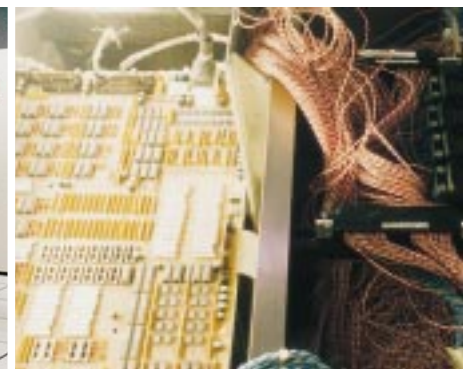
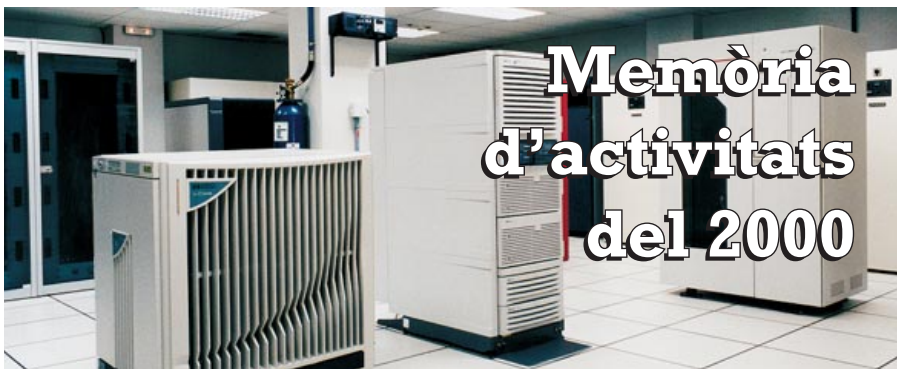


# TERAFLOP

CESCA

REVISTA DEL CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA

Núm. 57 • Març 2001



Quan aquest número els arribi a les seves mans, farà 10 anys que el M. H. President de la Generalitat, el President de l'FCR i els Rectors de les quatre Universitats públiques (UB, UAB, UPC i UPF) signaven un conveni per crear un consorci "amb l'objectiu de gestionar un gran complex de sistemes de càlcul" i així potenciar la capacitat de recerca de les universitats catalanes, impulsar el desenvolupament de la ciència, organitzar cursos de formació sobre aspectes bàsics, científics i tecnològics, i difondre informació científica i tècnica.

Formalment s'ha acordat celebrar aquest 10è aniversari el proper 30 d'octubre, data en què es va inaugurar el Centre. No obstant això, més enllà del balanç anual que tradicionalment aquest número de març els ofereix, cal reconèixer la nostra satisfacció per la tasca desenvolupada durant aquesta dècada ja que els objectius mencionats s'han complert amb escreix, encara que el detall d'aquest balanç es farà amb el número de novembre.

Avui m'haig de limitar a presentar-los el balanç de l'Exercici 2000. Si a la Memòria d'Activitats del 1997 el meu antecessor, l'Hble. Xavier Trias, manifestava que "és necessari fer accessibles aquests recursos a d'altres institucions", la qual cosa jo mateix corroborava l'any



següent expressant que "no només han de ser coneguts pel món empresarial i industrial, sinó també ser útils per a ells", aquest Exercici ha quedat ben palès.

D'una banda, la facturació fora del Consorci per als serveis de supercomputació, que en aquests dos últims anys han experimentat un creixement d'un 50%, s'ha quasi duplicat arribant a superar la cinquena part dels ingressos en aquest concepte. D'altra banda, la qualitat de servei en les comunicacions (Internet) que el Centre sempre ha impulsat per a la comunitat científica, també l'ha estès al món industrial, amb la creació del Punt Neutre d'Internet a Catalunya. Actualment ja són deu les empreses connectades, les quals han intercanviat cinc vegades més tràfic aquest gener que al mes de gener de l'any passat.

Aquest nou èmfasi no implica en absolut cap canvi en el nostre posicionament tradicional en el món universitari, acadèmic i de recer-

ca, els destinataris principals dels nostres serveis. Això ha quedat confirmat amb la posada en marxa d'un nou servei, orientat exclusivament a aquesta comunitat, que els dotarà de més fiabilitat en la seva identificació electrònica i amb la concessió d'una subvenció extraordinària del Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació per continuar renovant el nostre equipament de supercomputació i a qual li hem de manifestar el nostre agraïment.

Encara que la nostra activitat de suport a la recerca continuarà depenent majoritàriament de les subvencions públiques, també hem d'agrair la nostra inclusió com a Gran Instal·lació Científica en la Llei de Pressupost de l'Estat per al 2001. Espero que els incentius fiscals associats permetin estimular les polítiques generoses de mecenatge cap a aquestes àrees tecnològiques.



**Rafael Español i Navarro**

President del CESCA





L'any 2000 ha suposat per al Centre de Supercomputació de Catalunya la posada en marxa d'un nou servei, el de Certificació Digital, i la continuïtat i creixement dels ja existents. És especialment remarcable la consolidació del funcionament del Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CAT-NIX) i la triplicació del nombre de peticions al servidor *proxy-cache*. El Centre ha posat en marxa una nova trobada anual, la dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya (TSIUC), i ha creat dues noves comissions, la dels Serveis Informàtics (CSIUC) i la de Grans Usuaris de Supercomputació

(GUCAP). Tot centrat en els ja tradicionals tres eixos d'actuació: supercomputació, comunicacions i promoció científicotècnica.

El Servei de Certificació Digital dins la jerarquia de RedIRIS, posat en marxa a proposta de la Comissió Tècnica de l'Anella Científica, permetrà que el CESCA pugui certificar el seu personal, els servidors propis i els que es trobin allotjats a les seves instal·lacions, així com també a d'altres institucions connectades a l'Anella Científica, per tal que aquestes certifiquin els seus.

Les dues noves comissions treba-

llaran per proposar millores en els serveis ofertats pel Centre. La CSIUC és un fòrum de debat i reflexió sobre els serveis del CESCA a la comunitat universitària i s'encarrega a més de coordinar l'elaboració dels programes de les trobades de l'Anella Científica i dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya.

La GUCAP ha assumit part de les funcions que des de l'any 1996 havia realitzat el Consell Assessor i prèviament el Consell Científic. Aquesta Comissió ha estat creada per debatre les polítiques d'assignació de recursos, proposar criteris de prioritització per a



	1997	1998	1999	2000
<b>Supercomputació</b>				
<b>CESCA-CEPBA</b>				
<b>Rendiment punta (Gflop/s)</b>	44,96	87,83	120,91	141,81
<b>Hores computacionals</b>	443.864	605.117	840.830	953.503
<b>Nombre d'usuaris</b>	579	592	830	860
<b>Nombre de projectes</b>	112	121	159	238
<b>Visites programes de mobilitat</b>	35	39	50	41
<b>CESCA</b>				
<b>Rendiment punta (Gflop/s)</b>	19,88	42,77	69,65	69,65
<b>Hores computacionals</b>	199.347	282.584	393.188	432.260
<b>Treballs en espera &lt; 1 hora</b>	66%	49%	53%	64%
<b>Treballs en espera &gt; 24 hores</b>	10%	19%	19%	10%
<b>Consultes</b>	872	1.072	607	699
<b>Comunicacions</b>				
<b>Tràfic Anella Científica (TB)</b>	6,88	>8,86	24,01	>59,47
<b>Tràfic enviat a RedIRIS (TB)</b>	1,77	4,26	>9,50	32,99
<b>Tràfic rebut de RedIRIS (TB)</b>	4,56	11,45	>23,10	57,90
<b>Articles llegits (x10<sup>6</sup>)</b>	0,07	2,91	9,49	13,27
<b>Peticions al proxy-cache (x10<sup>6</sup>)</b>		12,84	248,62	710,25
<b>Peticions a l'ftp mirror (x10<sup>3</sup>)</b>		3,00	41,65	20,64
<b>Servidors allotjats + hostatjats</b>	3+4	3+8	5+12	6+15
<b>Pàgines llegides al web</b>	115,06	128,81	197,86	379,60
<b>Consultes</b>	288	673	776	1.112
<b>Promoció</b>				
<b>Conferències</b>	33	40	34	32
<b>Cursos Aula Supercomp. (assistents)</b>	4 (47)	11 (179)	4 (61)	8 (185)
<b>Jornades i seminaris (assistents)</b>	3 (168)	6 (487)	6 (224)	6 (353)
<b>Visites al Centre (visitants)</b>	15 (253)	10 (168)	9 (162)	16 (277)
<b>TERAFLOP</b>	8	9	9	9

les noves adquisicions de maquinari i programari, i coordinar esforços en la formació dels usuaris per al millor ús dels recursos de supercomputació del Centre.

La renovació tecnològica de l'equipament de supercomputació realitzada a la fi del 1999 (l'N4000 i l'V2500), que va incrementar el rendiment punta a 69,65 Gflop/s, ha permès millorar el temps de resposta a la demanda creixent de recursos: mentre que el nombre de treballs s'ha incrementat en un 14%, amb un temps mitjà d'execució de 14,14 hores, el nombre de treballs que han hagut d'esperar en cua més de 24 hores ha passat del 19% dels anys 1998 i 1999 a un 10% enguany. El nombre d'hores computacionals usades al maquinari del CESCA han estat 432.260, un 10% més que l'any anterior i, en el CESCA-CEPBA, 953.503, un 13% més que al 1999.

L'any 2000 s'ha acomplert un dels objectius marcats en el conveni La Universitat Digital a Catalunya 1999-2003: s'ha dotat a totes les universitats públiques d'un cabal mínim de connexió de 34 Mb/s, la UdG a través de fibra òptica i la URV i la UdL per radioenllaç. D'aquesta manera, totes elles disposen del cabal necessari per a desenvolupar projectes en banda ampla. Actual-

ment, l'Anella compta amb 55 institucions connectades, les quals han vist el seu tràfic d'Internet duplicat respecte a l'any anterior.

Un any més, els serveis addicionals de l'Anella Científica han continuat creixent. El servei de *proxy-cache* ha tingut més de 710 milions de peticions, una mitjana de 23 peticions per segon, xifra que quasi triplica el nombre de peticions rebudes l'any 1999. El tràfic del Servei d'Accés Remot i els accessos al nostre web s'han duplicat, el volum d'informació demanada al servidor *ftp-mirror* s'ha multiplicat per 1,7 i el de *News*, per 1,4. El Servei d'Allotjament i Hostatge de Servidors ha tingut quatre noves incorporacions.

Jazztel i Airtel s'han incorporat al CATNIX, i Infase Comunicaciones ha estat baixa en ser adquirida per PSINet. Pel que fa al tràfic, mentre que durant els seus primers sis mesos en funcionament l'any 1999 aquest va ser de 982 GB, enguany s'han intercanviat prop de 13 TB, equivalent a transferir tot el text d'una Gran Enciclopèdia Catalana cada quatre minuts. En mitjana, l'Anella ha continuat exportant tràfic a les altres entitats, però a l'últim trimestre l'intercanvi ha estat totalment equilibrat.

A l'abril ha finalitzat el programa

*Training and Mobility of Researchers (TMR)* d'accés a Grans Instal·lacions Europees, que ha facilitat que, des del 1996, 109 investigadors hagin pogut realitzar 133 estades amb 37 grups d'investigació de Catalunya i tenir accés als recursos compartits del CESCA-CEPBA. Aquest programa ha tingut continuïtat amb l'*Improving the Human Research Potential and Socio-Economic Knowledge Base (IHP)* que ha permès que 27 participants realitzessin un total de 29 estades a 18 grups de recerca locals. L'any 2000, 38 visitants han realitzat un total de 41 estades gràcies a aquests dos programes de mobilitat.

Pel que fa a la promoció científicotècnica, ha continuat la tasca de formació amb la celebració de dues edicions de l'Aula de Supercomputació que, a més de presentar els nostres serveis, han donat a conèixer diferents temes d'interès de comunicacions i supercomputació. S'han organitzat conferències i congressos, així com diferents seminaris en col·laboració amb d'altres institucions. El Centre també ha continuat informant de les novetats de supercomputació i comunicacions per mitjà de la seva revista, TERA-FLOP, i promocionant els seus serveis a través dels mitjans de comunicació locals i europeus. ■



JORDI FARETO

La plantilla del CESCA ha treballat enguany per millorar els serveis que ofereix el Centre.

El CESCA disposa d'un **programari** de supercomputació molt especialitzat per tal de satisfer les necessitats de càlcul dels seus usuaris, tant en programari de base com en aplicacions.

El programari de base és homogeni per a totes les màquines i el constitueixen els diferents compiladors, les llibreries de càlcul numèric, les llibreries de paral·lelització i els gestors de cues de *batch*. Al 2000, s'han actualitzat a l'IBM SP2 diferents utilitats de GNU, gmake (versió 3.78.1) i Octave (versió 2.0.15). També s'han instal·lat en aquesta màquina les eines Grid Analysis and Display System (GrADS), en la versió 1.7, i NetPBM Release 7.

Pel que fa als HP V2500 i N4000, s'hi han instal·lat l'HP-UX SDK -Development Kit- pel Java(tm) Plataforma 2, versió 1.2.2.03, que inclou el JRE (Java Runtime Environment), i el sistema de compilació HPF Adaptor, en la versió 7.0. També en aquestes màquines s'han instal·lat la nova versió 2.4 del compilador de Fortran 90; la versió 5.005\_003 del Perl; la versió 20.4.2 de l'editor de GNU, emacs; les utilitats gràfiques VCG, versió 1.30 Release 3.17; Graphviz, versió 1.5.1, i les utilitats Tcl i Tk en la versió 8.0.3.

El Centre disposa actualment de 29 aplicacions, se n'han instal·lat cinc de noves i se n'han donat de baixa tres: MARC, ja que va caducar el conveni amb DSP i no s'ha renovat, i DB2 i Intelligent Miner, que havien estat cedits per IBM per a realitzar el projecte de mineria de dades posat en marxa juntament amb l'Institut d'Estadística de Catalunya (vegeu TERAFLOP 34 i 35).

Durant el 2000, s'ha instal·lat a l'IBM SP2 i a ambdós HP el programa de visualització MOLDEN en la versió 3.6, i s'hi ha actualitzat a la versió 6.0 el programa de modelatge molecular AMBER. S'ha actualitzat a totes les màquines el programa de química quàntica Gaussian a la versió 98 Rev. A.9, que millora les funcionalitats, i s'ha instal·lat la versió 8.0.6 d'Oracle Enterprise Edition a tots dos HP així com el gestor de bases de dades relacionals de domini públic MySQL, en la versió 3.22.30. A l'HP V2500 s'ha actualitzat el programa Jaguar, amb la versió 4.0, i la base de dades Objectivity/DB per

C++ i Java, versió 5.2.1. Pel que fa a l'IBM SP2, s'hi ha actualitzat el programa ADF, amb la nova versió ADF2000.02, així com s'hi han instal·lat la versió 8.0.6 d'Oracle Enterprise Edition, l'Oracle Developer Server 6.0 i



JORDI PARETO

**SGI Power Challenge XL, instal·lat a la Universitat Jaume I.**



JORDI PARETO

**Convex Exemplar SPP-1200, usat en demostracions a diferents centres.**

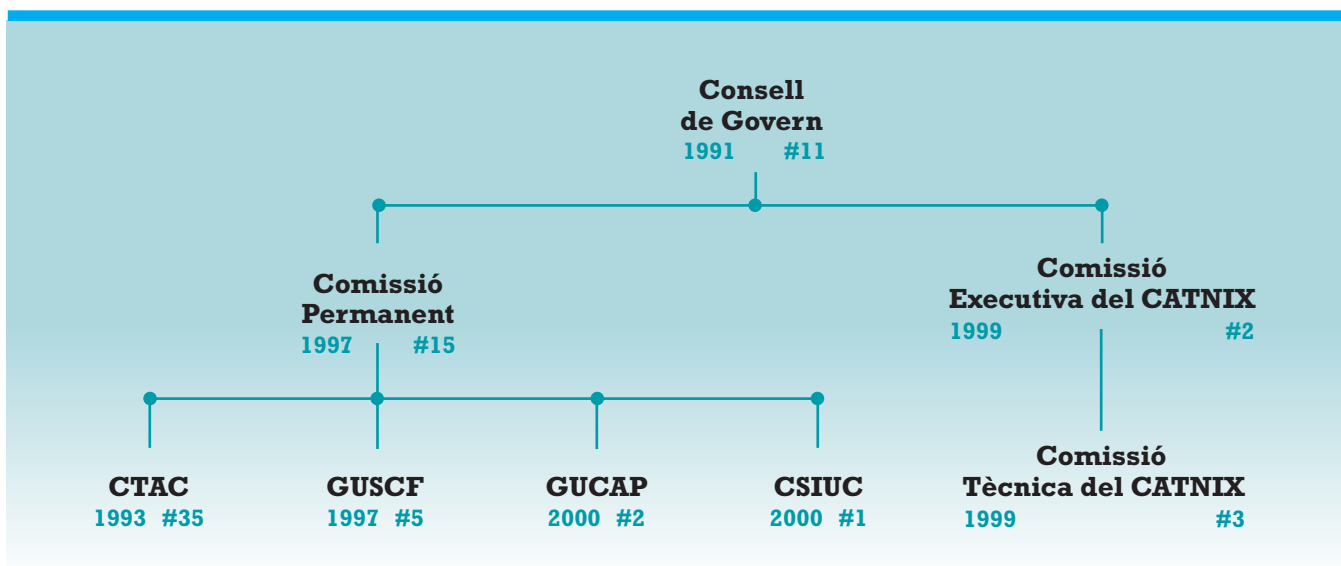
l'Oracle Application Server 4.0.8.

Després de la renovació de **maquinari** duta a terme el 1999, el Centre té disponible un IBM SP2, un HP Exemplar V2500, i un HP N4000, amb un rendiment punta total de 69,65 Gflop/s. L'N4000 té 8 processadors superescalars del model PA8500 a 440 MHz d'1,76 Gflop/s cadascun, 4 GB de memòria principal, 227 GB en disc, un rendiment punta ( $R_{punta}$ ) de 14,08 Gflop/s i un rendiment màxim ( $R_{max}$ ) de 10,22 Gflop/s. L'Exemplar V2500 té 16 processadors també del model PA8500 a 440 MHz, 8 GB de memòria principal, 216 GB en disc, un  $R_{punta}$  de 28,16 Gflop/s i un  $R_{max}$  de 17,47 Gflop/s. L'IBM SP2 té 44 processadors (42 thin160 i 2 wide), 12 GB de memòria principal, 494 GB en disc, un  $R_{punta}$  de 27,41 Gflop/s i un  $R_{max}$  de 16,17 Gflop/s. El 21 de desembre, el DURSI ha atorgat una subvenció extraordinària de 100 milions de pessetes per continuar renovant el maquinari de supercomputació.

El sistema d'emmagatzematge massiu de dades StorageTek TimberWolf 9740, posat en marxa a la fi de 1999, ha estat ampliat amb un segon dispositiu de transport 9840 amb una velocitat de transferència de 10 MB/s. Aquesta segona unitat de transport permet realitzar còpies de seguretat simultàniament i agilitzar la cerca d'informació quan hi ha múltiples requeriments.

El **Museu** ha augmentat el nombre de peces amb l'arribada de nous donatius l'any 2000. D'una banda, Convex Supercomputer, SAE ha entregat un Exemplar SPP-1200, el primer model que va arribar a l'Estat i que va ser utilitzat per a demostracions a diferents centres. Aquest computador és d'arquitectura de memòria distribuïda compartida i podia tenir un màxim de vuit processadors PA-RISC 7200 de 240 Mflop/s cadascun per node i un màxim de 16 nodes. D'altra banda, el museu compta també amb un Power Challenge XL, el primer d'aquest model a l'Estat instal·lat a la Universitat Jaume I, amb 24 processadors de 780 Mflop/s cadascun d'un màxim de 36 MIPS R10000 (vegeu TERAFLOP 46), que ha estat donat per Silicon Graphics. ■





L'any 2000 s'han creat dos nous òrgans assessors, la Comissió de Grans Usuaris de Supercomputació (GUCAP) i la Comissió dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya (CSIUC). Aquesta última, constituïda el 18 d'octubre, és un fòrum de debat i reflexió tant sobre els serveis del CESCÀ a la comu-

nitat universitària com les pròpies experiències en la gestió acadèmica; a més, s'encarrega de coordinar l'elaboració dels programes de la TAC i la TSIUC.

El Grup d'Usuaris del Servei de Cerca de Farmacòfors (GUSCF) s'ha reunit els dies 28 de juny i 11 d'octubre per continuar valorant aquest servei i

els plans que cal seguir de cara al futur.

El president del C<sup>4</sup>, Antoni Giró, ha assumit temporalment les funcions del director del C<sup>4</sup> ja que el nomenament de Mateo Valero ha quedat sense efecte des del 26 d'octubre a causa del conveni de la UPC i IBM per a crear el CEPBA-IBM Research Institute (CIRI) que ell dirigeix.



JORDI PARETO

**1 El Consell de Govern** s'ha reunit el 24 de març per aprovar la liquidació del Pressupost del 1999 i el Pressupost per al 2000. Posteriorment s'han produït dos canvis: Jaume Josa ha estat reemplaçat per Lluís Calvo, coordinador institucional del CSIC a Catalunya, i Josep Antoni Plana ha estat substituït per Jordi Mas, director general de la FCR.

**2 La Comissió Permanent** ha fet quatre reunions ordinàries els dies 3 de març, 19 de maig, 21 de juliol i 27 d'octubre per fer el seguiment de les activitats desenvolupades pel CESCÀ, adjudicar les diferents adquisicions a realitzar i modificar el Pressupost inicialment aprovat pel Consell d'acord amb les últimes previsions d'ingressos i despeses. Enguany les quatre vocalies rotatòries han correspost a: Enric Isidre Canela (UB), Sebastià Xambó (UPC), Francesc Xavier Grau (URV) i Martí Aldea (UdL).



2

JORDI PARETO



3

JORDI PARETO

**3 La Comissió Executiva del CATNIX** s'ha reunit el 14 de desembre, sota la presidència d'Andreu Mas-Colell, conseller del DURSI, qui va assumir-la en virtut del Decret 127/2000, de 3 d'abril, d'estructuració del Departament. Xavier Peiró, director del Centre de Telecomunicacions i Tecnologies de la Informació de la Generalitat de Catalunya, havia presidit aquesta comissió des del 15 de febrer, quan Miquel Puig va delegar en ell el càrrec. La Comissió Executiva ha aprovat el pressupost i el pla d'activitats per a l'any següent. També ha acordat canviar el nom de la Comissió i ha revisat alguns dels paràmetres inicials pel conveni de creació, com per exemple incrementar el cabal mínim de connexió de 256 Kbps a 2 Mbps. Fruit de l'entrada al CATNIX de Jazztel i d'Airtel, s'han incorporat com a vocals José Manuel Arnaiz i Enric Martín. A més, Carles Bages, Jaume Salvat, i Mateo Llaveró, han assumit la representació d'al-pi, Menta i BT, respectivament. Ha estat baixa Pablo Barrachina, d'Infase Comunicaciones.



4

JORDI PARETO

**4 La Comissió de Grans Usuaris de Supercomputació (GUCAP)** s'ha constituït el 5 d'abril. És un òrgan creat per la Comissió Permanent del 3 de març per debatre les polítiques d'assignació de recursos, proposar criteris de prioritització per a les noves adquisicions de maquinari i programari, i coordinar esforços en la formació dels usuaris per a la millor utilització dels recursos de supercomputació del Centre.



5

JORDI PARETO

**5 La Comissió Tècnica de l'Anella Científica (CTAC)** s'ha reunit els dies 19 de gener, 12 d'abril, 12 de juliol i 25 d'octubre. Aquesta comissió ha fixat les prioritats per al futur de l'Anella Científica, entre les quals destaca l'augment de la fiabilitat, la consideració de la seguretat com un element clau, i la creació del Servei de Certificació Digital.

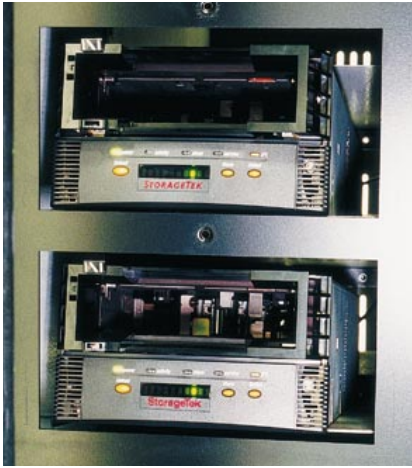
**6 La Comissió Tècnica del CATNIX** s'ha reunit els dies 5 de juliol i 29 de novembre per aprovar el procediment d'auditoria de detecció de congestió lleu i greu, crear una plataforma de proves per aplicacions en banda ampla (*backbone de multicast* versió 4), definir polítiques per difondre el CATNIX per a la incorporació de nous operadors, i proposar millores en els processos d'intercanvi de tràfic entre les institucions connectades. ■



6

JORDI PARETO





JORDI PARETO

**El sistema d'emmagatzematge de dades disposa d'una segona unitat de transport.**

El Departament d'Assistència Tècnica ha continuat gestionant i mantenint el maquinari i programari de supercomputació, per tal de garantir l'òptim funcionament dels recursos del Centre. Aquest departament també ha continuat gestionant els codis dels usuaris que es donen d'alta, mantenint i difonent els seus serveis a través del web del Centre, així com definint les polítiques per optimitzar l'ús dels recursos i mesures de seguretat informàtiques. A més a més, ha continuat oferint el servei de consultes per ajudar l'usuari en els problemes que li puguin sorgir en el dia a dia i per assessorar-lo en la definició dels recursos necessaris per al seu projecte, en la selecció i utilització tant del programari adient com dels supercomputadors del Centre.

Amb l'objectiu d'ampliar el ventall de programari i maquinari accessible pels usuaris, el CESCA va signar el 18 de febrer un **conveni** amb el Centre de Supercomputació de Galícia (CESGA) i el Centro Informático Científico de Andalucía (CICA). Aquest acord ha permès millorar l'accés dels investigadors de les tres comunitats a infraestructures tecnològiques avançades, pel que fa a sistemes i aplicacions informàtiques d'altres prestacions destinades a la simulació i modelització. Gràcies a aquest conveni de col·laboració, els usuaris del CESCA han pogut disposar de 10.000 hores computacionals per usar al CESGA i al CICA.

Les **hores computacionals** (HC) usades al maquinari del CESCA han estat 432.260, un 10% més sobre les

393.188 de 1999. També ha augmentat el nombre de treballs executats un 14%, passant de 26.485 a 30.294. D'aquests treballs, un 64% s'ha iniciat abans d'una hora d'espera, mentre que un 10% ha hagut d'esperar més de 24 hores, la qual cosa representa una millora significativa respecte a l'any anterior, on els percentatges respectius eren 53% i 19%. En mitjana, el temps mitjà d'espera ha passat de 21,71 hores al 1999 a 13,37 al 2000. A l'HP N4000 i a l'HP Exemplar V2500, el temps mitjà d'espera ha passat de 23,59 hores a 19,22, mentre que a l'IBM SP2 ha passat de 20,48 a 6,31. Aquest decrement important en el temps d'espera en aquesta màquina és conseqüència del traspàs de molts usuaris a l'N4000 i a l'V2500 ja que proporcionen un rendiment punta superior (1.760 vs 640 Mflop/s per processador).

El Departament d'Assistència Tècnica ha rebut 699 **consultes**, de les quals un 38% han estat resoltes al mateix moment que s'ha fet la consulta. Els usuaris han preguntat especialment sobre els codis (22%), les aplicacions (20%), els gestors de cues (16%), les xarxes (10%), els sistemes operatius (8%) i les bases de dades (7%).

Els 66 projectes acadèmics que administra el CESCA han usat 595.714 HC al maquinari disponible al CESCA-CEPBA, un 6% més que l'any 1999 (559.660). Les institucions del Consorci, excepte la UPC, han usat un total de 540.208 HC, de les quals un 35% (186.480 HC) s'han executat al maquinari del CEPBA. Els projectes de la UPC i d'altres institucions de l'Estat, administrats pel CEPBA, han usat 35.090 HC en el nostre maquinari, un 8% del total de les 432.260 HC que s'han executat.

El Servei de Meteorologia de Catalunya ha posat en marxa un nou servei que permet conèixer la previsió de l'alçada significant de les onades, la seva direcció de propagació i el temps entre cresta i cresta ([www.gencat.es/servmet/mar](http://www.gencat.es/servmet/mar)) i completa el servei de predicció del temps a Catalunya, que va ser posat en marxa el 1994. El **model d'onatge** ha estat desenvolupat pel Centre Internacional d'Investigació dels Recursos Costaners (CIIRC) de la UPC i les màquines del CESCA són les encarregades de realitzar dos

cops al dia els càlculs per elaborar la previsió marítima.

L'**entorn de treball** ha experimentat diverses millores: d'una banda, s'ha instal·lat el programa de connexió remota segura Secure Shell en la versió 2.1.0 a l'IBM SP2, l'HP V2500, l'HP N4000 i a l'SGI Octane, que allotja el Servei de Cerca de Farmacòfors, i la nova versió 5.0 del programari The Password Cracker. D'altra banda, s'ha eliminat de tots els directoris d'usuari els permisos d'altres (*other*) i s'ha canviat la màscara de fitxers (*umask*) per tal que els nous fitxers que es creïn tinguin per defecte els permisos de control total pel propietari del codi i permís de lectura i execució pels membres del mateix grup. A petició de la GUCAP, s'ha adaptat un node thin160 de l'IBM SP2 per tal que disposi de 12 GB de disc per a treballs que ho requereixin.

Per a l'àrea de Modelització Biomolecular, s'ha afegit un sisè **benchmark** basat en Amber. Aquest ha estat proporcionat per Leonardo Pardo, de la UAB, a qui se li agraeix la seva col·laboració. L'*speedup* màxim que s'associa amb aquest **benchmark** és lleugerament superior a l'aconseguit amb els **benchmarks** de Gaussian a l'V2500 i l'SP2, però no per a l'N4000.

El **Servei de Cerca de Farmacòfors** (SCF) ha realitzat una campanya de difusió adreçada a més de tres-cents membres de la Sociedad Española de Química Terapèutica. Han avaluat aquest servei Laboratorios Salvat i l'equip de treball de Mario Rubiralta i Anna Diez, del Laboratori de Química Orgànica de la Facultat de Farmàcia de la UB. També s'ha contactat amb dos laboratoris, Lacer i Uriach, i el resultat ha estat positiu ja que ambdós han anunciat la seva propera incorporació al GUSCF. A petició dels membres d'aquest grup, s'han començat els tràmits per sol·licitar un ajut a la CIRIT per tal d'adquirir l'ACD (Available Chemical Directory), que complementarà les bases de dades de què es disposa.

El **Servei d'Emmagatzematge de Dades** (SED), posat en marxa a la fi de 1999, ha arribat a una ocupació del 92%. Dels 2 TB de capacitat d'emmagatzematge que disposa actualment, s'han usat 1,84 TB. Un 78% per les còpies de seguretat pròpies i un 14% per



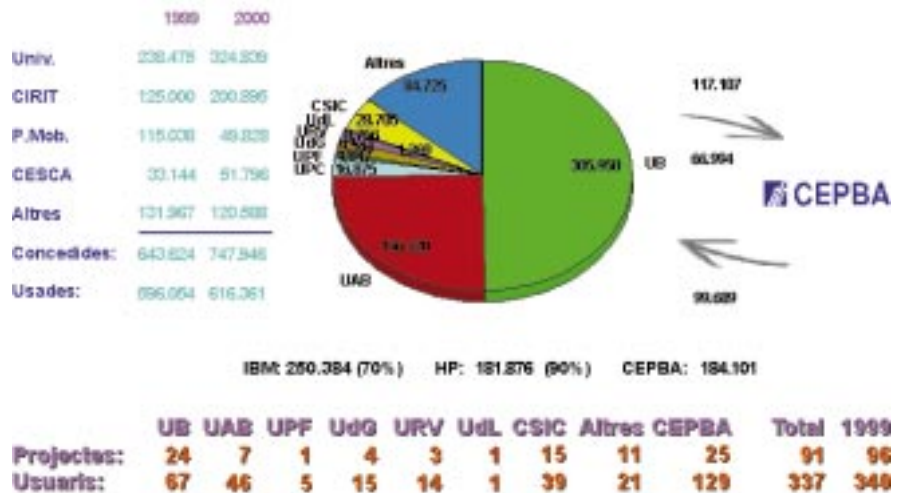
arxiu permanent de dades d'usuaris.

Dins l'**Accés a Gestors d'Informació per Internet** (AGI<sup>2</sup>), s'ha col·laborat amb el Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya per a desenvolupar el projecte TDC@t ([www.tdcat.cesca.es](http://www.tdcat.cesca.es)), adaptant i implementant el programari per a fer possible la consulta en línia de les tesis doctorals; s'ha implementat la versió electrònica de la publicació *Contributions to Science* ([www.cat-science.com](http://www.cat-science.com)) de l'Institut d'Estudis Catalans; s'ha posat en marxa un servei de rèplica per a Catalunya de la base de dades de contingut matemàtic Zentralblatt MATH amb la instal·lació del programari de consulta així com del contingut de la base de dades en una màquina del Centre per tal de facilitar-ne l'accés, i s'ha continuat administrant el projecte iniciat l'any 1996 pel Departament de Llenguatges i Sistemes Informàtics de la UPC per tal de potenciar les possibilitats que la Internet, la World Wide Web i els sistemes de gestió de dades Oracle ofereixen per a l'organització de les diferents activitats que formen part d'un departament universitari.

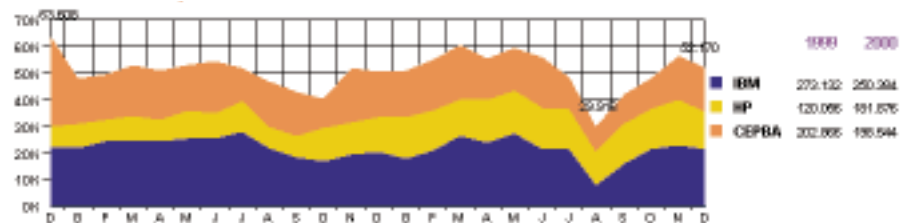
Pel que fa a l'**Experimentació en Noves Tecnologies de Supercomputació** (ENTS), l'única experiència que es pot fer pública és la realitzada per l'empresa Sema Group que ha utilitzat l'HP N4000 i l'HP Exemplar V2500 per provar el rendiment d'una aplicació desenvolupada per al sector de la telefonia.

El Departament d'Assistència Tècnica ha participat activament en diferents **projectes**. L'Agència Espacial Europea ha atorgat al juliol el contracte industrial per al disseny i implementació del sistema de base de dades de GAIA en el qual participen investigadors de l'IEEC i la UB, l'empresa GMV i el CESCA; ha col·laborat amb la Universitat de les Illes Balears i l'empresa Gridsystem en el projecte PROFIT, que desenvoluparà mètodes de computació d'altres prestacions integrats en un sistema basat en components per al sector financer, i que està patrocinat pel Ministeri de Ciència i Tecnologia. També administra el web del grup d'usuaris de sistemes HP d'altres prestacions, hp<sup>2</sup>eug, i ha desenvolupat el web del congrés HiPer 2000. ■

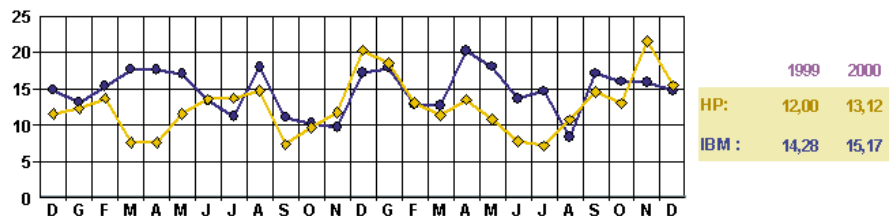
## Hores concedides i usades



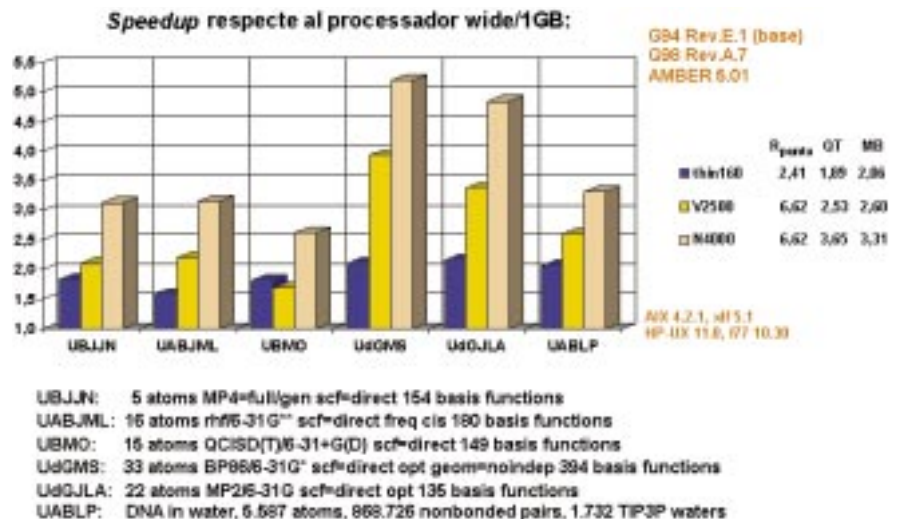
## El consum mensual per màquina



## El temps mitjà d'execució de treball per màquina



## Els nostres benchmarks



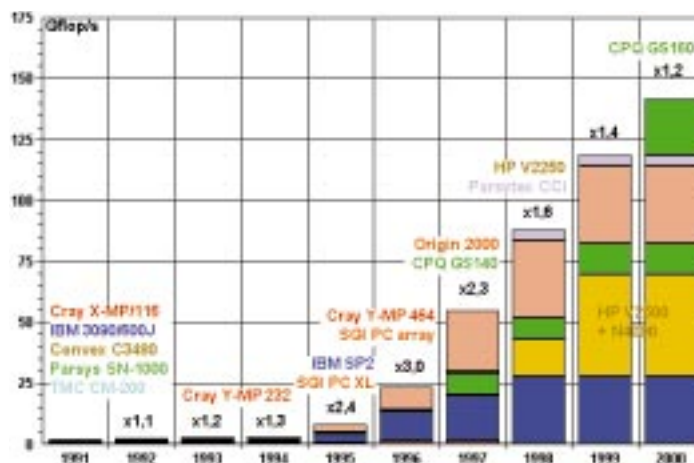
La compartició dels recursos entre el CESCA i el CEPBA ha continuat permetent obtenir el màxim rendiment del maquinari i el programari d'ambdós Centres, en total els usuaris han tingut accés a un rendiment punta de 141,81 Gflop/s. L'adquisició d'un Compaq AlphaServer GS160 pel CEPBA ha augmentat el rendiment punta en 23,39 Gflop/s. Aquesta màquina té 16 processadors Alpha 21264 a 731 MHz, 8 GB de memòria principal i 108 GB en disc.

A més, els usuaris han continuat disposant d'un SGI Origin 2000 amb 64 processadors MIPS R10000, 8 GB de memòria principal, 360 GB en disc i un  $R_{punta}$  de 32,00 Gflop/s; un Compaq AlphaServer GS140 amb 12 processadors Alpha 21264 a 525 MHz, 2 GB de memòria principal, 32 GB en disc i un  $R_{punta}$  de 12,50 Gflop/s, i un Parsytec CCI-8D amb 16 processadors Pentium II a 266 MHz, amb 1 GB de memòria principal, i un  $R_{punta}$  de 4,26 Gflop/s.

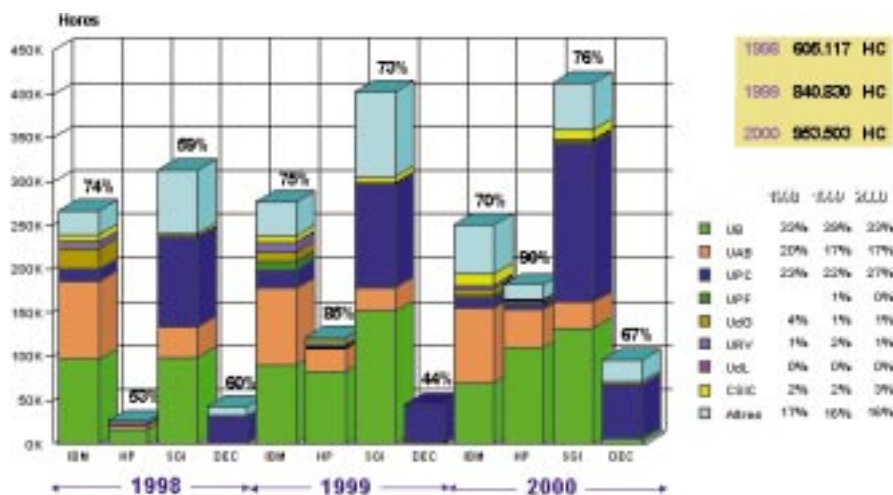
En total s'han usat 953.503 HC, un 55% al CEPBA i un 45% al CESCA, un 13% més sobre les 840.830 de 1999. El nombre d'usuaris ha passat de 830 a 860 i el de projectes, de 158 a 238, com a conseqüència de la reclassificació feta pel CEPBA. La UB ha usat un terç de les hores, seguida de la UPC amb un 27% i de la UAB amb un 17%. De fora de Catalunya, cal destacar la Universitat de les Illes Balears amb un 6% i la Universidad de Valladolid amb un 4%.

Durant el quinquenni 1996-2000 s'han usat tres milions d'hores computacionals, de les quals un 52% s'han consumit en l'àrea de química teòrica, un 13% en la de física, un 13% en la d'informàtica, un 11% en la de modelització biomolecular, un 6% en la de mètodes numèrics en enginyeria, un 1% en la de ciències de la terra, i un 4% en altres àrees. Tres universitats han usat tres quartes parts dels recursos: UB (34%), UPC (27%) i UAB (18%).

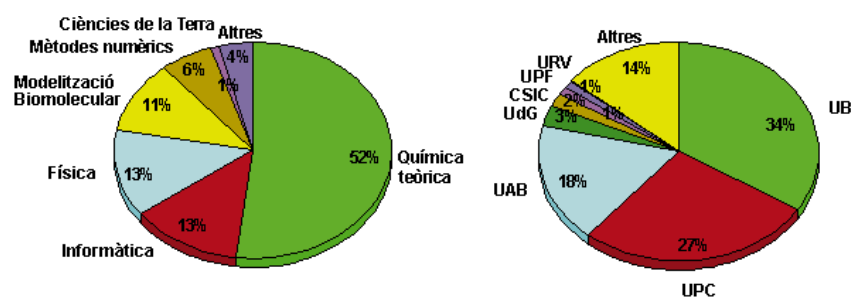
## El maquinari disponible: una visió històrica



## El consum per institució i màquina



## El consum en els anys 1996-2000



- M. Valero(UPC): *Simulació d'arquitectures i benchmarks* 3%
- S. Álvarez (UB): *Estructura electrònica de molècules i sòlids inorgànics* 6%
- F. Illas (UB): *Models ab initio en catàlisi heterogènia i ciència de materials* 6%
- J.J. Novoa (UB): *Enginyeria de cristalls moleculars d'interès tecnològic* 5%
- A. Oliva (UAB): *Estructura i reactivitat de complexos metàl·lics. Aplicacions en ...* 5%
- J.M. Lluch (UAB): *Reaccions de transferència protònica i d'hidrogen* 5%
- M. Orozco (UB): *Reconeixement molecular* 4%
- A. Aguilar (UB): *Dinàmica de reaccions químiques elementals* 4%
- A. Liedós (UAB): *Modelització molecular de sistemes amb metalls de transició* 4%
- J.J. Pérez (UPC): *Disseny de molècules bioactives* 3%



## Els programes de mobilitat



A l'abril ha finalitzat el programa *Training and Mobility of Researchers* (TMR) d'accés a Grans Instal·lacions Europees, que ha facilitat l'accés dels investigadors europeus als recursos compartits del CESCA-CEPBA. Des de 1996, gràcies a aquest programa de mobilitat 109 investigadors han realitzat 133 estades a Catalunya, d'una mitjana de 9,17 setmanes, convidats per 37 grups de recerca de les universitats públiques catalanes i el CSIC.

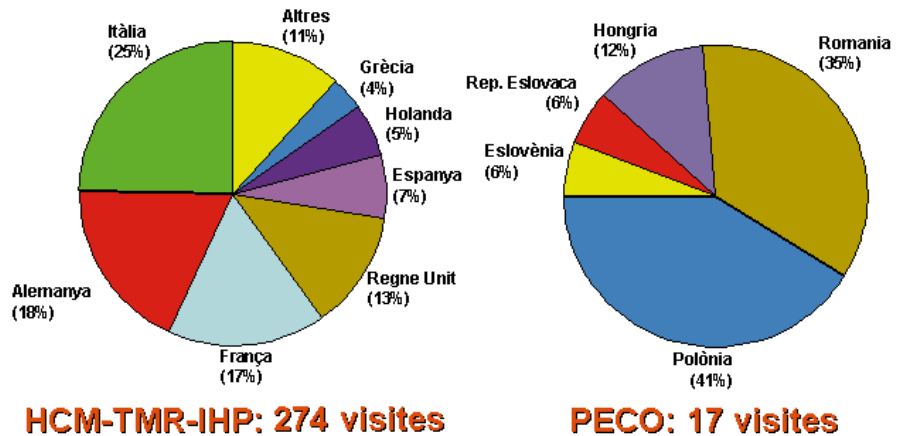


Com a perllongació del TMR, al maig ha començat l'*Improving the Human Research Potential and Socio-*

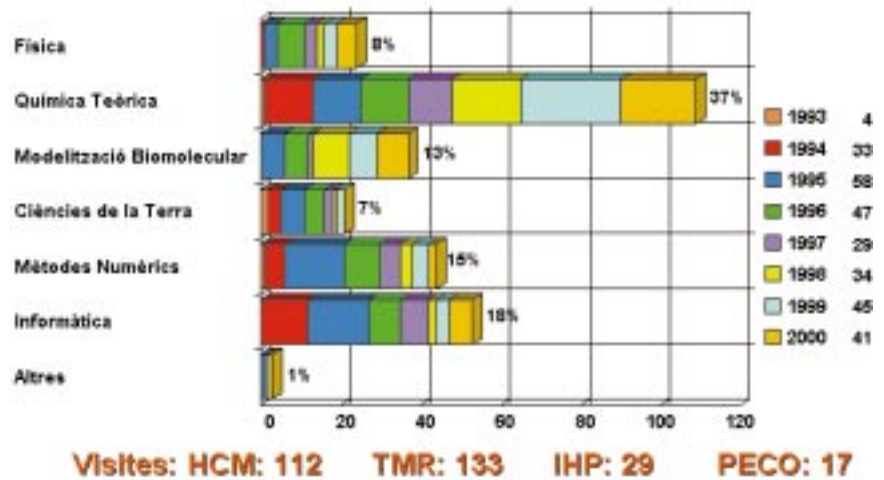
*Economic Knowledge Base* (IHP), que facilitarà el treball d'investigadors europeus amb grups locals fins al 2003. Aquest programa de mobilitat té un finançament de 721.740 € (120,09 MPTA) per part de la Comissió Europea.

De moment, l'IHP ha permès a 27 participants realitzar un total de 29 estades a 18 grups d'investigadors de Catalunya. L'any 2000, un total de 38 visitants han realitzat 41 estades d'una durada mitjana de 6,54 setmanes a 24 grups de recerca de Catalunya. El CESCA-CEPBA ha estat participant en programes de mobilitat d'investigadors des del 1993 quan el CESCA i el CEPBA van ser seleccionats com a Gran Instal·lació de Supercomputació del projecte Capital Humà i Mobilitat. D'aleshores, 226 participants han realitzat un total de 291 estades d'una durada mitjana de 8,88 setmanes convidats per 59 investigadors locals. ■

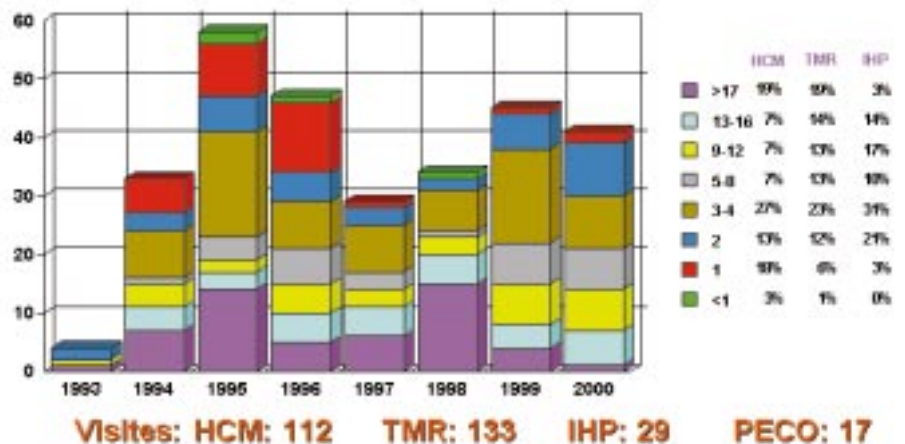
## Visites per país d'origen



## Visites per àrea de coneixement



## Visites per durada de l'estada





AL-PI

**Radioenllaç instal·lat a la UdL.**

Les comunicacions han esdevingut en poc temps una eina de treball imprescindible per a tota la comunitat científica, acadèmica i empresarial. A més de la fonamental importància que han tingut en l'accessibilitat dels usuaris als recursos del Centre, actualment juguen un paper clau en l'accés a la informació en tots els àmbits.

Durant l'any 2000, el Departament de Comunicacions i Operacions ha continuat la gestió de l'Anella Científica i dels seus nou serveis addicionals, així com la gestió del nus de RedIRIS a Catalunya i del CATNIX. A més, ha continuat administrant tota la infraestructura bàsica del Centre, com són servidors de correu, llistes de distribució i web, xarxa local, instal·lacions tècniques, etc.

A proposta de la Comissió Tècnica de l'Anella Científica, la Comissió Permanent del CESCO va aprovar el passat 27 d'octubre la creació del **Servei de Certificació Digital** (SCD) dins de la jerarquia de RedIRIS. Aquest nou servei permetrà que el CESCO pugui certificar el seu personal, els servidors propis i els que es trobin allotjats a les seves instal·lacions, així com també a d'altres institucions connectades a l'Anella Científica per tal que aquestes puguin certificar els seus. Aquest servei proporciona més fiabilitat en la identificació electrònica, com per exemple, en els enviaments de correu electrònic.

El retard en el desplegament de la fibra òptica ha afectat la connectivitat a l'**Anella Científica** de les universitats de Girona, Rovira i Virgili, i de Lle-

da. El conveni La Universitat Digital a Catalunya havia previst el pas a 34 Mbps per a l'octubre i desembre de 1999 i per al febrer del 2000, respectivament. Per a la UdG, l'enllaç per fibra es va aconseguir el 22 de desembre del 1999, encara que es va esperar fins al 10 de gener per fer-lo operatiu. El mencionat retard va obligar a connectar les altres dues universitats per radioenllaç, el qual va ésser operatiu el 2 de març a la URV i el 3 d'abril a la UdL. D'aquesta manera, s'ha dotat a totes les universitats públiques no metropolitanes d'un cabal de connexió a l'Anella Científica de 34 Mbps, acomplint l'objectiu marcat en el conveni i facilitant l'ús d'aplicacions de banda ampla.

Actualment, l'Anella compta amb 55 institucions connectades. D'una banda, s'han connectat la Fundació Centre de Documentació Política al març, l'Institut de Geomàtica i el CDES Abat Oliba a l'octubre, i l'Ateneu Barcelonès està en procés de fer-ho. D'altra banda, ha estat baixa l'Hospital Universitari Joan XXIII. Altres institucions han millorat la seva connexió: l'Hospital de la Santa Creu i Sant Pau (de 64 Kbps a 2 Mbps), l'Institut d'Estudis Catalans (de línia punt a punt a 64 Kbps a XDSI), l'Escola Universitària Salesiana de Sarrià (de 64 Kbps a 128 Kbps) i l'Institut Cartogràfic de Catalunya (de 64 Kbps a 128 Kbps). El tràfic de l'Anella s'ha multiplicat per 2,4, passant de 25 TB l'any 1999 a més de 59 TB. Amb l'objectiu d'augmentar la fiabilitat i redundància de l'Anella s'ha afegit un segon commutador i, per tal de millorar la seguretat en les comunicacions de les institucions que formen

part de l'Anella Científica, s'ha elaborat un document explicant els diferents tipus d'atac que es poden produir, donant consells per prevenir-los, i oferint diverses recomanacions a seguir en cas de detectar una incidència de seguretat.

El CESCO ha realitzat diferents millores en els **Serveis Addicionals de l'Anella Científica** (SxAC). D'una banda, s'ha ampliat la connexió a Internet a 1,5 Mbps per als serveis de *proxy-cache*, d'Accés Directe i d'Accés Remot, i d'altra banda, s'ha adquirit una nova màquina Sun E450, amb dos processadors UltraSPARC2 a 400 MHz, cadascun amb 4 MB de *cache*, 512 MB de memòria principal, 36,4 GB en disc, i fonts d'alimentació redundants. Aquesta nova màquina ha permès ampliar el servei de *News* per incorporar els usuaris de la UAB que fins ara accedien a un servidor propi, i donar més fiabilitat i redundància al servei. Precisament el nombre d'articles llegits al servidor de *News* ha augmentat, així com també ho ha fet el nombre de consultes al departament i les peticions al web. Pel que fa al servei *MBone*, s'ha retransmès, entre d'altres, la investidura de Vinton Cerf com a doctor "honoris causa" per la URV.

El servei de **proxy-cache** ha continuat creixent en nombre de peticions i en família. D'una banda, ha passat de prop de 249 milions de peticions al 1999 a més de 710 milions, i de l'altra, el Centre compta amb 19 germans de 13 institucions, després de la incorporació de la Universitat de les Illes Balears. Aquest ha estat el primer agermanament d'un *proxy* de les Illes, ante-



JORDI PARETO

**La comissió organitzadora i els ponents de la TAC 2000.**



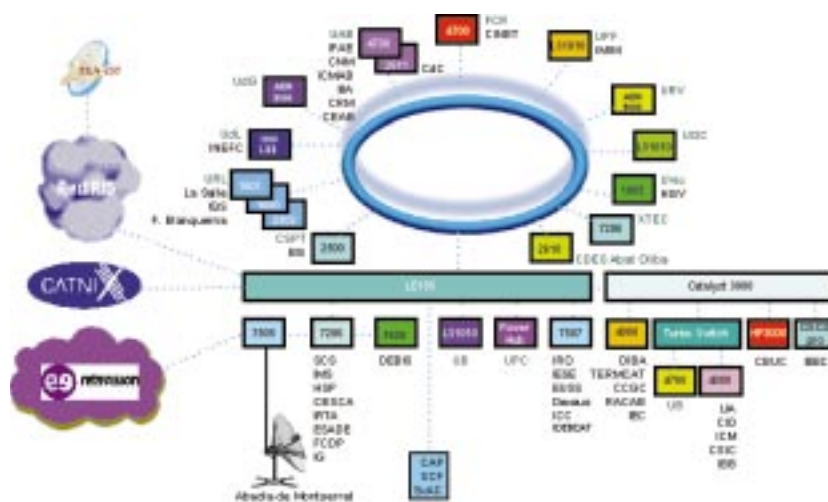
riorment ho van fer centres de super-computació i universitats de diferents comunitats autònomes, com Andalusia, Galícia, Aragó o Castella-La Manxa, entre d'altres. El nombre de fills del proxy-cache ha augmentat de 15 a 21, amb la incorporació de l'Hospital de Bellvitge (SCS), l'Hospital de Sant Pau, l'Institut de Ciència de Materials de Barcelona (CSIC), l'Institut Químic de Sarrià (URL), la Universitat Pompeu Fabra i la Xarxa Telemàtica Educativa de Catalunya.

El **Servei d'Accés Remot (SAR)** gairebé ha duplicat el tràfic enviat i rebut pels usuaris respecte l'any 1999. Cal comentar que aquest servei ha reduït el nombre d'usuaris en un factor 7, ja que durant el 1999 la UAB va donar d'alta a tots els usuaris i al 2000 ha donat de baixa a tots aquells que no necessitaven aquest servei. Tot i que el nombre d'usuaris ha disminuït, tant el tràfic enviat i rebut com el nombre d'hores d'ús del servei s'ha duplicat.

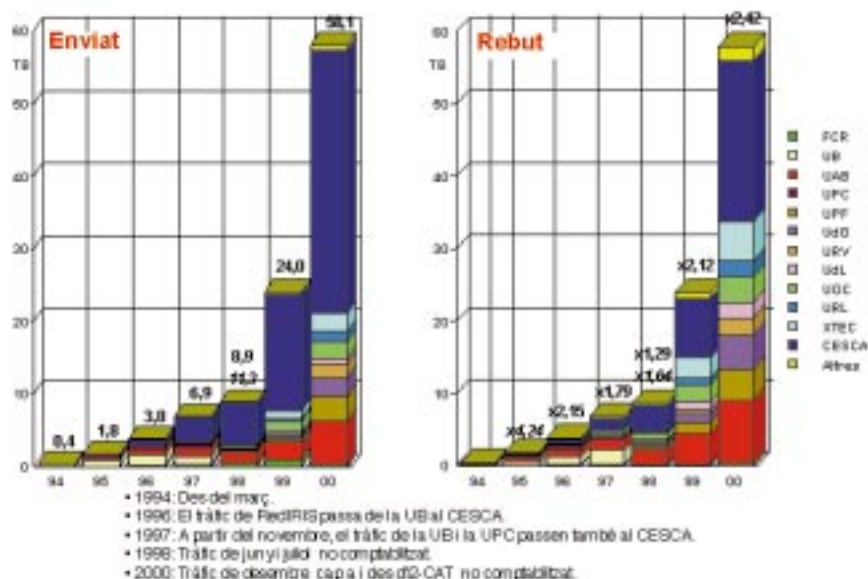
Pel que fa al **Servei d'Accés Directe (SAD)** el nombre d'usuaris ha passat d'11 a 23. En la seva majoria, són usuaris de la UAB que per a dur a terme diferents treballs de recerca han de connectar-se a màquines dels EUA i que, per tant, utilitzen aquest servei que els proporciona una millor qualitat de servei en les comunicacions amb aquest país.

El **Servei d'Allotjament i Hostatge de Servidors (SAHS)** ha experimentat quatre noves incorporacions. D'una banda, ha començat l'hostatge del web de la revista *Contributions to Science* de l'Institut d'Estudis Catalans, del web d'informació meteorològica Infomet de l'FCR, i del web Barcelona Centre Universitari, promogut per la Generalitat de Catalunya, l'Ajuntament i les universitats de Barcelona i la seva àrea d'influència per tal de promocionar Barcelona com a centre universitari internacional. De l'altra, ha començat també l'allotjament d'Intercampus, un projecte de les set universitats públiques catalanes i la UOC, que compta amb el suport del DURSI, i que permet l'intercanvi d'assignatures de lliure elecció mitjançant Internet. Mentre no han estat disponibles les instal·lacions del CIRI, s'ha allotjat també l'IBM RS-6000 SP de què disposa aquest Institut.

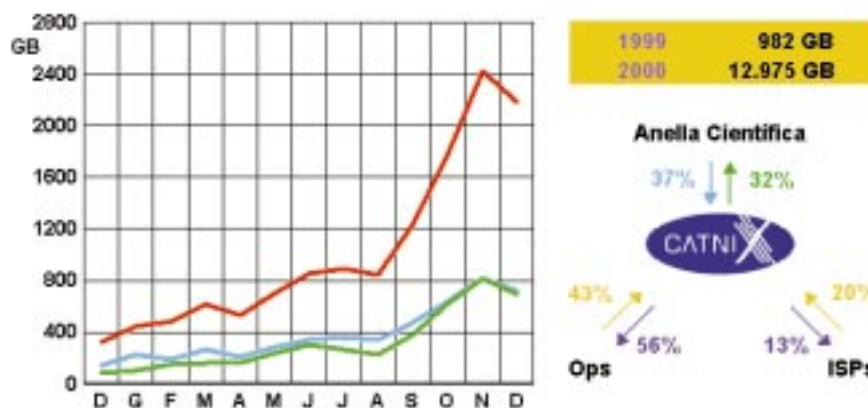
## L'Anella Científica: 55 institucions connectades



## Evolució del tràfic a l'Anella Científica



## El tràfic al Punt Neutre d'Internet de Catalunya



JORDI PARETO



**La nova Sun E450 ha permès ampliar el servei de News per incorporar els usuaris de la UAB.**

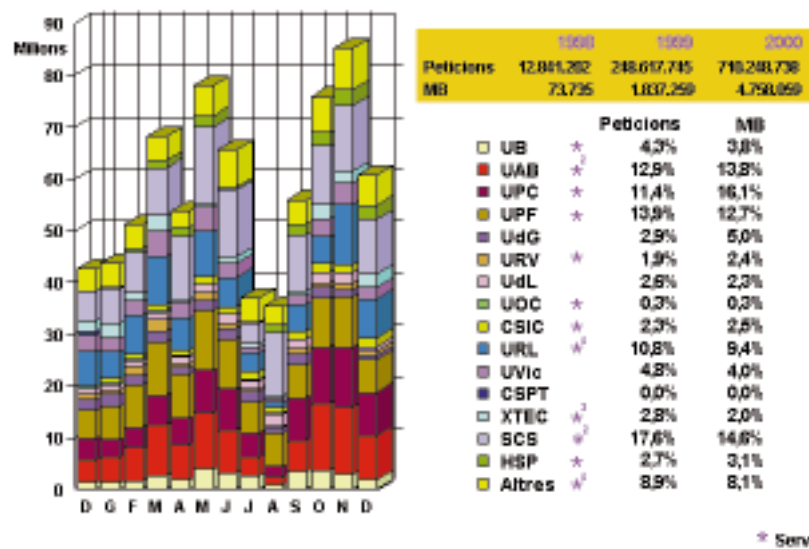
**RedIRIS** al llarg de l'any ha realitzat un esforç considerable per millorar tant les connexions del seu troncal amb Catalunya com les externes. L'ample de banda del troncal de Madrid a Barcelona és de 64 Mbps, mentre que de Barcelona a Madrid és de 40 Mbps. Pel que fa a les connexions externes de RedIRIS, s'ha realitzat una nova connexió amb Abilene i ESnet a 17 Mbps, i s'ha augmentat també la línia d'Ibernet, que ha passat de 34 Mbps per Gigacom a 64 Mbps. S'ha augmentat l'ample de banda de la línia TEN-155 amb els EUA, de 17 Mbps a 45 Mbps, i la línia TEN-155 a Europa ha passat de 34 Mbps a 45 Mbps (ATM).

El **CATNIX** s'ha consolidat amb èxit. D'una banda, s'hi ha connectat BT al maig i Jazztel al juliol, Airtel ha signat al desembre el conveni per a la seva incorporació, i tres institucions han ampliat la seva connexió: Datagrama (a 34 Mbps), Retevisión (a 6 Mbps) i Institut Català de Tecnologia (a 2 Mbps). D'altra banda, el tràfic intercanviat al Punt Neutre ha crescut considerablement. Mentre que durant els seus primers sis mesos en funcionament al 1999 el tràfic va ser de 982 GB, enguany s'han intercanviat prop de 13 TB. D'aquest tràfic, l'Anella Científica n'ha aportat un 37% i n'ha obtingut un 32%. A més, per tal de millorar la qualitat de servei a tots els usuaris de les entitats que hi participen, s'ha creat un procediment de detecció de congestió lleu i greu.

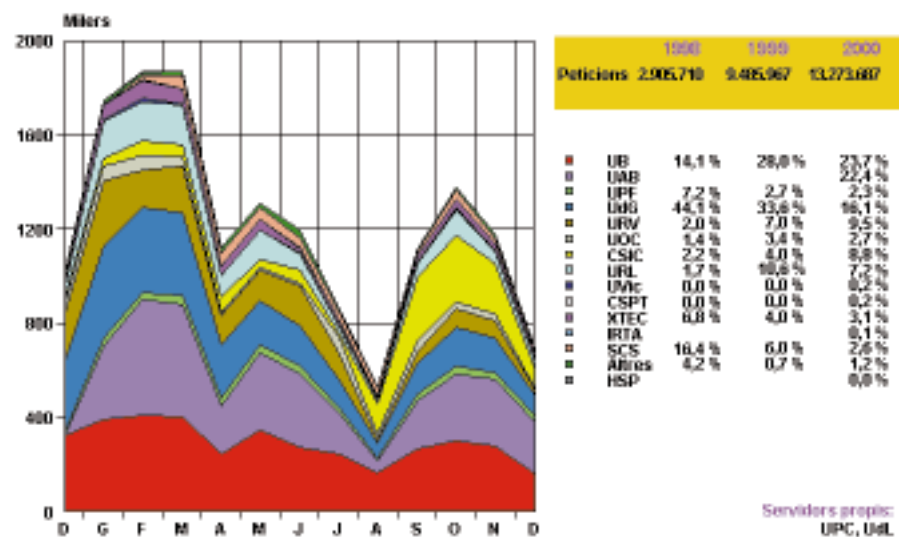
El CESCA ha contribuït també a la celebració de les jornades organitzades pel Centre de Ciències de Benasc (Osca), que ha tractat la computació quàntica. Per sisè any consecutiu, s'ha proporcionat el suport tècnic a la instal·lació d'una línia punt a punt de 64 Kbps entre Barcelona i Benasc, donant així accés a Internet perquè cada científic pogués treballar amb el seu propi ordinador. El Departament de Comunicacions i Operacions ha participat també en la realització de diferents projectes. Ha col·laborat en l'i2-CAT, impulsat per la Secretaria per a la Societat de la Informació, proporcionant,

d'una banda, connectivitat a sis institucions a través de l'Anella i, de l'altra, connectivitat internacional amb qualitat de servei per a realitzar una demostració al Japó durant la conferència anual de la Internet Society; ha col·laborat també en l'elaboració d'una tesi doctoral del Departament d'Arquitectura de Computadors de la UPC per a l'anàlisi de sistemes *cache* a Internet, i en el grup de treball per a la protecció de dades (GTPD), constituït dins la CSIUC. Aquest GTPD s'encarregarà d'elaborar propostes i treballar conjuntament per a la protecció de les dades a la universitat. ■

### El servidor de proxy-cache: peticions per institució



### Els articles llegits per institució





El Departament de Promoció ha continuat la tasca de fer arribar als usuaris i, al públic en general, les activitats i novetats en els camps de la supercomputació i les comunicacions. D'una banda, informant i de l'altra, formant.

S'han organitzat dues edicions de l'**Aula de Supercomputació** per respondre a les necessitats actuals de formació. D'una banda, s'han presentat els nous serveis del Centre: el Servei d'Emmagatzematge de Dades, posat en marxa a la fi de 1999; els serveis de certificació a Internet, que s'oferiran al Centre durant el 2001, i l'habitual Entorn de Supercomputació que presenta als nous usuaris les màquines de què disposa el CESCA. D'altra banda, s'han donat a conèixer diferents aspectes de les comunicacions i la supercomputació com són les noves tendències en seguretat a Internet, afinanament de servidors de *proxy-cache*, eines i tècniques de depuració de programes, i xarxes neuronals. En total, 185 persones han assistit als cursos organitzats a l'Aula.

A més, el CESCA ha coorganitzat amb d'altres institucions diferents **seminaris**. S'han donat a conèixer les últimes tendències en gestió del coneixement, mineria de dades i textos aplicats a la salut, en col·laboració amb IBM, i s'ha organitzat un seminari sobre els mètodes híbrids multicapa, juntament amb el Departament de Química de la UAB. Aquests seminaris han comptat amb un total de 113 assistents. El Centre ha estat també entitat col·laboradora de la tercera edició de l'Eurographics Workshop on Parallel Graphics & Visualisation, que va organitzar l'Institut d'Informàtica i Aplicacions de la UdG.

Enguany la **Trobada de l'Anella**

**Científica** ha arribat a la quarta edició i s'ha consolidat com un fòrum perquè les institucions que en formen part puguin intercanviar experiències. La TAC 2000 ha comptat amb set presentacions dels àmbits acadèmic i empresarial sobre aspectes com les xarxes i aplicacions mòbils, accés i transport en alta velocitat, i la protecció del *copyright* en els continguts multimèdia. Aquesta quarta Trobada ha comptat amb 56 assistents.

A més de la TAC 2000, el Consorci ha organitzat també la primera edició de la **Trobada dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya** (TSIUC) que ha tingut 68 assistents. Aquesta jornada ha estat concebuda perquè el sistema universitari català reflexioni sobre la protecció de dades personals a la universitat i defineixi una política conjunta per a seguir.

El Centre ha organitzat el congrés d'usuaris de sistemes d'altres prestacions de Hewlett-Packard, **HiPer 2000**, que ha portat visitants de diferents punts d'Europa, els Estats Units i Canadà. Del 17 al 20 de setembre, usuaris del món acadèmic i empresarial, així com directius de Hewlett-Packard, van poder compartir experiències i analitzar cap a on ha d'evolucionar la Computació d'Altes Prestacions en sistemes HP. A més dels canals habituals de difusió del CESCA, aquest congrés va ser promocionat en dues publicacions internacionals, l'*Scientific Computing World* i l'*HP European User Group News*. Una setmana abans de la celebració del HiPer 2000, s'havia coorganitzat amb Gaussian Inc. el *workshop* satèl·lit **Introduction to Gaussian: Theory and Practice** per presentar els nous mètodes disponibles en aquest programa. A més de Catalunya i les Illes Balears, van assistir al



Keiji Morokuma va presentar els mètodes híbrids multicapa.

*workshop* químics computacionals provinents de la resta d'Europa, Amèrica del Sud i Àsia.

Com cada any, s'ha participat en la **Setmana de la Ciència**, organitzada per la Fundació Catalana per a la Recerca. D'una banda, s'ha organitzat una conferència de caire divulgatiu sobre informàtica i ciència-ficció, impartida per Miquel Barceló, i a la qual van assistir 62 persones. D'altra banda, com és habitual, durant dos dies el Centre ha obert les seves portes als visitants interessats a conèixer què és i què es fa en un centre de supercomputació. A més de les noranta persones que han visitat el Centre durant la Setmana de la Ciència, s'ha rebut 187 visitants.

La difusió en l'àmbit internacional de les activitats de supercomputació i comunicacions, tant del CESCA com d'altres institucions, ha continuat gràcies a la col·laboració amb les revistes electròniques europees *Primeur* i *Directions*.

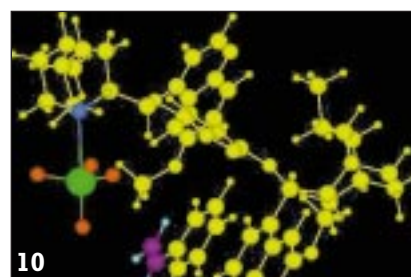
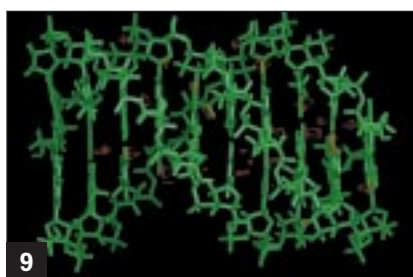
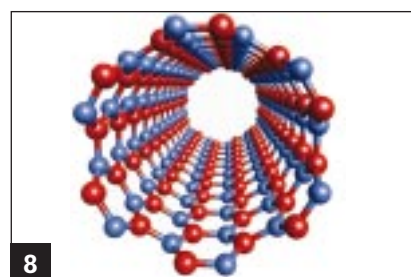
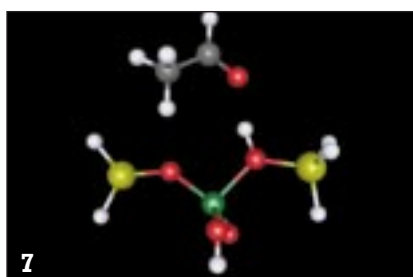
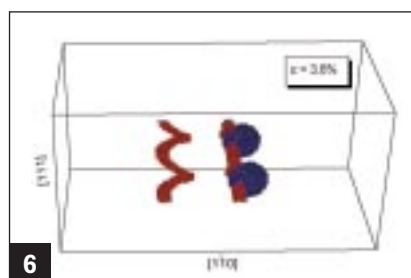
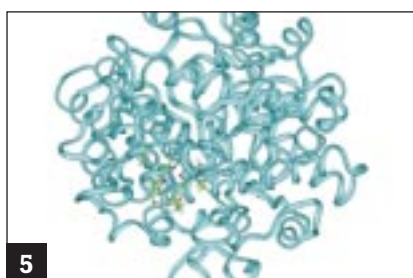
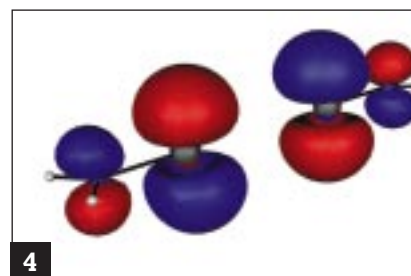
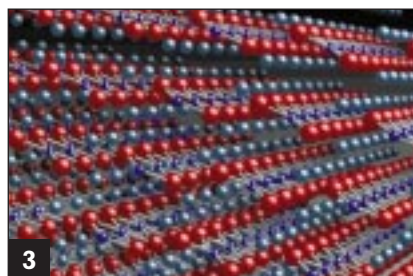
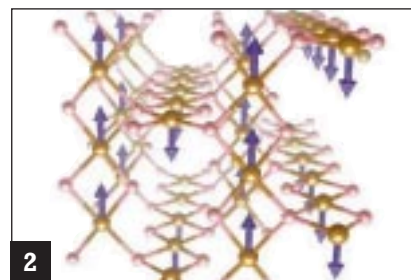
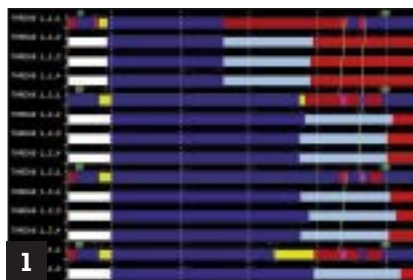
En l'àmbit nacional, s'ha parlat de nosaltres a la revista *Novatec*, de *La Vanguardia*, *PCWORLD*, o Televisió de Catalunya. També hem aparegut en el vídeo promocional del 150è aniversari de l'ETSEIB de la UPC, en un reportatge sobre el projecte GAIA elaborat per la Unitat d'Audiovisuals de la UB, i al desembre un equip de La 2 de TVE va enregistrar Francesc Illas, de la UB, a les nostres instal·lacions. El CATNIX ha estat difós al programa *Catalunya Avui* de TVE a Catalunya, a la versió electrònica de l'*AVUI*, i en publicacions electròniques com *Notícies Intercom* o *Vilaweb*. A més, el CESCA ha continuat informant de les novetats en supercomputació i comunicacions a través de la seva revista mensual, TERAFLOR. ■



La primera edició de la TSIUC va tenir lloc el passat 18 d'octubre.

# Els 10 projectes de més consum al CESCA-CEPBA

1. Simulació d'arquitectures i *benchmarks*.  
Mateo Valero (UPC, 8%)
2. Estructura electrònica de molècules i sòlids inorgànics.  
Santiago Álvarez (UB, 7%)
3. Predicció de propietats electròniques en catalisi heterogènia i ciència de materials a partir de models *ab initio*.  
Francesc Illas (UB, 6%)
4. Enginyeria de cristalls moleculars d'interès tecnològic.  
Juan José Novoa (UB, 5%)
5. Disseny de molècules bioactives.  
Juan Jesús Pérez (UPC, 5%)
6. Simulació atòmica dels processos de difusió i interacció de defectes en metalls i aliatges.  
Anna Serra (UPC, 5%)
7. Estructura i reactivitat de complexos metàl·lics. Aplicacions en síntesi orgànica i en química ambiental.  
Antoni Oliva (UAB, 5%)
8. Simulació *ab initio* de les propietats estructurals i electròniques de nous materials amb aplicacions tecnològiques: nanotubs, nanoestructures i molècules biològiques.  
Ángel Rubio (UVA, 4%)
9. Reconeixement molecular.  
Modesto Orozco (UB, 4%)
10. Modelització molecular de sistemes amb metalls de transició.  
Agustí Lledós (UAB, 3%)



Edita

**CESCA**

Gran Capità, 2-4  
08034 Barcelona  
Tel. 93 205 6464  
Fax: 93 205 6979  
<http://www.cesca.es>  
[teraflop@cesca.es](mailto:teraflop@cesca.es)

PATROCINA



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

Maria Isabel Gandia

**REDACCIÓ**

Teresa Via

**DISSENY I PRODUCCIÓ**

Subirà & Associats