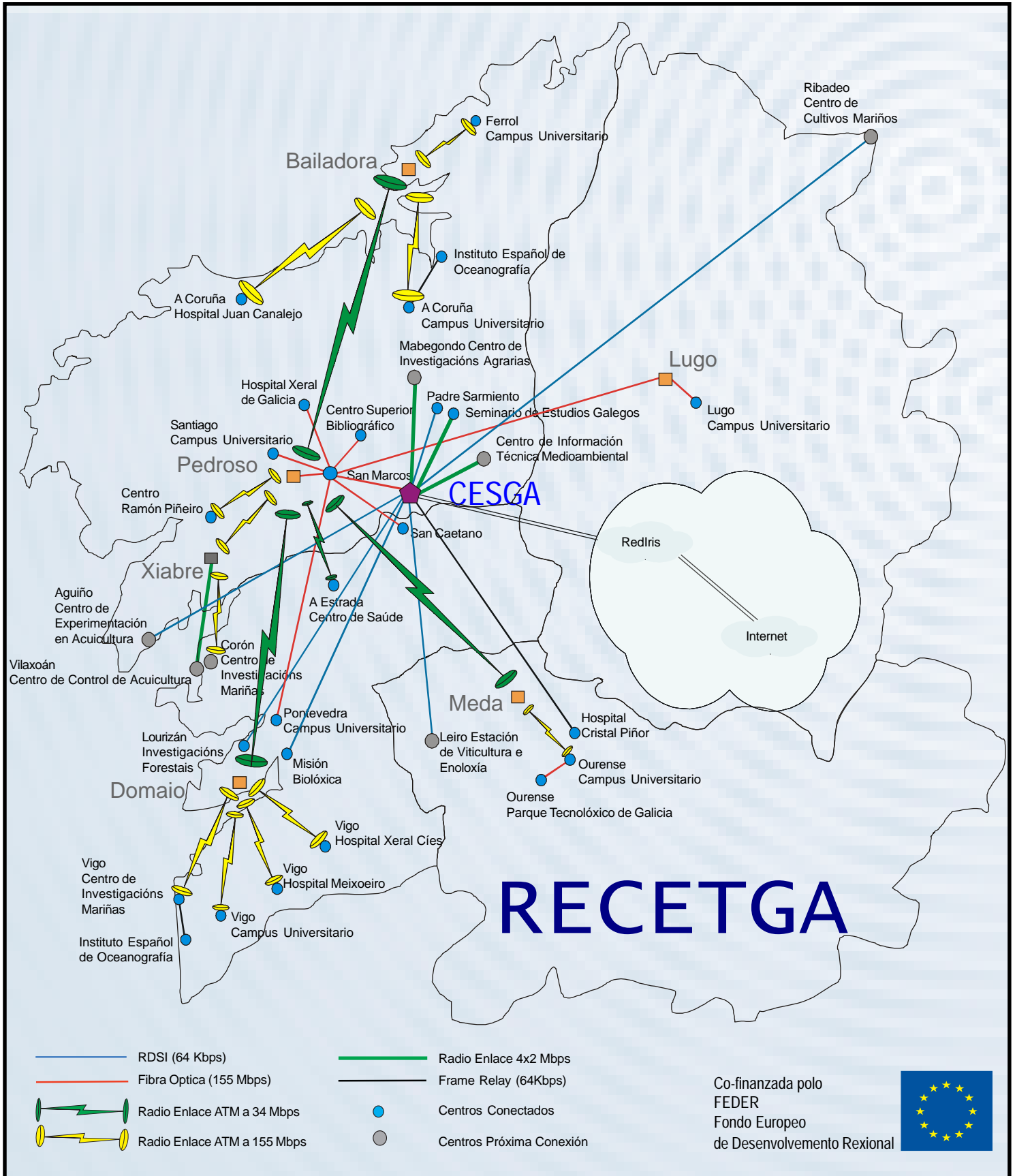


díxitos



Novas do Centro de Supercomputación de Galicia

Xaneiro 1999



[sumario]

[3] CESGA INFORMA

A Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia, RECETGA, soportada en tecnoloxía ATM, pon a disposición dos investigadores galegos un amplo repertorio de recursos e o máis avanzado en calidade de servizos.



[6] TECNOLOXÍA

A NEC Corporation lanza ó mercado o SX-5. Blue Mountain acada rendementos de cálculo de 1.6 Teraflops.



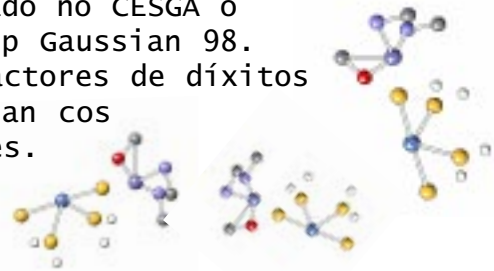
[4-5] EXPERIENCIAS DO USUARIO

Investigadores da Universidade de Santiago traballan na creación dunha ferramenta que permitirá predicir o rendemento de códigos irregulares no AP3000.



[7] OPINIÓN

Química cuántica e computacional en Galicia. Celebrado no CESGA o Workshop Gaussian 98. Os redactores de díxitos conversan cos ponentes.



[8] TI GALICIA

Luz verde á Rede de Bibliotecas de Universidades de Galicia. Novas aplicacións HPC no CESGA. Servidor espello da Zentralblatt MATH no CESGA.

[editorial]

Creados os grupos de traballo

CESGA – Universidades

O pasado 30 de outubro celebrouse no CESGA a primeira reunión de traballo dos coordinadores de actividade CESGA – UNIVERSIDADES. Nesta reunión fixéronse os obxectivos para o vindeiro ano e constituíronse dous grupos de traballo, un de cálculo intensivo, e outro dedicado as comunicacións. A iniciativa de creación destes grupos de traballo atopou unha excelente acollida por tódalas partes reunidas. Á reunión acudiron os coordinadores das tres universidades de Galicia e o do propio CESGA. Quedaron establecidos os responsables dos grupos de traballo do seguinte modo:

	Coordinador	Cálculo Intensivo	Comunicacións
CESGA	Ignacio López	Jesús Ramírez	José Carlos Pérez
USC	Luís Coladas	J.L. Simón	Antonio Pérez
UDC	Bernardino Arcay	Ramón Doallo	Antonino Santos
UVI	Manuel Ramos	Antonio Domínguez	Manuel Posse
AGI			Miguel Jiménez
			Juan Ruiz Buján

díxitos

Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA)

Director:

Javier García Tobío

Coordinador:

Fernando Bouzas

Redacción:

Ignacio López Cabido,
José Antonio Souto

Impresión:

Gráficas Litonor

Depósito legal:

C-1604-1998

ISSN:

1139-563X

Edita:

CESGA

Avenida de Vigo, s/n
(Campus Sur)

15706 Santiago

de Compostela

A Coruña, España

Teléfono: 981 594500

Fax: 981 594616

Correo electrónico:

dixitos@cesga.es

Enderezo web:

www.cesga.es/dixitos

Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia Calidade e Servizo nas Comunicacións

RECETGA

RECETGA, a Rede de Ciencia e Tecnoloxía de Galicia, é a rede de comunicación da Comunidade Científica Galega; a súa xestión corre a cargo do CESGA en coordinación con AGI (Autopista Galega da Información) dependente da Consellería de Cultura, Comunicación Social e Turismo. O financiamento dos equipos que conforman a rede foi posible en parte gracias ós Fondos Europeos de Desenvolvemento Rexional, FEDER. RECETGA é unha infraestrutura propia galega que non depende de operadores externos.

RECETGA non parou de medrar dende a súa implantación en 1993. Hoxe están conectados a rede centros de investigación da Xunta de Galicia, centros de investigación do Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) en Galicia, os sete campus das tres universidades galegas e centros de investigación pertencentes a hospitais e a fundacións públicas e privadas.

[Servizos RECETGA]

A comunidade científica galega usa a rede para satisfacer as súas necesidades en canto á transmisión de datos, videoconferencia, telefonía IP, teleensino, vídeo baixo demanda ou o uso de aplicacións gráficas interactivas.

Ademais de interconectar os centros de investigación en Galicia, RECETGA facilita o acceso a todos os recursos e servizos disponibles a través de RedIRIS e Internet, xa que, o CESGA é o nodo de RedIRIS en Galicia. A rede tamén permite ós investigadores conectarse en remoto ós recursos do CESGA nos campos da supercomputación, a visualización científica, a animación e o teleensino. O Sistema Universitario de Galicia tamén fai uso da rede co fin de optimizar a súa xestión.

Un dos servizos que se vén prestando ás universidades é a interconexión de cada universidade cos seus campus a través de circuitos virtuais permanentes que son utilizados para

enlazar as centralitas de telefonía o que supón un grande aforro ó permitir intercambios entre os campus chamadas de telefonía sen custo. O CESGA está estudando a posibilidade de difundir a transmisión de voz a outros centros de investigación utilizando tecnoloxías de VoIP (Voz sobre IP) e VoATM (Voz sobre ATM).

Constantemente, novos servizos son engadidos á oferta de RECETGA. Nun futuro próximo os usuarios terán acceso á Rede de Bibliotecas das Universidades de Galicia e á Zentralblatt MATH a través da RECETGA (ver paxina 8). O criterio fundamental que guía o crecemento da rede é a calidade de servizos (QoS), un criterio inherente á tecnoloxía ATM. Hoxe xa non é suficiente con que as liñas sexan rápidas, é necesario que sexan estables e garantan a continuidade do servizo. No CESGA hai en marcha proxectos orientados a fortalecer a infraestrutura existente así como a mellorar a establecendo novas conexións entre os nodos principais utilizando fibra óptica o cal permitirá manter un alto nivel de redundancia, e acadar, nun futuro próximo, velocidades na troncal por riba dos 2,5 Gbps.

[Especificacións Técnicas]

RECETGA é unha rede ATM con soporte SDH na rede de acceso e soporte PDH e SDH na rede troncal, que usa como medio de transmisión radioenlaces e fibra óptica.

A rede interconecta unha serie de conmutadores troncais cun ancho de banda de 34/155 Mbps. Cada un destes nodos troncais conectase a 155 Mbps ós distintos centros integrados en RECETGA.

Os equipos da rede troncal son ASX-200/BX e ASX-1000 de Fore Systems. Nos nodos de acceso están instalados equipos que posibilitan a integración das redes locais dos usuarios na rede ATM. Os radioenlaces que se utilizan son Radio Síncrono (SRA/18m STM-1 18GHz de Siemens).

Nos centros nos que, polo seu tamaño ou necesidades, non se xustifica a implantación dun enlace ATM de 155

Mbps, óptase por outras solucións como radioenlaces de 34 Mbps ou equipos escalables de 2 a 8 Mbps. En casos puntuais utilízanse outras técnicas de transmisión como cañóns láser cun rango de transmisión entre os 34 e os 155 Mbps. Noutros casos utilízanse enlaces RDSI.

A infraestrutura da rede amósase no mapa que aparece en portada.

Recentemente, o CESGA adquiriu equipamento para establecer redundancia no seu nodo e

Infraestructura ATM instalada no CESGA

	1993	1995	1998
Potencia de conmutación ATM (Gbps)	0	2,5	12,5
Portos ATM instalados	0	8	60

mellorar as capacidades de acceso dos usuarios ós novos superordenadores. Ademais, instalouse unha das máis avanzadas aplicacións de xestión de redes hoxe disponibles, o SPECTRUM da casa Cabletrón.

[Tecnoloxía ATM]

O modo de transferencia asíncrono (ATM) permite a transmisión simultánea de voz, vídeo e datos a grandes velocidades. Está baseado na combinación de técnicas de conmutación de paquetes e multiplexación por división de tempo (TDM). O uso de celas de lonxitude fixa (53 Bytes) permite combinar o tráfico de voz, vídeo e datos. A tecnoloxía ATM permite definir circuitos virtuais con diferentes características en función das necesidades de cada un destes tráfico:

CBR (Constant Bit Rate) principalmente voz e imaxe

VBR (Variable Bit Rate) vídeo comprimido

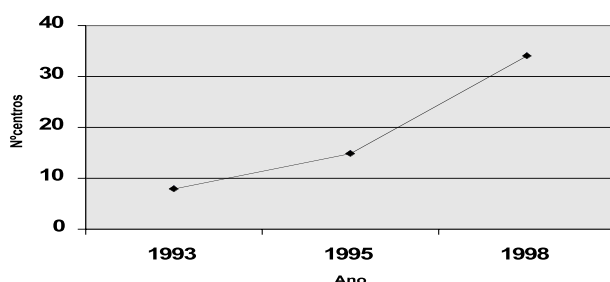
ABR (Available Bit Rate) datos a refachos

UBR (Unspecified Bit Rate) principalmente datos non críticos.

Á flexibilidade no tratamento dos diversos tipos de tráfico, a tecnoloxía ATM une grandes anchos de banda e unha fácil escalabilidade. Xa existen no mercado interfaces de 2.5 Gbps e incluso de 10 Gbps.

Outro aspecto importante de ATM é a posibilidade de xestionar de forma dinámica o ancho de banda. Deste xeito é posible asignar ancho de banda en función das necesidades de cada actividade, do estado da rede ou de outros parámetros de interese.

Número de Centros de Investigación na RECETGA



Predicción de rendimientos de códigos irregulares no AP3000

No marco dunha colaboración entre o CESGA, o FE-CIT e a Universidade de Santiago de Compostela estase a desenvolver unha ferramenta para a axuda dos programadores de grandes aplicacións na selección dos métodos máis adecuados para resolver grandes sistemas lineais dispersos no AP3000 de Fujitsu.

Dora Blanco, Vicente Blanco, Marcos Boullón, José C. Cabaleiro, Tomás F. Pena, Juan J. Pombo e Francisco F. Rivera
Departamento de Electrónica e Computación. Facultade de Física.
Universidade de Santiago de Compostela. 15706 Santiago.

[1. A predicción do rendemento dos computadores paralelos]

As ferramentas para a predicción do tempo de execución dos programas constitúen unha axuda inestimable para o programador. Este feito é de especial relevancia cando se trata de programadores de sistemas paralelos xa que a complexidade da organización destes computadores fai difícil facer unha estimación fiable do tempo requirido polos procesos executados neles [1]. Na situación actual, a programación dos sistemas paralelos require a toma dunha serie de decisións acerca de: o tipo de paradigma de programación a utilizar, o tipo de reparto das computacións entre os procesadores que constitúen o sistema, o xeito de reparti-los datos entre as memorias dos procesadores en sistemas de memoria distribuída ou no xeito de organizar-los datos atendendo á súa localidade no caso de sistemas de memoria compartida, o xeito de establecer o intercambio de información entre procesadores para resolver o programa global, etc. A influencia de todas estas decisións afecta dunha maneira directa e pouco predicible ó rendemento na execución dos programas.

Na actualidade, pódense encontrar ferramentas que, usando como partida un programa secuencial, extraen o paralelismo automaticamente, preparando o código para a súa execución paralela. Sen embargo, os resultados ofrecidos por estas ferramentas deixan moito que desexar, e para obter uns programas eficientes non queda máis remedio que realiza-la programación específica para o tipo de computador paralelo de que se trate. Para iso hoxe existen certas linguaxes de programación que explotan o paralelismo dun xeito sinxelo (HPF High Performance Fortran) [2] e outros que requiren un maior esforzo (librería de funcións de pase de mensaxes como MPI Message Passing Interface) [3] xa que a programación faise a un nivel máis baixo. HPF explota o paralelismo denominado de datos, que resulta moi adecuado cando o programa é regular, é dicir, non presenta indireccións no seu código, e os lazos están normalizados, tanto nos seus límites como no seu paso; pero HPF é totalmente ineficiente cando as computacións requiren accesos irregulares ós datos (por exemplo, cando se usan punteiros ou cando a finalización dos lazos non se coñece no momento da compilación). O uso de directivas e funcións intrínsecas fai que o programador non se teña que preocupar da localización dos datos nas memorias locais de cada procesador, senón que é o propio compilador de HPF o que realiza os movementos de datos dun xeito totalmente transparente ó usuario. Pola contra, o uso da librería de MPI precisa que o usuario teña que establecer explicitamente as comunicacións necesarias, polo que pode axeitalas ó seu caso particular requirindo polo tanto un sobreesforzo, coa contrapartida dun resultado xeralmente máis eficiente.

Performance Prediction of irregular codes on the Fujitsu AP3000

A performance prediction tool to establish the most efficient way to solve large sparse systems on the Fujitsu AP3000 is introduced in this work. We focus on iterative methods written in HPF that could call MPI routines to compute the kernels of these methods. This tool will decide whether or not these routines can be used efficiently in terms of runtime and memory overhead. This decision is made in terms of the prediction of the performance of both the HPF and the MPI versions of the matrix computations as well as the overhead associated with the redistribution of data between them.

[2. Os códigos irregulares]

En moitas aplicacións científico-técnicas os programas presentan estruturas de datos complexas para as que é difícil decidir a maneira máis axeitada de organizalos entre as memorias locais de cada procesador nun sistema multiprocesador. Este problema inicial provoca outros tales como o reparto de computacións entre procesadores ou o establecemento das comunicacións.

Un exemplo habitual nestas aplicacións é a resolución de sistemas de ecuacións lineais cun número de variables grande. Esta resolución implica o cálculo da inversa de matrices de gran tamaño que en moitas ocasións son dispersas. Un sistema dise disperso cando tanto dende o punto de vista da almacenaxe da matriz na memoria, coma no que respecta ás computacións, resulta máis rendible utilizar exclusivamente a lista dos elementos non nulos da matriz, e non almacenar tódalas entradas da matriz. Na figura 1 móstrase o patrón dunha matriz dispersa. Neste caso o problema pasa a ser irregular ó presentar indireccións para o acceso ós elementos da matriz.

No que atinxe ós métodos para resolve-los sistemas, existen dúas aproximacións, a dos métodos directos baseados tipicamente en obter unha factorización da matriz en termos de matrices máis sinxelas no tratamento da súa resolución (como as triangulares, ortogonais, etc), e os métodos indi-

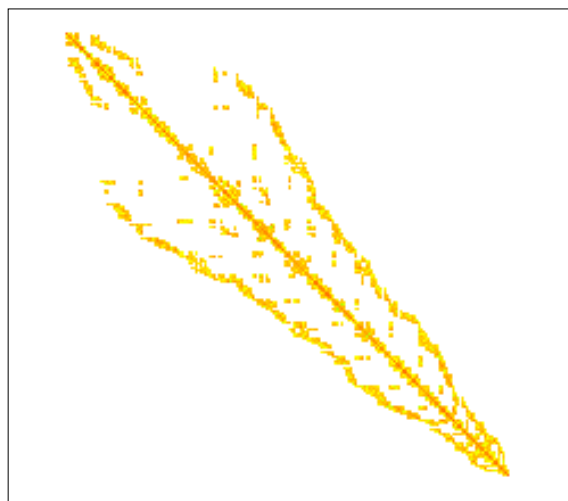


Figura 1. Patrón dunha matriz dispersa

rectos ou iterativos que consisten en obter aproximacións á solución do sistema a través dun proceso converxente que aproxima en cada iteración a solución ata atopar unha solución o suficientemente adecuada. Os métodos indirectos son os máis utilizados cando o sistema a resolver é disperso.

Na bibliografía pódese atopar un grande conxunto de métodos iterativos, cada un dos cales é especialmente axeitado a cada tipo de aplicación [4]. Deste xeito pódese coñecer a priori cal é o método máis adecuado para cada problema particular. Dende o punto de vista da programación, os métodos iterativos presentan todos eles unha estrutura similar no que atinxe ó tipo de computacións básicas que se deben executar en cada iteración: produtos matriz dispersa-vector, produtos escalares de vectores, etc. Polo tanto é importante dispor dunha boa librería de funcións para executar eficientemente este tipo de computacións no sistema paralelo.

[3. Unha librería de métodos iterativos]

Estamos a desenvolver unha librería de métodos iterativos sobre o sistema AP3000 de Fujitsu. Esta librería inclúe tanto tódolos métodos xa contrastados coma un bo número de preconditionadores que modifican a estrutura da matriz orixinal para facer máis eficiente a aplicación dos métodos.

Estando a programar dúas versións dos métodos, unha en HPF e outra empregando a librería MPI. A primeira é axeitada para aquelas porcións do código que teñen unha estrutura regular, mentres que o uso de MPI é eficiente nas computacións irregulares. O ideal sería combina-las dúas versións de xeito que sobre un programa en HPF se fagan insercións de códigos escritos en base á librería MPI. Estas insercións non son gratuitas, e implican en xeral movemento de datos entre os procesadores para adecualos á súa programación en MPI. Na figura 2 móstrase o rendemento obtido na aplicación dún método sobre unha matriz dispersa medido en termos da aceleración (relación entre o tempo de execución usando un procesador e varios).

[4. Un sistema de predicción de rendementos]

Para contestar á pregunta ¿E rendible face-las computacións irregulares en MPI dun método iterativo escrito en HPF? É necesario coñecer-los seguintes custos:

1. Custo da computación irregular en HPF: $T(\text{HPF})$
2. Custo da computación irregular empregando MPI: $T(\text{MPI})$
3. Custo da adecuación dos datos de HPF ás rutinas de MPI: $T(\text{C})$

Usualmente,

$$T(\text{HPF}) > T(\text{MPI})$$

Con esta información podemos deducir que a resposta á cuestión anterior é afirmativa se se verifica:

$$T(\text{HPF}) > T(\text{MPI}) + T(\text{C})$$

Estes custos non se coñecen a priori, e polo tanto é útil realizar unha predicción dos mesmos. Os factores que se deben ter en conta para realizar dita predicción son diversos. Por unha banda dependerá de características propias do sistema de computación: tipo de procesadores, tipo de rede de interconexión, capacidade dos sistemas que configuran a xerarquía de memoria: rexistros, cachés externa e interna, memoria principal, disco, etc; mecanismos de entrada/saída, etc. Pola outra banda dependerá das características do método iterativo e da matriz obxecto do método: tamaño da matriz, tipo de almacenaxe dos elementos da matriz, modelo de distribución dos datos entre as memorias locais de cada procesador, etc.

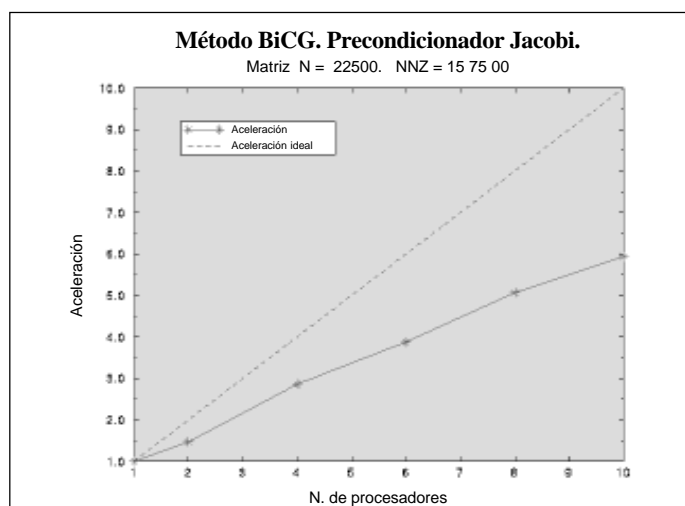


Figura 2. Tempo de execución usando un procesador e varios.

Para obter un modelo de predicción usaremos aproximacións ó comportamento dos diferentes factores; para iso usaranse modelos matemáticos que se axeiten ó comportamento do multiprocesador sobre o código considerado.

[4.1. Un exemplo: a comunicación procesador a procesador]

A modo de exemplo, pódese considerar unha aproximación lineal para modelar o custo de transmisión dun grupo de N datos dun procesador a outro de acordo coa expresión seguinte:

$$T(\text{com}) = T(\text{inic}) + N * T(\text{dato})$$

Donde $T(\text{inic})$ é o tempo de establecemento da comunicación e $T(\text{dato})$ é o tempo da transmisión física entre os dous procesadores. Nótese que esta comunicación é independente do tipo de rede de interconexión e da distancia entre os procesadores; esta é unha característica propia da maioría dos sistemas multiprocesador actuais e é consecuencia da tecnoloxía dos coprocesadores de encamiñamento.

[5. Un entorno de manexo amigable]

Como obxectivo final do proxecto de colaboración deseñárase un entorno gráfico de ventás para facilitar comodamente toda a información ó usuario. De tal xeito que, o usuario soamente deba indicar cal é o sistema a resolver, para que a ferramenta lle dea información puntual sobre cal é o método iterativo e preconditionador que máis se adapta ó seu caso particular, e despois lle dea unha estimación do custo asociado á implementación concreta sobre o AP3000 atendendo ós modelos obtidos para á elaboración do custo tanto en HPF coma no uso da librería MPI.

[Bibliografía]

1. Special Issue on Performance Evaluation Tools. IEEE Parallel and Distributed Technology. Winter 1995.
2. <http://www.pgroup.com>
3. <http://www.mcs.anl.gov/mpi/mpich>
4. V. Saad. Interactive methods for sparse linear systems. PWS Pub. 1995.

[Agradecementos]

Desexamos agradecer-lo soporte técnico e a axuda en xeral ofrecidos polo persoal tanto do CESGA coma do FECIT.

O Superordenador vectorial máis potente no mercado

Os grandes consumidores de recursos computacionais dan unha boa acollida á nova xeración de superordenadores vectoriais da NEC Corporation. Esta casa presentou o pasado mes de xuño a súa cuarta xeración de superordenadores vectoriais, o SX-5. Dous meses despois NEC xa recibira 7 peticións deste modelo de distintos centros de Europa, América e Xapón.

O SX-5 representa a combinación de tres tecnoloxías enfocadas a conseguir o máximo rendemento computacional: Arquitectura de procesador vectorial, conexión de múltiples CPUs vectoriais para formar un único nodo utilizando memoria compartida (arquitectura SMP) e conexión de múltiples nodos utilizando memoria distribuída (arquitectura MPP). A incorporación destas tres tecnoloxías nun único produto representa un novo enfoque, xa que tradicionalmente óptase por un único tipo de arquitectura no deseño de superordenadores (ou un máximo de dous, como nos ordenadores vectoriais paralelos Fujitsu VPP-300).

A unidade vectorial do SX-5 ofrece unha potencia pico de ata 8 GFLOPS (8 mil millóns de operacións de punto flotante por segundo) por CPU, o que representa un rendemento 4 veces superior ó do seu predecesor, o SX-4 que fora presentado en novembro de 1995. Deste xeito, o SX-5 é o ordenador ca meirande capacidade de cálculo por CPU. Cada nodo SMP do SX-5 pode combinar ata 16 CPUs vectoriais co que se obtén un rendemento pico de 128 GFLOPS e ata 128 Gbytes de memoria. En canto á escalabilidade do NEC SX-5, este permite interconectar ata 32 nodos con 16 CPUs vectoriais a través dunha rede de ultra-alta-velocidade, para poder chegar a formar o ordenador vectorial máis potente do mercado, cun total de 512 CPUs e un rendemento pico de 4 TFLOPS (4 billóns de operacións por segundo) e ata 4 Tbytes de memoria.

A rede de interconexión dos nodos proporciona un ancho de banda máximo de 256 Gbytes/segundo nas transferencias de datos e o ancho de banda para o acceso á memoria chega ós 32

NEC SX-5



Tbytes/segundo nos equipos formados por 512 CPUs.

No corazón dos chips do SX-5 utilízase tecnoloxía CMOS LSI de alta densidade de empacamento, cunha distancia entre portas de 0.25 mm e integrando ata 15 millóns de transistores por chip. A utilización desta avanzada tecnoloxía permite que o SX-5 utilice un ciclo de reloxo de 4.0ns, o que supón duplica-la frecuencia de funcionamento fronte á serie SX-4. A utilización de tecnoloxía CMOS reduce significativamente os requirimentos de espazo e de consumo de potencia habituais neste tipo de equipos.

O superordenador paralelo, Blue Mountain acada un rendemento real de cálculo de 1.6 TERAFLUPS

O Departamento de Enerxía dos Estados Unidos e Silicon Graphics, Inc. (SGI) acadaron, o pasado 10 de novembro, o maior rendemento de cálculo computacional obtido ata hoxe. O ordenador Blue Mountain, construído por SGI, executou o test Linpack, un dos estándares utilizados para medir o rendemento dos superordenadores, obtendo na proba un

rendemento de 1.6 billóns de operacións por segundo (TFLOPS). Este resultado fai do ordenador instalado nos Alamos o máis potente construído.

O Blue Mountain será utilizado para realiza-los cálculos necesarios para comproba-los medidas de seguridade, a estabilidade e a fiabilidade das

reservas armamentísticas nucleares dos Estados Unidos, eliminando así a necesidade de realiza-los explosións nucleares que se viñan facendo para poder responder a estas cuestións. Ademais, a experiencia conseguida coa aplicación de Blue Mountain no cálculo militar poderá ser trasladada a outros aspectos do entorno científico, e esta capacidade computacional poderá aplicarse para proporcionar avances na medicina, a predicción meteorolóxica, o estudo do cambio climático, ou en mellora-los sistemas de seguridade dos automóviles.

O sistema Blue Mountain está formado por 48 servidores comerciais Cray Origin 2000 que forman un único "ordenador" cun total de 6,144 procesadores. Deste modo, Blue Mountain está organizado en 48 sistemas multiprocesador de memoria compartida (SMP) con 128 procesadores en cada un dos "nodos" SMP. O sistema está deseñado de xeito que o cluster de 48 SMPs traballa coma se se tratase dun único ordenador. Estes 48 SMPs comunícanse a través dunha rede de alta velocidade chegando a velocidades de transmisión sostidas de 650 gigabits por segundo.



Workshop Gaussian 98

O Workshop Gaussian 98 reúne a Químicos Cuánticos e Computacionais no CESGA.

O Workshop, celebrado o pasado novembro, foi presentado polo Prof. Miguel Angel Ríos, Secretario Xeral de Investigación e Desenvolvemento da Xunta de Galicia e presidente do consello de administración do CESGA. As ponencias presentadas polos doutores: López e Souto do CESGA, Maurizio Cossi da Università di Napoli "Federico II", Alistair Rendell da Australian National University Supercomputing Facility (ANUSF) e Ross Nobes do Fujitsu European Center for Information Technologies (FECIT) versaron sobre as configuracións e algoritmos recomendados para obter os mellores rendementos da aplicación Gaussian 98 no VPP300 e no AP3000. Entre outros, ó Workshop asistiron investigadores do CSIC e das Universidades galegas e de O Porto.

Trala celebración do Workshop, os redactores de díxitos tiveron oportunidade de conversar cos ponentes.

díxitos: ¿Tendo en conta o ritmo ó que avanza a química computacional, é previsible que no futuro desapareza a figura do químico experimental?

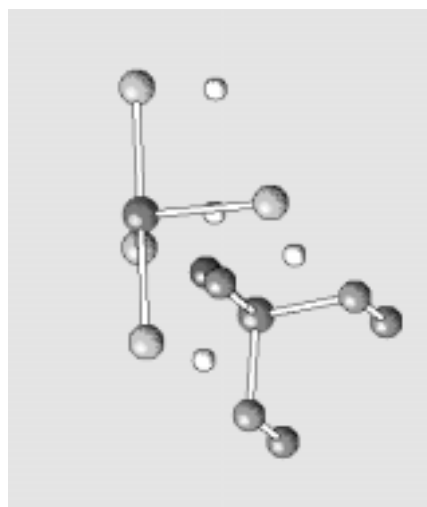
Dr. Cossi: A combinación de métodos clásicos e métodos ab initio faise absolutamente necesaria se queremos completa-los crebacabezas. Non, non espere que desaparezan os laboratorios experimentais. Se acaso o que si é predicible é que os lazos de cooperación entre químicos experimentais e computacionais se estreite aínda máis no futuro. Por exemplo, axudamos ós espectroscopistas a interpretar os seus datos e a desenvolve-los modelos dalgunhas reaccións. Máis especificamente, hoxe hai unha grande preocupación polos danos causados pola radiación nos tecidos vivos. Experimentalmente sábese que o primeiro paso nestes danos pasa pola creación de radicais libres. Un dos xeitos nos que estes radicais libres interactúan co material biolóxico consiste na extracción dun átomo de hidróxeno da parede celular. É importante comprender como se comporta este radical libre xa que estas reaccións son, con frecuencia, perigosas para a célula. Os experimentalistas contan con datos espectroscópicos, aínda que chegados a este punto non poden dicir moito máis xa que os radicais son de especies moi inestables. Aquí, comeza o

noso traballo. Primeiro fixemos moitos cálculos para determina-lo nivel de cálculo necesario para reproducir os datos espectroscópicos recollidos experimentalmente. Conseguido isto, fixemos os cálculos para reproducir estes datos e utilizámoslos para seguir a posible evolución dos radicais libres. O noso traballo rematou neste punto. Punto no que os experimentalistas coa información obtida dos nosos cálculos, poden ensaiar xeitos de impedi-los danos. Este é un de moitos exemplos que demostran a complementariedade dos dous métodos.

díxitos: ¿En que casos se fai máis evidente a necesidade desta cooperación?

Dr. Rendell: Verá, experimentalmente non é doado, por non dicir imposible, seguir a evolución dunha molécula nunha reacción que ocorre excesivamente rápida, que involucra demasiadas interaccións co medio ou que acontece nun medio no cal a toma de determinados datos experimentais é

simplemente imposible como sucede no espacio interestelar ou no interior do motor dun avión cando este viaxa a velocidades supersónicas. En xeral pódese dicir que canto máis inestable e a especie a estudar maior é a dependencia dos métodos computacionais.



díxitos: ¿Aporta a química computacional algún valor inmediato a sociedade ou estamos a falar dunha liña de investigación básica?

Dr. Nobes: De seguro que hai xa moitos anos que a investigación destes métodos deixou de ser un exercicio académico. Hoxe, os programas de química computacional úsanse nunha gran variedade de industrias como son a industria farmacéutica, agroalimentaria, agroquímica, petroquímica, medioambiental, etc. O uso destes métodos, ademais de supor aforros multimillonarios para as compañías, supón tamén que produtos de valor para a sociedade se materialicen en máis breves períodos de tempo. Por exemplo, un laboratorio farmacéutico, mediante estes métodos, pode elixir dunha lista de cincocentos compostos os 50 mellores candidatos para posterior testado. Podese realizar unha preselección deste tipo en seis meses, aforrándolle millóns á compañía e adiantando en anos a dispoñibilidade do novo medicamento.

Un dos pais da física cuántica, Dirac, escribía no ano 1929: "As leis fundamentais necesarias para o tratamento matemático da meirande parte da física e da química son coñecidas na súa totalidade, a dificultade estriba unicamente no feito de que a aplicación destas leis condúcenos a ecuacións excesivamente complexas para resolve-las." Hoxe, as leis fundamentais da mecánica cuántica, formuladas hai máis de 70 anos, permiten entender e calcular o xeito no que electróns e núcleos atómicos interactúan para construíren a materia en tódalas súas formas. Gaussian é un programa informático baseado nestas leis. John Pople, Nobel de Química de 1998, é o autor da primeira versión, publicada en 1970.

Os avances nas técnicas computacionais e o desenvolvemento de algoritmos de gran eficiencia permiten realizar simulacións de pequenas moléculas e do seu comportamento en interacción co medio. Dun xeito moi simple o proceso funciona como segue: nun ordenador introdúcese os datos que definen unha molécula, o resultado é unha descrición das propiedades desa molécula. As propiedades máis comunmente examinadas son a súa forma, en termos dos ángulos e lonxitude dos nexos, a súa estabilidade (fanse avaliacións en canto á esperanza de vida da molécula), isto é, se nunhas condicións dadas se espera que manteña a forma actual ou se se espera que se descompoña facilmente. Tamén son examinadas con frecuencia as propiedades espectroscópicas da molécula, xa que estas son as "pegadas dixitais" das moléculas e serven para a súa identificación experimental.

Seminario sobre Avances e Tendencias en Comunicaci3n no CESGA

En novembro CESGA acolleu o Seminario "Consolidaci3n de Servici3s Multimedia sobre Redes IP Corporativas: Videoconferencia, Datos e Telefonía". Neste seminario presentáronse as máis innovadoras propostas na área das comunicaci3ns. O seminario foi organizado



conxuntamente polo CESGA e Unitronics Comunicaciones, S.A. e contou cun grande éxito de asistencia o que reflicta o crecente interese

polas comunicaci3ns por parte de empresas e instituci3ns dedicadas á investigaci3n. Durante este seminario realizouse unha demostraci3n do funcionamento dos produtos máis novos no mercado.

GIS ArcView para Bi3logos

Expertos en sistemas de informaci3n xeográfica do CESGA impartiron un curso sobre o uso da aplicaci3n GIS ArcView 3. Esta ferramenta permite xerar, analizar e tratar bases de datos con informaci3n xeoreferenciada. O curso asistiron membros do Colexio Oficial de Bi3logos de Santiago. Est3 previsto realizar outros dous cursos sobre o uso desta ferramenta ó longo do ano 99.

Xunta e Universidades dan Luz Verde á Rede de Bibliotecas das Universidades de Galicia

O Presidente da Xunta de Galicia e os Rectores das tres Universidades Galegas firmaron o pasado día catro de decembro un acordo que suporá a posta en marcha do sistema da Rede de Bibliotecas das Universidades de Galicia.

Para materializala implantaci3n da Rede de Bibliotecas constituíuse unha comisi3n técnica interuniversitaria.

Esta rede permitirá que os alumnos, profesores e investigadores das universidades de Galicia teñan acceso a material arquivado nas bibliotecas das universidades indistintamente do campus no que se atopen. O CESGA dará soporte técnico á

implementaci3n deste sistema.

A principal base de datos europea de investigaci3n matemática, "Zentralblatt MATH", será instalada no CESGA

O pasado mes de outubro o CESGA, a Universidade de Santiago e os editores da "Zentralblatt fur Mathematik" chegaron a un acordo polo que se regula a instalaci3n no CESGA dun servidor da maior base de datos existente en Europa sobre artigos de investigaci3n en Matemáticas. O servidor do CESGA, inicialmente, dará acceso on-line á base de datos ás Universidades e Centros de Investigaci3n de todo o Sur de Euro-

pa, e será gratuito para os matemáticos das tres Universidades galegas. A "Zentralblatt fur Mathematik" recolle recenzi3ns de tódolos artigos ata hoxe publicados no campo da investigaci3n matemática desde 1931. Cada ano engádense á base uns 50.000 artigos de nova publicaci3n.

Este acordo é a culminaci3n das negociaci3ns que dende hai un ano viñan mantendo a Facultade de Matemáticas e o Instituto de Matemáticas cos apoios do Vicerrektorado de Investigaci3n da Universidade de Santiago, a Secretaría Xeral de Investigaci3n e Desenvolvemento da Xunta de Galicia e o propio CESGA. A xesti3n da "Zentralblatt MATH" correrá a cargo do CESGA e da Universidade de Santiago.

Novo Software de Aplicaci3ns HPC

A partires de febreiro, os usuarios do CESGA teran a súa disposici3n 3 novos paquetes de cálculo:

- Paquete ANSYS Multiphysics de cálculo de estruturas, fluídos, transferencia de calor e electromagnetismo, para servidor de cálculo con S.O. UNIX.
- Paquete GENESIS de cálculo e optimizaci3n avanzada de estruturas, para servidor de cálculo con S.O. UNIX.
- Paquete de cálculo simbólico e análise de datos científicos MATLAB, para servidor escalar con S.O. UNIX, incluíndo librerías orientadas ó control de procesos, procesamento de sinais e comunicaci3ns.

Ó longo deste ano impartiranse no CESGA cursos de formaci3n sobre as seguintes aplicaci3ns: ANSYS Multiphysics, MATLAB e MAYA (paquete de animaci3n). As datas destes cursos serán anunciadas no Web do CESGA (www.cesga.es)

BOLETÍN DE SUBSCRICI3N GRATUITA

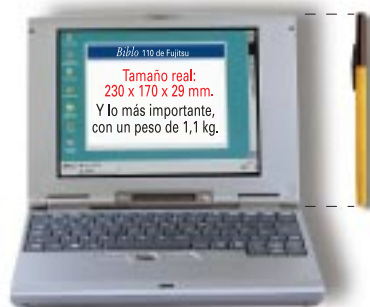
NomeCentro

Enderezo

Poboaci3n

C3digo postalCorreo electrónico

Estos dos portátiles miden lo mismo.



Biblo 110 de Fujitsu. Pequeño por fuera, grande por dentro

- Procesador Pentium® de Intel con tecnología MMX a 233 MHz
- Memoria SDRAM de 32 MB ampliable a 160 MB
- Disco SMART de 3,2 GB
- Autonomía de hasta 4 horas
- Pantalla TFT de 8,4" SVGA



PCs • NOTEBOOKS • SERVERS

Visítenos en: www.fujitsu.es o llámenos al 901 100 900