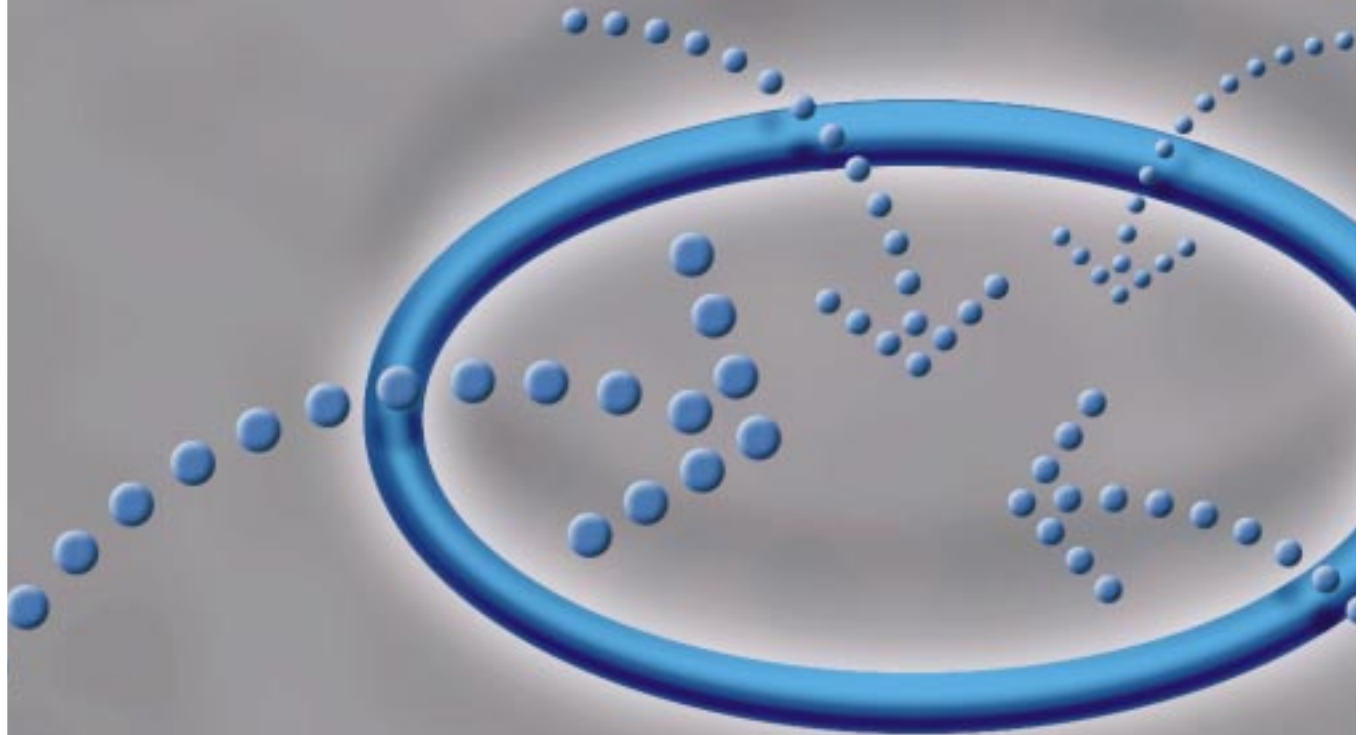


El servei d'accés remot, en marxa



■ Rafael Español, nou president de la FCR

■ SABA, un projecte d'experimentació per optimitzar l'ús d'Internet

L' accés remot

La comunitat universitària catalana ha començat 1999 amb una bona notícia: d'acord amb l'impuls que la Generalitat de Catalunya està donant a la Societat de la Informació, l'Anella Científica incorporarà el nou servei d'accés remot al sistema universitari català i, si ho desitgen, els seus membres ja poden gaudir-ne a un preu molt competitiu.

D'entrada, aquest servei estarà disponible per a uns 10.000 usuaris que podran optar per usar el servei d'Internet o el d'Intranet. El primer està orientat a tots aquells que necessitin connectar-se a punts externs a l'Anella Científica, i el segon, al personal que només necessiti accés remot als recursos de l'Anella.

D'una banda, tots els estudiants universitaris que ho sol·licitin podran disposar d'accés a Internet des del seu domicili, per tal d'aconseguir un dels objectius de la iniciativa: generalitzar l'ús d'Internet com a eina de treball, donades les seves grans possibilitats d'accés a recursos d'informació i serveis. Per exemple, des de casa, l'estudiant pot localitzar un document bibliogràfic, esbrinar a quina biblioteca universitària es troba, i si està disponible pel préstec o no mitjançant el Catàleg Col·lectiu de les Universitats Catalanes. Així mateix, l'estudiant podrà accedir a tots els serveis telemàtics i recursos creats per cada universitat (consultes a professors, tutories, campus virtuals a distància, etcètera). El cost que pagarà l'estudiant serà sempre de tarifa metropolitana de telèfon. La contractació del servei d'accés remot de manera global garantirà la cohesió territorial i la no-discriminació dels estudiants, amb independència de les dimensions de la institució on s'hagin matriculat. En el cas dels pro-

JORDI PARETO



El nou radioenllaç del CESCO, a dalt a l'esquerra, a sobre de l'antic.

fessors, el personal universitari i els investigadors l'accés remot els permetrà gaudir des de casa seva de les mateixes prestacions informàtiques que tenen al seu despatx i els farà més fàcil el teletreball.

El Comissionat, la FCR, el CESCO i la Fundació Retevisión van signar l'acord el passat mes de desembre



es posa en marxa

El president de la Fundació Catalana per a la Recerca i del Consorci Centre de Supercomputació de Catalunya, Xavier Trias (substituint recentment per Rafael Español, vegeu pàgina 5); el comissionat per a Universitats i Recerca, Joan Albaigés; i el president de la Fundación Retevisión, Pedro de Torres, van signar el passat 14 de desembre un conveni de col·laboració per tal de posar en marxa el servei. Es tracta d'un accés universal per a cada institució catalana connectada a l'Anella Científica, de manera que cadascuna utilitzarà el servei com si fos únicament seu.

Tots aquests serveis es vehiculen mitjançant l'Anella Científica, creada l'any 1993 sota l'impuls i patrocini de la FCR per tal de dotar a tot el col·lectiu científic d'una xarxa de fibra òptica que els permetés la transmissió de dades, imatges i tot tipus d'informació a

gran velocitat. Mitjançant l'acord signat, la Fundació Retevisión finança l'adquisició dels equips d'alta tecnologia necessaris i les línies que permetin connectar la infraestructura de comunicacions del CESCA via radioenllaç i facilita l'accés a Internet i la identificació dels usuaris remots. Així, l'usuari es connecta a Retevisión i d'allà, via radioenllaç, passa a connectar-se amb el CESCA. El radioenllaç és de 2 Mbps dividits en dos circuits: 1,5 Mbps per a l'accés remot i un de 512 Kbps per a la línia internacional.

El paper del CESCA serà el de gestionar el servei. Des del Centre es farà l'autenticació de l'accés ja que disposarà d'una base de dades amb els usuaris de cada universitat que hagin demanat el servei. L'acord permetrà que els estudiants que ara es connecten a través de RedIRIS ho puguin fer a través de Retevisión amb

l'Anella Científica i a partir d'aquesta amb Internet. Així, les universitats que no disposen d'aquest servei o que l'han aplicat parcialment el podran universalitzar, i les que ja l'han desplegat tindran l'opció d'escollir l'operador amb qui es volen connectar.

Modificacions al proxy

Amb l'arribada de l'accés remot el CESCA introduirà d'altres canvis en el seu servei. El fenomen que es preveu serà peculiar: com els estudiants usaran més Internet, i de retruc el proxy, aquest també tindrà més informació i, per això, s'ampliarà la capacitat d'em-

Un moment de l'acte en el que es va signar el conveni de col·laboració per posar en marxa el servei d'accés remot. D'esquerra a dreta, Joan Albaigés, Xavier Trias i Pedro de Torres.





▲ El router que actua com a *Network Acces Server (NAS)* per al servei d'accés remot.

magatzematge. A més, el *proxy* estarà connectat a RedIRIS i a Retenet (la xarxa de Retevisión que permet l'accés a Internet) i podrà tenir dades d'aquestes dues bandes. Les franges horàries en què s'usarà el servei es preveu que estiguin distribuïdes. Se suposa que l'ús que es faci del servei d'accés remot serà complementari a d'altres usos d'Internet i, per tant, es creu que la franja horària d'utilització serà diferent de la de la feina, en el cas dels professors, o de la dels estudis, en el cas dels alumnes.



▲ La Sun E3500 (a l'esquerra, sota del monitor) que allotja el servei de *proxy* *caché* i l'autenticador de l'accés remot. Al costat, el servidor de *news SunUltra2*.

La nova màquina sobre la qual corre el *proxy* ha passat de 2 a 4 processadors UltraSPARC (de 336 Mhz i 4 MB). S'ha passat de 512 MB a 1 GB de memòria RAM; de 33,6 a 49 GB de disc, i de 12,6 a 21 GB de disc dedicat a *proxy*. L'Squid, el programa que dóna el servei de *proxy*, s'ha compilat amb l'opció entrada/sortida asíncrona de forma que la *caché* respon amb més velocitat i de manera més fiable, i se l'ha dotat de la capacitat de respondre a comandes SNMP (*Simple Network Management Protocol*). La màquina, a

més, està preparada per intercanviar informació resumida amb d'altres *cachés* germanes. Finalment, en aquesta versió s'han introduït millores respecte a l'anterior i s'hi ha corregit alguns *bugs*, s'ha augmentat el nombre de *filedescriptors* i el d'i-nodes amb què pot treballar.

Telèfons d'informació de les institucions



Universitat de Barcelona	93 414 44 49
Universitat Autònoma de Barcelona	93 581 21 00
Universitat Politècnica de Catalunya	902 20 09 20
Universitat Pompeu Fabra	93 542 21 23
Universitat de Girona	972 41 80 95
Universitat Rovira i Virgili	977 55 80 00
Universitat de Lleida	973 70 20 93
Universitat Oberta de Catalunya	902 141 141
CSIC	93 409 54 10

XAVIER TRIAS, QUE FINS ARA ESTAVA EN EL CÀRREC, PASSA A SER PRESIDENT D'HONOR

Rafael Español, nou president de la FCR

Rafael Español, president del Grupo Seda, és d'ara endavant el nou president de la Fundació Catalana per a la Recerca (FCR) i, per tant, també del Consorci Centre de Supercomputació de Catalunya (CESCA) i de l'Institut d'Estudis Espacials de Catalunya (IEEC). Español substitueix a Xavier Trias, conseller de la Presidència, que va accedir al càrrec el novembre de 1997 i que, a partir d'ara, passarà a ser president d'honor. Aquesta és la primera vegada que el president de la Fundació Catalana per a la Recerca no és un conseller del Govern. Aquest fet s'emmarca en el procés que la Fundació Catalana per a la Recerca està duent a terme des de fa anys, en posar l'èmfasi en la innovació tecnològica i en la promoció de la societat de la informació.

El Patronat de la Fundació Catalana per a la Recerca, reunit el passat 14 de desembre, va designar dos nous vicepresidents:

Aquesta és la primera vegada que el president de la Fundació Catalana per a la Recerca no és un conseller del Govern



CARLES JUSCÀ/PRESSA

Rafael Español.

Albert Mitjà, director general d'Energia, en representació de la Generalitat; i Pedro Fontana, president de Banca Catalana, en representació del sector privat del Patronat.

Rafael Español, que havia estat nomenat vicepresident de la Fundació Catalana per a la Recerca el passat mes de setembre, és president-director de La Seda a Barcelona, empresa a què està vinculat des de 1993. A més, és president de Profibra, membre del Comitè de Direcció del Comitè Internacional del Rayon i Fibres Sintètiques (CIRFS) a Brussel·les, del Consejo Intertextil Español, conseller d'Endesa i d'Endesa Internacional.

PROGRAMES DE MOBILITAT

Sean Hetterich, de la **University of Stuttgart** (Alemanya), va arribar el passat 1 de gener per treballar amb Xavier Oliver, del Departament de Resistència de Materials i Estructures a l'Enginyeria de la UPC, en el projecte *Development and Application of Finite Elements Methods for Large Scale Coupled Fluid-Structure Problems*. Hetterich marxarà el 30 de juny.

Mirko Vitiello, de la **Università di Milano** (Itàlia), ens visita per segona vegada, del 10 de gener al 10 de març. Vitiello treballa amb Francesc Illas, del Departament de Química Física de la UB, en el projecte *Theoretical Study of Hydrogen Cracking on SiO₂ Regular and Defective Sites*.

Odile Eisenstein, de la **Université de Montpellier 2** (França), va arribar a Barcelona el passat 11 de gener per treballar amb Agustí Lledós, del Departament de Química de la UAB, en el projecte *Computational Study of the Structure and Fluxional Behaviour of Transition Metal Complexes*. Eisenstein marxarà el proper 7 de març.

Richard Baxter, de la **Queen's University of Belfast** (Irlanda del Nord), treballa en el projecte *Modeling Metal-Support Interactions by Means of Quantum Chemical and Molecular Dynamics Methods* amb Francesc Illas, del Departament de Química Física de la UB. Baxter va arribar el 15 de gener i marxarà el 15 de juliol.

Michael Thormann, de la **Universität de Leipzig** (Alemanya), s'estarà entre nosaltres del 15 de gener al 15 de juliol per treballar en el projecte *General Principles of K⁺ Channel Antagonist Binding: Rational Design of Highly Selective K⁺ Channel Antagonists*. Thormann ha vingut convidat per Miquel Pons, del Departament de Química Orgànica de la UB.

El projecte SABA experimenta noves aplicacions d'Internet en banda ampla

El projecte SABA, en el qual participen la UPC, la UdG i el C⁴, entre d'altres institucions, té com a finalitat l'experimentació i avaluació de noves propostes de tecnologia, arquitectura i protocols de xarxes de comunicacions que permetin la incorporació de tecnologies en banda ampla i solucionar els problemes que la xarxa Internet té actualment per proveir una qualitat de servei.

El projecte Nous Serveis per a la Xarxa Acadèmica de Banda Ampla (SABA) vol experimentar amb noves aplicacions i els nous protocols (RSVP, IPv6, etc.) d'Internet2, realitzant esdeveniments distribuïts usant noves tecnologies de xarxa. Els nous protocols proporcionen noves possibilitats per a desenvolupar noves aplicacions, i per tant nous valors afegits per a tota la comunitat d'usuaris que més tard se n'aprofitarà. Així, els resultats obtinguts seran útils per a la teleducació i el teletreball. Per exemple, SABA inclou l'adaptació d'aplicacions existents de treball cooperatiu i videoconferència per tal de realitzar un ús intensiu i continuat de les noves plataformes de xarxa aplicant mecanismes per donar una qualitat de servei.

Les entitats participants del projecte són el Centre de Comunicacions Avançades de Banda Ampla (CCABA) de la UPC, el Departamento de Ingeniería Telemática (DIT) de la Universidad Politécnica de Madrid i Telefónica I+D. A més, es treballa amb la UdG i com a Entitats Promotores i Observadores (EPO) estan RedIRIS, el C⁴, la UOC, i el Banc de Sabadell. El projecte, que té el finançament de la CICYT, va posar-se en marxa l'1 d'agost de 1997 i acabarà el 31 de juliol de 1999.

El projecte SABA s'estructura en cinc fases:

■ Treballar en el camp de les tecnologies i l'arquitectura de xarxa. Així, es busca dissenyar i avaluar noves propostes d'arquitectura de xarxes de comunicacions de banda ampla que permetin millorar les limitacions de les xarxes Internet actuals, desplegant els protocols

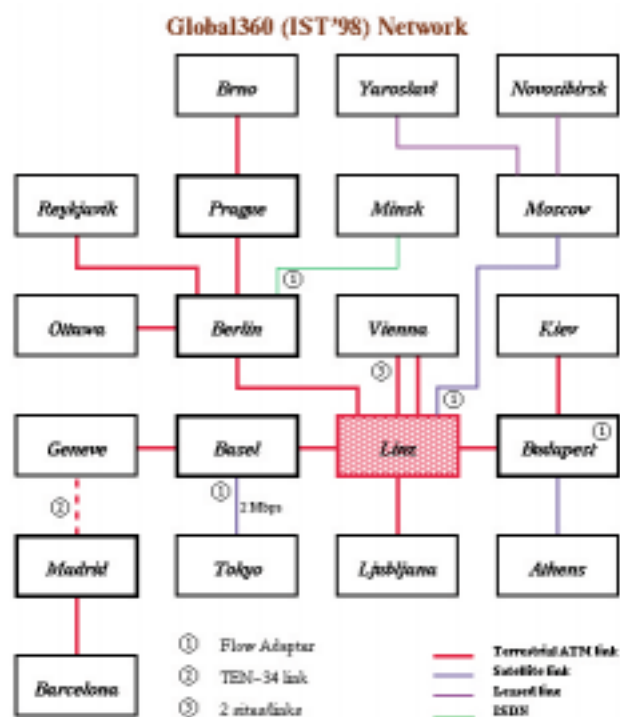
de xarxa, com per exemple l'IPv6, els protocols de temps real i reserva de recursos, i el *multicast* IP sobre ATM. Es pretén que Internet (ara amb un servei que no garanteix la qualitat conegut com a *best effort*) passi a proveir diferents classes de servei depenent de paràmetres de *Quality of Service* (QoS) basant-se en RSVP, ATM, etc. En aquesta fase es volen provar les noves tecnologies de QoS dels *routers* i experimentar amb arquitectures ATM avançades, MPOA entre d'altres, per poder treballar amb

les diferents possibilitats de qualitat.

■ SABA busca el desenvolupament de noves aplicacions, com per exemple el programa ISABEL de videoconferència orientada a les tele-reunions, teleconferències i treball cooperatiu en temps real. ISABEL s'està posant de manifest com una bona aplicació per fer *broadcasting* on hi hagi moltes localitzacions i com una eina útil per fer tele-reunions i seminaris distribuïts. De fet, totes les reunions del projecte SABA ja s'estan duent a terme mitjançant videoconferència. També es treballa amb eines MBone amb protocols de QoS i usant la reserva de recursos, i amb la videoconferència sobre LAN. Finalment també s'està experimentant en el processament distribuït en ATM en entorns WAN. També es busca l'adaptació d'aplicacions existents a les noves arquitectures de xarxa.

■ Creació d'una plataforma de xarxa. En aquest camp és on intervé el CES-CA com a entitat gestora de l'Anella Científica i consisteix a posar en funcionament una xarxa en paral·lel a la de RedIRIS per a les experiències del projecte. Es busca el desenvolupament d'una plataforma de xarxa esta-

Entitats participants en la conferència IST'98



Johannes Kepler University Linz, EIDIAKH

11/07/98, 14:06:11, 08

ble basada en les noves arquitectures que tracta el projecte i una plataforma d'equips d'usuari en les insitucions participants que permeti una experimentació continuada.

■ I encara més important que el desplegament de la plataforma de xarxa és provar amb ella i, per tant, una quarta fase d'experimentació i avaluació de resultats que s'han obtingut amb la plataforma anterior i la posada en marxa d'experiències d'ús real. Un exemple és la difusió de conferències a nivell europeu com l'IDC 98 o la Information Society Technologies-98, a Viena.

■ Finalment els resultats es transfereixen als EPO i als receptors interes-

sats fent èmfasi a Telefónica i RedIRIS.

Per a la realització de les proves d'aquest projecte es va crear una infraestructura de transport formada per circuits virtuals ATM no permanents. Experiències amb el tipus de xarxa amb què treballa el SABA (vegeu peça independent en aquesta mateixa pàgina) són pioneres a Catalunya i a Espanya. Totes elles funcionen amb la filosofia d'Internet2 i amb una determinada qualitat de servei. L'aplicació que demostra en aquest projecte alguns dels nous serveis de xarxa avançada és ISABEL. ISABEL permet diferents modes de funcionament: telereunió (hi ha diferents punts on tothom pot participar), tele-

conferència (un punt coordina la resta de participants, tenint més aviat caràcter de difusió) i teleseminari (destaca qui parla però es poden fer preguntes) Els usuaris tenen un seguit de beneficis: si es té una bona connectivitat de xarxa, vídeo i àudio d'alta qualitat, la possibilitat de col·laboració entre grups de diferents universitats, etc. Algunes activitats que s'han dut a terme usant aquesta eina són: dos cursos de doctorat (1997-1998/ 1998-1999) a la UPM i a la UPC, més de 10 reunions distribuïdes del projecte SABA i SABA-ext el 1998, dos reunions del projecte MEHARI, difusió d'esdeveniments com l'IST 98 o el Tele-com I+D del 97 i del 98.

La xarxa

La xarxa sobre la qual el projecte SABA (vegeu dibuix) desenvolupa les seves experiències té les següents característiques:

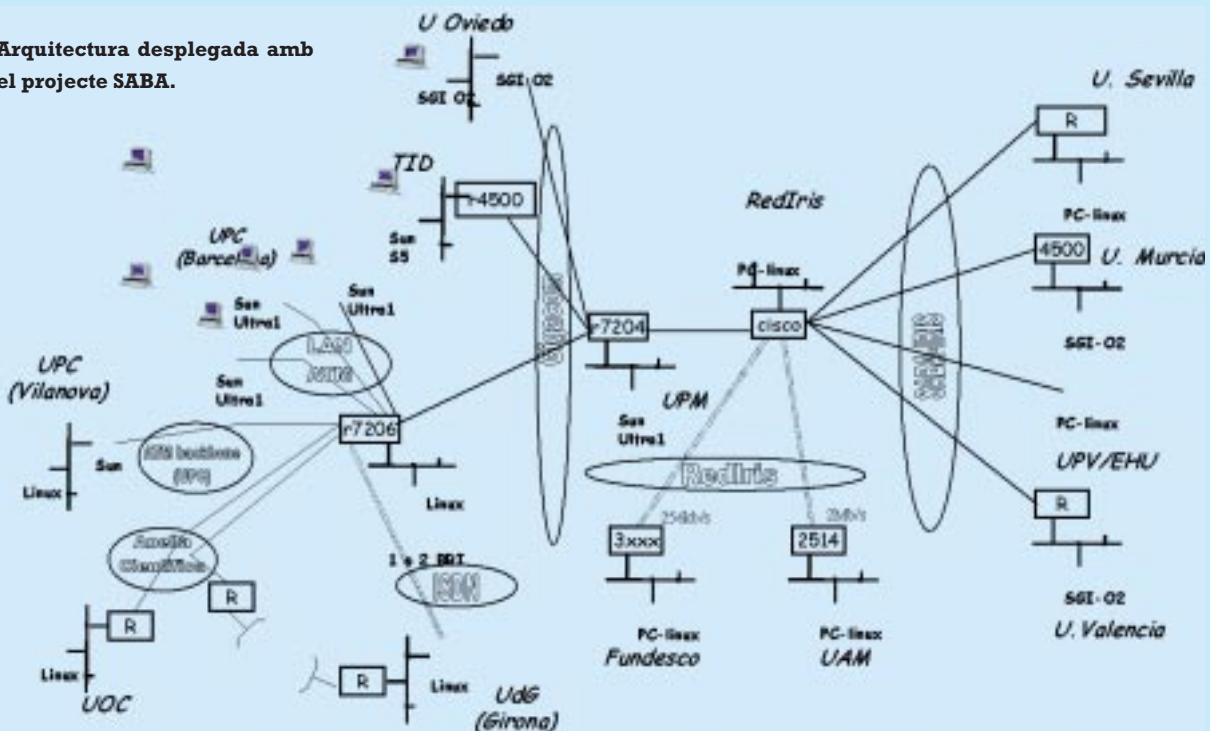
■ A Catalunya s'ha instal·lat una xarxa local ATM (situada al CCABA) amb un router (Cisco 7206) que dona connectivitat amb Madrid. Hi ha una connexió en ATM al backbone de la UPC i arribant en ATM nadiu fins a Vilanova. També existeix connectivitat ATM directa amb el CESCA que subministra accés amb la UOC (3 Mbps) i a la UdG (1 Mbps) a través del radioenllaç (Frame Relay) que existeix amb Girona. Totes les connexions ATM són a 155 Mbps.

■ A fora de Catalunya, l'Escola de Telecomunicacions de la UPM de Madrid i el CCABA de la UPC a Barcelona

s'interconnecten a través de Gigacom (xarxa comercial ATM de Telefónica) amb circuits virtuals sota demanda de l'amplada de banda necessària (entre 2 i 6 Mbps). Madrid va a RedIRIS que el connecta a la resta de seus d'Espanya mitjançant xarxes privades virtuals (VPN) amb circuits ATM d'entre 1 i 2 Mbps. On no arriba l'ATM comparteixen l'accés d'Internet a RedIRIS amb aquests punts i usen la capacitat sobrant.

Un dels problemes que es presenten ara és com s'arriba als usuaris a gran escala. Cal veure com adaptar la qualitat i, a la vegada, connectar amb punts d'usuaris que, molts cops, van a baixa velocitat. Aquest és un dels altres objectius del projecte.

Arquitectura desplegada amb el projecte SABA.



EL DATA BANK DE LA NEA INTENTA PROMOURE L'ÚS D'AQUEST TIPUS D'ENERGIA EN UN ENTORN PACÍFIC

Coneixements nuclears compartits

L'Agència per a l'Energia Nuclear (NEA, sigles angleses de Nuclear Energy Agency) és una agència especial de l'Organització per a la Cooperació Econòmica i el Desenvolupament (OECD) ubicada a París. El seu màxim objectiu és promoure la cooperació i el desenvolupament en el camp de l'energia nuclear de forma pacífica entre tots els països interessats. El Data Bank de la NEA té la mateixa funció però a una escala més reduïda: vol compartir programes i coneixements entre els països membres.

El Data Bank és un dels serveis que ofereix la NEA. Es tracta d'un banc de dades nuclears i de programes diversos que s'han aconseguit gràcies a les contribucions de la trentena de països que hi col·laboren i que, a la vegada, poden ser utilitzats per aquests països. Tots aporten els seus coneixements i, de retruc, tots aprenen de la informació que han aportat els altres. A més, mitjançant acords es fan intercanvis amb Canadà i els EUA, entre d'altres zones del món. El NEA Nuclear Science Committee supervisa les activitats del Data Bank i coordina la recerca internacional en temes bàsics i aplicats a l'energia nuclear. En el Data Bank participen gairebé tots els països membres de la NEA (uns 30) i tots els països de l'Organització Internacional de l'Energia Atòmica (OIEA) encara que no siguin membres de la NEA, mitjançant un acord de cooperació entre les dues entitats que es va firmar el 1968. Aquests acords fan que el nombre de països participants arribi a gairebé un centenar (vegeu el mapa que acompanya l'article).

El NEA Data Bank proporciona dades, eines de càlcul i experiència en els camps de la informació sobre reaccions nuclears, programes informàtics verificats, química termodinàmica, benchmarks per a la validació de programes... i, a més, organitza seminaris i cursos per a l'aprenentatge i ús correcte d'aquestes eines. Les seves activitats van adreçades a científics i en-

ginyers en energia nuclear, especialistes en recerca d'organitzacions governamentals, a la indústria i a les universitats que necessiten determinats programes per tirar endavant les seves investigacions i els seus projectes.

L'energia nuclear, sovint envoltada de polèmiques, té un seguit d'avantatges que la NEA i el Data Bank volen posar de relleu per tal d'usar-la com a

alternativa a d'altres possibilitats. Per exemple, segons dades de l'OECD, el consum mundial de combustibles fòssils podria arribar a doblar-se d'aquí a l'any 2020. Les emissions de diòxid de carboni (CO₂) augmentarien i, en proporció, ho farien també els riscos que comporta: aquestes emissions —segons la NEA— perjudiquen el procés de canvi climàtic i acceleren els seus efectes. Les energies renovables i la nuclear es presenten així com una alternativa que pot arribar a jugar un paper clau. En aquest context, la NEA vol que els països prenguin les postures que desitgin davant de

Bojje Forsater, Hallands-Bild / OECD per cortesia de Vattenfall AB



Substitució d'un generador de vapor a la central de Ringhals 3 (Suècia) el 1995.

DATA BANK SERVICE AREA



l'energia nuclear (reduir o augmentar la seva capacitat nuclear) però d'una manera responsable i sempre amb ple coneixement de les implicacions que comporta. La informació que proporciona la NEA, i en concret el Data Bank, ajuda —en certa manera— a prendre aquest tipus de decisions.

La missió del Data Bank és mantenir un centre de serveis als 30 països membres de la NEA per a l'intercanvi de programes i dades de tipus físic, químic i tecnològic, de l'energia nuclear. A més, el Data Bank organitza cursos i vol fer arribar informació validada internacionalment per diversos països, compilant, fent tests i distribuint-la a usuaris acreditats en formats estàndard. Una part vital de l'assegurament de la qualitat és, per exemple, comprovar que un codi determinat pot reproduir el comportament específic d'un reactor nuclear i dels seus components. Els programes que es distribueixen, es

comproven, s'instal·len en diferents plataformes i després els usen tots els països membres. Les aplicacions són molt diverses: programes que estudien l'impacte ambiental referit a l'atmosfera, la meteorologia i la física; d'altres de geofísica, de física fonamental, i d'utilització de càrregues de reactors, etcètera.

El 99% dels programes que es reben estan en FORTRAN. El següent pas és intentar executar el programa en una plataforma que s'aproximi el màxim a la que va fer servir l'autor del mateix i s'intenten eliminar subrutines que depenguin de la màquina i de

l'entorn. Per contra, es fomenten totes aquelles subrutines de domini públic i les que tinguin els compiladors. Després es fan tests i es comparen els resultats amb els que molts cops ha aportat l'autor, i es fa passar el programa per un

control de qualitat per tal de permetre guanyar temps a la persona que el farà servir (així se li eviten sorpreses desagradables quan l'usuari comença a treballar amb ell). El personal del Data Bank té un accés més fàcil per poder parlar amb l'usuari que ha fet el programa i també arriba abans a mitjans de càlcul que els usuaris, per ells mateixos, no poden utilitzar.

Pel que fa al paper d'Espanya dins de la NEA i del Data Bank, l'any 1998 es van distribuir un total de 139 programes a tot l'Estat. Espanya, per la seva banda, va contribuir al fons documental del Data Bank amb 4 programes i un benchmark. En total, uns 20 centres espanyols participen en el Data Bank, ja sigui rebent o elaborant programes. Entre ells es troben el Consejo de Seguridad Nuclear, Tecnatom, s.a, el Servicio de Física Hospitalaria y Protección Radiológica Hospital Virgen del Rocío, el CIEMAT, l'Institut de Robòtica Industrial (UPC/CSIC), la central nuclear d'Almaraz, Iberdrola Generación, SENER Ingeniería y Sistemas i diverses universitats de l'Estat, entre d'altres.

El 1998, Espanya va contribuir amb 4 programes i un benchmark i s'hi van distribuir un total de 139 programes

La Salle i l'IQS es passen a la fibra

L'Escola La Salle i l'Institut Químic de Sarrià (IQS) estan connectats a l'Anella Científica mitjançant fibra des del passat 14 de gener. Fins ara, aquestes dues institucions s'hi connectaven mitjançant radioenllaç. Amb aquest canvi les tres institucions connectades que pertanyen a la Universitat Ramon Llull, arriben a l'Anella amb fibra. La tercera, l'Escola Blanquerna, ja la utilitzava des del setembre de 1998.



Noves versions de programari disponibles

Durant el mes de gener el CESCÀ ha actualitzat dos dels programes disponibles per als usuaris: l'UniChem i el Gamess.

■ L'UniChem, un producte d'Oxford Molecular per a química computacional, està disponible des de fa unes setmanes en la seva versió 4.1. Consta d'una interfície gràfica que funciona sobre una estació de treball Silicon Graphics i un conjunt de programes de química computacional que s'executen a l'SP2 (MNDO94, DGAUSS, CADPAC, Gaussian). La nova versió del programa, que ja treballa amb el Gaussian98, no incorpora cap modificació a la interfície gràfica però sí algunes novetats en els programes de química computacional: s'inclou la nova versió 4.1 del programa DGauss, i el CADPAC s'ha actualitzat a la versió 6.3.

D'altra banda, s'ha instal·lat a l'IBM SP2 i l'HP V2250 la nova versió de maig de 1998 del programa de química quàntica GAMESS. La versió antiga (abril de 1997) es mantindrà activa fins al 20 de març d'enguany, data en què serà substituïda per aquesta nova versió si no reporta cap problema.

Avaria en la connexió d'Internet amb els EUA

El cable de fibra òptica que uneix Espanya amb els Estats Units va patir una avaria el passat dimarts 12 de gener a les 14.30 hores. L'incident va fer que s'interrompessin les connexions amb Amèrica del Nord a través d'In-

ternet i va afectar també part del tràfic de la xarxa amb la resta d'Europa.

El problema es va deure a que una excavadora que treballava en unes obres que s'estan realitzant a la carretera N-I, a l'alçada de la localitat madi-

lenya d'Alcobendas, va tallar accidentalment una mànega de comunicacions, segons dades de diversos proveïdors d'Internet. El tall de les línies va afectar en un primer moment gran part de les comunicacions internacionals de veu i dades, tot i que les de veu es van restablir durant la tarda del mateix dia. Les línies afectades es van recuperar del tot a les 6.20 hores de la matinada del dimecres, segons el Centre Nacional de control de Telefónica.

NCAR

El CESCA ha adquirit un nou programari de visualització anomenat NCAR Graphics. Es tracta d'un paquet desenvolupat per la University Corporation for Atmospheric Research (UCAR) a principis dels anys 60 que proporciona un entorn integrat de processament de grans volums de dades i la seva posterior visualització. Suporta una gran varietat de formats de dades —com per exemple Network Common Data Form (NetCDF), HDF, IEEE, binari i ASCII—, disposa d'una llibreria molt àmplia de tipus de gràfics —x4, contorns, superfícies— i genera sortides en els principals formats estàndard —postscript, Computer Graphics Metafiles (CGM)—.

El NCAR és de propòsit general tot i que és àmpliament utilitzat en les àrees de meteorologia, astrofísica i ciències medioambientals. Es pot ac-

cedir al programa mitjançant tres modalitats d'ús que es diferencien en el grau de dificultat a l'hora de fer-lo servir i en la complexitat dels gràfics que poden generar. Són les següents:

■ Low Level Utilities (LLU): són les llibreries de nivell més baix (FORTRAN i C). Permeten generar gràfics i processar dades des de programes escrits per l'usuari.

■ High Level Utilities (HLU): estan construïdes sobre les LLU i proporcionen una interfície consistent amb les funcionalitats d'NCAR. Són rutines més senzilles i còmodes d'utilitzar que les LLU però, per contra, no disposen de totes les funcionalitats de les LLU.

■ NCL (NCAR Command Language):



La imatge superior es la representació d'una superfície en 3-D feta amb NCAR Graphics.

es tracta d'un llenguatge interactiu construït sobre les HLU. Permet manipular dades i crear gràfics de forma dinàmica a través de la línia d'ordres sense necessitat d'escriure i compilar cap programa.

El programa s'ha instal·lat a l'SP2 i a l'HP V2250.



CASTEP

El CESCA ha comprat un dels programes més utilitzats en ciència de materials: C²-CASTEP. CASTEP (Cambridge Serial Total Energy Package) és un mòdul de mecànica quàntica integrat dins el paquet Cerius² (MSI) de modelatge molecular. El paquet adquirit complet inclou: Cerius²-Visualizer, CASTEP-Interface i CASTEP.

CASTEP té el seu origen en un conjunt de programes desenvolupats pel Grup de Teoria de la Matèria Condensada de la Universitat de Cambridge, durant les dècades dels 60 i

◀ **L'estructura de la cordierita hidratada, visualitzada usant Cerius².**

els 70. A mitjan dels anys 80 es va introduir al programa un seguit de canvis que van millorar de forma considerable el seu rendiment i van fer possible augmentar la grandària dels sistemes per a estudiar.

CASTEP permet fer càlculs de l'energia total i propietats relacionades (constants de cel·la, constants elàstiques, geometries, energies d'enllaç, etc.) de sistemes periòdics. Els càlculs es realitzen sobre una cel·la unitat que es repeteix periòdicament en l'espai i es caracteritzen per la utilització de pseudopotencials per substituir el potencial electroestàtic; funcions de base d'ones planes per expandir la funció d'ona electrònica, i Density Functional Theory (DFT) per incloure les interaccions interelectròniques. El programa s'instal·larà a l'IBM SP2.

Es duplica la capacitat de connexió de RedIRIS amb el punt neutre

La capacitat de connexió de la línia d'Ibernet —que connecta RedIRIS directament amb el punt neutre— es va doblar el passat dia 28 de desembre. Així, l'amplada de banda actual és de 18,4 Mbps en valors ATM i de 15,56 Mbps en valors IP. Amb aquest canvi, els usuaris accediran més ràpidament a les organitzacions que estiguin connectades

al punt neutre. Espanix, el Punt Neutre Espanyol d'Internet, està format per les següents organitzacions: BT Telecomunicaciones, S.A., EUnet-GOYA, Fujitsu-ICL Medusa, GLOBAL ONE, IBM Global Services, Sarnet, Telefónica Transmisión de Datos. Adicionalment, es troben en fase d'incorporació a ESPANIX IPFnet, Retevisión i Wisper.

Edita

CESCA

AMB EL SUPORT DE



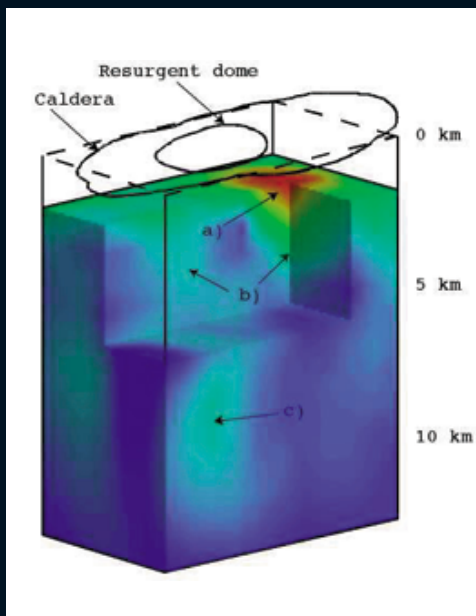
Generalitat de Catalunya



FUNDACIÓ CATALANA PER A LA RECERCA

Universitat de Barcelona
Universitat Autònoma de Barcelona
Universitat Politècnica de Catalunya
Universitat Pompeu Fabra
Universitat de Girona
Universitat Rovira i Virgili
Universitat de Lleida
Universitat Oberta de Catalunya
CSIC

F O T O / N O T Í C I A



Imatge tridimensional d'un volcà actiu a l'Est de Califòrnia.

El codi de colors representa les anomalies de velocitat de les ones sísmiques P (compressionals). Aquesta imatge s'ha obtingut mitjançant la inversió tomogràfica de les primeres arribades de terratrèmols. L'escala de la dreta indica fondària per sota de la superfície terrestre. Les característiques més importants són: a) la part més fonda de la conca sedimentària; b) roca alterada per la circulació hidrotermal;

c) la part més fonda del sistema hidrotermal. Les zones hidrotermals apareixen caracteritzades per velocitats baixes. Aquesta figura està treta d'un bloc que fa 128x128x44 km. En l'actualitat la grandària de la grid és d'1x1x1. Un dels objectius actuals és augmentar la resolució fins a disminuir la grandària de la grid a 0,5-0,1 km. La resolució del problema és no lineal, i es necessita un algoritme d'inversió d'ones. Ari Triggvason, del Departament de Geofísica de l'Institut Jaume Almera (CSIC), ha desenvolupat el programari per a la inversió tomogràfica. La solució de l'equació d'ones es calcula en l'actualitat mitjançant el traçat de raigs. Ramon Carbonell està desenvolupant programari per simulació de propagació d'ones en medis heterogenis tridimensionals mitjançant diferències finites. Els càlculs s'han fet a l'O2000.

Fe d'errades

A la fotonotícia del TERAFLOR número 37 faltava indicar que el càlcul havia estat realitzat pel **Grupo de Arquitectura y Concurrencia de la Universidad de Las Palmas de Gran Canaria**, liderat per **Álvaro Suárez Sarmiento**.

TERAFLOP

DIRECTOR

Miquel Huguet

COORDINADORA

Alicia Martínez

REDACCIÓ

Mònica Tudela

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà & Associats

CESCA

Gran Capità, 2-4

08034 Barcelona

Tel. 93 205 64 64

Fax: 93 205 69 79

<http://www.cesca.es>

teraflop@cesca.es

DIPÒSIT LEGAL: B-33512-94

ISSN: 1134-6671