

TERAFLOP

NOTICIARI DEL CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA

Núm. 15
10.000 exemplars

CESCA

Publicació mensual
Març 1996

La Química domina entre els usuaris del CESCA

Un cop acabat l'any 1995 convé fer un breu balanç sobre qui ha usat i per a què s'han utilitzat els nostres serveis de supercomputació. Com que l'SP2 no s'ha posat en modus d'exploració fins ara, aquest

balanç cal calcular-lo únicament en el Cray Y-MP/232.

Evidentment, aquest balanç no pot incloure una relació detallada del què han fet els nostres 217 usuaris, agrupats en 62 projectes, que han executat 18.828 treballs *batch* i que han generat una càrrega mitjana del sistema d'un 86%, equivalent a la utilització real màxima.

Al requadre adjunt (*Els projectes que han usat més computació*) us relacionem els 10 projectes que han usat el major percentatge de temps de càlcul, específicament el 51%. Com poden observar aquesta càrrega està ben distribuïda entre totes les universitats catalanes i el CSIC (vegeu la *Figura 1*).

La majoria d'usuaris utilitzen paquets comercials, més que programes pròpiament desenvolupats per ells.

Entre els primers destaquen els programes de Química computacional, Gaussian 92 (28%), Amber (8%), DGauss (7%), MOPAC (5%) i GAMESS (4%). Conseqüentment, com es pot observar a la *Figura 2*, l'àrea de recerca que predomina entre els nostres usuaris és la de Química.

Miquel Huguet
Director del CESCA

Les jornades CUG es fan aquest mes a Barcelona

Entre l'11 i el 15 de març es faran a Barcelona les jornades



CUG, que aquesta primavera ha organitzat el CESCA. Prop de

120 sessions on participaran personalitats de l'entorn de la supercomputació són el panorama que presenta el congrés.

Cray User Group (CUG) és una organització internacional que pretén crear un fòrum per promoure l'intercanvi d'informació d'interès per als usuaris de màquines Cray. Cada any, CUG organitza dues jornades, conjuntament amb un usuari dels seus ordinadors. Aquest mes, el CESCA actua com a organitzador local de les Spring'96 Cray User Group Conference, denominades "Catalonian Creations".

Durant aquestes jornades es parlarà dels grans reptes de la supercomputació (*challenges*) a partir de les experiències dels usuaris amb els avenços no tan sols dels reptes científics i d'enginyeria, sinó dels nous temes comercials cap a on la computació d'altres prestacions està tendint (bases de dades, servidors d'emmagatzematge de dades i servidors documentals) i que han esdevingut els impulsors del mercat dels sistemes paral·lels. També es presentaran els avenços en els nous estàndards de programació, eines de desenvolupament i llibreries que ajudaran a paral·lelitzar les aplicacions.

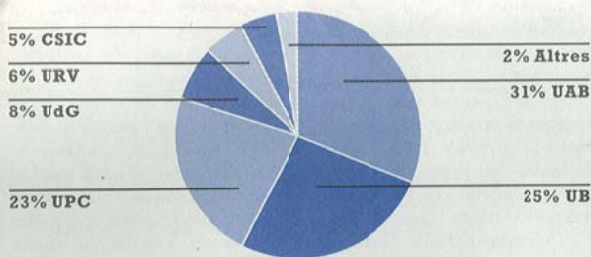
El dia 11 s'inicia la conferència amb 8 tutorials sobre els avenços en el maquinari i el programari de Cray, així com una introducció a les bases de dades d'altres prestacions. A la tarda, Josep A. Pana, director de la Funda-

ció Catalana per a la Recerca, obrirà formalment el CUG'96 i donarà pas a l'invitat d'honor, Pedro Alonso, de l'Hospital Clínic de Barcelona, que exposarà la seva recerca en el desenvolupament de la vacuna de la malària. Els presidents de Cray i del CUG, Phil Sampoer i Claude Lecoeuvre, faran balanç de les seves organitzacions.

Les sessions del CUG (unes 120) estaran organitzades en 4 grups paral·lels, però hi haurà 6 sessions plenàries. A més de les presentacions de Cray (tal com, per exemple, la d'un dels dissenyadors del Cray T3E i la d'un del sistema operatiu Unicos/MK), hi ha presentacions dels laboratoris de recerca més importants i de deu grups de recerca catalans (Universitat Politècnica de Catalunya, Universitat de Barcelona, Universitat Rovira i Virgili i Universitat Ramon Llull). A més Hans Zima, de la University of Vienna, donarà la seva visió de futur d'aquest mercat i Agnes Bradier, de la CEC, comentarà el Programa HPCN de la UE. Durant la conferència Cray Research oferirà 5 demostracions.

El programa detallat d'aquestes jornades el podeu trobar a: <http://www.cesca.es/CUG/CUGBarcelona.html> o al servidor FTP <ftp://cesca.es>, directori /pub/CUG-Barcelona

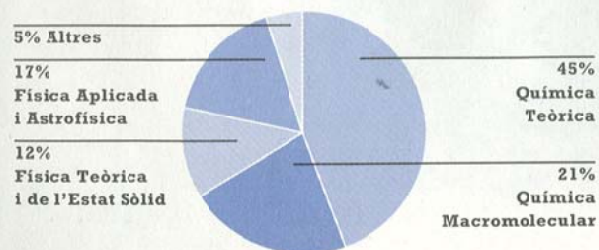
Figura 1. Utilització de recursos per Universitats



Els projectes que han usat més computació al Cray Y-MP

Número	Títol del projecte	Cap del projecte	Universitat
1	Estructura i Reactivitat de Complexos de Metalls de Transició	Antoni Oliva	UAB
2	Reaccions de Transferència d'Hidrogen en Estats Excitats	Josep M. Lluch	UAB
3	Disseny de Vacunes Sintètiques contra el Virus de la Febre Aftosa	Juan Jesús Pérez	UPC
4	Resuspensió Turbulenta de Partícules	Xavier Casamitjana	UdG
5	Determinació Estructural de Compostos	Josep M. Poblet	URV
6	Enginyeria de Cristalls Moleculars d'Interès Tecnològic	Juan José Novoa	UB
7	Estructura i Evolució de les Galàxies	Jordi Iseñ	CSIC
8	Dinàmica de Sistemes Químico-Físics de no Equilibri	Francesc Sagués	UB
9	Simulació Computacional d'Efectes Produïts per Enginyeria de Proteïnes	Francesc Xavier Avilès	UAB
10	Pols Tèrmics d'Estrelles SAGB	Enrique García-Berro	UPC

Figura 2. Utilització de recursos per departaments



Paral·lelisme per a l'optimització de fàbriques

En el context del projecte PACOS, gestionat pel CEPBA, s'ha desenvolupat un software paral·lel per ajudar a la planificació i gestió d'una fàbrica d'embotits. L'empresa pensa que estalviarà uns 50 milions de pessetes en costos directes **Plana 3**

Kasparov venç Deep Blue

El campió del món d'escacs venç per 4-2 a la computadora d'IBM Deep Blue, dissenyada especialment per a jugar als escacs **Plana 4**

Curs de Gaussian

Els propers 30 i 31 de març se celebraran a Barcelona un *workshop* del programa d'aplicacions químiques Gaussian **Plana 3**

SGI compra Cray Research

Silicon Graphics adquireix per 750 milions de dòlars la companyia de superordinadors Cray Research Inc. **Plana 3**

Entrevista

José M. Baldasano, director de l'ITEMA, parla de la relació entre la computació i el medi ambient **Plana 4**

AGENDA

MARÇ

• 4 (16 h)

Conferència: "Electronic structure of F and V centers at the MgO surface". Per Gianfranco Pacchioni, Universitat de Milà (Itàlia). Lloc: CESCA, Av. Diagonal 645. Telèfon 93-491 40 14. E-mail: caren@cesca.es.

• 5 (10 a 13 h)

"Introducció a la Supercomputació", Alicia Martínez (CESCA). Aula de Supercomputació (CESCA).

• 8 (10 a 12.30 h)

"Introducció a la Supercomputació sota l'entorn SP2", Joan Cambras i Montserrat Mestres (CESCA). Aula de Supercomputació (CESCA).

• 11-15

"CUG. Catalanian Creations". Lloc: Hotel Melià (Barcelona). Informació: 93-491 40 14, http://www.cesca.es/CUG/CUGBarcelona.html.

• 19 (10 a 13 h)

"Llenguatge HTML: Disseny de pàgines web", Sara Moya (CESCA). Aula de Supercomputació (CESCA).

• 21-22 (10 a 13 h)

"Comunicacions, xarxes i eines multimèdia", Carles Flamerich (CESCA) i Catí Parals (CSIC). Aula de Supercomputació (CESCA).

• 25 (10 a 13 h)

"Paral·lelització a l'SP2: Introducció a la paral·lelització i HPF", Eduard Ayguadé (UPC). Aula de Supercomputació. Lloc: CEPBA, Mòdul D6 del Campus Nord de la UPC. Telèfon 93-491 40 14.

• 26-27

(10 a 13 h teoria, 16 a 19 h pràctica)

"Paral·lelització a l'SP2: PVM (rutines de paral·lelització): programació i depuració", Sergi Girona (UPC). Aula de Supercomputació. Lloc: CEPBA, Mòdul D6 del Campus Nord de la UPC. Telèfon 93-491 40 14.

ABRIL

• 9 (10 a 13 h)

"Paral·lelització a l'SP2: Introducció al Fortran 90", Juan Claudia Agüi (IBM). Aula de Supercomputació. Lloc: CEPBA, Mòdul D6 del Campus Nord de la UPC.

• 15-17 (9 a 13 h)

Curs monogràfic: "Xarxes Neuronals i Aplicacions". Aula de Supercomputació (CESCA). Coordinador: Lluís Garrido (UB).

MAIG

• 30-31

Workshop: "Introduction to Gaussian: Theory and Practice". Curs teòric-pràctic de Gaussian organitzat pel C4, Cray Research i Universitat de Barcelona. Preu: 30.000 ptes. Lloc: CESCA. Telèfon 93-491 40 14.

Dinàmiques i formes de complexitat espacio-temporal

FRANCESC SAGUÉS

Dept. Química Física, UB

Observar el món que ens envolta significa deixar-se fascinar per les dinàmiques temporals dels fenòmens de la natura i per les formes espacials que en resulten. Històricament, la recerca científica ha estat moltes vegades motivada per l'afany, d'altra banda ben racional, de discernir pautes d'ordre i simetries en un món que se'n apareix com a canviant i desordenat. Últimament, però, la ciència ha avançat en l'anàlisi d'escenaris, que d'altra banda ens són ben familiars, on aquell ordre no és en absolut aparent o aquelles simetries, si existeixen, són ben subtils. Entendre la complexitat o, en altres paraules, desxifrar l'organització espacio-temporal d'aquesta complexitat, heus aquí l'aparent paradoxa a què ens veiem enfrontats. En el desenvolupament d'aquest nou paradigma la informàtica hi té un paper fonamental. Ben segur, la recerca entorn de la complexitat espacio-temporal no hauria pogut consolidar-se ni mostrar toia la seva versatilitat si no haguéssim disposat de les eines algorísmiques, numèriques i gràfiques que ens proporciona la supercomputació.

Continuem però aquesta reflexió en termes de la dualitat entre dinàmiques temporals i formes espacials que ens servia per a encapçalar-la. Els comportaments temporals més interessants caldrà esperar-los en les respostes del sistema no-lineals mantinguts suficientment allunyats de les condicions d'equilibri. En particular els règims asimptòtics dels sistemes

dinàmics dissipatius estan associats a quatre tipus d'atractors topològicament diferents. Aquests atractors constitueixen el cesti darrer a què es veu inevitablement conduïda tota trajectòria temporal en l'espai de fases del sistema dinàmic corres-



ponent, un cop oblidada la seva evolució transitòria dictada per la preparació inicial del sistema. Aquests quatre atractors i els corresponents règims temporals són, per ordre de complexitat creixent, el punt representant típicament un règim estacionari; el cicle límit, associat a una evolució temporal de tipus periòdic; el torus, característic d'una resposta quasi periòdica, i, finalment, l'anomenat atractor estrany que és la signatura del caos temporal. Per a discernir entre els comportaments temporals anteriorment esmentats, tant quan es consideren sistemes dinàmics continus com discrets, cal analitzar un gran nombre de condicions inicials fent variar simultàniament els valors dels paràmetres de control del sistema. Això suposa poder disposar tant de la considerable capacitat de càlcul inevitablement requerida per les tècniques de resolució numèri-

ca, com de les eines complementàries de càlcul simbòlic que ens poden proporcionar una aproximació analítica al problema.

Molts són els exemples que il·lustren aquesta riquesa de comportaments temporals i que abasten disciplines ben diverses. Des de les regularitats, que no ho són tant segons estudis recents, dels moviments dels astres, fins a l'aparent impredecibilitat de l'economia a gran escala, i malauradament també de cert caos que cadascú reconeix en la seva pròpia economia, l'espectre de dinàmiques amb diferents graus d'autoorganització temporal és cada dia més ampli. Jo, em limitaré a destacar aquí breument un àmbit especialment rellevant en aquest context: el de la Cinètica Química. Avui es disposa ja d'un veritable catàleg de dinàmiques químiques autocatalítiques encapçalat per la ja famosa reacció de Belousov-Zhabotinski, i tals que, operant preferiblement en reactors oberts, encara que també s'observen comportaments complexos però no permanents en mode tancat, poden exhibir algunes, o fins i tot totes, les respostes temporals descrites anteriorment. No cal dir que els esquemes cinètics per a moltes d'aquestes reaccions solen ser tan complexos, penssem que models realistes de la reacció BZ abans esmentada arriben a contenir fins a 22 etapes consecutives acoblades, que una vegada més l'eina de la computació resulta imprescindible.

Endinsant-nos en les estructures espacials, podríem preguntar-nos: existeix també una jerarquia de complexitat creixent en el terreny de les formes? Per a treurejar en la resposta a aquesta pregunta,

potser quelcom ambigua però no gens menys intrigant, ens centrarem directament en una fenomenologia molt concreta: aquella relacionada amb fenòmens d'electrocristal·lització en geometries quasi-bidimensionals.

Les formes més organitzades les observem en considerar processos de deposició metàl·lica en condicions pràcticament d'equilibri. S'oblindran llavors les formes facetades típiques de molts metalls. Quan la cristal·lització és més ràpida ens trobem amb nous comportaments. Un d'ells, sorprenent i altament influït per efectes de convecció natural, pot desenvolupar una certa estructura cel·lular ben definida. Si contàriament el procés és brusca i heterogeni les formes que s'observen són típicament dendrítiques. Ja arribats a l'extrem de la jerarquia descobrirem el paradigma del desordre espacial caracteritzat per les avui dia populars estructures fractals. Si bé aquestes darreres no exhibeixen simetries simples, si en canvi mostren una remarcable propietat d'auto-similaritat estadística. També aquí, la computació ens serveix tant des del punt de vista d'una resolució analítica de les equacions de creixement d'interfases, l'anomenat genèricament problema de Stefan, com per a la simulació de dinàmiques d'agregació, i fins i tot, i molt més simplement, per al propi càlcul algorísmic de les dimensions fractals.

Permeteu-me una darrera reflexió. No és en absolut una inclinació personal merament especulativa la que s'amaga darrera de les anteriors consideracions. Altra-ment, és un intent, això sí innovador, d'englobar amb una perspectiva unificadora la meua recerca dins el camp de la Química Física. No eren casualitat concis els exemples escollits, però és que aquella disciplina, i tant de bo es vagi reconeixent cada cop més en el futur, ens brinda oportunitats apassionants de recerca en el camp de la complexitat espacio-temporal.

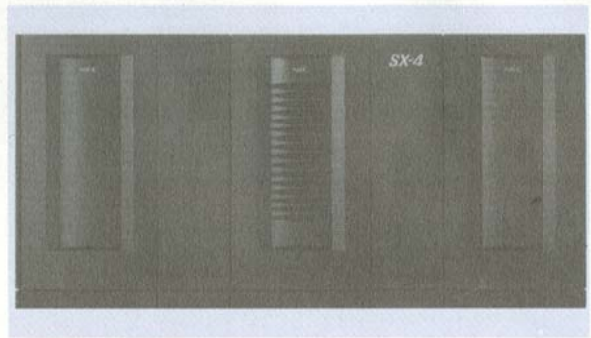
NOVETATS HPCN

Presentat a Barcelona el superordinador SX-4 de NEC

NEC, una de les empreses més fortes en el negoci de la computació, ha presentat el seu ordinador de la serie SX, el SX-4. El NEC SX-4 es un supercomputador escalable paral·lel vectorial successor del SX-3, que va ser el primer ordinador multiprocessador japonès, presentat l'any 1990. El SX-4 va sortir a la venda el mes de setembre de l'any passat. El SX-4 es pot trobar en dues arquitectures bàsiques. La primera és l'anomenada Single-Node, que és una màquina de memòria compartida que pot tenir entre 1 i 32 processadors. La potència màxima d'aquest sistema serà de 64 Gflop/s (2 Gflop/s per processador). Aquesta màquina també està disponible en model compacte, que pot tenir un màxim de 4 pro-

cessadors (8 Gflop/s). La segona arquitectura és un SX-4 de memòria distribuïda que pot connectar un mínim de 2 nodes i un màxim de 16.

Aquesta màquina pot arribar a una velocitat punta d'1 Tflop/s amb la seva configuració màxima (16 nodes, 512 processadors).



Model compacte de l'SX-4 de NEC

EDITA

CESCA

TERAFLOP

CONSELL EDITORIAL

Albert Marcet
Antoni Oliva
Santiago Olivella
Eugenio Oñate

CONSELL DE REDACCIÓ

Juan Carlos González
Jordi Aguilà

COORDINACIÓ

Miquel Huguet

CAP DE REDACCIÓ

M. Àngels Novoa

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà & Associats

MAQUETACIÓ

Rosa Álvarez

PUBLICITAT

J.L. Naranjo

Begoña Durán

Tel. 315 23 23

Generalitat de Catalunya

FUNDACIÓ CATALANA PER A LA RECERCA

La planificació en paral·lel d'una empresa de xarcuteria estalvia uns 50 milions de pessetes a l'any

Gestionar la planificació i controlar la producció d'una empresa de xarcuteria a partir d'un sistema informàtic paral·lel és l'objectiu del projecte SIRIUS, dins la iniciativa PACOS del programa ESPRIT. Mitjançant aquest software, Hesperia de Alimentación, l'usuari final, té previst estalviar uns 50 milions de pessetes anuals.

Ambar és un sistema expert, orientat a l'augment de la productivitat i eficiència d'una fàbrica, desenvolupat per l'empresa Neosystems Informàtica. Aquest sistema resol l'optimització des del punt de vista de minimitzar els costos operatius, equilibrar la fàbrica i controlar els colls d'ampolla amb previsió. Segons Eugeni Roures, director de Neosystems, "amb aquest sistema es destrueixen les línies clàssiques de producció a una empresa per a fer una optimització d'alt rendiment".

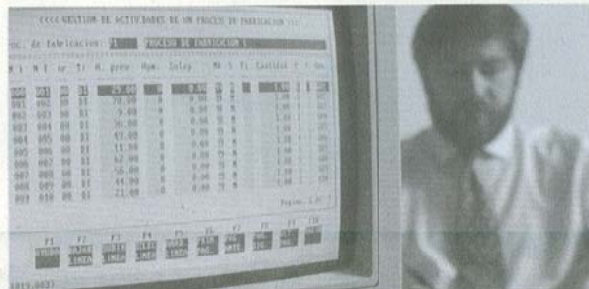
L'evolució del mercat fa que el temps de vida mitjà d'un producte s'hagi reduït moltíssim i que cada vegada sigui més necessari fabricar més varietat de productes. Aquesta evolució també implica una nova filosofia de gestió de les empreses que, segons Roures, "s'assembla molt al paral·lelisme, ja que es tracta de distribuir de la millor manera possible un nombre

determinat de tasques sobre les diferents màquines, que és el que es fa quan es paral·lelitzà".

Hesperia de Alimentación fabrica a partir de carn de porc un espectre de més de 1.000 productes. Tot i que la seva matèria primera és la carn, aquesta cal que sigui tractada de forma diferent en funció del producte i que es compri en un moment determinat perquè no pateixi minvaments ni es faci malbé. Introduint les dades necessàries al sistema que està desenvolupant Neosystems, aquest calcularà la millor forma de treballar a la fàbrica perquè la carn no disminueixi de pes, ni es deteriori, ni s'hagi de conservar sincronitzant la mà d'obra i els recursos productius o ajudant a la decisió de quan, com i a qui comprar la matèria primera. Tenint en compte totes aquestes

dades, l'empresa té previst estalviar cada any prop de 50 milions de pessetes només en costos directes.

Aquesta empresa de xarcuteria ja tenia instal·lat des de l'any 1992 la versió serial d'Ambar, però el fet que calien 24 hores perquè el sistema calculés una planificació, feia que no fos utilitzat al 100%. "Hem acudit al paral·lelisme pel problema de temps de càlcul, que amb un software paral·lel i unes màquines adequades es podrà reduir força", afirma Ramon Carulla, analista informàtic de producció d'Hesperia. Amb la versió paral·lela d'aquest sistema que Neosystems està desenvolupant aquest temps es pot reduir a 30 minuts o una hora, en funció de l'ordinador sobre el qual corri. "Aquest fet permetrà calcular amb molta agilitat i donarà la possibilitat de repla-



El software paral·lel ajuda en les empreses a la presa de decisions

nificar la fàbrica en qualsevol moment si canvia alguna circumstància", explica Eugeni Roures.

Software paral·lel per a gestionar una empresa

El sistema Ambar és un producte genèric que podrà ser aplicable a qualsevol tipus d'empresa, tot i que va dirigit fonamentalment a les pimes que facturin més de mil milions de pessetes i tinguin a partir de 100 treballadors. Aquestes empreses també hauran d'estar organitzades i decidir-se a treballar sota comanda i termini de lliurament. A aquest tipus d'empreses se les podria ajudar a reduir entre un 15 i un 30% dels costos operatius totals i de les necessitats d'inversió respecte de la forma de treballar clàssica amb estocs.

Necsystems també ha desenvolupat un tipus d'algoritmes que permet que el software pugui treballar sobre qualsevol tipus d'arquitectura. D'aquesta manera, es pot aprofitar la informàtica actual de l'empresa i, en cas d'actualització, serveix el mateix software.

El coordinador de SIRIUS és Neosystems però en el projecte, a més d'Hesperia Alimentación, també hi participen dos departaments de la UPC. El Laboratori d'Organització de la Producció valida, certifica i fa evolucionar els algoritmes millorant-ne la funcionalitat i l'operativitat. La Càtedra d'Estadística i Investigació Operativa ha aportat la seva tecnologia multiagent que es munta sobre un PC amb Windows 95. El SIRIUS és un dels subprojectes del projecte PACOS, que gestiona el CEPBA.

BREUS

SILICON GRAPHICS COMPRA CRAY

A finals del passat mes de febrer Silicon Graphics (SGI) i Cray Research van anunciar la seva fusió. SGI comprarà la companyia de supercomputadors per 576 milions de dòlars, fet que li permetrà cobrir tots els segments de mercat dels computadors d'altres prestacions. Cray Research, tot i les seves pèrdues econòmiques en l'últim any, és líder reconegut per la seva tecnologia, i Silicon Graphics ha revolucionat el mercat dels ordinadors d'altres prestacions amb màquines de menys d'un milió de dòlars. La unió d'aquestes dues companyies tindrà com a conseqüència el naixement d'un nou líder mundial en el sector de la supercomputació i, segons informacions de les pròpies companyies, uns preus "agressius" de les seves màquines en relació amb el rendiment. Podeu trobar més informació sobre la compra de Cray a http://www.cray.com/PUBLIC/WHATS_NEW/COMPANY/FEB96/merger.html.

GAMES PARAL·LEL A L'SP2

El mes passat es va instal·lar a l'SP2 del C⁴ la versió paral·lela del paquet de Química Quàntica Games. Ja existeix una versió serial d'aquest paquet al Cray i una altra a l'SP2. Recentment també s'han instal·lat a l'SP2 les rutines de paral·lelització per pas de missatges PVM, PVMe i MPI.

A L'ABRIL ES CELEBRARÀ A BRUSSEL·LES HPCN EUROPE 1996

Entre el 15 i el 19 del proper mes d'abril se celebraran a Brussel·les (Bèlgica) les jornades HPCN Europe 1996 en les quals es tractaran experiències dels usuaris finals, la recerca en noves aplicacions, algoritmes, eines sistemes i aspectes pràctics relacionats amb la computació d'altres prestacions. Paral·lelament també es faran un total de sis tutorials, sis workshops i també hi haurà exhibicions per part de la indústria. Per a més informació, podeu posar-vos en contacte amb el secretariat de la conferència enviant un missatge per correu electrònic a l'adreça HPCN96@fi.uva.nl.

El C4, Cray Research i la Universitat de Barcelona organitzen un workshop de Gaussian

Els propers 30 i 31 de maig se celebrarà un workshop del programa de Química Quàntica Gaussian. Aquest workshop està organitzat conjuntament pel Centre de Computació i Comunicacions de Catalunya (C⁴), Cray Research i la Universitat de Barcelona (UB).

El workshop que es farà a Barcelona el proper mes de maig tractarà totes les metodologies disponibles al paquet Gaussian. Es farà un èmfasi especial, però, en aquells mètodes i aspectes més novadors que fan que el Gaussian es pugui aplicar a un espectre de qüestions més ampli.

El curs començarà amb una introducció a la Teoria de l'Estructura Electrònica i continuarà explicant els diferents mètodes de càlcul i nivells de teoria del Gaussian, les seves utilitats i el seu rendiment en computadors Cray. Durant el workshop també es parlarà de les seves possibilitats en mètodes com el de la Teoria del Funcional de la Densitat o en tècniques d'optimització de geometria, entre d'altres.

Cal destacar la presència del professor Michael Robb, del King's College de Londres, en aquest

curs. Robb és un dels creadors d'aquest software. També hi participaran com a professors Carlos Sosa, de Cray; Juan José Novoa, de la Universitat de Barcelona; José Luis Andrés, de la Universitat de Girona; i Alicia Martínez, del CESCA.

El preu del curs és de 17.000 pessetes pels assistents d'entorn acadèmic i 25.000 per a la resta. També hi haurà 3 beques per a estudiants. Aquesta quantitat inclourà les lliçons teòriques, pràctiques sobre el Cray i una còpia de la User's Reference de Gaussian 94 i una altra de l'Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods.

Les fotocòpies de les conferències també s'inclouen en el preu. L'allotjament i els menjars van a càrrec de cada participant. Les classes tant teòriques com pràctiques es faran entre les 9.00 h i les 13.00 h i entre les 15.00 h i les 19.00 h.

Duplicada la potència del Cray

El passat mes de febrer es va actualitzar el Cray Y-MP 232 a un Y-MP 464 amb una velocitat punta de 1,33 Gflop/s. El Cray té 4 processadors vectorials paral·lels de memòria compartida enfront dels dos processadors que tenia fins ara. A més del Cray, el maqui-

nari disponible per als usuaris del C4 és un IBM SP2 de 44 processadors i 11,72 Gflop/s, una Power Challenge de SGI de 8 processadors i 2,38 Gflop/s una CM-200 de Thinking Machines de 2.043 processadors i 0,64 Gflop/s, i un C3480 de Convex de 0,40 Gflop/s.

INTRODUCTION TO GAUSSIAN: THEORY AND PRACTICE

Barcelona, 30 i 31 de maig

INFORMACIÓ: cursg94@cesca.es
<http://www.cesca.es/>

C⁴ Centre de Computació i Comunicacions de Catalunya

UNIVERSITAT DE BARCELONA

CRAY RESEARCH

Podeu veure Teraflop en format electrònic a partir del World Wide Web a l'adreça <http://www.cesca.es/teraflop>

Si voleu fer-nos algun comentari, utilitzeu l'adreça de correu electrònic

teraflop@cesca.es

ENTREVISTA

José M. Baldasano, director de l'ITEMA

“La simulació és una eina més en la recerca medioambiental”

José M. Baldasano, enginyer químic de formació, és director de l'Institut de Tecnologia i Modelització Ambiental (ITEMA). Aquest institut de la UPC va néixer l'any 1992 té com a objectiu principal abordar els temes ambientals des d'una perspectiva científica i intentar trobar-los una aplicació.

TERAFLOP Com s'aplica la tecnologia al medi ambient?

J. M. BALDASANO Primer cal dir que el 'laboratori' de qui estudia el medi ambient és el mateix medi natural. Coneixent-lo s'ha evolucionat en els últims 30 anys cap a les tecnologies i els instruments de gestió ambiental. Als anys 60, es feia control de la contaminació i no s'atacaven les causes sinó l'efecte. Ràpidament, a mitjans dels 70, es va veure que aquesta era una visió limitada i es va començar a impulsar la prevenció de la contaminació no només el control. Després la CE va definir que eren les tecnologies netes com, per exemple, usar làser en comptes de taidrina en la construcció de peces metàl·liques. Per altra banda, la simulació també és un tema molt important en els estudis ambientals.

TERAFLOP Fins a quin punt la recerca ambiental usa la simulació o l'experimentació?

J.M.B. A l'ITEMA fem les dues coses. La línia experimental és la històrica de la ciència, mentre que

la simulació es comença a potenciar als anys 60, amb el naixement dels ordinadors. Crec que el lògic és que aquestes dues línies de recerca siguin complementàries. La simulació és una eina més que permet fer experiments numèrics.

TERAFLOP Com trien les seves línies de recerca?

J.M.B. Tenim diferents polítiques d'actuació. En primer lloc tenim les nostres pròpies línies de recerca: són temes que ens interessin i que és necessari estudiar ja que hi ha

limitacions de coneixement. Bàsicament ens centrem en la modelització atmosfèrica i la d'aigües residuals. També treballem per desenvolupar tecnologies netes. Una altra de les nostres línies d'actuació és treballar per encàrreg. De vegades també busquem la relació amb l'exterior intentant aplicar el que nosaltres hem investigat, via administració o via empreses.

TERAFLOP Un dels projectes de l'ITEMA que més ha trascendit és el 'Barcelona', en que consisteix?



Baldasano: "El trànsit és el contaminant principal en les zones urbanes"

J.M.B. Barcelona és una àrea complexa des del punt de vista de transport atmosfèric. També és una zona fortament urbanitzada. Això fa que des del punt de vista científic fés interessant aprofundir-hi. La informació que es tenia de la zona era molt superficial i l'any 90-91 es planteja fer estudiar els processos circulatoris atmosfèrics en tres dimensions. Els nostres models corren sobre les nostres *workstations* i, quan són grans, sobre els ordinadors del CESCA.

TERAFLOP Quin és el principal factor de contaminació actual?

J.M.B. Avui, en les zones urbanes, és el trànsit. La contaminació clàssica dels anys 50 en ciutats com Londres eren d'origen industrial i de l'ús de carbó en les calefaccions domèstiques. D'aquí passem a tenir combustibles més nets i el contaminant principal és el trànsit i la producció d'energia elèctrica.

TERAFLOP I en el cas de les aigües i el sòl?

J.M.B. Els contaminants són matèria orgànica biodegradable i no biodegradable, metalls pesats i sals, tot generat per l'home.

TERAFLOP Quines possibilitats ofereix la supercomputació a la recerca ambiental?

J.M.B. Permet simular àrees molt grans i amb moltes coordenades. El temps de càlcul és molt inferior en una màquina grossa. I per fer previsions en temps real.

TERAFLOP La conscienciació de la societat envers els problemes medioambientals, ha influït en la manera de treballar de l'ITEMA?

J.M.B. Hi ha diferents perspectives: social, industrial, administrativa i de recerca. En la societat catalana la conscienciació ambiental existeix des de fa anys, liderada pels grups ecologistes. A nivell industrial i ad-

ministratiu a Catalunya hi ha una data clau, 1990, quan fracassa el pla de residus industrials especials. Amb això i tant la indústria com l'administració s'adonen que cal ocupar-se més del tema. A nivell de recerca, a Catalunya sempre ha hagut bastants grups, també.

TERAFLOP Com se situa vostè davant dels problemes medioambientals globals?

J.M.B. A finals dels 80 emergeix el concepte de desenvolupament sostingut i jo crec que allà hi ha l'aposta: o realment fem una revisió seriosa del model de desenvolupament sostingut o, no el planeta, però si la civilització humana podria entrar en una fase de col·lapse total. L'única espècie que ha tingut la possibilitat d'anar superant el que tallava el creixement de la seva població és l'espècie humana. A principi de segle estavem sobre els mil milions d'habitants mentre que a finals de segle estavem sobre els sis mil milions. A més ha augmentat molt la nostra esperança de vida. Per primer cop l'espècie humana ha ocupat tot el planeta i la nostra activitat ha arribat a interferir en elements bàsics del funcionament de la Terra tals com la capa d'ozó o el canvi climàtic.

TERAFLOP Quines són les pautes a seguir per a un desenvolupament sostingut?

J.M.B. Encara no tenim clar com arribar a una forma de viure que ens permetria un nivell de vida alt sense deteriorar la qualitat del medi ambient sense agotar els recursos, reciclant al màxim... Ara, les zones del món amb més baix desenvolupament volen tenir el mateix que els més desenvolupats. Jo crec, intentant ser objectiu, que no serem capaços de fer-ho. Caldria que ens deixéssim de basar en un model econòmicista però encara s'ha de concretar el que caldrà fer.

M.Àngels Ncvoa

Garry Kasparov venç per 4-2 al sistema Deep Blue d'IBM

Entre el 10 i el 17 de febrer, el campió del món d'escacs, Garry Kasparov va seure davant d'un contrincant que no es va posar nerviós ni va sentir la pressió psicològica que diuen que senten tots aquells que s'hi enfronten. Aquest oponent, al qual va vèncer per 4-2, era Deep Blue, un computador desenvolupat per IBM que pot calcular tres milions d'operacions per segon.

Deep Blue va obligar a Kasparov a rendir-se en el moviment 37 de la primera de les sis partides que van jugar. Aquesta va ser la primera vegada que una màquina venia a un gran mestre d'escacs en una partida que seguia les regles clàssiques de joc. Aquest fet va disgustar visiblement Kasparov, que va marxar del centre de convencions on es feia la partida a Filadèlfia (EUA) sense fer declaracions, davant de l'alegria de l'equip de programadors de Deep Blue. A l'endemà, quan havia guanyat la segona partida, Kasparov va definir el dia anterior com

un "mal dia" i va felicitar l'equip d'IBM pel seu gran treball. La tercera i quarta partides van acabar en empat i la cinquena i sisena les va guanyar Kasparov.

Deep Blue és un sistema IBM SP2 de 32 nodes on cada node, a més de tenir un processador Power2, té 8 processadors especials per a jugar a escacs. El sistema té una base de dades amb les partides que han jugat els grans mestres d'escacs des de fa 100 anys. A més, coneix el valor de les peces i sap si estan protegides.

Des de la meitat d'aquest segle una gran quantitat de progra-

madors han intentat dissenyar computadors i software suficientment potents per a vèncer els grans mestres d'escacs. L'any 88, un grup d'estudians de la Universitat de Carnegie Mellon (Pensilvania, EUA) van crear Deep Thought, un ordinador de dos processadors capaç de calcular 750.000 posicions per segon. Aquest ordinador va evolucionar cap a sis processadors i va jugar dues partides exhibició contra Garry Kasparov l'any 1989, que va guanyar. El successor d'aques: computador és el Deep Blue que el passat mes de febrer va jugar contra Garry Kasparov. El *match* a sis partides entre el campió del món i Deep Blue es va fer durant els actes de commemoració del 50è aniversari de l'Association for Computing Machines. L'estiu passat, dins la novena edició de la International Conference on Supercomputing (ICS) organitzada pel departament d'Arquitectura dels Computadors de la UPC, Miquel Illescas, el jugador d'escacs espanyol millor classificat mundialment, va jugar contra l'anterior versió de Deep Blue.

FOTO / NOTÍCIA



EL C⁴ POSA EN FUNCIONAMENT EL SEU WEB. El C⁴ ja té la seva pàgina de web a l'adreça <http://www.cesca.es>. A partir d'aquesta pàgina es pot accedir a informació que fa referència a aquest centre. L'apartat de Qui som? explica quina ha estat l'evolució tant del CEPBA com del CESCA fins a la creació del C⁴ i quins són els objectius del centre. A Què tenim? hi ha una descripció dels ordinadors del C⁴. També es pot accedir a l'apartat de projectes que han dat a terme al CEPBA i el CESCA, Serveis a l'Usuari, Formació i el que s'està fent al C⁴ en l'àrea de Comunicacions. També es pot accedir a la versió online d'aquest noticiari i a un apartat de Novetats.

Exemplar gratuït & Paper reciclat