

La Xarxa Espanyola de Supercomputació, inaugurada el 13 de març, compta amb el computador més potent d'Europa, MareNostrum, situat al Centre de Supercomputació de Barcelona, i permetrà satisfer la necessitat creixent de la comunitat científica de realitzar càlculs cada vegada més complicats.

Una de les complicacions principals amb què topen els científics que es dediquen a l'estudi de processos complexos com el clima, la bioquímica o la física nuclear és la dificultat de resoldre les equacions matemàtiques que descriuen aquests fenòmens. Es tracta d'equacions complicades que requereixen grans capacitats de càlcul, i resoldre-les és un pas fonamental per poder verificar que els models teòrics proposats s'adiuen amb la realitat observada. Des de ja fa força temps, és ben clar que algunes d'aquestes equacions només es poden resoldre mitjançant l'ús d'ordinadors. Per què apareixen fenòmens com el d'El Niño? Què fa que una proteïna interaccioni amb una altra i que això generi processos observables en organismes com els éssers humans? Com es mantenen units els quarks per donar lloc als protons i neutrons que conformen els nuclis dels àtoms? Aquestes i moltes altres són preguntes que tan sols es poden respondre amb la capacitat de càlcul dels ordinadors. Per tant, a mesura que la potència dels ordinadors augmenta, aquest tipus de càlculs es poden efectuar a més velocitat i el coneixement científic creix també més ràpidament. En el camp de la física nuclear, per exemple, en el marc de la cromodinàmica quàntica, hi ha hagut vegades que s'han necessitat mesos sencers per obtenir un resultat. Per raons com aquesta, la capacitat de computació és un dels elements crítics en l'avenç de la ciència dels sistemes complexos.

Centre de Supercomputació de Barcelona. El Ministeri d'Educació i Ciència, la Generalitat de Catalunya i la Universitat Politècnica de Catalunya, conscients d'aquests problemes, van tenir la iniciativa de crear un centre de supercomputació a la ciutat de Barcelona, amb l'objectiu de construir una gran eina de càlcul per a tots els grups de recerca de l'estat. El Centre de Supercomputació de Barcelona (BSC) es va

Supercomputació: l'eina clau de l'avenç científic

constituir oficialment l'abril del 2005 i compta amb 140 científics de camps ben diversos i amb la presència de MareNostrum, el supercomputador més potent d'Europa. El BSC treballa fonamentalment en tres àmbits de recerca

(informàtica, ciències de la Terra i ciències de la vida) i posa a disposició d'altres investigadors la potència de MareNostrum, que pot dur a terme càlculs complicats relacionats amb qualsevol altre camp de la ciència.

El superordinador MareNostrum, del Centre de Supercomputació de Barcelona, és el més potent d'Europa.



Xarxa Espanyola de Supercomputació. El passat 13 de març, la ministra d'Educació i Ciència, Mercedes Cabrerà, i el conseller d'Innovació, Universitats i Empresa, Josep Huguet, van visitar el Centre de Supercomputació de Barcelona amb motiu de la posada en marxa de la Xarxa Espanyola de Supercomputació. Aquesta iniciativa compta amb el lideratge del Ministeri d'Educació i Ciència i pretén crear una estructura distribuïda de supercomputadors amb l'objectiu de donar suport a les necessitats de càlcul dels grups de recerca de l'estat. Els nodes inicials d'aquesta xarxa estan situats al Centre de Supercomputació de Barcelona, al Centre de Supercomputació i Visualització de Madrid (CeSViMa), a l'Institut d'Astrofísica de Canàries (IAC) i a les universitats de Cantàbria, Màlaga, València i Saragossa. El BSC serà l'encarregat de coordinar la xarxa, de la qual s'esperen re-

sultats importants atesa la creixent demanda de càlculs cada vegada més complicats de la comunitat científica.

Ciències de la Terra. Una de les principals branques de recerca del BSC es dedica a la modelització del sistema atmosfèric. En aquesta branca es treballa en models de la qualitat de l'aire, en models meteorològics de predicció i en models climàtics globals i regionals. Els canvis en la composició de l'atmosfera, per exemple, poden afectar l'habitabilitat del Planeta perquè modifiquen la qualitat de l'aire al nivell del sòl i poden alterar el clima a llarg termini. La recerca en aquesta àrea està relacionada amb el desenvolupament, la implantació i el refinament dels models més moderns, tant globals com regionals, per predir la qualitat de l'aire a curt termini i les variacions climàtiques a llarg termini. En aquest sentit, la gran capacitat de com-

putació de MareNostrum és una eina clau que permet augmentar la resolució espacial i temporal dels sistemes de modelització atmosfèrica, i així obtenir un millor coneixement de la dinàmica de l'atmosfera i millorar la qualitat de les prediccions.

Ciències de la vida. Aquesta altra branca de recerca del BSC té com a objectiu principal entendre l'origen, l'evolució i el funcionament dels organismes vius mitjançant anàlisis teòriques i tècniques computacionals. En aquest camp es realitzen estudis que van des del funcionament de les entitats vives enteses com a sistema complex fins a les interaccions clau a escala subatòmica. Una de les principals línies de recerca en aquest camp consisteix a entendre les interaccions entre proteïnes. L'objectiu és optimitzar algoritmes de computació que permetin caracteritzar les associacions entre proteïnes, fet que representa un dels reptes més estimulants de la recerca en biologia estructural. D'aquesta manera, es podria entendre amb gran detall el funcionament de complexos químics amb aplicacions no solament biològiques sinó també terapèutiques.

MareNostrum. La joia de la corona del BSC és sense cap mena de dubte el supercomputador MareNostrum, que va néixer l'any 2004 quan el Govern de l'estat espanyol i l'empresa IBM van signar un acord per formalitzar la construcció d'aquest ordinador. Amb la recent duplicació de capacitat, implementada el novembre del 2006, MareNostrum ha esdevingut el supercomputador més potent d'Europa i el cinquè del món. Amb una potència de càlcul de 94,21 teraflops, és a dir, 94,21 trilions d'operacions per segon, MareNostrum és un referent internacional de la supercomputació, obert no tan sols a científics de tot l'estat sinó també de tot Europa. Amb la posada en marxa de la Xarxa Espanyola de Supercomputació, amb MareNostrum al capdavant, de ben segur que científics d'arreu tindran l'oportunitat de resoldre les equacions que més se'ls resistien i comprovar si les prediccions dels seus models i la seva, que és la nostra, comprensió de la realitat és prou acurada o no.

Toni Pou

