb una organització associativa de quatre vies que en conjunt proporciona un millor rendiment.

De l'altra, el CESCA ha augmentat la seva potència de càlcul amb l'arribada, el 21 de setembre, d'un nou servidor de càlcul, l'N4000, també de memòria compartida i de Hewlett Packard, amb 8 processadors superescalars PA8500 de 1,76 Gflop/s cadascun i amb 4 GB de memòria principal. L'N4000 té un R_{punta} de 14,08 Gflop/s i un R_{max} de 10,22.

Els processadors estan connectats mitjançant dos busos amb una velocitat agregable total de 3,8 GB/s. Aquesta interconnexió proporciona una latència a memòria molt més ràpida que l'V2500 (130 ns versus 550 ns). L'N4000 disposa de dos controladors



Estudi d'una dinàmica enzim-complex realitzat amb el programa AMBER.

de fibra òptica *fiber channel* I/F PCI FC-AL (*Full-Speed Arbitrated Loop*), 12 discos de 18,2 GB que, conjuntament amb els dos discos SCSI interns de 9 GB, fa un total de 227 GB. La velocitat de transferència de dades d'aquest nou sistema d'E/S és de 100 MB/s i la rotació dels discos de 10.000 rpm. En comparació, aquestes dades per als discos Ultra SCSI de l'V2500 són de 40 i 7.000, respectivament.

A diferència dels anys anteriors, l'IBM SP2 no s'ha renovat tecnològicament. Des de la seva arribada l'any 1995 amb 10 processadors *thin* i 2 *wide*, que proporcionaven un R_{punta} de 3,17 Gflop/s, s'havia passat a 44 processadors l'any 1996 que s'havien actualitzat amb les successives versions tecnològiques (*thin2*, *thin120* i *thin160*) augmentant l' R_{punta} fins a 27,41 Gflop/s al juny de 1998. Aquestes actualitzacions van permetre que l'SP2 estigués present a quasi totes les edicions de la llista TOP500 fins a l'any 1998, amb excepció del novembre del 1995, a les posicions 377, 169, 210, 382, 241, 356 i 439.

Encara que des del 1993 (on ambdues màquines del CESCO, el Cray Y-MP i l'IBM 3090, hi eren presents) la potència màxima agregable s'hagi multiplicat per un factor de 47, la primera i l'última màquina de la llista ho han fet per 40 i 79, respectivament. En total, el CESCO ha estat present en nou de les 14 llistes publicades.

L'any 1999 també s'ha posat en servei un sistema d'emmagatzematge massiu de dades, gràcies a un ajut de la CIRIT, mitjançant el qual els usuaris poden arxivar aquella informació rellevant de la seva recerca i s'ha automatitzat el procés de guardar còpies de seguretat. Per a aquest nou servei, inaugurat el 12 de novembre, s'ha adquirit una llibreria automatitzada StorageTek TimberWolf 9740 amb un dispositiu de transport 9840 i el programari VERITAS Netbackup per fer còpies de seguretat i d'arxiu. La llibreria 9740 pot contenir fins a 252 ranures amb una capacitat de 5 TB sense compressió i és ampliable fins a 57 TB. La ràtio d'intercanvi és de fins a 350 cartutxos per hora.

El transport 9840 proporciona una alta velocitat de transferència de 10 MB/s i està especialment orientat a

entorns d'altres prestacions tant de còpies de seguretat com d'aplicacions científiques. Una de les seves particularitats és que carrega la cinta en el seu punt mig de manera que, en mitjana, el temps de recerca és de 8 segons. La cinta 9840 té una capacitat nativa de 20 GB amb un factor de compressió LZ1 (3:1).

Per facilitar la visualització d'algunes de les plaques i components del nostre maquinari del museu, s'han instal·lat en una vitrina. Així ara es poden comparar tres de les vuit plaques que constitueixen el processador del Convex C1 (tecnologia del 1984) amb quatre de les sis de les del Convex C2 (del 1987); algunes de les del Cray X-MP i Y-MP (del 1985 i 1998, respectivament); l'únic component que ens resta de l'IBM 3090 i un calaix *thin* del primer IBM SP2 adquirit l'any 1995.



Algunes de les peces històriques s'exhibeixen ara al nostre Museu de la Supercomputació.



El 6 de juliol el CESCO i Microsoft van signar l'acord per oferir avantatges a les universitats catalanes en l'adquisició de programari.

Amb independència del programari adquirit per al nostre maquinari, el CESCO va signar el 6 de juliol un acord amb Microsoft per posar en marxa el programa *Licència Campus* per a totes les universitats del Consorci i per a les dues privades (URL i UVic) connectades a l'Anella Científica. Aquest programa afavoreix la modernització i l'actualització del programari original de Microsoft, disponible a tot el maquinari propietat de la Universitat, mitjançant un pla de lloguer anual renovable a un preu fix, amb uns costos globals més avantatjosos

i adaptats a les característiques pròpies del nostre país. Inclou la disponibilitat de tres diccionaris (català, castellà i anglès) per als productes d'*Office-Pro* (Word, Excel, Access, PowerPoint, Outlook i FrontPage) mentre que la *Licència Campus* en contempla només un. D'entrada, aquestes condicions només es poden aplicar a maquinari propietat de les mencionades institucions, però l'acord estableix que es buscarà el mecanisme per estendre'l als usuaris de l'Accés Remot, és a dir, als teletreballadors, tant professors i PAS com estudiants.



El Departament d'Assistència Tècnica ha continuat administrant el maquinari i programari de supercomputació,

elaborant la documentació *on-line* sobre els recursos disponibles i la millor manera d'usar-los, i assessorant els usuaris en els problemes que apareixen en el dia a dia. A més, ha assumit la gestió del Servei de Cerca de Farmacòfors, fins ara a mans del Departament de Promoció; ha posat en marxa un nou servei, un sistema d'emmagatzematge massiu de dades (SED), pel qual els usuaris poden arxivar aquella informació rellevant de la seva recerca; i ha automatitzat el procés de guardar còpies de seguretat.

Les **hores computacionals** usades han estat 393.188, un 39% més sobre les 282.584 de 1998. El nombre de treballs executats ha augmentat un 44%, de 18.400 a 26.485. En mitjana, els treballs a l'SP2 han estat més llargs, de 13,0 a 14,3 hores, mentre que els de l'V2250/V2500 han seguit el procés invers, de 12,5 a 12,0.

El **temps de resposta** ha millorat cap a finals d'any, un cop s'ha actualitzat l'V2250 i l'N4000 ha entrat en funcionament. No obstant això, la mitjana del temps d'espera ha empitjorat tant a l'IBM SP2 (de 18,89 hores a 20,48) com a l'V2250/2500 (de 16,20 a 23,59). Només un 53% dels 26.485 treballs executats han hagut d'esperar menys d'una hora per iniciar-se i, en contrast, un 19% han hagut d'esperar-se més d'un dia.

El 49% de les 607 **consultes** s'han resolt immediatament. La reducció en el nombre de consultes realitzades (1.072 l'any anterior) s'interpreta



El 12 de novembre es va inaugurar el servei d'emmagatzematge de dades.

com una mostra de la consolidació dels nostres serveis. Les consultes més freqüents han estat sobre els codis (23%), les aplicacions (17%), els gestors de cues (15%), les xarxes (7%) i els sistemes operatius (7%).

Els 70 projectes que el CESCA ara administra i comptabilitza, corresponents a totes les institucions del Consorci excepte la UPC, han usat un total de 464.087 HC, de les quals 202.866 (un 43%) s'han executat en el maquinari del CEPBA. D'altra banda, els administrats pel CEPBA, els de la UPC i d'altres institucions de l'Estat, han usat 131.967 HC en el nostre maquinari, un 34% de les 393.188 utilitzades.

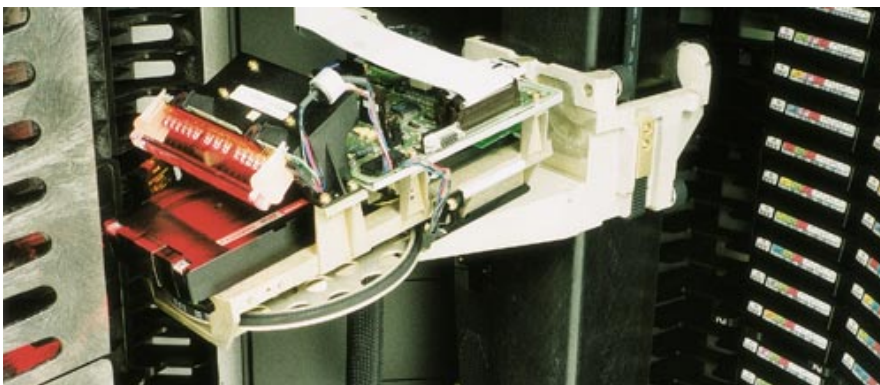
S'han realitzat diversos canvis per millorar l'**entorn de treball**: s'ha modificat l'algorisme d'accés a les cues *batch* per fer-lo equitatiu a nivell de projectes, en comptes d'usuaris; s'ha configurat els dos HP com a *trusted systems* per reforçar-ne la seguretat; i s'ha ampliat a 32 nodes la cua *parallel* de l'SP2.

També per optimitzar l'ús dels nostres recursos, evitant que quedin

desocupats, i per permetre que els projectes acadèmics que hagin esgotat les hores atorgades per a l'any en curs puguin continuar treballant durant l'últim trimestre sense perjudici dels que encara disposen d'hores concedides, s'ha habilitat una cua especial **free**, sense cost, per executar-hi treballs a baixa prioritat, preferiblement durant les hores que la màquina estigui més desocupada. Només els projectes que hagin esgotat la seva quota d'hores estan autoritzats a encuar-hi treballs durant l'últim trimestre. A més, s'ha autoritzat a tots els projectes acadèmics a sobrepassar les seves hores concedides en un 15%.

Un cop actualitzats el Gaussian i l'V2250 i instal·lat l'N4000, s'ha tornat a avaluar el rendiment d'ambdues màquines amb els **benchmarks** proporcionats pels nostres grans usuaris. El nou Gaussian98 millora el temps d'execució per quatre dels cinc *benchmarks*, des d'un *speedup* de 1,10 a 1,24 als nodes *thin160* de l'SP2; el cinquè, que realitza un càlcul de freqüències, experimenta una petita degradació d'un 5%. En mitjana, el canvi de versió ha permès una millora d'un 13% a l'SP2. La nova màquina, l'N4000, és en mitjana un 44% més ràpida que l'V2500 (evidentment quan ambdues executen només un únic treball) i un 93% més que el *thin160*. Els *benchmarks* també s'han usat per afinar la nova adquisició: d'un *speedup* mig d'un 3,14 proporcionat per la configuració inicial s'ha passat a un de 3,94, una millora d'un 25%.

El **Servei de Cerca de Farmacòfors** (SCF), patrocinat per la CIRIT, ha estat regularment accedit pels laboratoris Dr. Esteve i Menarini, i per tres



El braç del robot agafa el cartutx de la ranura corresponent i el col·loca a la unitat de transport per extreure o gravar-hi dades.

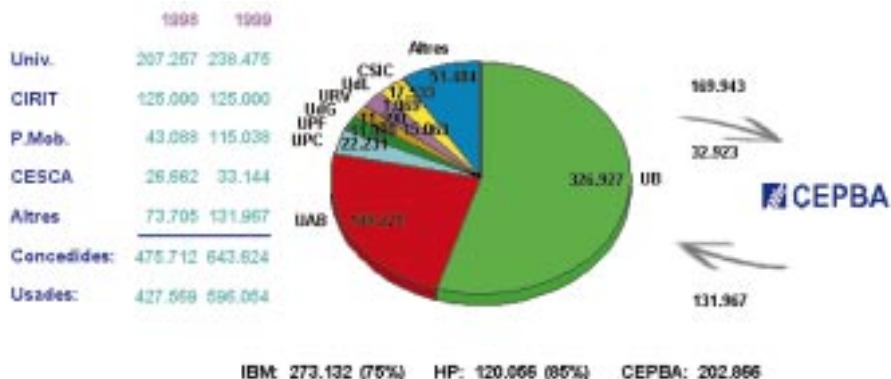
grups de recerca de la UB, la UPC i la UPF. El Prof. Juan Jesús Pérez, impulsor d'aquest servei i vicepresident del GUSCF ha dut a terme una investigació que ha conduït al descobriment d'una molècula que podrà ser usada com a fàrmac contra la psoriasi i pel qual ha estat guardonat amb el premi Laboratoris Salvat 1998.

El nou **Servei d'Emmagatzematge de Dades** (SED) ha automatitzat tot el procés de còpies de seguretat que des de la creació del Centre ha fet manualment el Departament de Comunicacions i Operacions. La política implementada serà l'equivalent, una còpia total un cop per quinzena i una incremental diària per a tot el maquinari, tant de supercomputació i de comunicacions com per als servidors allotjats i hostatjats que així s'hagi pactat. Aquestes còpies ocupen 24 cartutxos (480 GB) dels 252 que pot arribar a emmagatzemar el robot.

Aquest servei també permet que els nostres usuaris i les institucions connectades a l'Anella Científica puguin arxivar els fitxers que considerin oportú guardar en cinta, en una còpia simple (únicament emmagatzemada al robot) o doble (una al robot i l'altra a l'armari ignífug per a més seguretat). De cara al futur, s'està treballant per incorporar la funcionalitat de guardar automàticament arxius que no s'hagin usat des d'una data determinada de manera completament transparent a l'usuari.

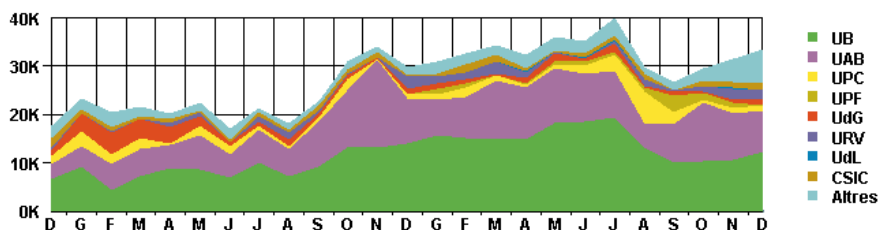
El Departament participa activament en alguns projectes: el **Meteo**, el servei de predicció del temps a Catalunya que, des de l'any 1994, es realitza diàriament amb la col·laboració de la Universitat de Barcelona, patrocinat pel Departament de Medi Ambient i la FCR, ara dos cops per dia; el **GAIA**, per preparar un dels cinc projectes de la missió *Comerstone 5*, planificada per ser llançada cap al 2009, amb l'objectiu bàsic de produir l'astrometria d'alta precisió per a tots els objectes del cel fins a una magnitud límit donada, uns mil milions; el **Sistema d'Informació d'LSI**, per avaluar les possibilitats que la Xarxa i Oracle ofereixen per a l'organització de les diferents activitats que formen part d'un departament universitari; i l'**MIM5**, per estudiar la meteorologia de la Mediterrània amb un nou model meteorològic basat en GPS.

Hores concedides i usades

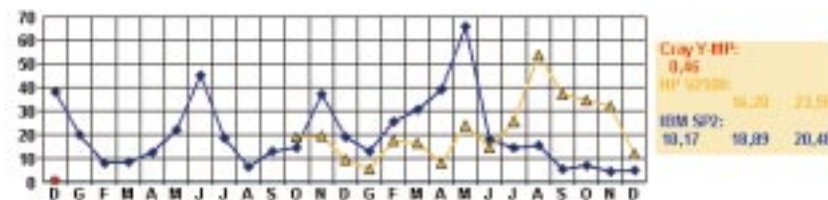


	UB	UAB	UPF	UdG	URV	UdL	CSIC	Altres	CEPBA	Total	1998
Projectes:	24	9	1	5	3	2	16	10	26	96	98
Usuaris:	75	45	5	16	14	4	34	16	131	340	392

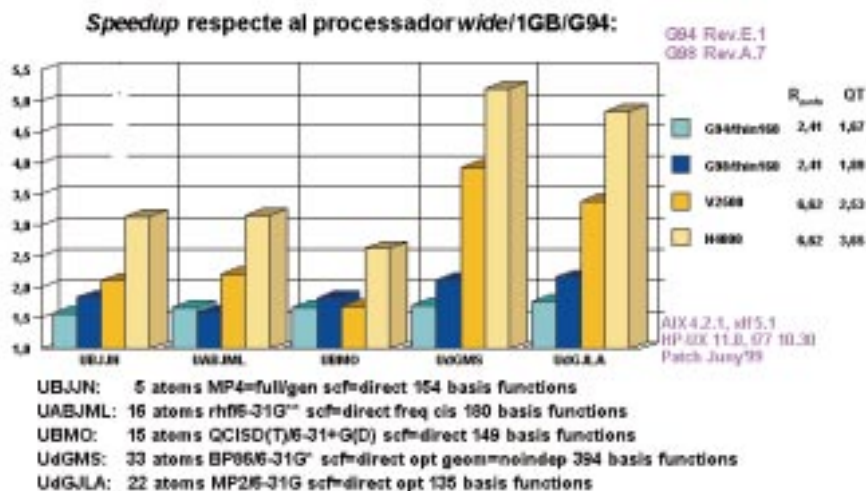
El consum mensual per institució



El temps mig d'espera



Els benchmarks de Gaussian



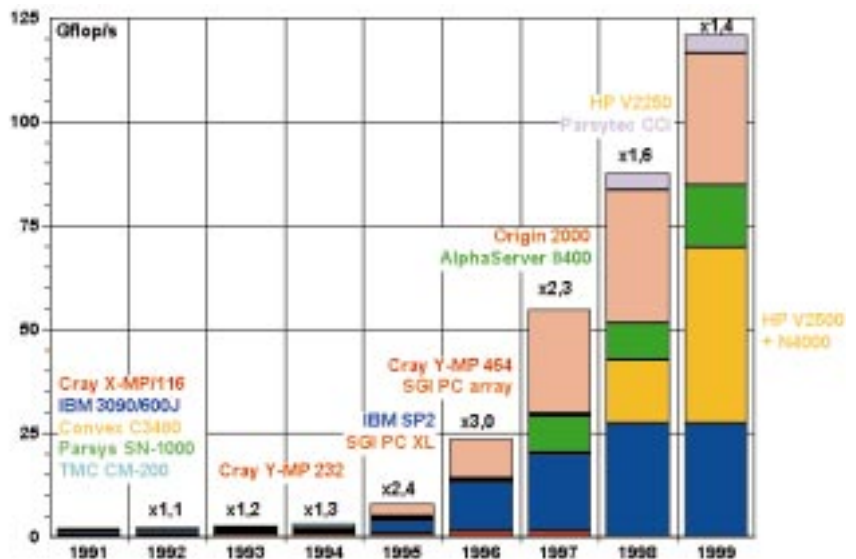
La compartició dels recursos entre el CESCA i el CEPBA, coordinats des del novembre del 1995 pel C⁴, ha continuat permetent obtenir el màxim rendiment en l'ús del respectiu maquinari i augmentar el rendiment punta disponible fins a 120,91 Gflop/s. A més de les màquines que s'han mencionat abans, els usuaris han tingut accés a: l'Origin 2000 de 64 processadors, 8 GB de memòria principal, 288 GB en disc i un R_{punta} de 32,00 Gflop/s; l'AlphaServer 8400 de 12 processadors, 2 GB de memòria principal, 60 GB en disc i un R_{punta} de 15,00 Gflop/s; i el Parsytec CCI de 16 processadors Pentium, 1 GB de memòria principal, 26 GB en disc i un R_{punta} de 4,26 Gflop/s.

Les hores computacionals (HC) usades han estat 840.830, un 53% al CEPBA i un 47% al CESCA, en total un 39% més sobre les 605.117 de 1998. Un grup reduït de projectes, com ja és habitual, es reparteix la major part del consum: els 10 primers projectes consumeixen el 56% de les hores i els 20 primers, el 77%. El nombre d'usuaris ha augmentat respecte a l'any anterior de 592 a 830 i el de projectes ha passat de 121 a 158.

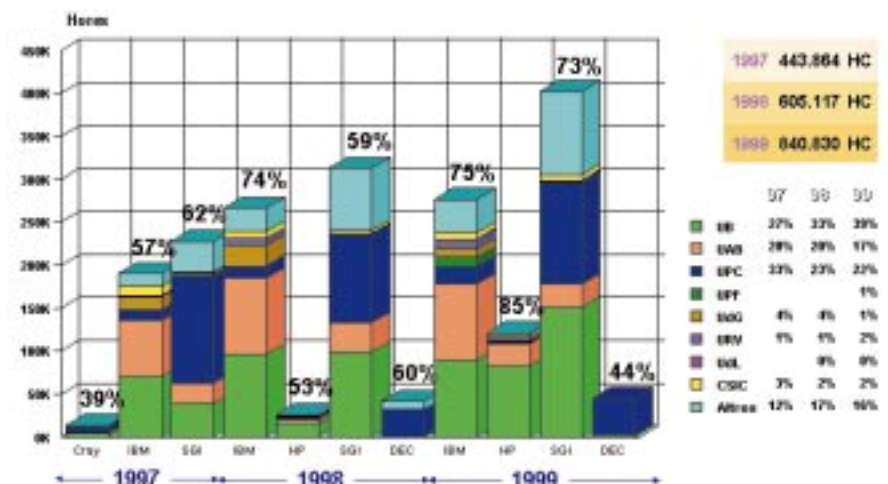
Per a l'edició especial del TERA-FLOP amb motiu de la JOCS'99, es va recopilar la descripció de 53 projectes realitzats al CESCA-CEPBA agrupats en sis àrees: astrofísica, meteorologia i clima (6), física (9), informàtica (4), mètodes numèrics en enginyeria (5), modelització molecular (10) i química teòrica (19). Per cada projecte, a més de proporcionar la mateixa informació que per a l'edició anterior (títol, cap, integrants, objectius, mètode computacional i publicacions rellevants), enguany s'hi va incorporar el nombre total d'hores usades per màquina.

Durant el període 1996-1999, s'han usat un total de 2,16 MHC, utilitzant cadascuna de les sis àrees citades un 5%, 9%, 13%, 5%, 16% i 52% de les HC, respectivament, i per institució un 36% la UB, un 23% la UPC i un 20% la UAB. Els 53 projectes descrits han usat el 94% dels recursos. A més, s'ha recopilat i/o revisat la descripció de 14 projectes dels 77 disponibles a la web, amb 105 noves publicacions generades.

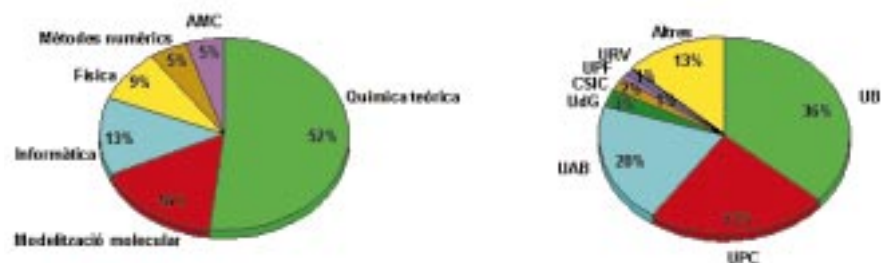
El maquinari disponible: una visió històrica



El consum per institució i màquina



El consum en els anys 1996-1999



Els grans usuaris:

- + M. Valero (UPC): Simulació d'arquitectures i benchmarks 10%
- + S. Álvarez (UB): Estructura electrònica de molècules i sòlids inorgànics 8%
- + F. Illas (UB): Models ab initio en catalisi heterogènia i ciència de materials 7%
- + J.J. Novoa (UB): Enginyeria de cristalls moleculars d'interès tecnològic 6%
- + J.M. Lluch (UAB): Reaccions de transferència protònica i d'hidrogen 6%
- + A. Oliva (UAB): Estructura i reactivitat de complexos metàl·lics. Aplicacions en ... 6%
- + M. Crozzo (UB): Reconeixement molecular 6%
- + A. Aguilar (UB): Dinàmica de reaccions químiques elementals 4%
- + A. Uedós (UAB): Modelització molecular de sistemes amb metalls de transició 4%
- + L. Pardo (UAB): Modelització i simulació de processos biològics 3%



Els representants de les institucions signants del conveni Internet2-CAT van fotografiar-se plegats a la Generalitat.

GB d'espai en disc i el de *proxy-cache*, de 28 GB, podent mantenir un nombre més elevat de planes web.

El nombre de germans del servidor de **proxy-cache** s'ha incrementat a 12, ubicats a vuit comunitats autònomes (Andalusia, País Valencià, País Basc, Galícia...) i el de fills, a 15. Els germans ens estalvien l'ús de les línies internacionals un cop les pàgines resideixen a un servidor de l'Estat, mentre que els fills permeten l'emmagatzematge i l'accés de les pàgines web de manera distribuïda entre les institucions de l'Anella. L'èxit d'aquest servei iniciat a l'octubre del 1998 ha quedat demostrat en superar els 40 milions de peticions tant al novembre com al desembre.

L'ús del servidor de **ftp mirròr** és

encara força irregular entre els internautes catalans, suposem que com a conseqüència de la dificultat de fer-los arribar els avantatges d'aquest servei. De totes maneres, per exemple al març es van transferir més de 16.000 fitxers que van estalviar 10,32 GB de tràfic per les línies internacionals.

S'han distribuït diverses conferències per **MBone** a les quatre institucions que tenen aquest servei configurat (UPC, UdG, UdL i URL), entre elles es pot mencionar *Abilene and the Internet? Infrastructure* pel Dr. Terence W. Rogers, director del projecte Abilene, organitzada pel DIT-UPM amb la col·laboració del CCABA-UPC i RedIRIS.

El nombre de peticions al servidor de **news** s'ha triplicat respecte a

l'any anterior, arribant quasi als 9,5 milions d'articles llegits. Els grups tècnics de *news* més usats són els que debaten diversos temes sobre el sistema operatiu Linux (configuració, maquinari disponible, xarxes...). Respecte a altres grups de discussió, al principi de maig l'OCYT va tallar l'accés a tots els de la categoria *alt.sex.** i similars.

A finals d'any, hi havia 20.016 usuaris donats d'alta al **Servei d'Accés Remot** provinents d'onze institucions, encara que la majoria eren de la UAB. L'objectiu inicial per universalitzar l'accés a Internet a la comunitat universitària s'ha complert i de cara al futur, la majoria d'universitats ja han arribat a acords individuals per facilitar l'accés als estudiants. Aquest servei continuarà obert per permetre als investigadors l'accés als recursos del CBUC o als nostres (d'ús exclusiu per a la comunitat científica catalana) i per al personal d'aquelles institucions de l'Anella que prefereixen no contractar-lo directament.

El **Servei d'Accés Directe** s'ha implementat a un Sun Ultra 10 amb 1 processador de 440 MHz, 512 MB de memòria principal i 18 GB en disc i s'ha connectat a la xarxa de Retenet. De moment, hi ha 11 usuaris d'alta, tots de la UAB.

RedIRIS al llarg de l'any ha fet diverses millores, tant pel que fa a les connexions externes com a les del seu



El Punt Neutre d'Internet a Catalunya

El 7 d'abril es va signar i presentar l'acord de creació del Punt Neutre d'Internet a Catalunya, CATNIX. A iniciativa del comissionat per a la Societat de la Informació i de la Fundació Catalana per a la Recerca (a la dreta) s'ha creat un lloc on conflueixen les xarxes de diverses entitats per tal d'intercanviar-se les sol·licituds dels usuaris i millorar el servei que se'ls dona. Les institucions fundadores són el CSI, la FCR, BT Telecomunicacions, Cable i Televisió de Catalunya, Catalana de Telecomunicacions SOX,



Centre de Supercomputació de Catalunya, Datagrama, Infase Comunicacions, Institut Català de Tecnologia, Internet Network Services, Retevisió i SAREnet.



En aquests armaris es troben el commutador del CATNIX i els encaminadors que s'hi connecten.

troncal. En les externes, s'ha augmentat el cabal de la línia als EUA fins a 38 Mbps, de la del TEN-155 a 34 Mbps, 12 d'ells reservats exclusivament pel tràfic del servidor de *proxy-cache*, i de la d'Ibernet, també a 34 Mbps. El troncal amb Catalunya s'ha incrementat fins a 24 Mbps de Madrid a Barcelona i a 11 Mbps viceversa.

El desenvolupament de la Societat de la Informació ha ocasionat que el servei d'Internet hagi d'estar disponible les 24 hores al dia, 7 dies a la setmana. Aquest no ha estat el cas durant l'any 1999 ja que s'han produït cinc incidències que han ocasionat la pèrdua de servei, total o parcial, amb l'agreujant de produir-se dues durant el cap de setmana. Per millorar la disponibilitat de l'Anella s'ha contractat un servei extern a Satec (**S24x7**) per tal que en cas d'emergències fora del nostre horari laboral restableixin el servei d'operació.

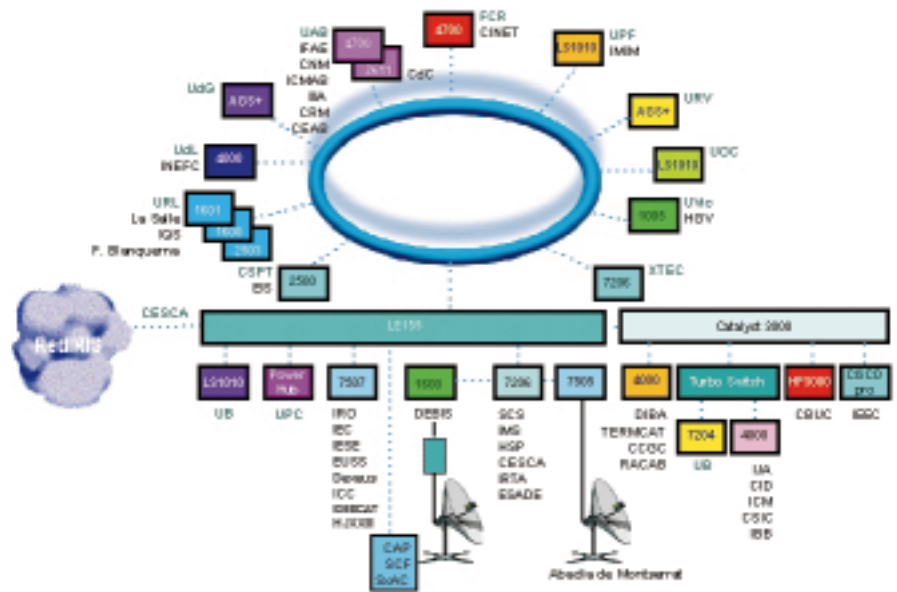
Les institucions connectades han continuat fent un gran nombre de **consultes** (776) que, en la seva majoria, han estat sobre interrupció del servei, encaminament, *proxy-cache* i SAR. D'altra banda, al nostre web hi ha hagut un total de 197.863 pàgines accedides (sense incloure els 17.665 accessos a la plana principal), un 28% de les quals són d'informació sobre els serveis de supercomputació, provinents de 26.526 *hosts* diferents i que han transmès 3,15 GB de dades.

S'han incrementat el nombre de servidors allotjats i hostatjats (**SAHS**) al CIESCA amb els de la Societat Catalana de Física, el Hewlett-Packard HPC European Users' Group (HP²EUG), la Universitat Ramon Llull, la Biblioteca de l'Abadia de Montserrat i el Consell Consultiu de Catalunya.

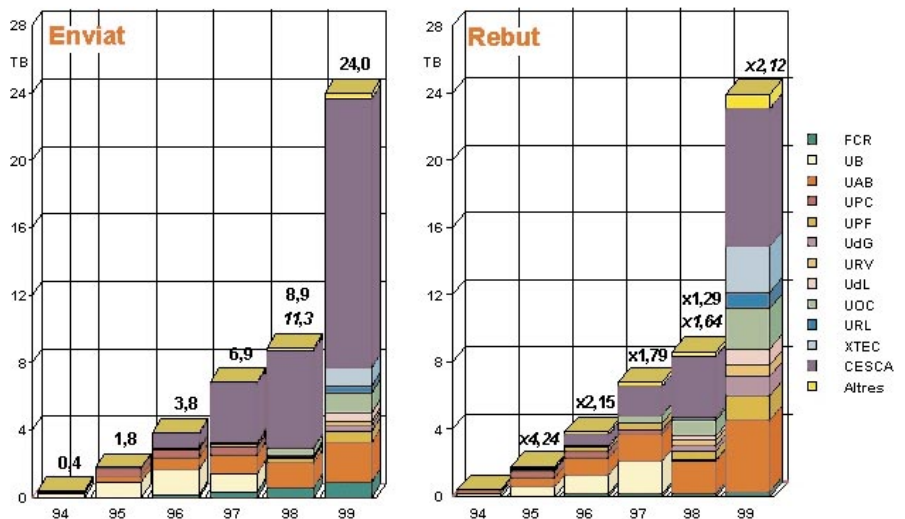
A iniciativa de la Societat Catalana de Matemàtiques, s'ha adquirit un Compaq Proliant 800, amb 2 processadors Pentium III (de 500 MHz), 128 MB de memòria principal i 9,1 GB en disc, per instal·lar-hi, entre altres serveis, la base de dades matemàtica Zentralblatt MATH que conté revistes, *proceedings* i altres documents.

Un any més, per cinquè consecutiu, el CIESCA també ha contribuït a la celebració de les jornades **Centre de Física de Benasc** (Osca) proporcionant el suport tècnic a la instal·lació

L'Anella Científica: 53 institucions connectades



Evolució del tràfic a l'Anella Científica



- 1994: Des del març.
- 1996: El tràfic de RedIRIS passa de la UB al CIESCA.
- 1997: A partir del novembre, el tràfic de la UB i la UPC passen també al CIESCA.
- 1998: Tràfic de juny i juliol no comptabilitzat.

d'una línia punt a punt de 64 Kbps que connectava l'Annexus amb la petita població dels Pirineus. També s'ha col·laborat amb diversos projectes de recerca, tal com el **SABA**, coordinat a Catalunya per la UPC on s'investiguen eines de reserva d'ample de banda i videoconferència; el pilot d'**IPv6** que ha posat en marxa una xarxa basada en aquest protocol connectada al *backbone* de RedIRIS i que vol desenvolupar

noves aplicacions sobre aquest nou protocol; i l'**I2-CAT**, coordinat per la UPC on es desenvolupa una plataforma experimental per promoure, per un costat, infraestructures de banda ampla per part dels operadors presents a Catalunya i, per l'altre, el desplegament de serveis i aplicacions per omplir aquesta infraestructura per part de les comunitats d'investigació i innovació del país.

Les activitats del CESCA en el camp de la supercomputació i les comunicacions han continuat arribant 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 i de participació en projectes institucionals.

Pel que fa a la formació, el CESCA ha celebrat dues edicions de l'**Aula de Supercomputació**, les quals van continuar amb la tradició de formar i informar en temes d'actualitat, com ara els nous protocols d'Internet o la seguretat en xarxes informàtiques, amb la col·laboració de la URL i la FIB (UPC), respectivament.

Els cursos de l'Aula s'han complementat amb quatre **seminaris**, dos d'ells dedicats a presentar els productes *ChemOffice WebServer* i *WebLab MedChem Explorer*, eines d'ajut al disseny de fàrmacs d'utilitat a la indústria i els altres dos enfocats vers la vessant pràctica del llenguatge de programació Java i la seva interrelació amb la base de dades *Objectivity*.

La celebració de dos actes periòdics ha contribuït a la difusió i al debat sobre l'impacte de les noves tecnologies. La tercera Trobada de l'Anella Científica (**TAC'99**), de caràcter anual, l'ha confirmat com a un punt d'intercanvi d'experiències entre totes les institucions connectades. En aquesta trobada hi va haver set presentacions, que van tractar temes com la qualitat de servei per a Internet o la necessitat d'autenticació a la xarxa.

La Jornada Catalana de Supercomputació (**JOCS'99**), de caràcter biennal i aquest any en la seva segona edició, coorganitzada amb el CEPBA, ha continuat amb el seu paper de fòrum de debat per presentar l'estat i els reptes de les diverses àrees de recerca que usen les tecnologies de computació d'alt rendiment i per parlar dels serveis que ambdós centres ofereixen tant a la comunitat científicotècnica com a les empreses del país, com ara la predicció del temps i el disseny de fàrmacs.

La difusió en l'àmbit internacional de les activitats de supercomputació i comunicacions, tant del CESCA com d'altres entitats, s'ha continuat fent a través de col·laboracions amb dues revistes electròniques europees, *Pri-*



Els assistents a la TAC'99, davant l'Edifici Annexus.



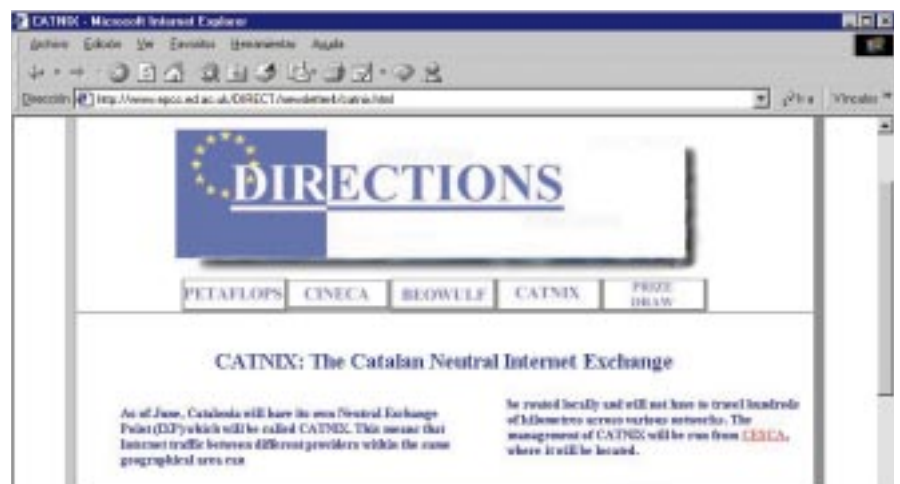
Alguns dels ponents que van participar a la JOCS'99.

meur i *Directions*. El conveni *La Universitat Digital a Catalunya*, la creació del CATNIX, la situació de l'Estat espanyol a la llista TOP500 i el cinquè aniversari d'IDRIS són algunes de les nostres aportacions.

En l'àmbit internacional, cal esmentar que la candidatura del CESCA com a organitzador del proper congrés d'usuaris de sistemes d'altres prestacions de Hewlett Packard, **Hi-Per 2000**, ha estat acceptada.

Finalment, el CESCA ha continuat

donant suport a d'altres activitats encaminades a promoure les noves tecnologies, com són la publicació de la seva revista mensual TERAFLOP i la participació, un any més, en la Setmana de la Ciència amb dues jornades de portes obertes. Des del juliol, el TERAFLOP compta amb una col·laboració del Centre de Terminologia Catalana (TERMCAT). Amb una columna mensual el TERMCAT difon l'ús correcte en català de la nova terminologia del ciberespai.



El Centre fa difusió de les activitats de supercomputació i de comunicacions en publicacions electròniques com *Directions*.

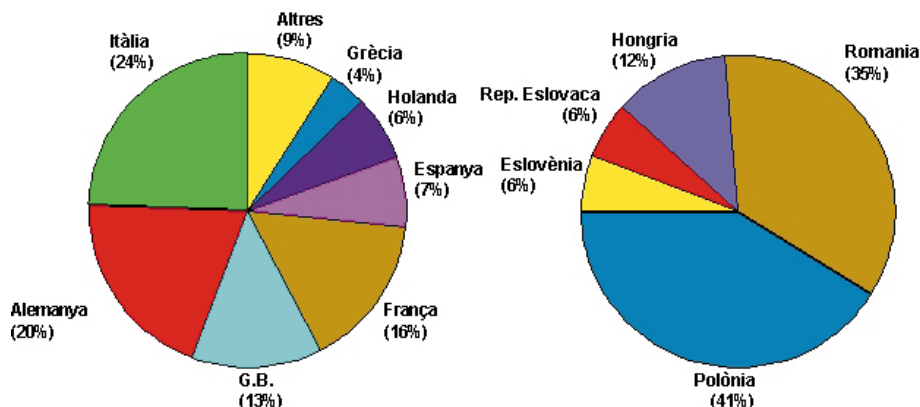
El programa TMR

El programa *Training and Mobility of Researchers*, finançat per la Comissió Europea i enguany coordinat pel CEPBA, ha permès fins ara que 98 investigadors europeus facin 121 estades d'una durada mitjana de 9,42 setmanes convidats per 33 grups de recerca catalans. Des de l'inici dels programes de mobilitat l'any 1993, hi ha hagut 199 convidats que han fet 250 estades a 54 grups i que han generat un total de 262 publicacions. Si mirem només dades de 1999, han vingut 46 investigadors (50 visites) de la mà de 24 grups de recerca.

A més, aquest any ha tingut lloc a Barcelona la TRACS Users Group Meeting 1999, organitzada conjuntament per l'Edinburgh Parallel Computing Centre (EPCC) i el CEPBA. Aquesta reunió anual aplega tots els investigadors europeus que s'han beneficiat dels programes de mobilitat de la Comissió Europea fins ara de l'EPCC, enguany de l'EPCC i del CESCA-CEPBA, i a partir del 2000, de totes les Grans Instal·lacions de Supercomputació.

S'ha signat amb la Comissió Europea un nou contracte (*Access to CESCA and CEPBA Large Scale Facilities, ACCESS*) per a la continuació del programa TMR, ara anomenat *Improving the Human Research Potential and Socio-Economic Knowledge Base (IHP)*, per un nou període de 36 mesos amb un finançament de 721.740€ (120,09 MPTA). El nombre de "Grans Instal·lacions de Supercomputació" s'ha incrementat a quatre amb la incorporació del Parallel Computation Laboratory de Bergen (Noruega), amb una màquina a la llista TOP500 a la posició 372. Mentre CINECA i EPCC continuen amb màquines entre les 50 primeres posicions (47 i 49, respectivament), ni el CESCA ni el CEPBA hi figuren actualment.

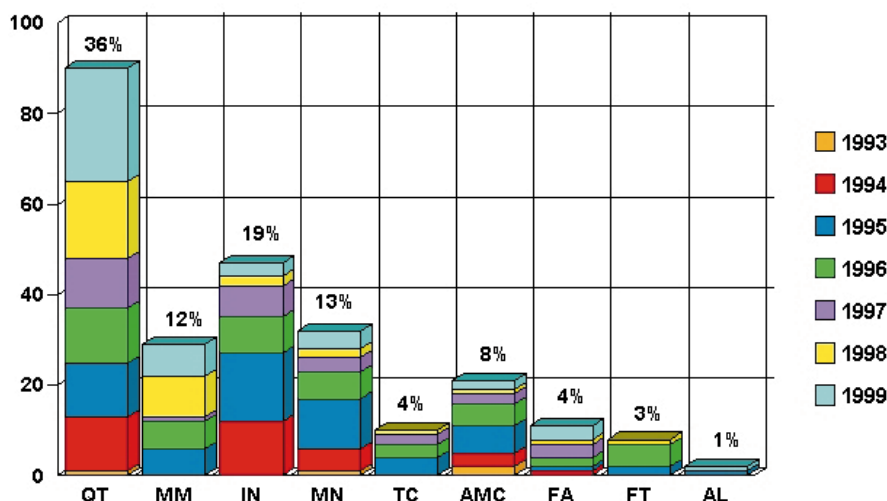
Visites per país d'origen



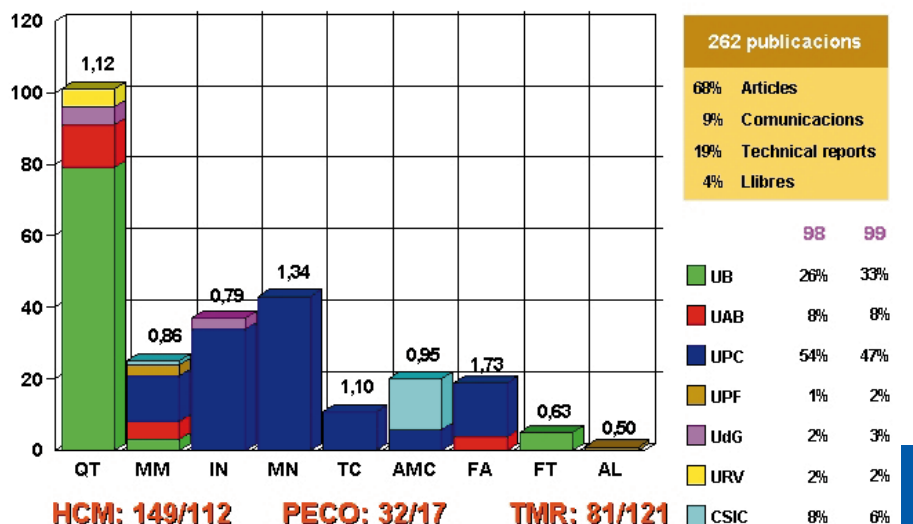
HCM: 112 visites
TMR: 121 visites

PECO: 17 visites

Visites per àrea d'especialitat



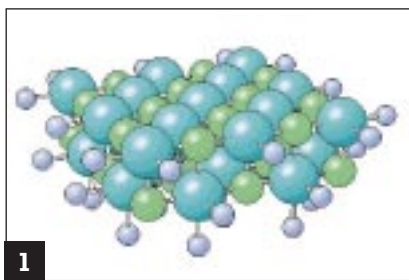
Publicacions per àrea i institució



HCM: 149/112 **PECO: 32/17** **TMR: 81/121**

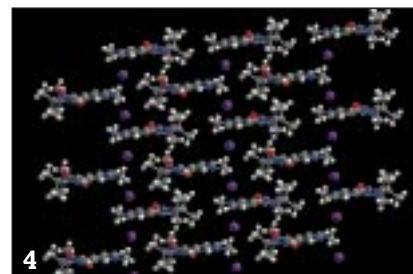
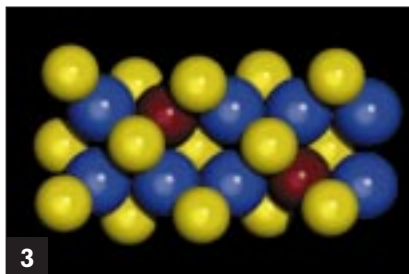
Els 10 projectes de més consum al CESCA-CEPBA

1. Models *ab initio* en catàlisi heterogènia i ciència de materials
Francesc Illas (UB, 10%)



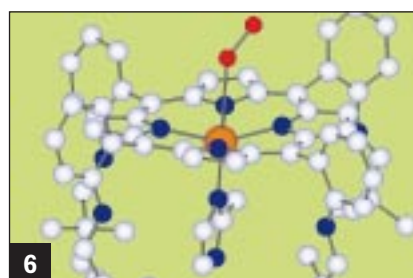
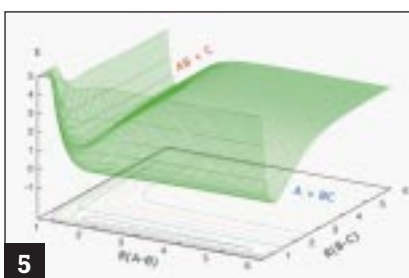
2. Simulació d'arquitectures i *benchmarks*
Mateo Valero (UPC, 8%)

3. Estructura electrònica de molècules i sòlids inorgànics
Santiago Álvarez (UB, 7%)



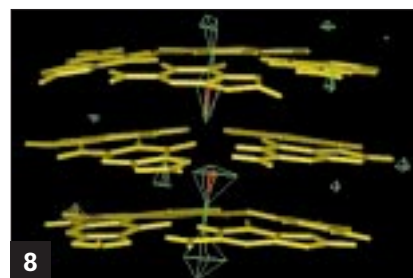
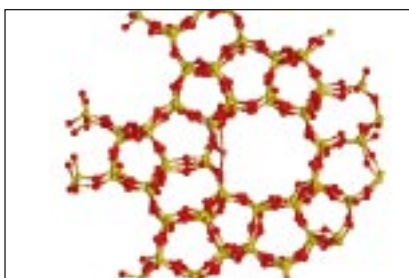
4. Enginyeria de cristalls moleculars d'interès tecnològic
Juan José Novoa (UB, 6%)

5. Dinàmica de reaccions químiques elementals
Antoni Aguilar (UB, 5%)



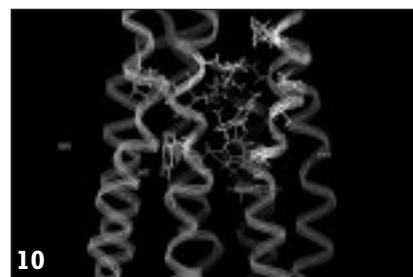
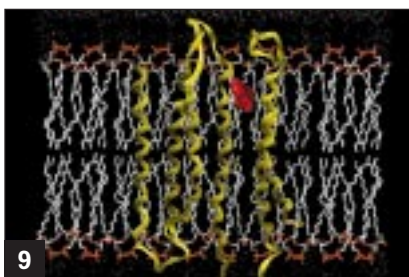
6. Modelització molecular de sistemes amb metalls de transició
Agustí Lledós (UAB, 4%)

7. Estructura i reactivitat de complexos metàl·lics. Aplicacions en síntesi orgànica i en química ambiental
Antoni Oliva (UAB, 4%)



8. Reconeixement molecular
Modesto Orozco (UB, 4%)

9. Modelització i simulació de processos biològics
Leonardo Pardo (UAB, 4%)



10. Disseny de molècules bioactives
Juan Jesús Pérez (UPC, 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

COORDINACIÓ

Joan Cambras
Alicia Martínez
Carme Monserrat
Caterina Parals
Teresa Via

FOTOGRAFIES

Jordi Pareto

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà & Associats