

TERAFLOP

CESCA 1991
2001
anys

REVISTA DEL CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA

Núm. 63 • Març 2002



El 2001 ha estat l'any del desè aniversari del Consorci Centre de Supercomputació de Catalunya, una data adient per fer un balanç del que s'ha aconseguit en aquesta dècada i com ha d'evolucionar el Centre en els propers anys.

La valoració que es va fer pública el passat 30 d'octubre va ésser satisfactòria en cadascuna de les tres àrees d'activitat del CESCA: la supercomputació, les comunicacions i la promoció. Deu anys després de la seva fundació, el Consorci s'ha consolidat i està treballant a 'ple rendiment'.

El Govern de la Generalitat de Catalunya així ho ha considerat, atorgant-nos el passat 19 de febrer la Placa Narcís Monturiol en reconeixement de la feina feta al llarg d'aquesta dècada al servei de la universitat i la recerca que ha contribuït al progrés científic i tecnològic de Catalunya. Sens cap dubte, aquest honor ens enfortirà i ens farà créixer en els nostres tres eixos d'activitat.

De fet, en els últims temps, la supercomputació ha deixat de ser d'ús exclusiu per al càlcul científic i ha abastat un ventall més ampli, com és el suport a la gestió en general. Així, el creixement d'aquest eix anirà en ambdós sentits: d'una banda, continuar la renovació tecnològica del nostre



equipament per a ús científic i la incorporació de la tecnologia *grid* per facilitar la cooperació amb altres centres de supercomputació i, de l'altra, l'impuls del desenvolupament de continguts multimèdia tant educatius com científics.

L'Anella Científica, fins ara orientada en exclusiva a un entorn R+D, incorporarà la "I" d'innovació tecnològica de manera que esdevingui una plataforma per tal que les empreses puguin experimentar en serveis i aplicacions en banda ampla en un entorn precomercial. Per aconseguir-ho, també es renovarà l'equipament del CATNIX amb tecnologia gigabit. A més, l'increment de velocitat fet al 2001, permetrà engegar dos nous serveis addicionals enguany: veu per Internet a l'Anella i videoconferència.

En un món cada cop més obert i més globalitzat, la Universitat ha d'ésser capdavantera en la utilització generalitzada de les noves tecnologies d'informació i comuni-

cacions i, per això, es continuarà impulsant els acords consorciats de cooperació tecnològica amb els proveïdors líders en el sector. En particular, es preveu complementar les ofertes actuals d'ADSL i tarifa plana per a l'accés remot amb cable, i continuar el desplegament de xarxes sense fils i la implementació de la certificació digital. També es treballarà en l'elaboració d'indicadors de qualitat per als serveis informàtics de les universitats i per a operadors i proveïdors d'Internet connectats al CATNIX.

Lluny de seguir camins paral·lels, els tres eixos d'actuació del Centre han de convergir en una cruïlla: l'impuls de la recerca i de la Societat de la Informació a Catalunya.

Rafael Español i Navarro

President del CESCA

El Centre ha ampliat enguany la seva capacitat disponible i ha millorat les seves instal·lacions. S'ha adquirit maquinari de computació d'altres prestacions, que ha duplicat el rendiment punta de què disposen els usuaris. S'ha quadruplicat la velocitat del troncal de l'Anella Científica, cosa que facilitarà el desenvolupament d'aplicacions en banda ampla i permetrà que les institucions connectades puguin augmentar la seva velocitat sense problemes de congestió. S'han instal·lat també un sistema d'alimentació ininterrompuda i un grup electrogen, que proporcionen fiabilitat i auto-

nomia a tot l'equipament, tant de supercomputació com de comunicacions. A més, s'han promogut els acords de cooperació tecnològica per facilitar l'adquisició de programari i impulsar l'ús de la tecnologia sense fils i els portàtils a les universitats.

El CESCA disposa ara d'una potència de càlcul total de 134,16 Gflop/s, quasi el doble que l'any 2000. Gràcies al patrocini del Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació (DURSI) i del Ministerio de Ciencia y Tecnología, s'han adquirit dues màquines Compaq, un AlphaServer HPC320 i un sistema beowulf, res-

pectivament. L'HPC320 disposa de vuit nodes ES40, cadascun amb quatre processadors Alpha 21264B a 833 MHz (EV68) i amb 8 MB de memòria cau de segon nivell, 20 GB de memòria principal, 1.128 GB en disc i un rendiment punta de 53,31 Gflop/s. El sistema beowulf té vuit nodes DS10, cadascun amb un processador Alpha 21264A a 600 MHz (EV67) i amb 2 MB de memòria cau de segon nivell, 4 GB de memòria principal, 291 GB en disc (36,4 GB a cada node) i un rendiment punta de 9,60 Gflop/s.

Investigacions sobre l'estructura electrònica de les molècules, cristalls

LA PORTADA

- 1 Acord de portàtils amb Toshiba (25/5)
- 2 Lliurament de guardons en el desè aniversari (30/10)
- 3 Acord de portàtils amb Compaq (11/12)
- 4 Colt s'incorpora al CATNIX (9/5)
- 5 Inauguració dels nous supercomputadors (20/7)
- 6 La taula rodona de la JOCS, a la UB (30/10)
- 7 El grup electrogen proporciona autonomia i fiabilitat (20/8)
- 8 El nou maquinari Compaq, l'HPC320 i el beowulf (20/7)
- 9 10 anys treballant per al CESCA (6/4)
- 10 Cloenda de la TAC, celebrada a la URL (6/6)
- 11 Obertura de la TSIUC, enguany a la UdG (21/11)

FOTOS: JOSEPH PARETO



	1998	1999	2000	2001
Supercomputació				
CESCA-CEPBA				
Rendiment punta (Gflop/s)	87,83	120,91	141,81	206,32
Hores computacionals	605.117	840.830	953.503	1.114.158
Nombre d'usuaris	592	830	860	849
Nombre de projectes	121	159	238	222
Visites programes de mobilitat	39	50	41	36
CESCA				
Rendiment punta (Gflop/s)	43,12	70,00	70,00	134,16
Hores computacionals	282.584	393.188	432.260	528.081
Treballs en espera < 1 hora	49%	53%	64%	69%
Treballs en espera > 24 hores	19%	19%	10%	8%
Consultes	1.072	607	699	633
Comunicacions				
Tràfic Anella Científica (TB)	>8,86	24,01	>58,08	155,68
Tràfic enviat a RedIRIS (TB)	4,26	>9,50	32,99	113,45
Tràfic rebut de RedIRIS (TB)	11,45	>23,10	57,90	119,24
Articles llegits (x10⁶)	2,91	9,49	13,27	8,23
Peticions al proxy-cache (x10⁶)	12,84	248,62	710,25	672,67
Peticions a l'ftp-mirror (x10³)	3,00	41,65	20,64	196,79
Servidors allotjats + hostatjats	3+8	5+12	6+15	6+19
Pàgines llegides al web (x10³)	128,81	197,86	379,60	385,97
Consultes	673	776	1.112	755
Promoció				
Conferències	40	34	32	29
Cursos Aula (assistents)	11 (179)	4 (61)	8 (185)	2 (12)
Jornades i seminaris (assistents)	6 (487)	6 (224)	6 (353)	4 (231)
Visites al Centre (visitants)	10 (168)	9 (162)	16 (277)	17 (301)
TERAFLOP	9	9	9	6



La plantilla del CESCA del 2001.

moleculares d'interès tecnològic, reconeixement molecular i reaccions implicades en química atmosfèrica i en processos de combustió han usat milers d'hores computacionals per tal de trobar nous materials, avançar en el tractament de malalties o reduir l'impacte de l'home en el medi ambient. En total, 98 projectes acadèmics han consumit més de mig milió d'hores en el maquinari del Centre. També s'ha facilitat la gestió universitària amb projectes com la base de dades de tesis doctorals TDC@t.

El programa de mobilitat *Improving the Human Research Potential and Socio-Economic Knowledge Base* (IHP) ha permès a 35 investigadors realitzar un total de 36 estades a 20 grups de recerca de Catalunya, d'una durada mitjana de 6,51 setmanes. Des que el CESCA i el CEPBA van ser seleccionats com a Gran Instal·lació de Supercomputació del projecte *Human Capital and Mobility* l'any 1993, 251 participants han realitzat un total de 327 estades convidats per 63 investigadors locals.

L'any 2001 s'ha aconseguit que totes les universitats connectades a l'Anella Científica disposin d'Internet amb banda ampla, amb l'augment a 34 Mbps de la Universitat Ramon Llull, la Universitat de Vic i el Campus de Sabadell de la Universitat Autònoma de Barcelona. Pel que fa al nombre d'institucions a l'Anella, la UAB ha augmentat en tres els seus punts d'accés i s'ha connectat el Centre Unesco de Catalunya. A més, set institucions han ampliat el seu cabal.

El troncal de l'Anella Científica ha quadruplicat la seva velocitat, que ha passat de 622 Mbps a 2,5 Gbps. Aquesta millora permetrà, d'una banda, seguir augmentant les velocitats de connexió de les institucions sense tenir problemes de congestió a la xarxa i,

de l'altra, el desenvolupament d'aplicacions de banda ampla i de nous serveis. Pel que fa al tràfic de l'Anella, aquest s'ha quasi triplicat respecte l'any anterior.

Les institucions connectades han continuat disposant de diversos serveis addicionals, com són el *proxy-cache*, l'*ftp-mirror* i les *news*, entre d'altres. El servidor de *proxy-cache* ha augmentat tant en nombre de fills com de germans. Pel que fa al nombre de peticions rebudes, aquestes van disminuir durant uns mesos per l'augment de cabal de la línia internacional de RedIRIS, tot i que en tornar a estar col·lapsada passat l'estiu, van créixer de nou les peticions al servidor *proxy*. Els serveis d'accés remot i d'accés directe s'han mantingut en nombre d'usuaris, mentre que els articles llegits per institució han disminuït pels canvis d'hàbits a la xarxa.

El tràfic transmès al Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX) s'ha quintuplicat, fruit de la incorporació de noves institucions (Colt Telecom, Easynet i Tiscali-Nacamar) i de l'augment de cabal d'altres ja connectades (al-pi telecomunicacions, BT Telecomunicacions, Jazztel, Menta i Retevisión). Enguany s'ha aprofitat la seva infraestructura per engegar un pilot d'experimentació de *multicast*, un sistema d'enviament eficient ja que transmet a través de la xarxa una única còpia de la informació, conservant l'amplada de banda i els recursos de la xarxa tant en el punt d'enviament com en el de recepció. A més, el CATNIX s'ha integrat en l'associació de punts neutres europeus EuroIX, essent-ne el CESCA soci fundador.

Pel que fa a la promoció, s'han impulsat els acords de cooperació tecnològica amb proveïdors líders en el seu sector per tal de facilitar l'adquisició, tant de programari com de maqui-

nari, entre la comunitat universitària. S'ha signat el Programa Select, amb Microsoft, que permet a les institucions de l'Anella l'adquisició de llicències aollint-se a un descompte per volum; l'acord de portàtils, amb Toshiba i Compaq, per promoure l'ús de la tecnologia sense fils i els portàtils a les universitats i, per als usuaris del Servei d'Accés Remot, s'ha incorporat la tarifa plana, a través de Retevisión, i l'ADSL, amb al-pi telecomunicacions.

A més, el Grup de Treball de Protecció de Dades, creat arran de la TSIUC 2000, ha impulsat la convocatòria d'un concurs públic per implantar la Llei Orgànica de Protecció de Dades de Caràcter Personal a les universitats. Així, set de les universitats consorciades i el CESCA han unit esforços per prendre les mesures de seguretat necessàries segons aquesta llei.

S'ha organitzat la segona edició de la Trobada dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya (TSIUC), que ha tractat els indicadors de qualitat. S'ha dut a terme la Trobada de l'Anella Científica, que ha comptat amb cinc ponències sobre telecomunicacions, aplicatius i societat de la informació, i amb una taula rodona sobre portals educatius. A més, s'ha organitzat la Jornada Catalana de Supercomputació, un fòrum biennal que enguany s'ha fet coincidir amb la data del desè aniversari del Centre i que ha tractat la proteòmica, l'astronomia i les polítiques europees de supercomputació.

La celebració d'aquests 10 anys es va dur a terme en una recepció al Palau de la Generalitat i va ser presidida pel conseller del DURSI, Andreu Mas-Colell. Durant aquest acte, es van guardar diferents personalitats que han contribuït al progrés i a la consolidació del Centre. A més, el CESCA també ha lliurat enguany un guardó a tres membres de la plantilla i a un col·laborador extern que han treballat per al Centre durant tota aquesta dècada.

Ha continuat la tasca de formació amb l'Aula de Noves Tecnologies, a més de conferències i seminaris en col·laboració amb d'altres institucions. S'ha continuat també informant de les novetats per mitjà del TERAFLOP, i promocionant els serveis a través dels mitjans de comunicació. ■

1 El **Consell de Govern** s'ha reunit el 23 de març per aprovar l'adaptació dels Estatuts al nou organigrama del DURSI, l'ampliació de funcions de la Comissió Permanent, la liquidació del Pressupost del 2000 i el Pressupost per al 2001. Posteriorment s'han produït els canvis següents: Joan Tugores ha assumit la representació de la UB en substitució d'Antoni Caparrós, i M. Rosa Virós ha substituït Enric Argullol en la representació de la UPF. A més, fruit de la modificació dels estatuts (publicada al DOGC núm. 3.513, de data 14 de novembre de 2001), es va incorporar al Consell de Govern Carles Martín, secretari per a la Societat de la Informació.

2 Enguany les quatre vocalies rotatòries a la **Comissió Permanent** han correspost a Montserrat Llinés, de la UAB; Sebastià Xambó, de la UPC; Daniel Serra (Francesc Pedró fins al 18-10), de la UPF; i Francesc Vallverdú, de la UOC.

3 El conseller del DURSI, Andreu Mas-Colell, ha delegat la presidència de la **Comissió Executiva del CATNIX** en el director general d'Indústria de la Generalitat de Catalunya, Antoni Gurguí. Hi ha hagut les següents incorporacions: Sven Engelhardt, de Tiscali-Nacamar; Ginés Alarcón, de Colt Telecom; i Mikel Lekaroz, d'Easynet. Andreu Veà ha assumit la representació de Retevisión, i Claudio Morán, la de BT.

Pel que fa als òrgans assessors, en el **Grup d'Usuaris del Servei de Cerca de Farmacòfors** (GUSCF) s'han incorporat com a vocals Antonio Romero, del CSIC; Robert Soliva, de Laboratoris J. Uriach; Àngel Messeguer, del CSIC, i Josep Font, de la UAB. A la **Comissió dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya** (CSIUC), Jaume Arona i Corominas ha substituït Joan Parellada en la representació de la UB. La **Comissió Tècnica del CATNIX** ha tingut tres noves incorporacions: Frank Rey, de Tiscali-Nacamar; Javier Benítez, de Colt Telecom; i Àngel Jaraño, d'Easynet.

A més, la Comissió Permanent ha aprovat la creació de dos nous grups de treball: el Grup de Treball per a l'Avaluació d'Adquisicions en Comunicacions (GTAAC), per preparar el concurs de renovació de l'Anella Científica de l'any 2003, i el Grup de Treball per a l'Avaluació d'Adquisicions en Supercomputació (GTAAS), el qual ha avaluat i seleccionat les ofertes del concurs de renovació del maquinari. ■



JORDI PARETO



JORDI PARETO



JORDI PARETO

L'any 2001 el CESCA ha quasi doblat la seva potència de càlcul, gràcies al suport del DURSI i del Ministerio de Ciencia y Tecnología. El rendiment punta total ha passat de 70 Gflop/s a 134,16 Gflop/s, amb la instal·lació del nou **maquinari** adquirit a Compaq, un AlphaServer HPC320 i un sistema beowulf. Aquests supercomputadors van ser inaugurats pels directors generals d'Universitats i Recerca, Antoni Giró i David Serrat, el 20 de juliol.

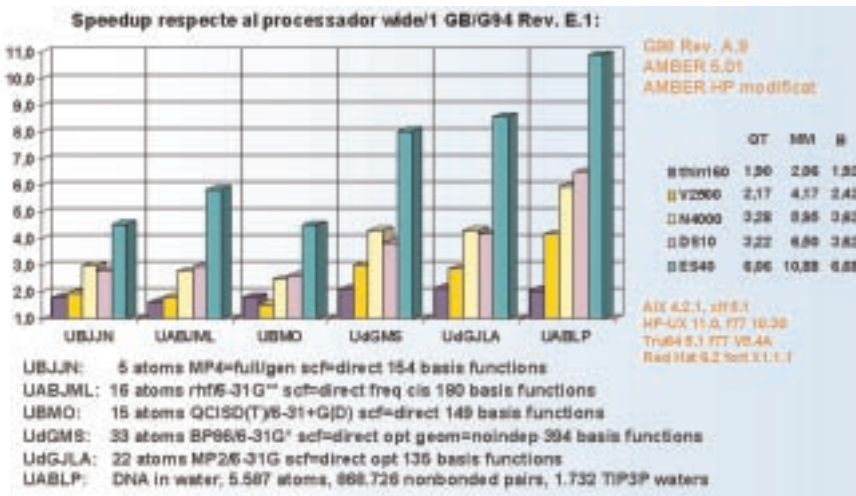
L'HPC320, batejat com a *guille-ries*, disposa de 32 processadors Alpha 21264B EV68 a 833 MHz, 20 GB de memòria principal, 1.128 GB en disc i té un rendiment punta de 53,31 Gflop/s. Els 32 processadors estan distribuïts en 8 nodes ES40 interconnectats amb una xarxa Memory Channel II de 100 MB/s. La configuració d'aquesta màquina proporciona el màxim rendiment per a les aplicacions de química teòrica i modelització biomolecular que caracteritzen majoritàriament la càrrega dels usuaris del Centre, i que no paral·lelitzem significativament més enllà dels quatre processadors.

El sistema beowulf, que ha rebut el nom de *montnegre*, disposa de vuit processadors Alpha 21264A EV67 de 600 MHz, 2 MB de memòria cau de segon nivell, 4 GB de memòria principal i 291 GB en disc, i té un rendiment punta de 9,60 Gflop/s. Els vuit nodes DS10 estan connectats per dues xarxes, Fast Ethernet i Myrinet 2000. Aquesta màquina ha estat adquirida per desenvolupar mètodes de computació d'altres prestacions distribuïts per al sector financer, entre d'altres aplicacions.

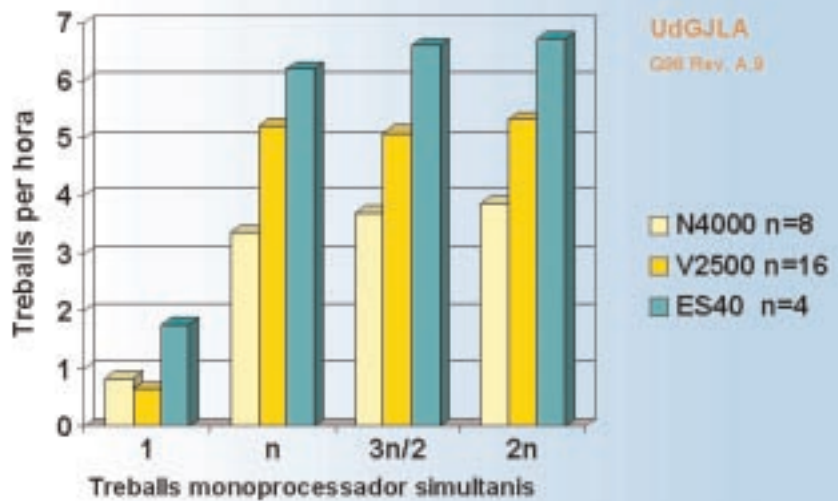
Els resultats obtinguts per als processadors EV68 en els *benchmarks* de química teòrica i modelització biomolecular han estat de 6,06 i 10,88, respectivament, amb una mitjana geomètrica de 6,68, la qual cosa multiplica per 1,8, 2,8 i 3,5 el rendiment de l'N4000, amb tecnologia PARISC 8500 de l'any 1999, del V2500, amb el mateix processador, i de l'SP2, amb tecnologia Power2 thin160 de l'any 1998, respectivament. El rendiment per als processadors EV67 és en mitjana equivalent als de l'N4000.

Pel que fa als nodes, se n'ha ava-

El rendiment per processador



El rendiment per node



luat el rendiment amb una càrrega de treball d' n , $3n/2$ i $2n$ del *benchmark* UdGJLA, on n és el nombre de processadors per node. A partir dels resultats obtinguts, s'observa que el nombre de treballs per node ES40 (amb 4 processadors) és sensiblement superior al V2500 (amb 16 processadors) i quasi el doble a l'N4000 (amb 8 processadors). Aquest fet és explicable per la degradació que l'arquitectura de cada node introdueix en executar els treballs monoprocessador simultàniament, la qual cosa correspon a l'entorn real de treball. Així doncs, aquests resultats corroboren l'aposta feta en adquirir nodes amb un nombre menor de processadors que s'ajusten millor a la càrrega característica majo-

ritària dels usuaris del Centre.

També s'ha actualitzat l'SGI Octane que allotja el Servei de Cerca de Farmacòfors (SCF) i la base de dades documental del Centre. Aquesta actualització comprèn la substitució del processador R10000, de 175 MHz i 1 MB de memòria cau de segon nivell, per dos processadors R12000, de 400 MHz i 2 MB; l'ampliació de la memòria en 512 MB, passant a tenir 704 MB de memòria principal, i la instal·lació d'un nou disc de 36 GB, passant a tenir un total de 49 GB d'espai en disc.

A l'IBM SP2, s'han substituït tres discs d'IBM de 4,5 GB per dos discs Seagate de tecnologia UltraSCSI. Els nous discs tenen 18,4 GB de capacitat, 7.200 RPM i un temps mitjà de cerca



L'HPC320 va arribar el 18 de juny i va estar operatiu en fase de proves l'1 d'agost.



El nou SAI proporciona més fiabilitat i autonomia al maquinari, tant de supercomputació com de comunicacions.

de 5,8 ms. Amb aquest canvi, per al conjunt dels nostres *benchmarks*, s'ha obtingut una millora del rendiment en el temps real d'execució que varia des d'un 12% fins a un 30% per als *benchmarks* que utilitzen significativament l'accés a disc.

A més d'adquirir nou maquinari de càlcul, s'ha instal·lat un nou sistema d'alimentació ininterrompuda (SAI) i un grup electrogen que proporcionaran més fiabilitat i autonomia tant als supercomputadors com a tot l'equipament de comunicacions. El SAI és un sistema paral·lel redundat PowerWare, és a dir, està constituït per dos equips que treballen de manera simultània i autònoma, però que estan enllaçats per detectar possibles fallades de l'altre equip i assumir aleshores les seves tasques. El SAI s'encarrega habitualment de controlar les pujades i baixades de tensió per tal que aquestes no afectin el maquinari. En cas de produir-se un tall de corrent,

les bateries del SAI proporcionen l'energia necessària a les màquines, mentre arrenca el grup electrogen. Aquest grup, model Agalsa DLA.165, disposa d'una autonomia de 72 hores, la qual cosa assegurarà que les màquines i els usuaris no pateixin les conseqüències d'un possible tall del corrent elèctric.

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 majoritàriament 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*. Pel que fa a les aplicacions, n'hi ha 31 de disponibles amb la incorporació de dues noves, Polyrate i Gaussrate.

S'ha millorat el rendiment de les versions d'Amber a l'N4000 i al V2500 després de la revisió sol·licitada a HP. S'han modificat les versions 5.01 i 6.0 d'aquest programa, cosa que s'ha traduït en un increment de rendiment per al *benchmark* UABLP del 38%, al V2500, i del 43%, a l'N4000. A més, a l'N4000 s'ha instal·lat la nova versió 6.0 de la base de dades Objectivity/DB per C++ i Java. Aquesta versió coexisteix amb les dues versions anteriors: la 5.1, instal·lada a l'IBM SP2, i la 5.2.1, a l'HP V2500.

S'ha instal·lat a tots els supercomputadors, excepte a l'IBM SP2, la nova revisió A.11 del programa de química quàntica Gaussian98. A l'SP2 no ha estat possible dur a terme aquesta actualització per incompatibilitats entre la nova revisió del programa i el sistema operatiu d'aquesta màquina (AIX 4.2).

A l'SP2, s'ha instal·lat el programa de càlcul mecanoquàntic Polyrate en la versió 8.5.1, un programa per a l'anàlisi de reactius, productes i estats de transició en reaccions químiques de sistemes poliatòmics (i també d'àtoms i diàtoms com a casos especials). També s'hi ha instal·lat el Gaussrate en la versió 8.4, un conjunt de subrutines i *scripts* que fan d'interfície entre els programes Polyrate i Gaussian.

Després de la seva renovació

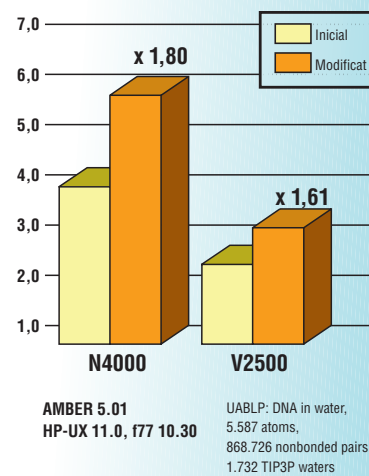
tecnològica, s'han traslladat a l'SGI Octane les aplicacions Unichem (DGauss, CADPAC i MNDO97) i Cerius2-Castep que estaven instal·lades a l'SP2. Per aquest motiu, s'hi ha instal·lat el gestor de cues de *batch Load Sharing Facility* (LSF), com a les HP i a les Compaq. També s'hi ha instal·lat la nova versió 4.2 MatSci del programa Cerius2-Castep, així com la nova versió 7.3 dels compiladors de Fortran 77, Fortran 90, C i C++.

També a l'SGI Octane, s'ha actualitzat a la versió 4.6 el programa de cerca de farmacòfors Catalyst, que té la capacitat de definir i cercar patrons en bases de dades d'estructures químiques tridimensionals de compostos d'interès biològic, i s'hi ha ampliat el nombre de mòduls disponibles d'aquest programa. Els mòduls afegits són els que incorporen les funcionalitats de generació d'hipòtesis (HypoGen i HipHop). A més, s'ha actualitzat a la nova versió les bases de dades d'estructures d'interès biològic Derwent, Maybridge, NCI i BioByteMasterFile.

A més de tot el programari comú a les màquines del Centre, les dues Compaq disposen del programa de química quàntica Gamess i de la llibreria numèrica CXML. A l'HPC320 s'hi ha instal·lat també el Compaq Java™ 2 SDK *Standard Edition* (J2SDK), versió 1.3.0-1 per Compaq® Tru64™ UNIX®, així com la versió 6.1 de la base de dades Objectivity/DB per C++ i Java. ■

L'Amber a les HP

Speedup respecte al processador wide/1 GB:



El maquinari de supercomputació ha permès als investigadors realitzar càlculs de gran envergadura que han fet avançar la seva recerca, en àrees com la química teòrica, la modelització biomolecular, la física, els mètodes numèrics i les ciències de la Terra. Investigacions sobre l'estructura electrònica de les molècules, cristalls moleculars d'interès tecnològic, reconeixement molecular, i reaccions implicades en química atmosfèrica i en processos de combustió han usat milers d'hores computacionals per tal de trobar nous materials, avançar en el tractament de malalties o reduir l'impacte de l'home en el medi ambient. També s'ha facilitat la gestió universitària amb

d'una hora d'espera, mentre que un 8% han hagut d'esperar més de 24 hores, la qual cosa representa una millora respecte l'any anterior, on els percentatges eren 64% i 10%, respectivament.

Amb l'arribada del Compaq s'ha reduït el **temps d'espera** a les HP, mentre que a l'IBM, després del traspàs d'usuaris de l'any passat cap a d'altres màquines, es manté. De mitjana, el temps mitjà d'espera ha passat de 13,37 hores al 2000 a 12,97 al 2001. A l'HPC320, instal·lat al juny, el temps mitjà d'espera és de 3,26 hores. A l'N4000 i al V2500, el temps mitjà d'espera ha passat de 19,22 hores a 17,06, mentre que a l'SP2 s'ha mantingut en 6,32. De mitjana, el **temps d'execució**

nari del CEPBA. Els projectes de la UPC i d'altres institucions de l'Estat, administrats pel CEPBA, han usat 40.744 HC en el nostre maquinari, un 8% del total de les 528.083 HC que s'han executat.

L'**entorn de treball** ha experimentat diverses millores: d'una banda, es pot accedir als servidors de càlcul utilitzant la interfície ATM a 155 Mbps i, de l'altra, s'han afegit a l'IBM SP2 dos nodes més amb 12 GB de disc temporal per a treballs que ho requereixin a través de la cua *xdisk*. Així doncs, hi ha quatre nodes disponibles: un *wide* amb discs externs i tres *thin160*, un amb discs SSA i dos amb nous discs interns de Seagate. També s'han ampliat totes les cues de 100 a 200 hores de CPU



Els directors generals d'Universitats i Recerca, Antoni Giró i David Serrat, van inaugurar els nous supercomputadors el 20 de juliol.



Aquest grup d'investigadors de la UB i la UAB estan investigant nous tractaments de l'Alzheimer.

projectes com la base de dades de tesis doctorals TDC@t i s'ha millorat l'accés a la informació matemàtica amb l'actualització de la rèplica de la base de dades Zentralblatt MATH.

Enguany, diferents usuaris del Centre han vist reconeguda la seva tasca. Han rebut la distinció del DURSI, Francesc Illas (UB), Miquel Solà (UdG), Mariona Sodupe (UAB) i Joan X. Comella (UdL); han estat premiats Juan José Novoa (UB), Modesto Orozco (UB) i Lluís Torner (UPC), entre d'altres, i ha estat homenajiat Juan Bertrán (UAB), un dels pares de la química teòrica a Catalunya i també un dels primers usuaris del CESCO, que enguany s'ha jubilat.

Les **hores computacionals** (HC) usades al maquinari del CESCO han estat 528.081, un 22% més sobre les 432.260 del 2000. El nombre de treballs executats ha disminuït un 13%, passant de 30.294 a 26.456. D'aquests treballs, un 69% s'han iniciat abans

ha augmentat respecte el 2000, passant de 14,15 a 17,29 hores. Cal tenir en compte que des de mitjan del 2001, d'una banda, s'ha incorporat el nou maquinari Compaq i, d'altra banda, s'ha augmentat a 200 hores el límit de temps d'execució de totes les cues restringides a 100 hores.

Durant el 2001 s'han rebut 633 **consultes**, de les quals un 36% han estat resoltes al mateix moment que s'han fet. Els usuaris han preguntat especialment sobre els codis (28%), les aplicacions (22%), els gestors de cues (18%), els sistemes operatius (11%), les xarxes (9%) i informació general (6%).

Els 70 projectes acadèmics que administra el CESCO han usat 763.461 HC al maquinari disponible al CESCO-CEPBA, un 28% més que l'any 2000 (595.714). Les institucions del Consorci, excepte la UPC, han usat un total de 669.395 HC, de les quals un 38% (253.666 HC) s'han executat al maqui-

per tal d'assolir els requeriments actuals dels treballs dels usuaris i s'han prioritzat les execucions dels visitants del programa de mobilitat. S'han incorporat quatre noves estadístiques al web, tres de les quals mostren informació en temps real del consum de CPU, el nombre de treballs *batch* (en execució i en espera) i el nombre d'usuaris connectats en els servidors de càlcul, i l'altra gràfica mostra l'evolució mensual del nombre de tesis introduïdes per cada universitat a la base de dades de tesis doctorals TDC@t.

El nombre de grups de recerca usuaris del **Servei de Cerca de Farmacòfors** (SCF) ha passat de 6 a 9. Això ha permès ampliar-lo amb la incorporació de dos nous mòduls, HypoGen i HipHop, i també actualitzar el programa Catalyst i diverses bases de dades.

El **Servei d'Emmagatzematge de Dades** (SED), posat en marxa a la fi de 1999, ha ampliat la seva capacitat en

40 cintes més, cosa que augmenta la disponibilitat del nombre de dades en 800 GB. El robot disposa ara de 140 cintes, que es tradueixen en 2,73 TB de dades. L'ocupació d'aquest servei ha arribat al 74%, ja que s'han utilitzat 104 de les 140 cintes disponibles. S'han emmagatzemat 2,75 TB (part de les dades estan comprimides), un 86% per les còpies de seguretat pròpies i un 14% per arxius permanent de dades d'usuaris.

Dins l'**Accés a Gestors d'Informació per Internet (AGI²)**, la base de dades del TDC@t comptava a la fi del 2001 amb 290 tesis doctorals introduïdes de sis de les vuit universitats que hi participen i que encara en fan un ús irregular que no correspon al nombre

JORDI PARETO

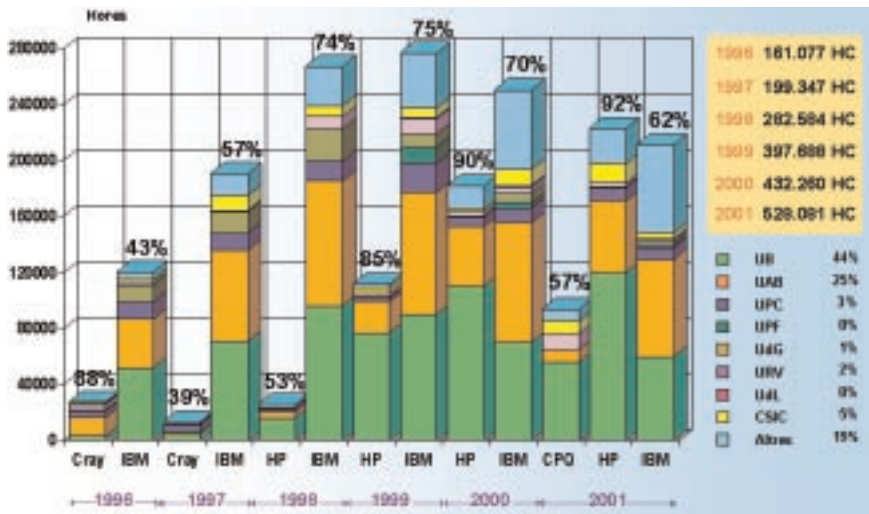


Juan Bertrán, un dels pares de la química teòrica a Catalunya.

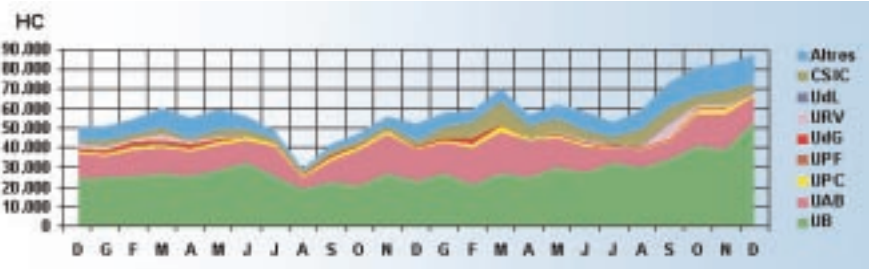
de tesis publicades per cada institució. S'ha continuat la gestió de la versió electrònica de la publicació *Contributions to Science* (www.cat-science.com) i se n'ha millorat el web amb noves aplicacions, com són una llista de discussió (Agora) i diverses estadístiques. També s'ha actualitzat a la nova versió, Summer 2001, la rèplica de la base de dades matemàtica Zentralblatt MATH, que va ser posada en marxa l'any 2000.

Durant el 2001 ha continuat la tasca en el projecte GAIA, de l'Agència Espacial Europea, en el qual s'està dissenyant el prototip de la base de dades que emmagatzemarà la informació que es rebrà des d'un satèl·lit i en què també participen investigadors de l'IEEC i la UB, així com l'empresa GMV. Ha continuat també el projecte PROFIT, liderat per l'empresa Gridsystem, que desenvolupa mètodes de computació d'altres prestacions integrats en un sistema basat en components per al sector financer. ■

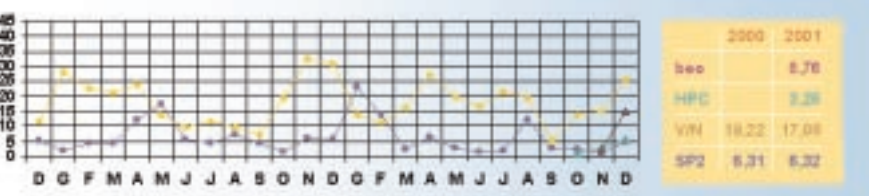
El consum per institució i màquina



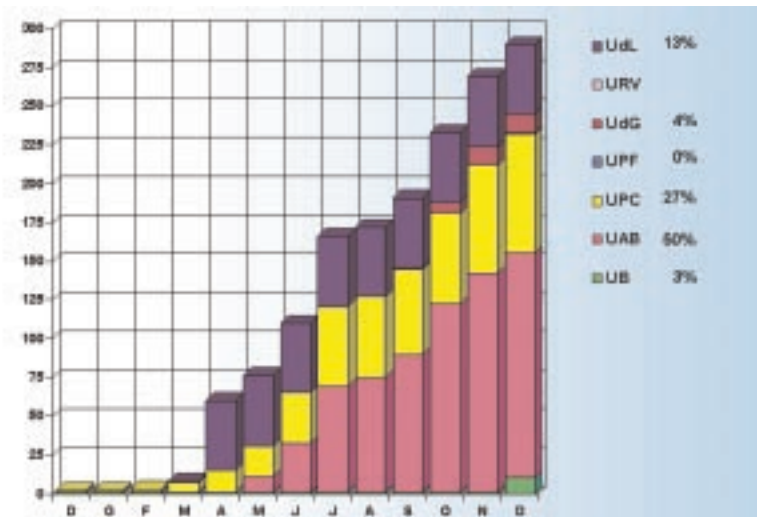
El consum mensual per institució



El temps mitjà d'espera per màquina



Tesis doctorals en xarxa



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 206,32 Gflop/s.

S'han usat 1.114.158 HC, un 53% al CEPBA i un 47% al CESCA, un 17% més sobre les 953.503 del 2000. El nombre d'usuaris ha passat de 860 a 849 i el de projectes, de 238 a 222. La UB ha usat un 34% de les hores, seguida de la UPC amb un 24% i la UAB amb un 15%. El grup Altres, que engloba a diferents universitats de fora de Catalunya, ha consumit un 17% de les hores usades, i en destaca especialment el grup d'investigació de José Manuel Saà, de la UIB, que ha usat un 6% de les hores.

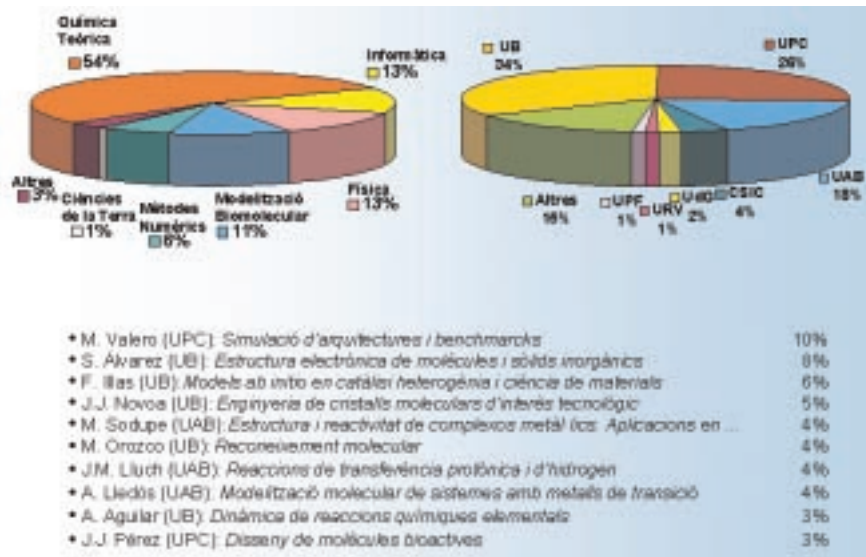
De les hores computacionals usades en el període 1996-2001, un 54% ha estat en l'àrea de química teòrica; un 13% en la de física; un 13% en la d'informàtica; un 11% en la de modelització biomolecular; un 6% en la de mètodes numèrics en enginyeria; un 1% en la de ciències de la Terra; i un 3% en altres àrees. Tres universitats han usat tres quartes parts dels recursos: UB (34%), UPC (26%) i UAB (18%).



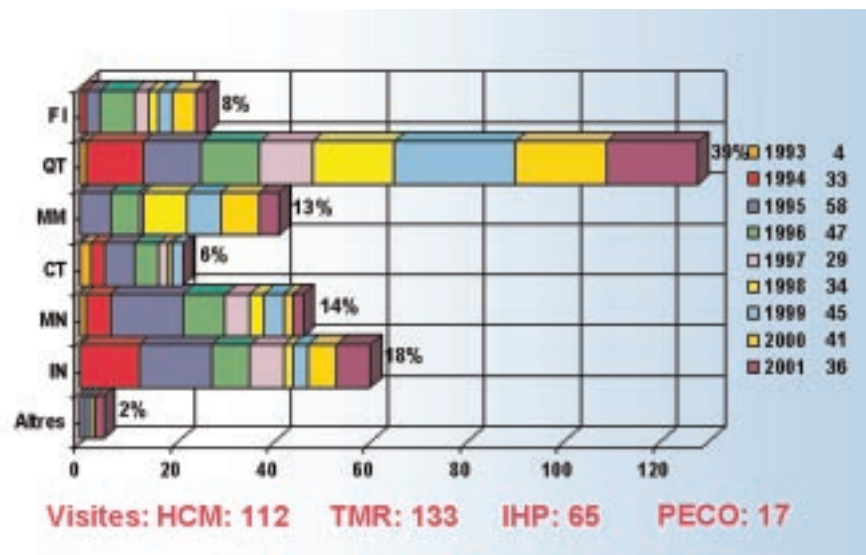
Improving Human Potential

El programa de mobilitat d'investigadors *Improving Human Potential* (IHP) ha permès a 35 participants realitzar 36 estades a 20 grups d'investigació de Catalunya, d'una durada mitjana de 6,51 setmanes. El CESCA i el CEPBA han participat en programes de mobilitat d'investigadors des del 1993, quan van ser seleccionats com a Gran Instal·lació de Supercomputació del projecte *Human and Capital Mobility*. D'aleshores ençà, 251 participants han realitzat un total de 327 estades d'una durada mitjana de 8,59 setmanes convidats per 63 investigadors locals.

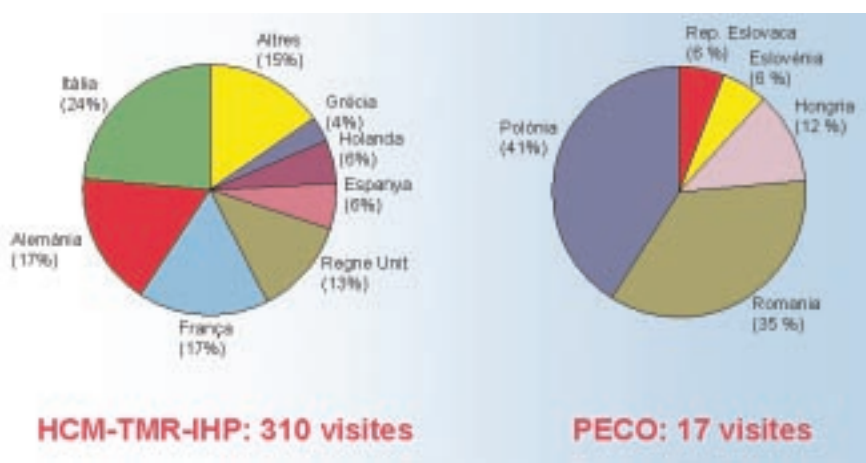
El consum en els anys 1996-2001



Programes de mobilitat: visites per àrea de coneixement



Programes de mobilitat: visites per país d'origen



Les comunicacions són avui dia una eina de treball imprescindible per a tota la comunitat científica, tecnològica i acadèmica. A més del paper decisiu que han tingut en l'accessibilitat dels usuaris als recursos de supercomputació del Centre des del principi, actualment juguen un paper clau en l'accés a la informació i en el desenvolupament de nous projectes que necessiten de la banda ampla.

Durant el 2001 ha continuat la gestió de l'**Anella Científica** i dels seus nou serveis addicionals, del Punt Neutre d'Internet de Catalunya (CAT-NIX) i del nus de RedIRIS a Catalunya. A més, ha continuat l'administració de tota la infraestructura bàsica del Centre, com són servidors de correu, llistes de distribució i web, xarxa local, instal·lacions tècniques, etc.

Enguany s'ha aconseguit que totes les universitats connectades a l'Anella Científica disposin d'Internet amb banda ampla, amb l'augment de cabal de la URL, la UVic i el Campus de Sabadell de la UAB. Amb aquestes ampliacions, el nombre d'institucions connectades a 34 Mbps ha passat de 8, al maig de 1998, a 11.

El troncal de l'Anella ha guanyat en velocitat i en redundància. La xarxa troncal SDH (tecnologia òptica per al transport de senyals de comunicació sobre la qual s'implementa l'ATM) ha augmentat la seva velocitat de 622 Mbps a 2,5 Gbps, la qual cosa permetrà seguir millorant les velocitats de connexió de les institucions sense tenir problemes de congestió a la xarxa. Amb aquesta ampliació en la velocitat del troncal, l'Anella es va avançar tecnològicament a la nova xarxa de recerca europea, Géant, que va estar operativa a 2,5 Gbps de velocitat en el seu troncal al novembre. A més, l'Anella Científica ha ampliat la redundància fora de Barcelona. L'arquitectura metropolitana de la xarxa en dos anells, un de principal i un altre de secundari, s'ha estès fins a la UdG, de manera que si hagués un tall en la fibra en un d'aquests anells, existiria un camí alternatiu que permetria la comunicació.

El nombre d'institucions connectades a l'Anella ha passat de 55 a 40. El motiu d'aquesta reducció es troba en la reclassificació feta a l'hora de comp-



JORDI PARETO

El 2 d'agost, Colt telecom va connectar-se al CATNIX a través de fibra òptica.



CHRISTIAN RIBAS

El pas a 2,5 Gbps va suposar la renovació del commutador.

tabilitzar el nombre d'institucions i que engloba, per exemple, els diferents centres i instituts del CSIC o les quatre institucions federades de la URL que es connecten a l'Anella. El 2001 s'hi ha connectat el Centre Unesco de Catalunya (a 384 Kbps) i la UAB ha augmentat en tres els seus punts d'accés: el Campus de Sabadell (a 34 Mbps) i les Unitats Docents de la Facultat de Medicina a l'Hospital Universitari Germans Trias i Pujol i a l'Hospital General Vall d'Hebron (a 2 Mbps). Han millorat la seva connexió altres institucions: Centre de Terminologia (de 256 a 512 Kbps), Institut Cartogràfic de Catalunya (de 128 a 512 Kbps), Institut d'Es-

tadística de Catalunya (de 64 a 512 Kbps), Institut d'Estudis Catalans (de 64 a 512 Kbps), Institut de Recerca Oncològica (de 64 a 128 Kbps) i Institut Municipal de Salut Pública (de 64 a 512 Kbps). També ha millorat la seva connexió el Centre Mediterrani d'Investigacions Marines i Ambientals del CSIC, que ha canviat la seva ubicació i s'ha integrat a la xarxa de comunicacions de la UPF. Pel que fa al tràfic de l'Anella, aquest s'ha multiplicat per 2,7 i ha passat de 58 a 156 TB.

Coincidint amb el desè aniversari del CESCA, s'ha renovat el web institucional per tal d'actualitzar el seu format i fer més accessible la informació des de la pàgina principal. Des del 7 de març, data en què 10 anys enrere es va signar el conveni de creació del Centre, els internautes accedeixen al nou web (www.cesca.es) que, a més dels canvis a la pàgina principal, incorpora noves pàgines d'informació sobre els serveis oferts, així com de les ofertes tecnològiques disponibles per a tota la comunitat universitària.

El CESCA ha realitzat diferents millores en els **serveis addicionals** de l'Anella. La línia directa als EUA, que usen el *proxy-cache* i els serveis d'accés directe i accés remot, ha estat ampliada a 4 Mbps. Anteriorment aquesta línia disposava d'un cabal d'1,5 Mbps. Pel que fa al servidor de **News**, els usuaris poden accedir a dues noves jerarquies que inclouen grups de notícies relacionats amb els programaris Staroffice i VMware.

Al servei de **proxy-cache** ha disminuït lleugerament el nombre de peticions, que han passat dels 710,25 milions del 2000 als 672,67 milions del 2001. El motiu d'aquest decrement es troba en l'ampliació dels accessos internacionals de RedIRIS feta al març, cosa que va millorar el temps de resposta de les peticions realitzades sense usar el *proxy*. De tota manera, després de l'estiu es van tornar a col·lapsar les línies i va augmentar de nou el nombre de peticions a aquest servei. Pel que fa a la família del *proxy* del Centre, aquesta ha continuat creixent tant en fills com en germans. Enguany té 18 germans, cinc més que l'any 2000, amb la incorporació de quatre servidors de RedIRIS i un més d'Euskal

Herriko Unibertsitatea (EHU). Pel que fa als fills, ara en té 25. D'una banda, s'han incorporat un nou servidor de la UPC, la UOC i l'Hospital de Sant Pau, i dos servidors proxy més de la UPF i, d'altra banda, s'ha donat de baixa l'Institut Químic de Sarrià.

Pel que fa al **Servei d'Accés Remot (SAR)**, ha augmentat el nombre d'usuaris que es connecten a l'Anella usant el SAR. Aquest servei ha estat ampliat amb la incorporació d'una tarifa plana en horari reduït, proporcionada per Retevisión, i d'ADSL, per al-pi telecomunicacions. Pel que fa al **Servei d'Accés Directe (SAD)**, s'ha mantingut el nombre d'usuaris. Aquest servei és usat per aquells investigadors que necessiten tenir molt bona connectivitat amb els EUA per a la realització d'un projecte o bé que volen tenir un codi en aquesta màquina per poder accedir a fitxers via *ftp* amb més rapidesa.

El **Servei de Certificació Digital (SCD)** ha acabat d'implementar-se durant el 2001. La finalitat d'aquest servei, posat en marxa a la fi del 2000, és establir una infraestructura de clau pública a l'Anella Científica dins de la jerarquia del Pilot de Certificació IRIS-PCA per tal 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 altres institucions connectades a l'Anella, perquè aquestes puguin certificar els seus.

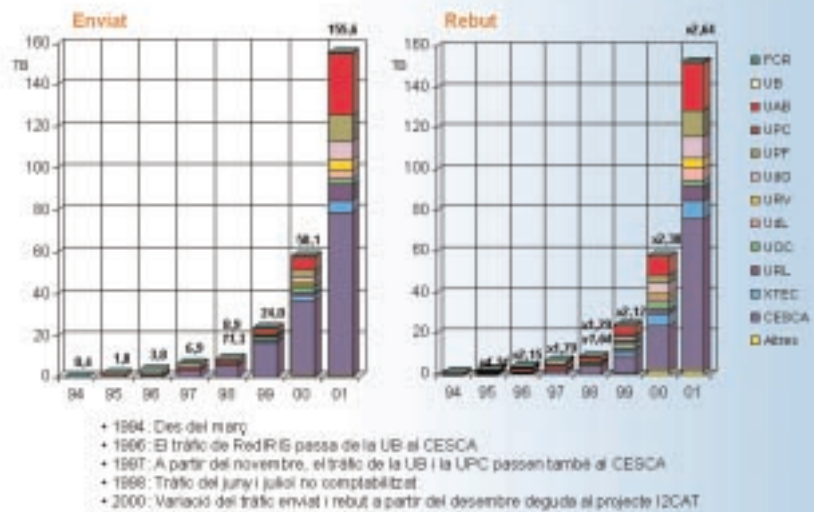
El **Servei d'Allotjament i Hostatge de Servidors (SAHS)** ha tingut vuit noves incorporacions (1 allotjament i 7 hostatges) i dues baixes. S'ha allotjat la màquina del Servei de Meteorologia de Catalunya i s'han hostatjat els següents webs: European Universities Continuing Education Network, Institut d'Estudis Catalans, Intercat (facilita l'aprenentatge del català als estudiants que provenen de fora de Catalunya), i quatre webs del Centre Unesco de Catalunya (el de l'entitat, la revista *Tots en català* i en anglès, i *Linguapax*, un projecte per promoure la cultura de la pau). Ha estat baixa la *Sociedad Astronómica de España y América* i el pilot de la revista *Recercat*, que finalment ha estat desestimat.

La connectivitat entre Barcelona i Madrid a través de la xarxa **RedIRIS**

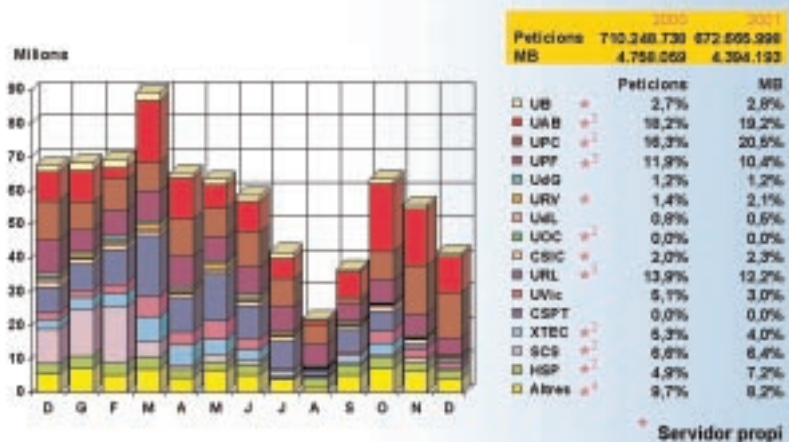
L'Anella Científica



L'evolució del tràfic de l'Anella Científica



El servidor de proxy-cache: peticions per institució



JORDI PARETO



La UVic disposa d'Internet amb banda ampla a través d'aquest radioenllaç des del 14 de novembre.

ha augmentat a 155 Mbps. També s'han realitzat diferents millores a les línies internacionals. L'amplada de banda amb els Estats Units ha passat a 155 Mbps per a la Internet general i a 77 Mbps per a la Internet2 i els proxies. Amb Europa, RedIRIS es connecta a la xarxa Géant a 2,5 Gbps. El node d'accés de Géant per a RedIRIS està a Madrid i es connecta als nodes d'Itàlia i França a 2,5 Gbps. Aquesta nova xarxa paneuropea, que ha substituït la TEN155, disposa de troncats a 10 i 2,5 Gbps.

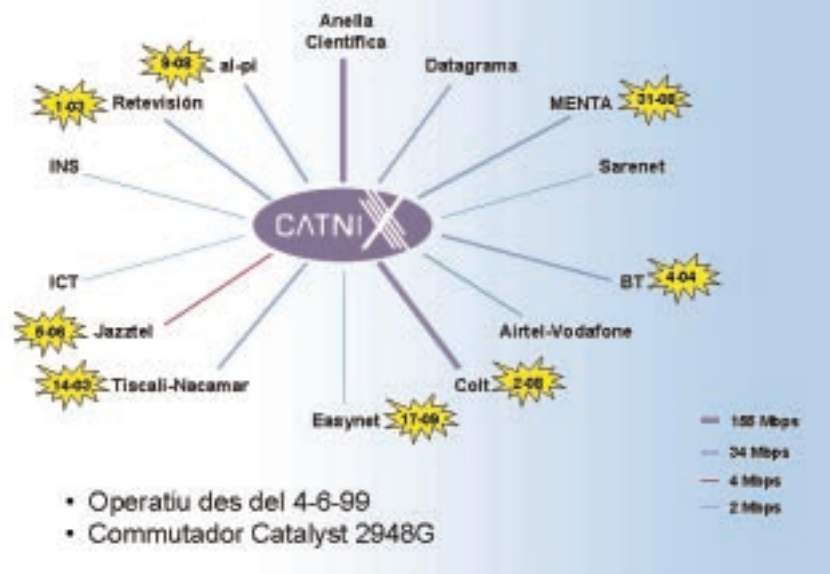
El **CATNIX** ha continuat la seva consolidació amb èxit. D'una banda, s'hi ha connectat Tiscali-Nacamar, Colt Telecom i Easynet, i d'altres institucions han ampliat la seva connexió: alpi telecomunicacions, BT Telecomunicacions, Menta i Retevisión (a 34 Mbps), i Jazztel (a 4 Mbps). D'altra banda, el tràfic al Punt Neutre ha crescut considerablement, ja que gairebé quintuplica el de l'any 2000. S'hi ha intercanviat més de 61 TB de tràfic, xifra que és equivalent a transferir tot el text d'una Gran Enciclopèdia Catalana cada 48 segons. D'aquest tràfic, l'Anella Científica n'ha aportat un 26% i n'ha obtingut un 16%. A més, el CATNIX s'ha integrat en l'associació de punts neutres europeus Euro-IX, essent-ne el CESCA soci fundador.

Aprofitant la infraestructura del CATNIX, s'ha engegat un pilot d'experimentació de *multicast*, que possibilita

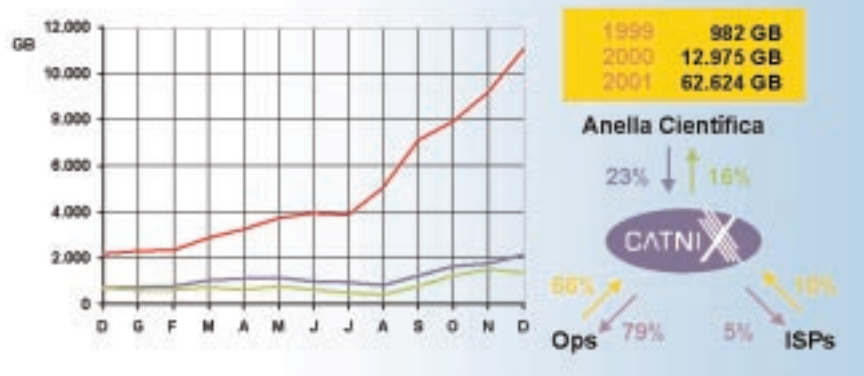
la transmissió de les mateixes dades a un grup de destinataris que les han sol·licitades. El *multicast* es pot considerar un sistema d'enviament eficient ja que transmet a través de la xarxa una única còpia de la informació sol·licitada, conservant l'amplada de banda i els recursos de la xarxa tant en el punt d'enviament com en el de recepció de la transmissió. Els operadors i proveïdors presents al CATNIX poden aprofitar la seva infraestructura per implementar-hi l'intercanvi de dades multimèdia usant el *multicast*. A més, s'ha actualitzat la interfície gràfica de Looking Glass al web del CATNIX, una utilitat de gran ajuda en la resolució de problemes operacionals en entorns de xarxa, especialment els implicats en connectivitat i encaminament entre proveïdors.

El CESCA ha contribuït també a la celebració de les jornades organitzades pel Centre de Ciències de Benasc (Osca), que ha tractat el tema Strings, Branes and Field Theory. Per setè 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. També s'ha col·laborat en l'i2CAT, impulsat per la Secretaria per a la Societat de la Informació, proporcionant connectivitat a les universitats no metropolitanes a través de l'Anella perquè puguin participar en aquest projecte. Una de les proves pilot que enguany s'han dut a terme i en la qual ha col·laborat el Centre ha estat la retransmissió en directe d'una òpera, *La Traviata*, a la UdG i la UdL. ■

El Punt Neutre d'Internet a Catalunya



El tràfic intercanviat



Un dels objectius del Centre és aprofitar la seva condició de consorci per signar acords amb empreses líders que beneficiïn la comunitat universitària. Enguany, s'ha refermat aquesta voluntat i s'han signat diferents acords de **cooperació tecnològica** que, d'una banda, facilitaran la incorporació de programari i maquinari i, de l'altra, impulsaran la incorporació de la tecnologia sense fils a les universitats.

Amb Microsoft, s'ha signat el programa Select, un acord per tal de facilitar l'adquisició de programari a totes les institucions de l'Anella Científica (excepte el Servei Català de la Salut). Amb Toshiba i amb Compaq, s'ha signat un acord per potenciar la incorporació dels equips portàtils i de la tecnologia sense fils a les universitats. A més, per als usuaris del Servei d'Accés Remot s'ha incorporat la tarifa plana, amb Retevisión, i l'ADSL, amb al-pi telecomunicacions.

Arran de la celebració de la primera TSIUC, que va tractar la protecció de dades de caràcter personal a la universitat, es va crear un grup de treball per col·laborar en la implementació de la Llei Orgànica de Protecció de Dades de Caràcter Personal (LOPD) a les universitats i al CESCA. Aquest grup ha impulsat la convocatòria d'un concurs públic per elaborar la metodologia a seguir a les universitats públiques catalanes i al mateix Centre per implementar les mesures de segu-



JORDI PARETO

Guardonats i personalitats en finalitzar l'acte de celebració del desè aniversari del Centre al Palau de la Generalitat.



JORDI PARETO

Els ponents i la comissió organitzadora de la TAC'01.

retat necessàries segons la LOPD, una tasca per a desenvolupar l'any 2002.

A més, el Centre ha gestionat l'adjudicació d'ajuts de la Direcció General de Recerca per un total de

120.202,42 € (20 MPTA) a grups de recerca per desenvolupar projectes de comunicacions avançades usant la infraestructura de l'Anella Científica o d'i2CAT. Els cinc grups d'investigació



JORDI PARETO

El CESCA va estar present al saló BIT, que reuneix empreses d'informàtica i telecomunicacions.



La Jornada Catalana de Supercomputació va comptar amb sis ponents.

seleccionats de diverses universitats catalanes rebran un ajut per dur a terme el seu projecte durant el curs acadèmic 2001-2, els quals certament ajudaran a desenvolupar els continguts educatius en banda ampla.

Enguany la **Trobada de l'Anella Científica** ha arribat a la cinquena edició. La TAC 2001 ha comptat amb cinc presentacions i una taula rodona. Aquesta Trobada ha tingut 79 assistents provinents dels serveis d'informàtica i comunicacions de les institucions connectades a l'Anella i ha tractat temes com el repte d'un nou model social dins la societat de la informació, l'UMTS, el multilingüisme al web, el nou servei de directori implantat a la UdG i els portals educatius.

També s'ha dut a terme la segona edició de la **Trobada dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya** (TSIUC) que ha comptat amb 43 assistents. Aquesta jornada ha tractat la qualitat de servei en els departaments d'Informàtica de les universitats, un aspecte cabdal per tal de gestionar la qualitat en el sistema universitari.

Amb motiu del desè aniversari del Centre, s'ha fet coincidir l'organització de la **Jornada Catalana de Supercomputació** amb la data en què es va inaugurar el Centre, el 30 d'octubre. La JOCS'01 ha tractat la proteòmica i l'astronomia i ha debatut sobre polítiques europees de supercomputació. En la cinquena edició, ha comptat amb sis ponents i 89 assistents. Els actes de celebració, però, van tenir lloc a la tarda amb una **recepció** al Palau de la Generalitat. El conseller Mas-Colell

va ser l'encarregat de donar la benvinguda als més de dos-cents assistents a l'acte, que va comptar amb un dels pares d'Internet, Lawrence G. Roberts, com a conferenciant d'honor. Durant la celebració, van ser guardonats Macià Alavedra, Joaquim Pujol, Xavier Trias, Joan Albaigés, Eugenio Oñate i Teresa Delàs per la seva contribució al progrés i consolidació del CESCA.

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 a través de la seva publicació, TERAFLUP, i de diferents cursos, seminaris i conferències.

D'una banda, s'ha organitzat una **Aula de Noves Tecnologies** (abans anomenada Aula de Supercomputació) per presentar als nous usuaris les màquines de què disposa el CESCA. L'Aula ha comptat amb el curs Entorn de supercomputació, que introdueix a les principals característiques i ús del maquinari i programari del Centre en les diferents plataformes disponibles. A més, s'ha organitzat un curs de programació Tru64 UNIX v5 i tècniques per a la migració d'aplicacions de 32 bits a 64 bits, impartit per Compaq, per mostrar les tècniques per a la migració de programes de 32 a 64 bits i, a més a més, resoldre qüestions relacionades amb la migració cap a Compaq de codis des de les altres plataformes disponibles al Centre.

D'altra banda, en col·laboració amb l'empresa Análisis y Simulación, s'ha preparat una presentació del programari *Load Sharing Facility*, una

gamma de productes de gestió que planifica, monitoritza i analitza la càrrega del treball per a una xarxa d'ordinadors. També s'ha coorganitzat amb Accelrys un seminari per introduir els usuaris en la generació de farmacòfors i en la interfície d'usuari de Catalyst.

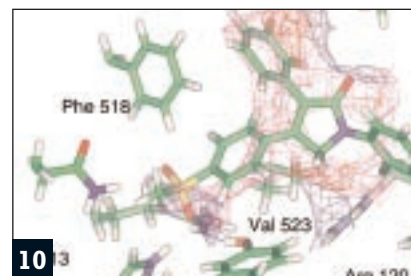
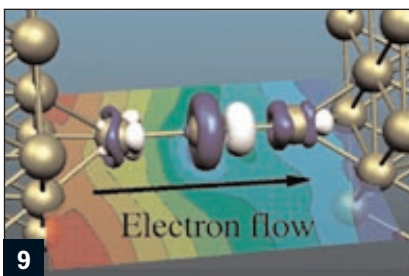
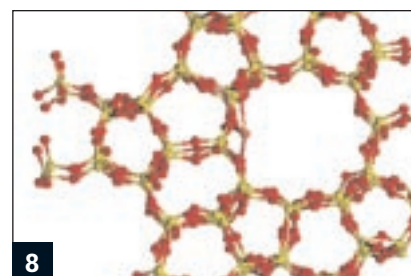
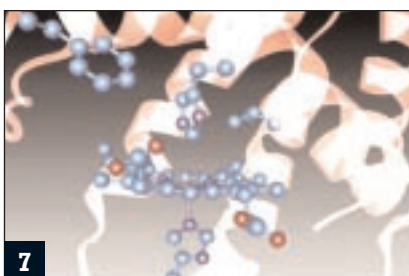
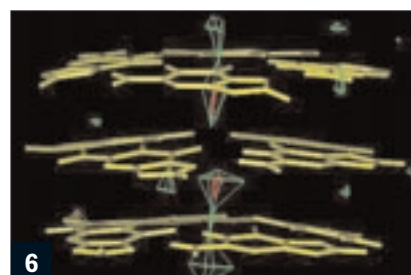
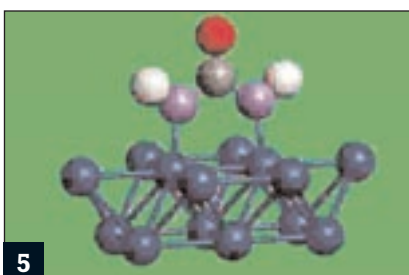
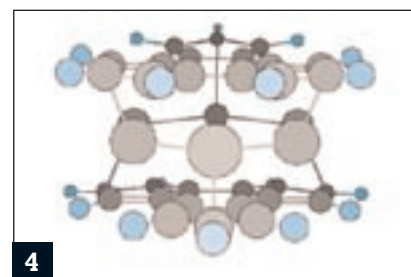
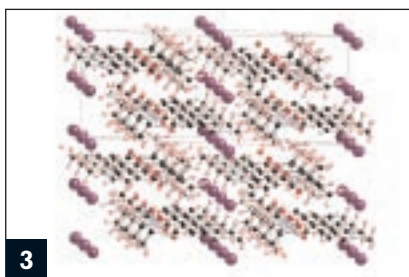
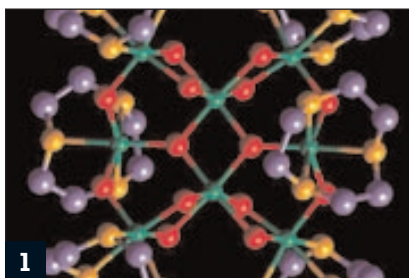
Com cada any, s'ha participat en la **Setmana de la Ciència**, organitzada per la Fundació Catalana per a la Recerca. D'una banda, s'ha fet una conferència de caire divulgatiu sobre els supercomputadors virtuals i les seves aplicacions. El director de *render* de la productora Dygra Films, Alberto Fernández, va presentar el film en 3D *El Bosque Animado*, que ha estat visualitzat de forma realista (*render*) usant el supercomputador virtual galleg. Aquesta conferència va comptar amb l'assistència de 52 persones. Com és habitual, també s'ha organitzat una Jornada de Portes Obertes per donar a conèixer el Centre i els serveis que proporciona a la comunitat científicotècnica. Aquesta Jornada va permetre que 27 persones de diferents àmbits poguessin visitar les nostres instal·lacions. A més, el CESCA ha continuat rebent visites durant tot l'any, sobretot provinents d'universitats i de centres d'ensenyament secundari. Un total de 301 persones han pogut conèixer el Centre gràcies a aquestes visites guiades.

El Centre ha estat present en el saló Barcelona Information Technologies (BIT), que s'ha celebrat del 15 al 19 de maig, i on ha donat a conèixer els seus serveis de supercomputació i comunicacions d'altres prestacions adreçats tant a la comunitat acadèmica com a les empreses. A més, el Centre també ha realitzat dues conferències durant el BIT 2001: "CESCA: 10 anys al servei de la Recerca" i "CATNIX: facilitant l'accés a Internet".

Enguany el CESCA ha estat present als mitjans de comunicació amb motiu del seu desè aniversari, l'adquisició de nou maquinari de supercomputació i l'ampliació del troncal de l'Anella, noves incorporacions al CATNIX, així com acords i convenis signats. El Centre ha aparegut en premsa diària (*El Periódico*, *El País*...), premsa especialitzada (*Comunicaciones World*, *iWorld*, *Computing*...), agències de notícies (Europa Press, Vilaweb...), televisió (TV3, BTV) i ràdio (Ona Catalana, RAC1). ■

Els 10 projectes de més consum al CESCA-CEPBA

1. Estructura electrònica de molècules i sòlids inorgànics
Santiago Álvarez (UB, 11%)
2. Simulació d'arquitectures i *benchmarks*
Mateo Valero (UPC, 8%)
3. Enginyeria de cristalls moleculars d'interès tecnològic
Juan José Novoa (UB, 6%)
4. Reactivitat química d'agregats moleculars de compostos organometàl·lics
Josep M. Saà (UIB, 6%)
5. Estructura electrònica, propietats magnètiques i catalítiques de materials d'interès tecnològic
Francesc Illas (UB, 5%)
6. Reconeixement molecular
Modesto Orozco (UB, 5%)
7. Modelització molecular de sistemes amb metalls de transició
Agustí Lledós (UAB, 3%)
8. Catàlisi per metalls de transició: aplicacions en química ambiental i en sistemes d'interès bioquímic
Mariona Sodupe (UAB, 3%)
9. Estudi de primers principis sobre materials complexos d'interès tecnològic
Pablo J. Ordejón (CSIC, 3%)
10. Disseny de molècules bioactives
Juan Jesús Pérez (UPC, 3%)



Edita

CESCA

Gran Capità, 2-4
08034 Barcelona
Tel. 93 205 6464
Fax: 93 205 6979
<http://www.cesca.es>
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
Carme Monserrat
Caterina Parals
Xavier Pereira

REDACCIÓ
Teresa Via

DISSENY I PRODUCCIÓ
Subirà & Associats