

# TERAFLOP

## Tecnologia i experiències a les xarxes de recerca

Avenços en Astrofísica

ENTREVISTA

Santiago Olivella, professor d'investigació a l'IQAC-CSIC

La tesi més consultada de la Universidad de Oviedo al TDX

# Tecnologia i experiències a les xarxes de recerca

TAC'09

La tretzena edició de la Trobada de l'Anella Científica (TAC), que convoca anualment el CESCA i que reuneix les institucions usuàries de l'Anella Científica, s'ha celebrat a l'Escola Universitària Salesiana de Sarrià (EUSS), que enguany ha celebrat el seu 15è aniversari i els 125 anys dels Salesians de Sarrià, i ha estat dedicada a parlar sobre les tecnologies emergents avui dia a les xarxes acadèmiques i de recerca, i els usos rellevants que s'hi estan realitzant.



Joaquim Ibáñez i Alexandre Blasi durant l'acte d'obertura de la TAC'09.

Els encarregats d'obrir la trobada han estat Alexandre Blasi, vicepresident de la Fundació Rinaldi, i Joaquim Ibáñez, cap d'Àrea de Polítiques Sectorials Científiques i Tecnològiques de la Generalitat de Catalunya, en representació de Joan Roca, director general de Recerca.

Blasi ha comentat que la TAC esdevé "un entorn on es parla sobre tecnologia, una paraula que té el seu origen en el saber fer". I ha afegit que "més enllà de l'aparell, del silici, hi ha la combinació de la persona i el seu coneixement acumulat". Blasi ha afirmat que "és necessari que existeixin espais com la TAC per poder comunicar-se, explicar i compartir com fer les coses".

Per la seva part, Ibáñez ha ressaltat "la importància de disposar d'una infraestructura consolidada com l'Anella, que afavoreix la interconnexió i col·laboració entre els agents implicats en el sistema de recerca català". I en relació amb el desenvolupament d'infraestructures com l'Anella Científica, Ibáñez també ha des-

tacat "la signatura del Pacte Nacional per a la Recerca i la Innovació (PNRI), que estableix una línia d'actuació comuna entre tots els agents del sistema de recerca i innovació perquè en els propers anys la recerca gaudeixi d'una certa estabilitat i esdevingui una prioritat real independentment dels canvis polítics o socials que puguin ocórrer".

La primera sessió, moderada per Víctor Huerta, de la UPC, ha comptat amb la presentació de tres ponències que han tractat sobre el nou projecte de xarxa òptica de RedIRIS, RedIRIS Nova; l'optimització de xarxes d'alta capacitat i la identificació d'aplicacions amb NetFlow.

A continuació, Caterina Parals, del CESCA, ha donat la benvinguda a les noves institucions adherides des de l'anterior edició de la TAC durant la segona sessió de la trobada: el Centre d'Alt Rendiment (CAR), representat per Josep Escoda, el Museu Marítim de Barcelona, per Enric García, i el Museu de les Arts Escèniques (Institut del Teatre), per Roger Guasch.

César Latorre, de l'EUSS, ha moderat la tercera sessió en què s'han presentat tres experiències, el projecte FEDERICA de la Fundació i2CAT, la tecnologia i internet en el nou mòdul esportiu del CAR i les xarxes de recerca bioinformàtica al Centre de Regulació Genòmica.

En la cloenda, Miquel Huguet, director del CESCA, ha comentat que "mentre que l'anterior edició de la TAC va ser de presentació de la renovada Anella Científica, amb noves funcionalitats, millor flexibilitat, fiabilitat i velocitat; enguany hem volgut mostrar alguns resultats amb experiències d'institucions que n'estan traient profit. I ha remarcat que en aquesta TAC "hem volgut evidenciar l'heterogeneïtat de l'Anella, ja que a més de connectar universitats i centres d'investigació, també integra biblioteques i museus, unitats de recerca o docents d'hospitals, parcs científics i tecnològics... que demostrin l'ampli abast del seu ús".

Josué Sallent, director general de la Societat de la Informació, ha agraït la participació a la norantena d'assistents i ha destacat "que el PNRI fa referència reiterada a la necessitat de disposar d'e-infraestructures amb una visió de futur, per donar resposta a les necessitats abans que es pro-

## La TAC ha mostrat experiències d'ús, gràcies a la renovació de l'Anella Científica

dueixin. En aquest sentit, "el CESCA ha de continuar liderant aquestes iniciatives i ha de centrar els seus esforços en oferir nous i innovadors serveis útils per a la comunitat universitària i de recerca", ha afegit.

La TAC'09 ha estat possible gràcies a la tasca del comitè de programa integrat per Víctor Huerta, de la UPC, Lluís Ariño, de la URV, César Latorre, de l'EUSS, i Caterina Parals i Miquel Huguet, del CESCA, i ha comptat amb el patrocini de Satec i Al-Pi Telecomunicacions i amb la col·laboració de l'EUSS. ■



## RedIRIS-NOVA: El projecte de xarxa òptica per a RedIRIS

**Esther Robles**

Red.es

**R**edIRIS10 és la infraestructura de comunicacions que la comunitat acadèmica i de recerca espanyola usa per interconnectar-se entre si mateixa i amb altres xarxes acadèmiques i de recerca internacionals. Es tracta d'una xarxa dedicada, formada per enllaços d'alta velocitat i sobre la qual se suporten serveis avançats de nivell 3 (IP) i també de nivell 2 (Ethernet natiu i MPLS). RedIRIS10, amb una topologia mallada i enllaços troncals a 10 Gbps i 2,5 Gbps, porta operativa des de l'any 2007.

Tot i així, perquè aquesta infraestructura de comunicacions continuï sent útil, ha d'evolucionar i afrontar els nous reptes que plantegen els projectes i investigadors: la xarxa òptica privada de l'LHC (OPN LHC), la Red Nacional de Supercomputación (RES) i l'europea (DEISA), la xarxa europea de radiotelescopis interferomètrics e-VLBI (EVN), el Gran Telescopio de Canarias (GTC), la Red Nacional de Emergencias (RENEM)... són exemples de projectes i instruments que tenen grans necessitats d'amplada de banda i que requereixen de nous serveis de xarxa.

Des de la seva creació, la infraestructura de RedIRIS s'ha confeccionat seguint el model de lloguer de capacitat, que consisteix en contractar un conjunt d'enllaços amb unes característiques tecnològiques determinades per satisfer la demanda en aquell moment i per a un període d'entre 2 i 4 anys. Segons l'evolució observada en anys anteriors i la tipologia dels projectes en curs, es preveu un important augment en la quantitat de circuits d'alta capacitat que s'hauran de necessitar a curt i mitjà termini.

Per això, l'evolució de la xarxa que ja s'ha iniciat, es basa en el model de desplegament de fibra òptica pròpia. En concret, es tracta d'adquirir i operar fils de fibra òptica a nivell nacional, inclosa la interconnexió entre les Illes Canàries i la península, i tot l'equipament òptic necessari per a la seva il·luminació.

El projecte per portar a terme aquest desplegament s'anomena RedIRIS-NOVA i per a la seva execució s'ha plantejat una licitació inicial que té per objectiu desplegar una malla principal que interconnecti els punts de presència de RedIRIS a la pe-

nínsula i amb les Illes Canàries i arribar a altres punts en funció de la disponibilitat pressupostària i la prioritització fixada pel MICINN i cadascuna de les comunitats autònomes. El pressupost per a aquesta licitació inicial és de 138 milions d'euros provinents de fons FEDER i de fons del MICINN.

Després d'aquesta licitació inicial es contemplaran licitacions complementàries per arribar als punts de presència de RedIRIS a les Balears, Ceuta i Melilla, o incrementar el mallat de la xarxa obtinguda amb la licitació inicial.

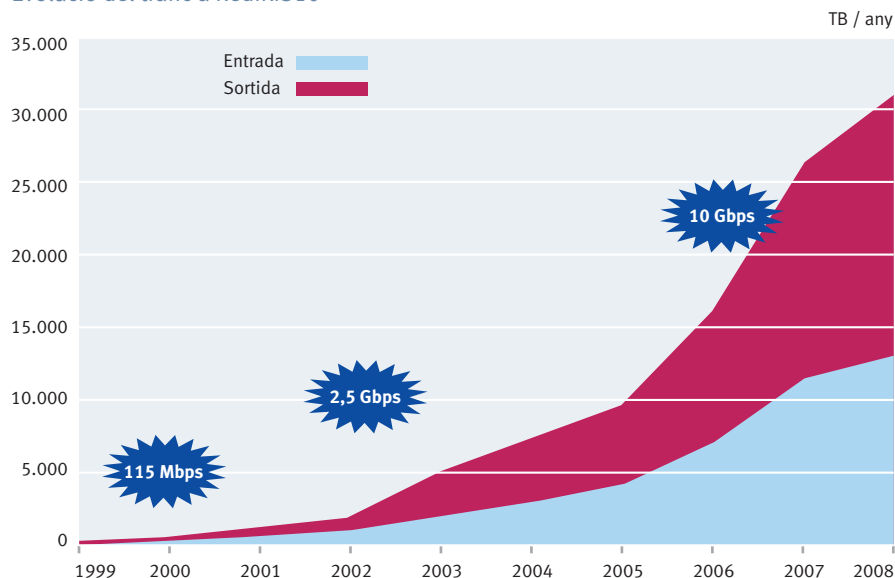
L'adquisició d'aquesta fibra fosca, així com els espais intermitjos d'allotjament per ubicar equips òptics d'amplificació, es basa en un model de lloguer de llarga duració Infeasible Right of Use (IRU). En el projecte RedIRIS-NOVA, el plantejament inicial és un IRU a 10 anys o més.

En la licitació de l'equipament òptic es distingeixen dos conjunts o grups d'especificacions. D'una banda, s'ha defensat un conjunt de requisits obligatoris que tecnològicament han de ser suportats o implementats pels equips. Així, per exemple, funcionalitats i capacitats que s'estan estudiant són: nombre de lambdes o canals suportats, recolzament de l'arquitectura OTN, funcionalitat de *colorless* i *directionless*, suport de GMPLS/ASON amb restauració, canals de 40 Gbps, preparació per a 100 Gbps...

Atès que la xarxa de fibra fosca i els equips òptics per a la seva il·luminació s'estan licitant simultàniament, no es coneixen ni els seus paràmetres exactes ni la seva topologia final. Per tant, la licitació de l'equipament òptic inclou un segon bloc d'especificacions que defensen un escenari hipotètic de xarxa de fibra òptica, on es proporcionen els valors estimats de paràmetres òptics, com ara l'atenuació, dispersió cromàtica, PMD, distàncies... perquè els licitadors puguin dissenyar la seva proposta de solució.

RedIRIS-NOVA permetrà evolucionar la xarxa actual cap a una xarxa híbrida que permetrà oferir serveis des del nivell 1 fins al nivell 3: Transport de canals òptics de forma transparent extrem a extrem, servei de VPN de nivell 2 Ethernet i connectivitat global i serveis IP. Més encara, el plantejament és enriquir aquests serveis amb funcionalitats avançades com automatització, monitoratge avançat, gestió i control dinàmic per part de l'usuari final i interoperabilitat i operació multidomini. ■

### Evolució del tràfic a RedIRIS10





## La importància de l'optimització en xarxes de recerca

**José Carlos Pérez**  
Telindus

Les xarxes de recerca han evolucionat a velocitats de vertigen des que el 1957, com a resposta al llançament del satèl·lit soviètic Sputnik, els Estats Units van crear l'Agència de Projectes d'Investigació Avançada (ARPA) dins el seu Departament de Defensa, impulsora de les primeres xarxes.

El lideratge de les xarxes de recerca ha estat basat en l'aparició d'aplicacions que facilitaven el treball i la col·laboració a la comunitat científica però que després es popularitzaven a les xarxes generalistes. Des dels seus inicis, les xarxes de recerca han passat per diverses etapes: la primera és la dels pioners, "Vull connectar-me a això... com dius que s'anomena? La segona correspon als golfes, amb la generalització de l'accés a internet a les universitats i a conseqüència de l'increment dels usuaris es produeix un creixement quasi exponencial del tràfic i dels serveis. La xarxa es converteix en pocs anys en una qüestió fonamental per a qualsevol centre de recerca. Comença la lluita per l'amplada de banda. I la tercera i última és la dels sibarites; les noves aplicacions necessiten una gran amplada de banda però, no sols això, també calen unes condicions de qualitat concretes i garantides.

La disponibilitat d'amplades de banda apreciables amb costos raonables i l'aparició de diverses tecnologies, com ara DWDM, MPLS, etc. ha disparat la utilització de continguts multimèdia i ha popularitzat eines i formes de treball que s'han anomenat Web 2.0. Un exemple són els portals de continguts multimèdia que es generen amb contribucions dels usuaris.

Actualment, una altra tendència és que diversos serveis que estaven al cantó dels usuaris passen a ser considerats un servei més de la xarxa. Així, apareixen nous conceptes com el Cloud Computing, entès com els recursos que es troben disponibles a la xarxa i que s'ofereixen de forma senzilla, orientats a la producció i amb una empresa al darrera que ofereix serveis comercials i que és responsable de la seva gestió i explotació.

Suposem que entenem del tot què és el Cloud Computing, ara pensem què podem fer amb aquest "núvol de computació". Llavors, a través de la xarxa podem fer: Software as a Service (SaaS), que és una forma d'usar programari com si el tingués instal·lat el client però sense tenir-lo (gmail, YouTube...); Infrastructure as a Service (IaaS), com a forma d'uti-

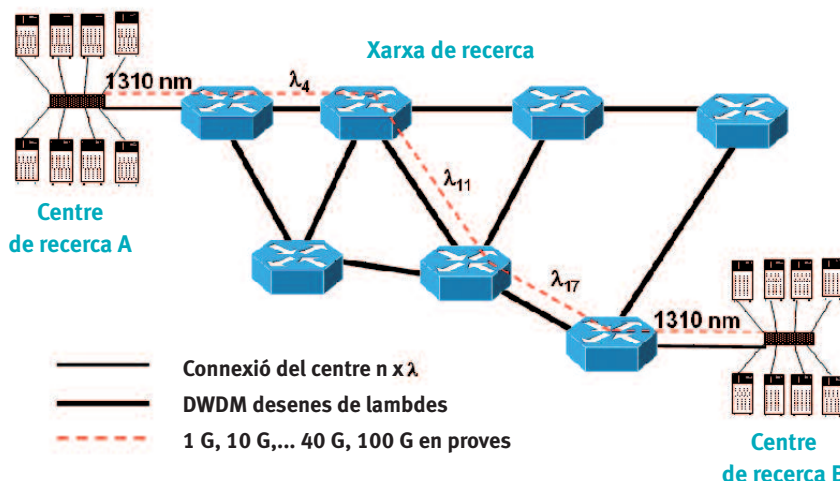
litzar recursos de maquinari de tercers, ordinadors o emmagatzematge, com si fos un servei (AmazonEC2, Amazon S3, ElasticHosts...), i Platform as a Service (PaaS), una combinació de SaaS i IaaS de manera que l'usuari pot desenvolupar aplicacions en línia i desplegar-les (Microsoft Azure, Google Apps...).

Tot això s'ha d'oferir a través de la xarxa. Per tant, la qualitat de servei que obtindrem usant aquests serveis dependrà en primer lloc de la qualitat del nostre accés a internet. Per això, els sistemes de control i optimització de l'amplada de banda es converteixen en l'eina fonamental, tot i que no es tracta d'obtenir directament més amplada de banda, sinó d'aconseguir serveis d'alta capacitat i diferenciats on la qualitat del servei estigui garantida.

En conclusió, les xarxes de recerca han estat sempre un entorn de prova per a moltes tecnologies que poden ser després aplicables al desplegament de xarxes generalistes per part d'operadors comercials. Curiosament, ara està succeint el contrari, apareixen noves formes de treball que provenen de les xarxes generalistes gràcies a la universalització d'internet i que estan influïnt les xarxes de recerca. Aquest és el cas del Cloud computing o el Web 2.0, entre d'altres.

En el cas de la tecnologia Deep Packet Inspection (DPI) o inspecció profunda dels paquets per a la gestió de l'amplada de banda, succeeix quelcom similar. Els operadors comercials l'estan usant i s'està plantejant la seva aplicació a les xarxes de recerca, perquè es pugui gestionar millor la xarxa gràcies a les prestacions que ofereix a nivell de classificació del tràfic.

Per tot això, sembla que es tracta d'un moviment pendular en què les xarxes de recerca i les xarxes dels operadors comercials alternen el seu lideratge. Ara bé, què ens espera llavors quan les xarxes de recerca donin el següent pas? ■





## Identificació d'aplicacions amb NetFlow

**Pere Barlet**  
CCABA (UPC)

La classificació de tràfic, i en particular la identificació d'aplicacions de xarxa, és important per a les tasques de gestió i administració de la xarxa. Aquest, però, és un problema complex que requereix l'ús de tècniques d'identificació molt sofisticades, donada la naturalesa canviant del tràfic internet i de les seves aplicacions. En conseqüència, aquest problema ha atret l'interès tant dels operadors de xarxa com de la comunitat científica.

Tradicionalment, els números de port s'han utilitzat per identificar el tràfic d'internet (p. e. els *well-known ports* registrats per la IANA). No obstant això, avui dia és àmpliament conegut que aquest mètode no és vàlid per classificar el tràfic de xarxa actual, a causa de la imprecisió dels seus resultats. L'alternativa més comuna als números de port és la inspecció del contingut dels paquets. Aquest mètode, conegut també com a Deep Packet Inspection (DPI), consisteix a cercar patrons coneguts o signatures en el camp de dades dels paquets. Tot i que aquesta solució potencialment pot ser molt precisa, el seu alt consum de recursos fa inviable el seu ús en les xarxes actuals d'alta velocitat. A més, algunes aplicacions, com ara el P2P, han començat a implementar tècniques sofisticades d'ofuscató del protocol per tal de camuflar el seu

tràfic, a part d'utilitzar ports no estàndard o ports d'altres aplicacions, per evadir la detecció o travessar tallafocs.

Per solucionar aquests problemes, la comunitat científica ha proposat diverses tècniques d'aprenentatge automàtic (AA) per a la identificació d'aplicacions. En termes generals, la majoria d'aquestes tècniques es basen en analitzar, en una fase fora de línia, la relació entre un conjunt predefinit d'atributs del tràfic, com ara els números de port, la mida del flux, el temps entre arribades de paquets, etc. i cada aplicació. Aquest conjunt d'atributs és utilitzat per construir un classificador (p.e. arbre de decisió) que posteriorment és utilitzat per identificar el tràfic en línia.

Tot i que existeix un ampli ventall de propostes d'AA per a la identificació d'aplicacions, hi ha alguns aspectes importants que encara romanen sense investigar. Com a resultat, la majoria de tècniques d'AA han tingut un èxit molt limitat entre els operadors de xarxa. Per exemple, la majoria de sistemes de monitoratge de xarxa encara utilitzen els números de ports o tècniques de DPI per identificar el tràfic.

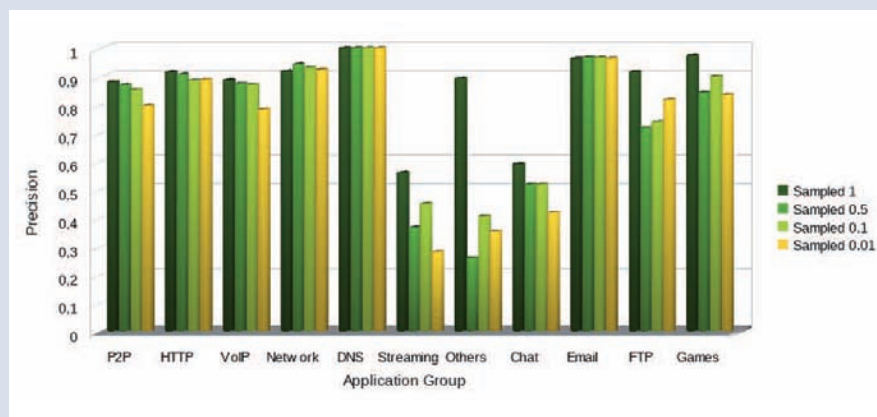
Entre aquests problemes oberts s'inclouen els següents: la majoria de tècniques d'AA només poden operar en traces a nivell de paquet, la qual cosa requereix

el desplegament de maquinari addicional de monitoratge molt costós; l'impacte del mostratge de tràfic (*sampling*) en aquestes tècniques d'AA encara és desconegut, tot i que el mostratge, com ara el Sampled NetFlow, és una pràctica habitual entre els operadors; la majoria de les propostes d'AA necessiten d'una fase d'entrenament molt costosa.

En aquest treball s'han investigat aquests tres problemes oberts. En primer lloc, s'ha estudiat el problema de la identificació d'aplicacions utilitzant NetFlow, en comptes de traces a nivell de paquet. Per a aquest efecte, s'ha adaptat el mètode d'AA proposat [1]. En segon lloc, s'ha analitzat l'impacte del mostratge de tràfic en la precisió d'aquesta tècnica d'identificació, que és molt important per les baixes taxes de mostratge utilitzades pels operadors de xarxa (p.e. 1/1000) per fer front a atacs o anomalies de xarxa. En últim lloc, s'ha proposat un mètode automàtic d'entrenament que no requereix la inspecció manual del conjunt d'entrenament i redueix significativament l'impacte del mostratge de tràfic en la precisió dels mètodes d'identificació d'aplicacions basats en AA.

La figura mostra la precisió d'aquest nou mètode de detecció d'aplicacions a la xarxa de la UPC utilitzant NetFlow amb diferents taxes de mostratge ( $p=\{50\%, 10\%, 1\%\}$ ). La precisió mitjana per a  $p=1\%$  va estar al voltant del 85% mentre que, amb la tècnica original proposada a [1] i el mètode basat en els números de port, la precisió va ser inferior al 50% i al 15%, respectivament. Tanmateix, la precisió per algunes aplicacions (p.e. *Streaming, Others i Chat*) va ser especialment baixa, perquè el conjunt d'entrenament incloïa poc tràfic d'aquestes aplicacions.

Precisió per grup d'aplicació del mètode d'identificació d'aplicacions basat en AA



[1] P. BARLET-ROS, E. CODINA, i J. SOLÉ-PARETA. "Identificació de aplicacions de red median-te técnicas de aprendizaje automático". *Boletín de RedIRIS*, 82-83, abril 2008.

## El projecte FEDERICA: Construint i operant una e-infraestructura dedicada als recercaires europeus de les xarxes de computadores

Eduard Grasa, i2CAT

El projecte FEDERICA és un projecte del 7è programa marc de la Unió Europea que aposta per la creació d'infraestructures de recerca dedicades al camp de la internet del futur. El seu objectiu principal és crear una infraestructura de xarxa d'abast europeu, separada de les xarxes de producció però amb la possibilitat d'interoperar-hi, on els investigadors puguin realitzar els seus experiments i validar tecnologies en el camp de les arquitectures i protocols d'internet.

FEDERICA adopta el paradigma de la virtualització de recursos i l'aplica sobre la seva infraestructura per tal de permetre'n l'ús simultani. El substrat de FEDERICA, format per enllaços Ethernet transparents, enrutadors, commutadors Ethernet i computadores, es divideix en diverses llesques –subconjunts de recursos– independents, cada una de les quals es dedica a un usuari. Aquest té el control total de la llesca, fet que li permet canviar-ne la configuració per tal d'adaptar-la als requeriments dels seus experiments.

Les tasques del projecte es divideixen en quatre grans àrees. La primera consisteix a seleccionar els elements adequats per construir el substrat. Tan important com construir la infraestructura és definir un model i mecanismes per operar-la: procediments per a la creació de llesques, assignació de recursos i permisos als usuaris,

modificació de les llesques, monitoratge del substrat i de les llesques... En una primera fase l'operació de FEDERICA es durà a terme manualment; no obstant això, seria molt més eficient i senzill disposar d'una eina que centralitzés tots els mecanismes per al funcionament de FEDERICA.

Les tasques de recerca del projecte van encarades a assolir aquest objectiu, i estudien temes com el control multidomini, gestió i monitoratge, control de l'usuari o federació d'infraestructures. La darrera d'aquestes grans àrees és també la més important: la captació i la interacció amb els usuaris.

Qualsevol usuari que vulgui utilitzar FEDERICA per dur a terme els seus experiments, ha d'enviar una petició a la comissió d'usuaris de FEDERICA, qui, un cop estudiada i acceptada la petició, posa en marxa els mecanismes perquè s'assignin els recursos necessaris per a la creació de la llesca.

## Tecnologia i internet en el nou mòdul esportiu del CAR

Josep Escoda, CAR

El Centre d'Alt Rendiment Esportiu (CAR) es troba davant l'inici de les obres del seu nou mòdul esportiu, que serà la major obra feta mai en aquesta institució en els seus 21 anys d'història. El nou mòdul comptarà amb una extensió de 22.000 m<sup>2</sup> i 36 milions d'euros de pressupost. L'aposta perquè aquest edifici sigui únic quant a la seva concepció i modèlic quant a la seva dotació tecnològica és un repte de futur que comença a materialitzar-se ara. Fa un any ja es va di-

vulgar i transmetre amb els nostres col·laboradors internacionals la voluntat de fer un edifici 100% IP i es va rebre un *feedback* positiu dels EUA, Austràlia i Europa, amb suggeriments molt constructius.

Els principis que regiran la seva construcció són el balanç entre rendiment i salut, la modularitat, la integració, la no invasivitat, el *feedback* instantani, el control, la qualitat i l'ecologia; així com els components de què formaran part les unitats d'entrenament, que inclouran entrenador, esportista, instal·lació i equipament esportiu, i dotació tecnològica específica per a cada modalitat.

Aquestes unitats es caracteritzaran en la seva vessant tecnològica per disposar d'equipament esportiu tecnològicament adaptat, sistemes d'informació basats en IP, enregistrament continuat i multidimensional, *biofeedback* permanent dins del procés, que estarà basat en tecnologies sense fil, tant per a la recollida, visualització i control de les dades que estaran conformades per àudio, vídeo, multimèdia, paràmetres biomèdics i físics de mesura.

Des del CAR ja s'han fet diverses accions per identificar l'estat dels sistemes i la seva futura evolució, accions concretes amb Techideas, Eventmind, Network i Atos Origin, tant a Barcelona com a Pequín, que indiquen cap a on s'ha d'avançar. Altres accions amb la Comunitat Europea ens estan permetent identificar també col·laboradors potencials i socis tecnològics.

El CAR acaba d'incorporar-se a l'Anella Científica amb una amplada de banda de 100 Mbps. Durant aquests tres anys, l'evolució de l'amplada de banda del CAR ha estat exponencial, anant d'1 a 2 Mbps per passar després a 6 Mbps,



Els ponents de la sessió III durant el torn de preguntes.

a 10 Mbps i finalment a 100 Mbps amb l'Anella Científica.

Les aplicacions d'aquesta amplada de banda que ofereix l'Anella són força diverses. Primer, proporcionar accés a internet als alumnes del CAR que conformen més de 600, entre esportistes permanents, els alumnes de l'Institut d'Estudis Secundaris del CAR, els dels mòduls de grau mitjà i superior, els dels mòduls esportius i els universitaris residents.

Segon, afavorir l'intercanvi de dades amb la resta del món esportiu, que inclou els àmbits català, espanyol i internacional, i poder relacionar-se per la xarxa amb federacions de tots els àmbits, clubs esportius i comitès olímpics d'arreu per a la prestació de serveis.

Tercera, donar serveis web a les federacions internacionals que ho requereixin i hostatjar l'Associació Internacional de Centres d'Alt Rendiment per coordinar accions amb quasi 50 centres d'alt rendiment a nivell internacional.

A més, dins de l'àmbit dels projectes esportius del govern català el CAR presta serveis via web a tres programes: L'Alt Rendiment Català (ARC), Prescripció de l'Activitat Física per a la Salut (PAFES) i Servei d'Atenció a l'Esportista (SAE).

Des del punt de vista tecnològic, la demanda més important en el futur vindrà donada pel nou edifici, on es preveu un desplegament de vídeo i àudio IP d'alta qualitat per a aplicacions esportives i videoconferències, i un centre de procés de dades que podrà créixer fins als 100 m<sup>2</sup> i un petabyte d'emmagatzematge de vídeo per a la millora de l'entrenament.

## El Centre de Regulació Genòmica i les xarxes de recerca bioinformàtica

David Camargo i Yann Dublanche, CRG

El 1986, només fa 23 anys, el premi Nobel Renato Dulbecco publicava un article a la revista *Science* en el qual declarava la necessitat de seqüenciar tot el genoma humà si es volia lluitar seriosament contra el càncer. La seqüenciació completa del genoma humà es va produir el 2003 i va revelar que 'només' consta de 22.000 gens, un nombre quasi igual al dels ratolins i només una mica més gran que el dels cucs i els insectes.

La visió tradicional de la genòmica es modifica definitivament, després del primer descobriment dels exons el 1977, amb l'epigenètica, la bioinformàtica i les noves tecnologies: la biologia cel·lular, la biologia de sistemes, i les teràpies basades en la comprensió i la reparació dels sistemes de regulació genòmica.

El Centre de Regulació Genòmica (CRG) es va posar en funcionament l'any 2000. És un centre públic de recerca bàsica biomèdica, creat per la Generalitat de Catalunya i la Universitat Pompeu Fabra. Està enfocat a l'estudi del genoma humà, el seu paper en la regulació del desenvolupament i la funció de l'organisme, i el seu ús en el diagnòstic, la prevenció i el tractament de malalties.

El CRG ha obtingut a més el suport del Ministeri de Sanitat a través de l'Institut de Salut Carlos III, de la Fundació Genoma Espanya i del Ministeri de Ciència i Innovació. L'estructura científica del CRG s'articula al voltant de sis programes de recerca, cadascun d'ells integrat amb fins a sis grups de treball. Al CRG hi treballen actualment unes 400 persones, entre personal de recerca i de gestió.

L'objectiu del CRG és contribuir a la millora de la qualitat de vida de la societat desenvolupant noves vies de diagnòstic i prevenció i tractament de malalties basades en l'estudi del genoma. El CRG està associat a la xarxa europea EMBL/EBI, forma part del nucli científic del Parc de Recerca Biomèdica de Barcelona des del 2007 i està adherit a l'Anella Científica des de 2008, de la qual gaudeix de connectivitat amb dos punts d'accés a 1 Gbps i 100 Mbps.

Tot i que els programes de recerca del CRG fan servir un ús intensiu de les noves tecnologies i la xarxa de comunicacions, dos d'ells en fan un ús encara més intens: el de Biologia de Sistemes i el de Bioinformàtica i Genòmica. Aquests programes no es limiten a l'ús tradicional dels serveis de la xarxa amb finalitat científica (comunicació telemàtica, accés a contingut de recerca, publicació de descobriments, accés a bases de dades, etc.) sinó que proveeixen la comunitat científica d'actius importants per contribuir a la recerca amb objectius conjunts. Aquests actius tenen forma de serveis web que ofereixen accés en línia a determinades aplicacions, i de programari científic especialitzat distribuït als altres laboratoris.

## Noves tecnologies en CATALÀ!

### Videojocs per a tothom (i 3)

Després de tractar en els dos números anteriors sobre els diferents gèneres de videojoc que es poden trobar en el mercat, no voldríem tancar aquest tema sense esmentar una de les qualitats més importants que cal valorar en un videojoc. Ens referim a la **jugabilitat** (en anglès, *playability* o *gameplay*), que es mesura segons el grau d'entreteniment que ens pot proporcionar un videojoc i segons la seva usabilitat, i que té en compte paràmetres com ara l'originalitat, la facilitat de control, la interacció, la coherència dels menús, la fluïdesa i la precisió dels moviments dels personatges o l'equilibri entre la dificultat i la satisfacció del jugador.

Si teniu interès a conèixer els termes bàsics del món dels videojocs, us recomanem que consulteu la Terminologia dels videojocs, que recull 265 termes amb la definició corresponent i les equivalències en castellà, francès, anglès i alemany (<http://www.termcat.cat/dicci/videojocs/index.html>).

I si voleu posar a provar la vostra **habilitat** (*skill*, en anglès), és a dir, la capacitat que un jugador adquireix progressivament mentre juga i que li permet executar cada vegada amb més èxit les accions del joc, no podeu deixar escapar l'ocasió d'endinsar-vos en la terminologia dels videojocs amb en Màrius Gros, un **personatge** (*character*, en anglès) amb qui podreu jugar a *La Guerra de les Bombolles* i a *L'Endoll Contrataca* (<http://www.termcat.cat/jocs/MariusGros/index.html>). Som-hi?



**termcat**

centre de terminologia

www.termcat.cat

# AMIGA, un nou model teòric per entendre com s'han modelat les galàxies



Tot i els grans avenços que hi ha hagut en la tecnologia utilitzada pels astrònoms observacionals, i que s'ha traduït en més i millors telescopis terrestres i observatoris espacials, encara és molt complicat poder fer estudis, amb una estadística acceptable, d'objectes a escales cosmològiques.

Per aquest motiu, en el camp de la formació i l'evolució de galàxies prenen un gran valor els models teòrics i les simulacions numèriques, l'única finestra per entendre l'origen de les propietats físiques de les galàxies i la manera com han variat amb el temps.

El grup de recerca en Astronomia i Astrofísica de la Universitat de Barcelona, dirigit per Eduard Salvador i integrat per Alberto Manrique, Guillermo González, Sinue Serra, Jordi Bracons i Jordi Viñas, ha desenvolupat un nou model teòric anomenat Analytic Model for IGM and GALaxy evolution (AMIGA), que permetrà avançar en l'enteniment dels processos físics que han modelat les galàxies que poblen l'Univers.

## El model

AMIGA és un model de formació jeràrquica de galàxies que comparteix l'esquema general d'altres models semianalítics actuals: modelar l'evolució de les galàxies remuntant-se tant com es pugui cap al passat, des del creixement de les pertorbacions de densitat que donen origen als halos de matèria fosca, fins a l'acoblament final de les galàxies en el si dels halos. Els models semianalítics utilitzen simulacions Monte-Carlo o N-cossos per seguir l'evolució de la matèria fosca, que domina gravitatòriament, i prescripcions analítiques motivades físicament per descriure l'evolució dels barions (refredament, formació estel·lar i retroalimentació, interacció galàxia-galàxia i galàxia-medi intergalàctic).

Una de les principals diferències del model AMIGA respecte a d'altres models és que no utilitza simulacions N-cossos ni Monte-Carlo per resseguir l'evolució dels halos de matèria fosca. Aquests mo-

dels necessiten grans quantitats de recursos computacionals per aconseguir altes resolucions i/o amplis rangs dinàmics i temporals. AMIGA utilitza funcions de distribució de probabilitats extretes del formalisme *Extended Press-Schechter* (EPS) modificat, que considera dues vies per al creixement en massa dels halos: una de ràpida i violenta (la fusió), que destrueix els halos progenitors de masses comparables i que dona lloc a la formació d'un de nou; i una de lenta i tranquil·la (l'acreció), en la qual un halo en captura d'altres de masses molt inferiors conservant l'estructura interna. A la figura 1 es mos-

tra, de manera esquemàtica, com evolucionen els halos de matèria fosca i el gas bariònic calent atrapat que contenen.

El mètode que s'utilitza a AMIGA per seguir l'evolució dels halos i el seu contingut bariònic és la construcció d'una malla bidimensional amb les masses dels halos,  $M_H$ , i el desplaçament al vermell,  $z$  (mesura cosmològica del temps), on cada punt conté informació sobre les propietats d'ambdós components (figura 2). Per a cada punt de la malla ( $M_H, z$ ) es calculen els temps de formació i les masses dels progenitors amb les funcions de distribució de probabilitat i s'estimen les respectives propietats típiques dels progenitors interpolant sobre la malla prèviament construïda. Aquesta interpolació sempre es pot realitzar atès que les masses dels progenitors seran sempre menors que  $M_H$  i el desplaçament al vermell de formació sempre serà més gran que  $z$ .

## Per les seves característiques, AMIGA s'executa en màquines de memòria compartida

Per a cada combinació de les configuracions dels progenitors, explica Eduard Salvador, "determinem les propietats típiques del nou halo, triem el seu moment angular total i els paràmetres orbitals inicials dels satèl·lits. Un cop tenim les condicions inicials en l'època de formació podem fem evolucionar l'halo considerant

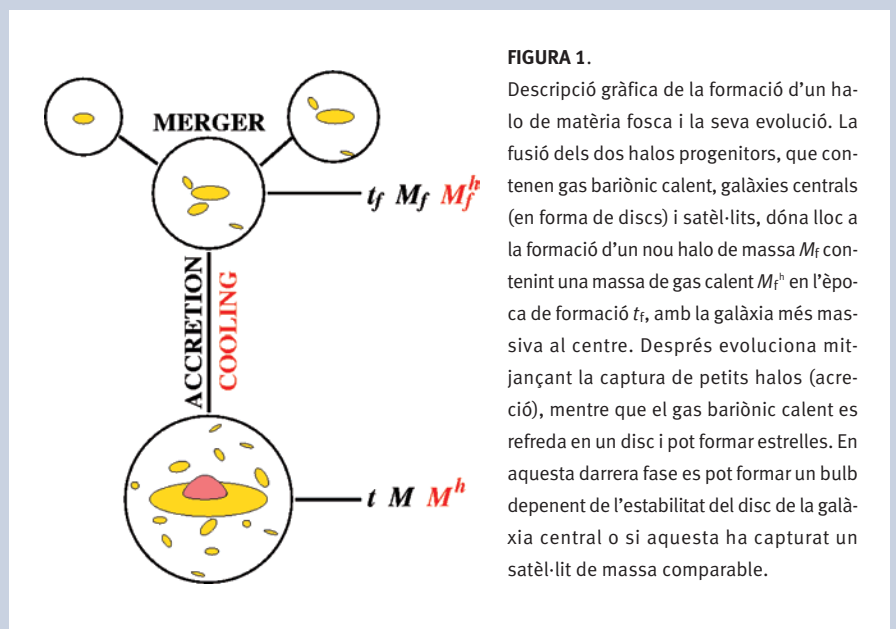


FIGURA 1.

Descripció gràfica de la formació d'un halo de matèria fosca i la seva evolució. La fusió dels dos halos progenitors, que contenen gas bariònic calent, galàxies centrals (en forma de discos) i satèl·lits, dona lloc a la formació d'un nou halo de massa  $M_f$  contenant una massa de gas calent  $M_f^h$  en l'època de formació  $t_f$ , amb la galàxia més massiva al centre. Després evoluciona mitjançant la captura de petits halos (acreció), mentre que el gas bariònic calent es refreda en un disc i pot formar estrelles. En aquesta darrera fase es pot formar un bulb depenent de l'estabilitat del disc de la galàxia central o si aquesta ha capturat un satèl·lit de massa comparable.



només accreió fins a trobar el punt de massa  $M_H$  i desplaçament al vermell  $z$ . Les propietats típiques de l'halo en aquest punt per a les diferents configuracions dels progenitors les trobem fent un promig estadístic”.

Així, “AMIGA permet cobrir un rang més ampli de masses i temps amb menys recursos computacionals que els requerits pels models basats en simulacions. A més, permet avaluar propietats generals de tota la població d'halos per a una època donada, la qual cosa reverteix en una estimació més acurada dels efectes de retroalimentació de les galàxies sobre el medi intergalàctic”, conclou Salvador.

### Prediccions del model

El principal objectiu d'AMIGA és estudiar com actuen els diferents processos físics que han modelat les galàxies actuals i fer prediccions raonables d'observables per a altres èpoques. Per aconseguir aquesta fita cal fixar primer els paràmetres lliures del model, associats a processos poc coneguts, com per exemple la formació estel·lar. En una primera fase, es fixen els paràmetres relacionats amb la població estel·lar primigènica de metal·licitat nul·la responsable de la història de reionització de l'Univers i de l'enriquiment inicial del medi intergalàctic utilitzant observables a  $z > 3$  (densitat còsmica de gas fred, densitat còsmica d'estels, ritme de formació estel·lar). En una segona fase, es fixen els paràmetres que resten i es comparen amb observables de galàxies (funcions de lluminositat a  $z = 0$ , comptes de galàxies en

magnitud, fraccions morfològiques en diferents medis). Aquesta tasca permetrà, a més, identificar quins processos físics determinen els observables emprats, és a dir, l'origen de les propietats observades de les galàxies i del medi intergalàctic.

Per últim, un cop fixats els paràmetres, es podrà utilitzar AMIGA per fer pre-

diccions de quantitats encara no observades, generalment propietats de galàxies a  $z > 6$ , però en el punt de mira de la propera generació de telescopis. En aquest àmbit, AMIGA resultarà una eina molt útil per saber a priori què es pot observar i per interpretar les observacions en un context cosmològic”, explica Eduard Salvador. ■

### AMIGA al CESCA

Tot i que AMIGA suposa un estalvi de temps de CPU respecte a d'altres models, com explica Jordi Viñas, “si volem utilitzar un mostratge fi de les propietats esmentades, tant el temps de càlcul com la memòria es veuen augmentats de forma molt considerable. És per això que sorgeix la necessitat de paral·lelitzar-lo i executar-lo en màquines adients, que per les característiques del programa han de ser de memòria compartida, mitjançant OpenMP, com ho són tant l'SGI Altix 3700 i com cada un dels nodes del nou Bull NovaScale”.

En primer lloc, ha calgut una adaptació del codi a aquestes màquines sobretot per optimitzar la utilització de la memòria cau entre els diferents processadors, tant ordenant correctament la lectura d'índex a les grans matrius com en la correcta inicialització de les variables. Per aconse-

guir-ho, ha estat indispensable l'ús de programari especialitzat en l'anàlisi d'executables paral·lelitzats, com ara Intel VTune.

Un cop optimitzat el codi, “les primeres execucions amb 8 processadors donen una acceleració de 6 respecte el codi amb un únic processador a l'SGI Altix i de 6,6 al Bull NovaScale. Si tenim en compte que la part paral·lela del codi és un 85% del total d'execució, l'acceleració màxima que es pot obtenir segons la Llei d'Amdhal és de 6,66. Per tant, l'eficiència de la part paral·lela del programa és del 90% a l'Altix i del 100% al Bull. En les proves realitzades a l'Altix amb un major nombre de processadors, fins a 32, hem pogut comprovar que l'escalat es manté força bo, obtenint una acceleració de 22 per al global del programa”, explica Viñas.

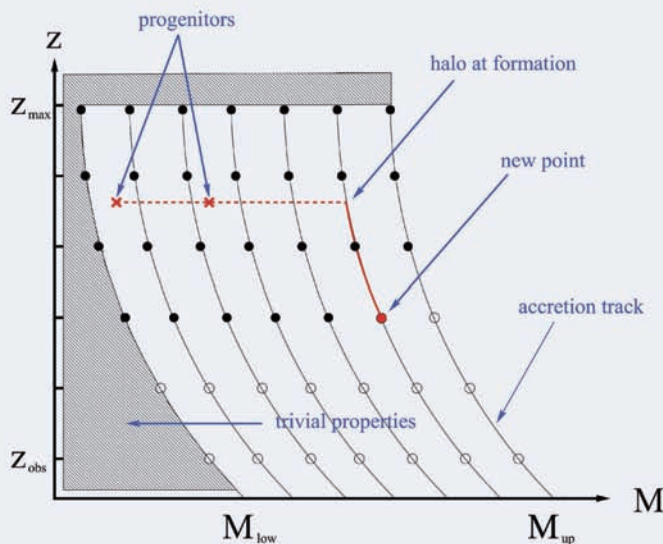
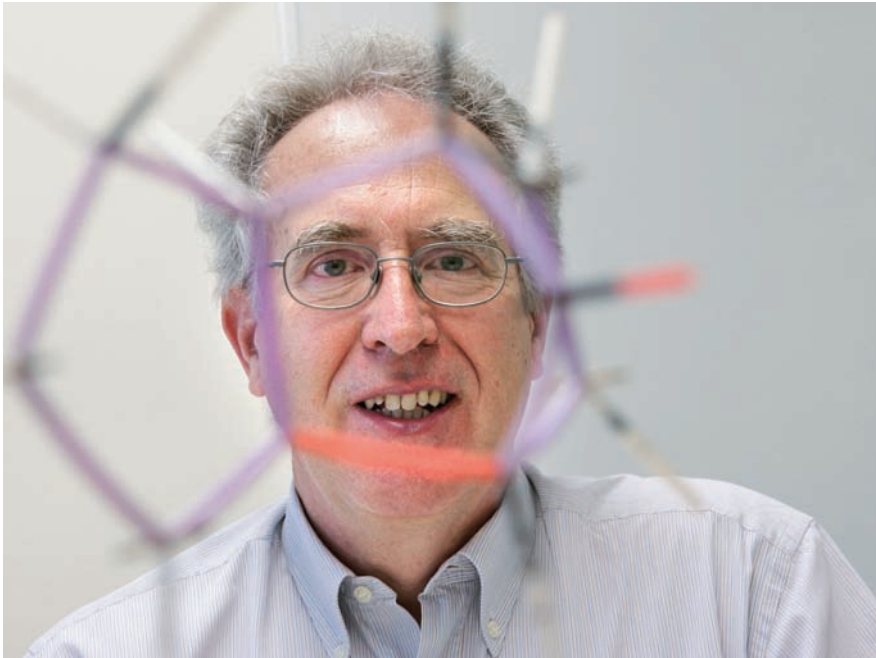


FIGURA 2.

Malla d'interpolació utilitzada en AMIGA per seguir l'evolució dels halos de matèria fosca i el seu contingut bariònic. Els eixos corresponen a la massa dels halos i al temps expressat en funció del desplaçament al vermell  $z$ . Les propietats de l'halo i el seu contingut bariònic en formació depenen de les dels progenitors, que s'obtenen interpolant sobre la malla prèviament calculada. Aquestes propietats es fan evolucionar seguint un camí d'accreió en el qual l'halo creix en massa suaument conservant l'estructura interna mitjançant la captura d'halos molt menys massius fins arribar al nou punt de la malla.

## “La xarxa de recerca en química teòrica ha fet de pal de paller per als químics teòrics catalans”

FOTOS: JORDI PARETO



A la fi de 1969, ara fa 40 anys, Santiago Olivella va tenir el seu “bateig de foc” en la química teòrica computacional amb uns càlculs quàntics que va poder fer gràcies al fet que “el Dr. Ramon Carbó em va deixar usar el codi HMO que havia programat en Fortran IV per a un petit ordinador IBM 1130 de l’IQS”, explica Olivella. En la seva carrera, l’estada postdoctoral en el grup de Michael Dewar, a la University of Texas at Austin (EUA), va ser “decisiva”. Allà va descobrir que “la química teòrica i computacional podia ser una eina molt potent per investigar l’estructura i la reactivitat de les molècules” i d’allà va tornar amb una cinta magnètica amb programes de càlcul teòric semiempíric. Així va començar una tasca d’implementació d’aquests programes, uns inicis de “molta feina i de poc suc”, i també de formació d’estudiants de doctorat al llarg de 22 anys. El 1985, amb els professors Joan Bertran i Ramon Carbó, va crear l’actual Xarxa de Referència en Química Teòrica i Computacional de Catalunya (XRQTC), que “ha fet de pal de paller per a tots els grups de recerca en química teòrica que han anat sorgint al llarg dels anys a les diferents universitats catalanes”. Amb motiu dels 65 anys del professor Olivella, els seus col·legues de l’XRQTC l’han homenatjat en la 25a reunió d’aquesta xarxa “com a reconeixement als seus esforços i dedicació”.

**El 1968, fa prop de 40 anys, va acabar la carrera en Química, just dos anys després que Robert Mulliken, en rebre el premi Nobel de Química el 1966, profetitzés que l’avanç dels ordinadors transformaria la química teòrica i computacional en una eina quasi tan indispensable com el treball experimental. Què ha estat per a vostè, que ha viscut aquesta evolució, allò que més l’ha impressionat?**

El que més m’ha impressionat és l’espectacular creixement de la velocitat de càlcul i l’extraordinària capacitat d’emmagatzematge de dades que han experimentat els ordinadors. Cal tenir en compte que jo pertanyo a la generació dels químics teòrics que va començar a fer càlculs químic-quàntics emprant les fitxes perforades, tant per carregar el codi a l’ordinador com per entrar-hi les dades del càlcul. La gran potèn-

cia de càlcul dels ordinadors actuals ha fet possible que es complís amb escriure la predicció de Robert Mulliken. Només cal adonar-se de la gran diversificació de les aplicacions de la química teòrica i computacional en diferents àmbits de la recerca, com són la ciència de materials, el disseny de fàrmacs, la química atmosfèrica, la catàlisi enzimàtica, el disseny de nous catalitzadors, la dinàmica de reaccions, etc.

**Com es va viure aquesta predicció en el seu entorn?**

Cal tenir present que Robert Mulliken era físic, no químic. Pensar que els químics poguéssim fer càlculs del nostre interès usant la mecànica quàntica, el que en diem química quàntica, semblava una quimera. En primer lloc, perquè els sistemes a tractar, que tenen un interès real, són sistemes molt grans i els recursos computacionals que hi havia en aquella època eren molt rudimentaris. En aquell moment, era molt difícil albirar un futur com el que hem aconseguit recentment. Per tant, té molt de mèrit la predicció que va fer Mulliken en una època en què hi havien pocs ordinadors i en què la química quàntica era pràcticament una entelèquia. Mulliken va saber veure-hi el futur que tenia com a eina potent i pràctica.

**Què el va portar a seguir els estudis en Química?**

Amb 12 o 13 anys ja anava a les drogueries del barri i a les cases de material de laboratori per comprar-me productes químics i balons, matrassos, cubetes... A casa, en un petit safareig tancat a la galeria, havia muntat un laboratori i feia els meus experiments seguint un llibre de química que m’havia regalat el meu pare. Ja de ben jove la química tenia un gran atractiu per a mi, tots els diners que recollia me’ls gastava en productes químics i en material de laboratori. De tant en tant, hi havia algun petit ensurt a casa, perquè alguna cosa explotava i els meus germans i els meus pares venien corrent a veure si havia pres mal.

Abans de començar la carrera, dubtava si fer la llicenciatura en Química o en Física, perquè veritablement la física sempre m’ha agradat molt. En aquella època, el primer any de carrera era un curs selectiu comú per a totes les llicenciatures de ciències que contenia diverses assignatures generals, química, física, matemàtiques... i va ser decisiva la impressió que em va causar el professor de Química, el

Dr. Josep Pascual Vila, creador de l'escola de química orgànica de Barcelona. Malgrat era el seu últim any com a docent, ja que es jubilava a l'any següent, el professor Pascual va saber transmetre'ns el seu entusiasme per la recerca en química, i això va ser decisiu en mi. De tota manera, vaig continuar estudiant física també, perquè seguia tenint molt d'interès per a mi. D'alguna manera, ja estava força inclinat cap a la química teòrica, que en el fons és una barreja entre la química i la física.

### **Com va arribar a la química quàntica un cop va acabar la carrera en Química?**

Quan vaig estudiar la llicenciatura en Química a la Universitat de Barcelona (UB) no hi havia cap assignatura de química quàntica. Per tant, un cop acabada la carrera i començada la tesi doctoral, em vaig introduir en la química quàntica de forma autodidacta, fent servir llibres de text clàssics en anglès, com ara els Coulson, Pauling, Eyring, Walter and Kimball, etc. que vaig trobar a la Biblioteca de Catalunya, l'antiga Biblioteca Central, i també d'altres de més moderns que vaig comprar a la llibreria Blackwell de Londres.

A la fi de 1969 vaig tenir la immensa sort de conèixer el Dr. Ramon Carbó, que acabava de tornar d'una estada postdoctoral en el grup de química quàntica del professor Serafín Fraga, a la Universitat d'Alberta, al Canada, que era, per cert, un dels deixebles d'en Robert Mulliken. El Dr. Carbó es va incorporar a l'Institut Químic de Sarrià (IQS) com a professor d'àlgebra lineal i va continuar fent la seva recerca en el camp de la química quàntica. A més de deixar-me els seus llibres de química quàntica, el Dr. Carbó em va deixar emprar el codi HMO que ell havia programat en Fortran IV per a un petit ordinador IBM 1130 de l'IQS per fer càlculs basats en el mètode de Huckel per a sistemes amb electrons pi. Aquests primers càlculs quàntics van ser el meu bateig de foc en el camp de la química teòrica computacional.

### **L'any 1973, va marxar a França per fer una estada postdoctoral al Laboratoire de Chimie Organique Physique du Centre d'Études Nucleaires de Grenoble (CENG). Quins records té d'aquells anys de finals de la dictadura a Grenoble?**

Només vaig estar tres mesos en el grup de recerca del professor André Rassat, al CENG, però recordo l'agradable sensació de llibertat que es respirava a França i que contrastava fortament amb l'atmosfera tanca da i repressora de la dictadura franquista

que hi havia a tot l'Estat espanyol. Des del punt de vista científic, em va impressionar molt el fet de participar en un grup de recerca format per químics experimentals i químics teòrics. Això permetia treballar en temes molt interessants que difícilment s'haguessin pogut tirar endavant sense una estreta col·laboració entre els químics experimentals i els teòrics.

### **El seu segon postdoctorat va ser als EUA, a Austin, en el grup de Michael J. S. Dewar. Com van ser aquells anys als EUA i com van contribuir en la seva trajectòria professional?**

## **“El gran nombre d'articles publicats pels químics teòrics catalans avala el nivell de la seva recerca”**

Aquells dos anys i escaig d'estada postdoctoral als EUA en el grup de recerca del professor Dewar van ser extraordinàriament feliços i fructífers, tant des del punt de vista científic com personal. En gran part, va ser a causa de viure en una societat amb una forma de pensar i de fer molt diferent a la que jo estava acostumat. Allí, la Maria Àngels, la meua dona, i jo vam fer moltes amistats que avui dia encara perduren.

En la meua trajectòria professional, la contribució d'aquesta estada postdoctoral va ser decisiva. Vaig descobrir que la química teòrica i computacional podia ser una eina molt potent per investigar l'estructura i la reactivitat de les molècules. Era l'època dels anomenats “mètodes semiempírics d'orbitals moleculars” (MINDO/2, MINDO/3, MNDO...), que van obrir als químics quàntics les portes a l'exploració de les superfícies d'energia potencial de reaccions d'interès químic real, cosa que permetia esbrinar el seu mecanisme.

Fins aleshores, la recerca en química quàntica s'havia mantingut en un terreny molt acadèmic i amb unes aplicacions molt limitades. Mercès a l'augment de la potència de càlcul dels ordinadors i a l'avenç en la programació d'algorismes de càlcul numèric eficients, els anomenats mètodes *ab initio* també van començar a ser emprats per estudiar reaccions químiques amb un nombre petit d'àtoms. Tot plegat em va fer decidir a dedicar-me professionalment a

l'estudi computacional de les reaccions químiques basat en els mètodes de la química teòrica.

### **Un cop va tornar a Catalunya, com era la recerca en química teòrica que s'hi feia? Quines diferències hi havia aleshores amb el que havia conegut fora?**

Quan vaig tornar dels EUA, la recerca en química teòrica que es feia a Catalunya bàsicament era la que realitzava el professor Carbó a l'IQS, el professor Bertran a la Universitat Autònoma de Barcelona i els estudiants del Dr. Tel a la UB. Els recursos de càlcul eren raquífics. Excepte el grup del professor Carbó, que disposava d'un ordinador a l'IQS, els altres grups de recerca havíem de realitzar els càlculs teòrics en l'ordinador FACOM de la Universitat Politècnica de Catalunya o bé en l'ordinador UNIVAC 1108 del Centro de Proceso de Datos del llavors Ministerio de Educación y Ciencia, ubicat a Madrid.

Tant el codi com les dades dels càlculs s'introduïen als ordinadors amb una lectora de fitxes perforades. En el cas de l'UNIVAC, la lectora de fitxes enviava les dades a Madrid a través d'una línia telefònica de mala qualitat que s'espallava cada dos per tres. Aconseguir que acabés amb èxit el càlcul d'optimització de la geometria d'una molècula no gaire gran amb un mètode semiempíric era una tasca molt llarga, laboriosa i extenuant. Atès que jo venia de treballar amb l'ordinador CDC 6600-6400 de la Universitat de Texas a Austin, un dels més potents que hi havia en aquella època als EUA, el xoc amb la manca de recursos computacionals que hi havia a Catalunya va ser brutal. Realment calia tenir molta paciència i voluntat per voler-se dedicar a la química teòrica i computacional en el nostre país en aquella època!

### **Quin any es va incorporar al Consell Superior d'Investigacions Científiques (CSIC)?**

Abans de marxar als EUA, ja havia aconseguit una plaça de col·laborador científic del CSIC, així que vaig fer el postdoctorat amb un permís especial que em va concedir el CSIC perquè em desplaçés als EUA per treballar en el grup del professor Dewar. Sabia que a la meua tornada tenia una plaça assegurada com a col·laborador científic, però no tenia clar en quin camp de la química treballaria. Quan vaig tornar dels EUA, ja ho tenia molt clar.

Va ser important el que vaig portar d'EUA el novembre de 1976: una cinta magnètica amb els programes de càlcul que teníem al grup del professor Dewar. En



Es va llicenciar en Química a la UB el 1968, i va doctorar-se el 1973 amb la màxima qualificació amb una tesi sobre radicals lliures en química orgànica. Aquests estudis el van introduir a la química quàntica i va començar com a postdoctoral al Laboratoire de Chimie Organique Physique du Centre d'Etudes Nucleaires du Gre-

noble, l'any 1973 en el grup del professor André Rassat. De 1974 a 1976, va fer una segona estada postdoctoral a la University of Texas a Austin, en el grup del professor Michael Dewar. Des de 1988, Olivella és professor d'investigació del CSIC, i ha estat un dels professors catalans en química teòrica pioners en ensenyar i en promoure els conceptes i les eines de la química quàntica tant entre la comunitat química teòrica i altres químics d'altres àrees, com ara l'orgànica, la inorgànica i la bioquímica. De 1981 a 2000, va ser professor convidat a la UB on ha estat cofundador i el primer director de Centre Especial de Recerca en Química Teòrica (1998-2000). A la fi de l'any 2000, va tornar al CSIC on lidera el grup de Química Teòrica i Computacional a l'Institut de

Química Avançada de Catalunya. Guardonat amb la medalla Narcís Monturiol al mèrit científic i tecnològic de la Generalitat de Catalunya (1999) i amb el premi Solvay per a la recerca en ciències químiques (2003), és acadèmic electe de la Reial Acadèmia de Ciències i Arts de Barcelona des de 2007. Autor de nombroses contribucions en el camp de la química quàntica, tant pel que fa a models teòrics a estructura i mecanismes de reacció en química orgànica. Ha contribuït al desenvolupament i a la implementació del codi MOPAC, un dels paquets més àmpliament usats a la química computacional i que va permetre a molts investigadors joves usar aquesta eina computacional per tractar diferents problemes químics des del principi dels 80.

aquell moment, la majoria d'aquests programes no estaven implementats en lloc més que en aquell grup. Amb moltes penes, treballs i sacrificis vaig aconseguir implementar-los aquí. El primer problema va ser trobar una lectora de cintes compatible, buscar en quins ordinadors es podria instal·lar aquest programari, que van ser el FACOM, l'UNIVAC... Per tant, els inicis van ser de molta feina i de poc suc, ja que abans de poder treure una publicació passaves molt de temps implementant i provant els programes.

**Una de les seves contribucions és la creació l'any 1985 de la Xarxa Catalana de Química Teòrica i Computacional (vegeu *Teraflop 68*), juntament amb els professors Joan Bertran (vegeu *Teraflop 60*) i Ramon Carbó (vegeu *Teraflop 68*). Quina ha estat l'aportació d'aquesta xarxa a la recerca en química teòrica a Catalunya?**

La creació l'any 1985 del Grup de Química Quàntica de l'IEC, el nom que tenia inicialment, que passaria l'any 1994 a ser la Xarxa de Química Teòrica i Computacional de Catalunya, és a dir, una xarxa temàtica de la Generalitat de Catalunya, i que finalment l'any 2006 es va convertir en la Xarxa de Referència en Química Teòrica i Computacional de Catalunya ha tingut un paper fonamental en la promoció de la recerca d'excel·lència en Química Teòrica i Computacional a Catalunya. És innegable que la recerca en aquest camp en el nostre país ha assolit un nivell de qualitat i reconeixement internacional molt alt. Aquesta afirmació l'avalua el gran nombre d'articles publicats pels quí-

mics teòrics catalans en les millors revistes científiques internacionals i la creixent participació com a conferenciants invitats d'aquests científics en congressos internacionals de gran prestigi.

La xarxa ha fet una mica de pal de paller per a tots els grups de recerca en química teòrica que han anat sorgint al llarg dels anys a les diferents universitats catalanes. Ha estat el nexa comú per a tots aquests grups, per poder intercanviar coneixement, per esperonar la gent jove a presentar els seus treballs directament en congressos i reunions, i també per solucionar problemes de programari i de supercomputació com si fossim un sol grup.

**Aquesta tasca formadora i esperonadora de la gent jove ha estat una activitat important en la seva carrera professional.**

Efectivament. Durant 22 anys vaig estar donant un curs de doctorat a la UB, abans fins i tot de ser professor visitant en aquesta universitat. Just després de la meua tornada dels EUA, el professor Josep Castells, catedràtic de Química Orgànica de la UB, es va interessar en que jo, malgrat estés al CSIC, pogués impartir un curs de doctorat que introduís tots els estudiants de doctorat de química en el càlcul teòric. El professor Castells era molt conscient de la importància que tindria la química teòrica i computacional, no solament en el Dept. de Química Física sinó també en el de Química Orgànica.

A part de mantenir el programari, vaig fer la tasca de distribuir-lo i donar-lo a conèi-

xer. Una activitat que va contribuir a fer augmentar espectacularment el nombre de tesis doctorals de química experimental que incloïen també càlculs teòrics. Evidentment, van ser molt importants també en aquest punt les contribucions dels professors Carbó i Bertran.

**Des del propi CESCO, hem pogut veure el creixement de la comunitat de químics teòrics a Catalunya, que històricament han estat grans usuaris dels serveis de càlcul del Centre. Com a usuari i com a membre de la Comissió de Grans Usuaris de Supercomputació, com ha contribuït el CESCO a la seva tasca investigadora?**

Estic totalment convençut de que el CESCO ha contribuït en gran mesura a la meua tasca investigadora des de la seva creació l'any 1991. Molts dels càlculs en què es fonamenten la majoria dels articles que he publicat aquests darrers anys s'han pogut realitzar mercès al maquinari del CESCO i al suport tècnic que sempre he rebut per part del seu personal.

A banda de facilitar la supercomputació als usuaris de química teòrica, el CESCO també ha fet una gran tasca a través de l'organització de *workshops*, seminaris, la Jornada Catalana de Supercomputació, la pròpia revista *Teraflop...* Són valors afegits que han ajudat els químics teòrics, en particular, però en general a tota la comunitat científica. El CESCO no és solament un centre de supercomputació, sinó que ha dinamitzat també tot una sèrie d'aspectes relacionats amb la supercomputació, la recerca, la formació, etc. ■

# Els punts neutres del sud d'Europa s'uneixen per potenciar-hi el tràfic d'internet

Representants dels punts neutres de Catalunya (CATNIX), Madrid (ESpanix), Torí (TOP-IX), Milà (MIX), Roma (NaMeX) i Lió (LYONIX) van signar el passat 22 de maig un conveni de col·laboració amb l'objectiu de promoure i potenciar el tràfic d'internet del sud d'Europa i reduir d'aquesta manera les diferències existents amb el del nord.

Aquest acord es materialitza amb la creació del Southern European Internet

Exchange Points (SEIXP), un grup format pels membres signants i obert a tots els punts neutres de la zona, l'objectiu del qual serà reduir les diferències amb el nord d'Europa pel que fa a l'intercanvi de tràfic d'internet en el qual participen nodes neutres. La seva principal àrea d'interès serà el sud d'Europa, però també l'àmbit mediterrani i l'Orient Mitjà, com a regions on potenciar i desenvolupar el tràfic d'internet.

El conveni de col·laboració estableix que, per fomentar el creixement d'internet en aquestes àrees d'interès, els membres del SEIXP desenvoluparan activitats conjuntes, com ara la creació d'un butlletí per fomentar el debat i la cooperació



en diferents temes tècnics i comercials, i crear mercat. El grup, que estarà dirigit per un comitè directiu format per un representant de cadascun dels membres, també ha acordat celebrar esdeveniments conjunts per tal de crear una xarxa social entre els nodes neutres membres i millorar-ne la cooperació.

En la signatura del conveni han participat Jordi Bosch, president de la Comissió Estratègica del CATNIX; Cristóbal López, gerent d'ESpanix; Maurizio Goretti; conseller delegat de NaMeX; Luca Cicchelli, delegat per TOP-IX i MIX, i Samuel Triolet, director de LYONIX.



D'esquerra a dreta: Josep Castells (STSI), Maurizio Goretti (NaMeX), Jordi Bosch (STSI), Samuel Triolet (LYONIX), Cristóbal López (ESpanix), Luca Cicchelli (TOP-IX), Josep Ramon Ferrer (STSI) i Miquel Huguet (CESCA).

## FilNet es connecta al CATNIX

El proveïdor de serveis d'internet (ISP) FilNet s'ha connectat al Punt Neutre d'Internet de Catalunya (CATNIX) amb una velocitat de 100 Mbps. La connexió d'aquest ISP al punt neutre es fa a través de Telvent, la segona ubicació del CATNIX.

El secretari de Telecomunicacions i Societat de la Informació, Jordi Bosch, ha assegurat que amb la incorporació de FilNet al CATNIX "seguim potenciant l'oferta d'internet a Catalunya, on el CATNIX és un element clau dins de l'estratègia global de desplegament de serveis i infraestructures de telecomunicacions al nostre país", i que "tant els clients de FilNet com els ciutadans de Catalunya es podran beneficiar d'una major qualitat de servei d'internet".



Pedro José Urteaga, de FilNet, i Jordi Bosch, de l'STSI, a la signatura del conveni.



# Desenvolupament d'un sistema de control adaptatiu flexible

L'adaptabilitat és una qualitat pròpia dels éssers vius, i en especial dels éssers humans, que permet l'evolució i el desenvolupament, ja que propicia els canvis necessaris per resistir i acceptar les modificacions de l'entorn. Així, en els processos industrials, aconseguir que el sistema que controla un procés s'adapti als canvis que puguin ocórrer (envelliment, canvi en algun dels seus paràmetres, fallades...) és útil per mantenir l'eficiència del procés. Amb aquest propòsit, Hilaro López va escriure *Análisis e implementación de un sistema de control adaptativo en tiempo real basado en microcomputador*, la tesi més consultada de la Universidad de Oviedo (UOV) en el repositori Tesis Doctorals en Xarxa (TDX).

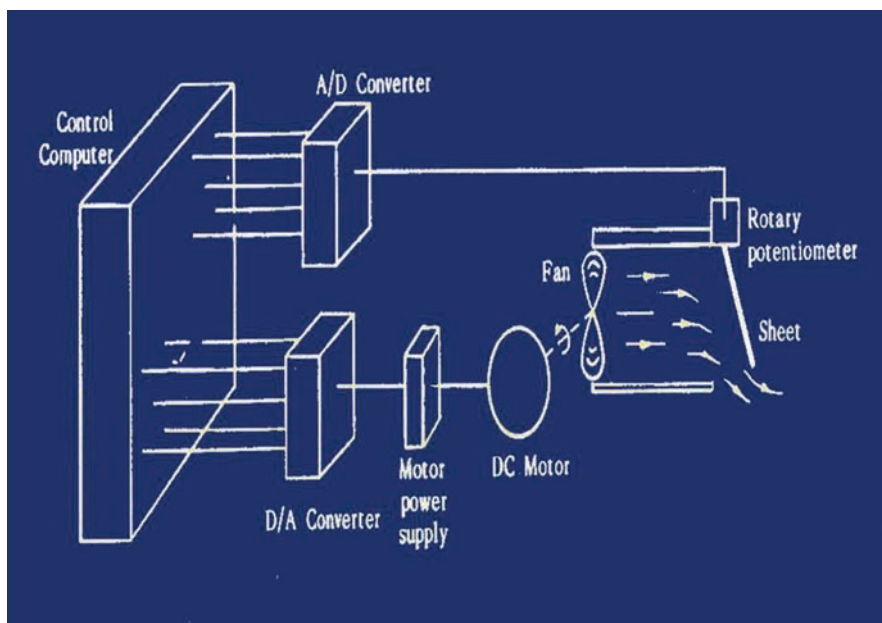
mació tan completa de forma ràpida i des de qualsevol lloc és un privilegi que nosaltres no vam tenir al desenvolupar la nostra recerca". A més, "el TDX no només és útil per als doctorands, sinó també per revisar l'estat de la recerca d'una matèria concreta o comprovar el nivell de la investigació que es desenvolupa a les universitats", comenten.

"El fet que sigui la tesi més consultada de la UOV pot ser perquè va ser una de les primeres digitalitzades i incorporades al TDX d'aquesta universitat, i va esdevenir el referent de molts professors i investigadors que volien també afegir-hi la seva". De fet, "el tema tractat ha evolucionat molt en els darrers 20 anys i el contingut ha quedat antiquat. Tot i així, és un referent dels inicis del control adaptatiu", explica López.

## La tesi, de 1989, va ser digitalitzada i incorporada al TDX el 2007

El control adaptatiu es pot definir com un sistema que contínuament i automàticament mesura les característiques dinàmiques de la planta o procés a controlar, les compara amb les característiques desitjades i usa la diferència per generar un senyal d'accionament de manera que pugui mantenir el funcionament òptim amb independència de les variables ambientals. Per això, abans de dissenyar un sistema de control adaptatiu cal definir les condicions desitjades per al funcionament òptim del sistema.

En termes matemàtics, "es tria un índex de funcionament que serà el límit superior del comportament del sistema i que ofereix informació del seu funcionament òptim, però que no descriu les característiques de la seva resposta transitoria", explica l'autor. Per això, "és nor-



Esquema de la planta pilot on s'ha aplicat el sistema de control MASTER.

Aquesta tesi, dirigida pel Dr. Guillermo Ojea i presentada en el Departament d'Enginyeria Elèctrica, Electrònica de Computadors i Sistemes de la UOV, va ser llegida l'any 1989 i incorporada al repositori el 2007, quan la UOV va entrar a formar part del TDX. Per poder introduir-la, va ésser digitalitzada "ja que només disposava d'una còpia impresa en paper", explica l'autor, i "així vaig poder preservar-la en el temps i posar-la a disposició de qui pogués necessitar-la", afegeix.

Per a Vicente Gotor, rector de la Universidad de Oviedo, "ha estat una gran idea la creació del TDX, ja que és una motivació perquè els investigadors consultin més tesis. A més, cal destacar la importància de poder accedir a aquestes fonts originals (tesis) en lloc d'haver de consultar les publicacions en revistes derivades d'elles".

Tant per a l'autor com per al director d'aquesta tesi, "el TDX és una eina indispensable i en fem una valoració molt positiva. El fet de poder accedir a una infor-

mal usar el procediment de prova i correcció, però és necessari que el sistema tingui un únic funcionament òptim i que les variables dels paràmetres no es donin amb molta rapidesa, perquè el sistema pugui assumir-les”, afegeix.

Així, la tesi se centra en l'estudi de les tècniques de control adaptatiu, dels algorismes necessaris per al disseny d'un controlador d'aquest tipus i dels requeriments que s'han d'acomplir en la seva implementació. “Amb els resultats obtinguts s'ha desenvolupat un sistema de control adaptatiu flexible, de baix cost i estructura modular, per al treball en temps real, de forma que pugui ser àmpliament aplicat tant a la indústria com a la recerca i la docència a les universitats”, comenta López.

La tesi s'estructura en cinc parts. La primera presenta les principals tècniques, aportacions i desenvolupaments industrials així com de recerca relacionats amb el control adaptatiu. A continuació, la segona part, fa una revisió dels algorismes de disseny, identificació i supervisió necessaris per al desenvolupament d'un sistema bàsic de control adaptatiu, així com dels diferents mètodes de control implementats.

La tercera part estudia els aspectes a tenir en compte a l'hora d'implementar un sistema de control adaptatiu per a treball en temps real, des dels requisits de programari fins al maquinari disponible per fer efectiva la implantació. La quarta part presenta el sistema dissenyat, maquinari i programari, així com els resultats obtinguts aplicant els diferents mètodes de control, supervisió, filtratge... implementats. En concret, el sistema desenvolupat s'anomena Sistema Modular per al Control Adaptatiu en Temps Real (MASTER) i ha estat implementat en base a un computador compatible PC-AT dotat d'una targeta d'interfície DASH-16F de Metrabyte Corporation.

Com a llenguatge de programació s'ha utilitzat Modula-2, un llenguatge d'alt nivell, petit i compacte, adequat per a la implementació de sistemes en temps real. L'estructura del sistema MASTER és bitària (*background* i *foreground*, processament no prioritari i prioritari) i cada tasca consta d'una sèrie de procediments (inclosos en mòduls) que s'executen de manera seqüencial. El pas del control per

## La tesi desenvolupa un sistema de control adaptatiu flexible anomenat MASTER

part del *background* al *foreground* es realitza quan es produeix una interrupció que marca un nou període de mostreig o d'adquisició de dades en temps real.

MASTER s'ha aplicat al control d'una planta externa connectada físicament a ell. Així, “s'ha controlat l'angle que forma la placa amb la vertical, mitjançant un flux d'aire que prové d'un ventilador de velocitat variable”, explica López. “El ventilador

s'actua per un motor de corrent continu amb amplificador de potència lineal i l'angle de la placa es mesura per un potenciòmetre de baix fregament”, afegeix.

Per a López, “el sistema de control MASTER pot aplicar-se a funcions de *data logging* i de control de processos a nivell industrial. També pot ser útil com a entrenament dels enginyers de control que no estiguin familiaritzats amb aquests sistemes o per explicar als estudiants els aspectes relacionats amb l'ús de computadores per al control de processos”.

MASTER soluciona també les restriccions que s'han trobat en els paquets de programari de control adaptatiu i equipar la seva aplicabilitat industrial a la dels controladors autònoms sense perdre flexibilitat ni perjudicar la resta d'aplicacions. Una aportació important de la tesi recau en “la simplificació i automatització de la fase de posada en marxa del sistema, que incorpora una fase de preidentificació que proporciona paràmetres inicialment necessaris”. “Totes les opcions es poden seleccionar per mitjà del programari sense necessitat de modificar el maquinari i, a més, per incrementar el rang d'aplicabilitat industrial del sistema s'han inclòs els mecanismes necessaris per a l'adquisició de dades via DMA, gestió d'alarmes o control manual”, explica López. Per últim, com a perspectives de futur de la recerca desenvolupada, es va suggerir l'aplicació de tècniques d'intel·ligència artificial al sistema generat, “fita que s'ha aconseguit amb el pas del temps”, conclou López. ■

### Hilario López

És doctor en Enginyeria Industrial per la Universidad de Oviedo i professor titular de l'Àrea d'Enginyeria de Sistemes i Automàtica a la mateixa universitat. Des de 2008, és director de l'Escola



Politécnica Superior d'Enginyeria de Gijón. Ha estat autor de nombroses publicacions a revistes nacionals i internacionals, dos llibres i ha dirigit sis tesis doctorals. És membre del Comité Español de Automática de la International Federation of Automatic Control des de 1995, de l'Instituto Universitario de Tecnología Industrial de Asturias des de 2002 i avaluador de la Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva.

### Guillermo Ojea

És doctor en Enginyeria Industrial per la Universidad Politécnica de Madrid i catedràtic de la Universidad de Oviedo des de 1984. Ha impartit docència en les titulacions d'Enginyeria Industrial, Enginyeria Química i Enginyeria de Telecomunicacions. Ha participat en nombrosos projectes de recerca i és autor d'un gran nombre d'articles i comunicacions a congressos. Ha estat vicerector de Programació i Inversions a la Universidad de Oviedo des de 1989 a 1996 i director del Departament d'Enginyeria Elèctrica des de 2000 a 2004. Des de 2005, ocupa el càrrec de secretari del Consell Social a la mateixa universitat.





## El concepte d'identitat social urbana

Sovint, per conèixer la identitat d'una persona ens referim al seu entorn físic, que molts cops ens ajuda a esbrinar-la. Ho fem quan ens presenten a un desconegut amb el qual hem d'establir una llarga conversa. Una de les preguntes que segurament faríem al nostre interlocutor seria sobre la seva procedència. On viu? D'on és? És així com comença l'article de Sergi Valera i Eric Pol, *El concepto de identidad social urbana: una aproximación entre la psicología social y la psicología ambiental*, el més consultat de la revista *Anuario de Psicología* en el repositori de Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO) en el període 2006-08.

A més, *Anuario de Psicología* ha estat la segona revista més consultada a RACO en el mateix període. Aquesta revista pertany a la Universitat de Barcelona (UB), i es troba disponible al repositori des del seu exemplar número 1, de 1969, gràcies als ajuts per a la digitalització retrospectiva de revistes que va rebre l'any 2007 amb el patrocini de la Secretaria de Telecomunicacions i Societat de la Informació de la Generalitat de Catalunya. Amb aquests ajuts es van poder digitalitzar 16.161 pàgines de la revista.

En concret, aquest article, publicat en el número 62, de l'any 1994, tracta sobre el concepte d'identitat social urbana com a punt de connexió entre la psicologia social i la psicologia ambiental, nexa d'altra banda necessari per a una concepció global de l'entorn i per comprendre els processos socials que tenen lloc a les ciutats.

Per als autors, el fet que l'article sigui tan consultat és conseqüència "possiblement de la seva temàtica, que és tan

actual ara com quan es va publicar l'article, el 1994. El fenomen de construcció d'identitats, siguin personals o socials, continua atraient els científics socials, i l'enfocament psicoambiental, és a dir, l'anàlisi del paper dels entorns físics en els processos de configuració de la identitat, afegeix un element d'originalitat al debat". A més, "al voltant d'això es tro-



ben conceptes com la identitat de barri, el concepte social de veïnat, la identitat del lloc, etc. que esdevenen un contrapunt important a fenòmens com ara els derivats de la globalització", afegeixen.

Pel que fa al repositori, els autors creuen que "és realment imprescindible poder comptar amb un repositori de re-

vistes científiques catalanes, i ho és tant per dinamitzar la producció científica al nostre país com per oferir altres indicadors de l'impacte i rellevància científica de les nostres produccions més enllà dels utilitzats habitualment en la visualització i avaluació de la recerca".

### La identitat social urbana

"La majoria dels grups de la societat viuen en entorns urbans, per això s'ha optat per parlar d'identitat social urbana. Poques vegades els psicòlegs socials han centrat la seva atenció en els aspectes ambientals i en el paper dels entorns físics en la formació de la identitat social. Tot i així, els escenaris físics en els quals l'individu desenvolupa la seva vida quotidiana juguen un important paper en la configuració de la seva identitat, determinades àrees geogràfiques determinen la identitat urbana dels seus habitants", comenten els autors. L'article comença fent una aproximació a la consideració de l'entorn en els processos d'identitat social, continua amb una primera aproximació al concepte d'identitat social urbana, per després ampliar-lo esmentant les seves principals característiques.

"La principal aportació de l'article és l'intent de posar en relació una teoria clàssica de la psicologia social europea, la teoria de la identitat social, amb les aportacions de la psicologia ambiental, una disciplina molt més jove, i la seva anàlisi dels entorns físics primaris psicològicament parlant (casa, barri...)", expliquen els seus autors. Així, "la construcció de categories socials en base a referents ambientals és un tipus d'anàlisi original. Altres estudis en l'àmbit internacional han abordat també aquesta temàtica però no des d'aquest enfocament", conclouen. ■



# Disseny d'una planta de producció de carbonat sòdic

**UAB** El disseny d'una planta de producció de carbonat sòdic a partir de carbonat de calci i clorur de sodi, mitjançant el mètode Solvay ha estat l'objectiu de *Planta de producció de carbonato sódico*, el tercer document més consultat en el Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT) en el període 2005-08, després de *Disseny de drivers per a targes de transmissió de senyals* que ocupa la primera posició (vegeu *Teraflop 102*) i *ParallelKnoppix Tutorial*, la segona (vegeu *Teraflop 97*).

Aquest document, de la col·lecció de projectes i treballs de final de carrera de l'Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Química de la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB), ha estat escrit per Laura Cervera, Lucía Izquierdo, Juan Pablo Labbrozzi, Marta Moreno, Eloy Outeiral i Raquel Vidal, i introduït a RECERCAT el 2006. Des d'aleshores, ha rebut un 1,78% del total de consultes.

El projecte té per objectiu el disseny d'una planta de producció de carbonat sòdic a partir del mètode Solvay que s'ubicarà a Vilafranca del Penedès, a l'Alt Penedès. Aquest procés es caracteritza perquè a partir de matèries primeres molt bàsiques, com són el clorur sòdic i la roca calcària, s'obté un producte de gran mercat, el carbonat sòdic. En el projecte s'estudien tant el disseny dels equips que seran part del procés de producció com els sistemes de control utilitzats, impactes mediambientals que es puguin generar i l'avaluació econòmica de l'acceptació del procés en el mercat.

## El carbonat sòdic

El carbonat sòdic és una sal blanca i translúcida que, abans de l'arribada dels processos industrials, provenia de fonts naturals, tant vegetals com minerals. A la fi del segle XVIII la producció disponible era molt més baixa que la demanda creixent del mercat de detergents i cristall. Per això, Nicolas Leblanc va proposar un procés d'obtenció del carbonat sòdic a partir de la sal comuna i va obtenir la patent el 1791. Aquest procés tenia un fort impacte ambiental ja que emetia grans quantitats d'HCl gas (àcid clorhídric) i residus, com el sulfat de calci sòlid que produeix gasos venenosos.

Més endavant, aquest mètode va ser substituït pel creat per Ernest Solvay que va utilitzar les mateixes matèries primeres que l'anterior, el clorur sòdic (sal comuna) i el carbonat càlcic (roca calcària), i hi va afegir amoníac per fabricar industrialment el carbonat sòdic. Així, va aconseguir fer menys costós el procés i eliminar alguns dels problemes que presentava el mètode Leblanc. Des d'aleshores, el mètode Solvay és el que s'usa en l'actualitat per obtenir carbonat sòdic.

"L'optimització del procés de l'obtenció del carbonat sòdic és molt important, ja que existeixen dos cicles tancats de compostos", expliquen els autors. El cicle del CO<sub>2</sub>, produït en forns on es produeix la calcinació de la calcària i el cicle de l'amoniac, el més important del sistema, i el que va suposar un avanç en la producció de carbonat sòdic i va fer que el procés Solvay tingués molt èxit. En aquest segon cicle es recupera quasi la totalitat de l'amoniac, fet

que suposa no només un benefici en l'impacte ambiental, sinó també un estalvi econòmic del procés.

El carbonat sòdic és un producte químic utilitzat en multitud de branques de la indústria siderúrgica, s'usa per torrar, escalfar sota una ràfega d'aire el crom i altres extractes, i disminueix el contingut de sofre i fòsfor de la fosa i de l'acer. També s'usa per reciclar bateries velles i per baixar el punt de fusió del silici i poder treballar-lo millor. En la fabricació de detergents, el carbonat sòdic assegura el correcte funcionament de la resta de substàncies que els componen, enzimes, tensioactius... A més, actua com a regulador del pH per al tractament d'aigües o els processos de flotació. S'usa per fer sabons, alumini, tèxtils, paper, preparacions farmacèutiques, sosa càustica, etc.

**El tercer document més consultat a RECERCAT també pertany a la UAB, com els dos primers**

El projecte conclou observant que el lloc on s'ubicaria la planta "no és el més adequat, almenys des del punt de vista mediambiental i per això no seria viable", comenten els autors. Les solucions que es plantegen comporten grans inversions que farien inviable l'operació a la planta. "Aquestes dificultats podrien solucionar-se situant la planta més a prop del mar", conclouen. ■



## Nou armari central de cablatge



S'ha instal·lat un nou armari central de cablatge (ACC) per a la Sala de Màquines del Centre que servirà per fer les interconnexions entre els diferents sistemes que hi ha en funcionament. L'armari és un Retex de 42 posicions U de 19 polzades d'amplada amb elements de suport per guiar el cablejat vertical i horitzontalment, taulers de connexió (*patch-panels*) de fibra i coure, i l'electrònica principal de la xarxa d'emmagatzematge, serveis, i gestió i monitoratge. Hi arriben els enllaços de fibra, habitualment multimode, i coure, principalment categoria 6, que provenen dels armaris principals de la Sala de Màquines. Així, la interconnexió es realitza entre aquests armaris i l'armari central amb cablejat estructurat amb corrugats de protecció i, per als enllaços més crítics, amb dues rutes diferents.

El principal avantatge que aporta aquest armari és la flexibilitat, ja que permet interconnectar dos sistemes o equips de xarxa que estiguin en armaris diferents sense haver d'instal·lar enllaços directes entre ells. Així, quan s'instal·la un nou sistema, només cal fer arribar el cablejat cap a l'armari principal i a partir d'aquí ja es pot interconnectar amb la resta d'armaris, segons les necessitats. A més, l'ACC també facilita la gestió del cablejat del fals terra tècnic de la Sala de Màquines i la conseqüent adaptació a noves necessitats de manera fàcil i òptima. ■

## Noves altes i ampliacions a l'Anella

L'Institut d'Estudis Catalans ha connectat a l'Anella Científica un nou punt d'accés SHDSL a 8 Mbps, que dona connectivitat al nou local de la plaça Salvador Seguí, i l'Institut de Física d'Altes Energies (IFAE) compta amb una nova connexió d'1 Gbps amb DWDM. L'IFAE té a més una connexió dedicada de 10 Gbps per al Port d'Informació Científica.

D'altra banda, dues institucions han ampliat el seu cabal de connexió. El Centre de Regulació Genòmica ha passat de 900 Mbps a 1 Gbps i la Fundació Clínica per a la Recerca Biomèdica ha ampliat la seva connexió de 10 a 100 Mbps, facilitant els recursos necessaris per a una gestió i un desenvolupament adequats dels seus projectes científics. ■

## L'Anella Científica participa en la primera retransmissió 3D en directe d'Espanya

L'Anella Científica ha participat en la primera retransmissió en directe amb tecnologia 3D i qualitat cinematogràfica realitzada durant la cinquena edició del Digital Barcelona Film Festival (DiBa 2009), un esdeveniment que vol unir el cinema digital amb les darreres tendències innovadores i que ha tingut lloc del 17 al 24 de maig.

Dins d'aquest festival, el dia 19 de maig ha tingut lloc una demostració de retransmissió en directe d'imatges en tres dimensions, que gràcies als avenços en tecnologia estereoscòpica han permès l'aplicació de la tecnologia 3D a les retransmissions en directe. La filmació de les imatges en 3D s'ha realitzat usant quatre parells de càmeres d'alta definició que junt amb un sistema de control estereoscòpic han permès comprimir les imatges JPEG2000 en senyal IP.

En concret, els assistents a l'Auditori de la Universitat Pompeu Fabra (UPF) han pogut seguir, usant unes ulleres polaritzades especials, en directe i en tres dimensions un assaig de l'òpera *Fidelio* de Beethoven (producció de la Metropolitan Opera House de Nova York) que s'ha retransmès des del Gran Teatre del Liceu fins a la UPF.

La retransmissió s'ha dut a terme gràcies a la col·laboració de diverses empreses, que han aportat els seus serveis de cinematografia, sistemes de projecció i alta definició, i institucions com i2CAT, la UPF, el Gran Teatre del Liceu i el CESCO, que ha proveït la connexió entre el Gran Teatre del Liceu i i2CAT a través de l'Anella Científica. Així, s'ha habilitat entre ambdues institucions un circuit de nivell 2 de 500 Mbps i un segon circuit, entre el Liceu i la UPF, com a *backup* del circuit principal. ■



Els assistents han seguit la retransmissió amb unes ulleres polaritzades.

## Celebració del curs de Schrödinger



El curs de Schrödinger ha tingut lloc del 10 al 12 de juny.

A principis de juny ha tingut lloc un curs impartit per Schrödinger, que ha comptat amb la participació de 37 assistents, dels quals una vintena eren usuaris del centre. En aquest curs s'han presentat les característiques i el funcionament d'aquest

programari útil per al disseny de fàrmacs. Els participants han tingut accés a sessions teòriques i pràctiques adreçades a conèixer el programari, els mètodes basats en l'estructura, en el lligand i la seva aplicació en el disseny de fàrmacs. ■

## Millores i noves revistes, a RACO

El dipòsit Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO) ha incorporat tres millores que facilitaran el procés d'incorporació i edició de les revistes. La primera és la detecció de duplicats, que comprova que no existeixi cap altre sumari amb el mateix any, número, volum i títol quan s'incorpora un nou número o article.

La segona millora consisteix a separar el procés d'introducció de dades del d'indexació, que permet cercar aquesta in-

formació a través de la interfície de cerca, per millorar la rapidesa al crear nous sumaris i articles. Per últim, RACO permet esborrar definitivament el número i els articles d'una revista concreta, ja que fins ara quan s'usava l'opció "Eliminar número", els articles no s'esborraven i quedaven emmagatzemats com a articles inèdits.

Amb les 12 publicacions introduïdes al maig i al juny, RACO compta amb 244 revistes de 49 institucions. ■

## Més repositoris a la cerca global del TDX

S'ha ampliat el cercador global del servidor Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) amb tres nous repositoris espanyols que usen el protocol d'interoperabilitat OAI-PMH. Aquests repositoris són els de la Universidad de Huelva, la Universidad Politécnica de Cartagena i la Universidad de Zaragoza. Aquesta última, abans incorporava les seves tesis directament al TDX com a institució membre, però ara les ofereix des del seu propi repositori digital.

Amb aquestes noves incorporacions, a través de la cerca global del TDX es pot accedir a més de 16.000 tesis de tretze re-

positoris d'e-informació, inclòs el mateix TDX: els dos repositoris cooperatius, Dialnet i TDX, i els 11 institucionals individuals.

D'altra banda, des de gener, el TDX disposa de la tesi de Dolors Aleu i Riera, la primera dona espanyola llicenciada i doctorada en Medicina. La tesi, *De la necesidad de encaminar por nueva senda la educación higiénico-moral de la mujer*, tracta sobre les conductes higièniques i morals que han de complir les dones per millorar la seva qualitat de vida. Va ser dirigida per Juan Giné i Partagàs, presentada en el Departament de Medicina de la UB i llegida el 1882. ■

## PADICAT captura les eleccions europees

Amb motiu de les eleccions europees del passat 7 de juny, el repositori Patrimoni Digital de Catalunya (PADICAT) ha capturat diversos webs relacionats amb la campanya electoral, tal com va fer amb les passades eleccions generals de 2008, les municipals de 2007 i les eleccions al Parlament de Catalunya el 2006.

Des del mes previ a aquestes darreres eleccions s'han anat capturant més de 165 recursos digitals per oferir una visió global de l'evolució de la campanya electoral europea. Així, s'han capturat els recursos digitals utilitzats per a la campanya per a les 35 candidatures espanyoles, els mitjans de comunicació espanyols i catalans amb major impacte, i diferents recursos institucionals espanyols i europeus.

Entre aquests recursos, i a part dels webs dels corresponents partits polítics i coalicions, es troben el web del Parlament Europeu, del Ministeri de l'Interior, de la Junta Electoral Central, el canal Youtube European Parliament, els webs de *La Vanguardia*, *El País*, *Euronews*, *Le Monde Diplomatique*, entre d'altres.

Aquest monogràfic forma part d'un projecte europeu realitzat conjuntament entre la Biblioteca de Catalunya i les biblioteques nacionals d'Alemanya, Gran Bretanya, Àustria, Dinamarca, França, Polònia i la República Txeca, i altres membres de l'International Internet Preservation Consortium per preservar les pàgines web de la campanya electoral europea donada la rellevància que aquests webs tenen per al desenvolupament de la campanya en si, tal com ha succeït a les darreres eleccions dels Estats Units.

Dolors Lamarca, directora de la Biblioteca de Catalunya, ha comentat que amb aquestes captures "asseguem la consulta dels recursos digitals d'aquestes eleccions europees i conjuntament amb la resta de biblioteques nacionals i europees estem creant el futur arxiu web d'Europa". ■

## 48 participants en el curs del programari SIESTA

Del 19 al 22 de maig ha tingut lloc un curs sobre SIESTA, en col·laboració amb Pablo Ordejón, del Centre d'Investigació en Nanociència i Nanotecnologia; Oswaldo Diéguez i Alberto García, de l'Institut de Ciència de Materials de Barcelona; Javier Junquera, de la Universidad de Cantabria, i José Anto-

nio Torres, de la Universidad Autónoma de Madrid. S'ha realitzat una introducció teòrica bàsica a SIESTA, incloent la teoria que hi ha al darrera, DFT i transport quàntic, i sessions pràctiques que han tractat sobre la configuració bàsica i les tècniques computacionals i analítiques amb SIESTA. ■

TERESA VIA

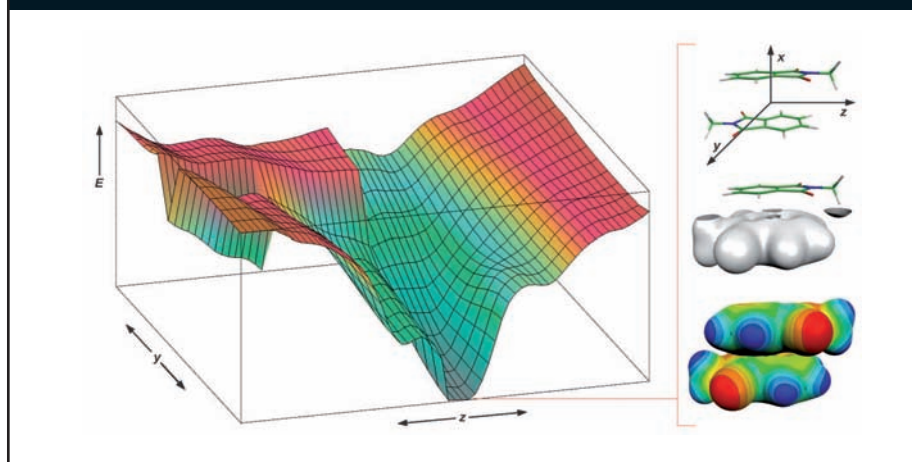


## F O T O / N O T Í C I A

**E**l grup de Policondensació i Membranes Polimèriques de l'Institut de Ciència i Tecnologia de Polímers del CSIC, liderat per José González de la Campa i integrat per Iñigo García Yoldi, es dedica a l'estudi i síntesi de polímers de condensació, amb l'objectiu principal de preparar membranes polimèriques per a ultrafiltració, osmosi inversa i separació de gasos. A més d'una intensa labor experimental en la síntesi de nous monòmers i polímers, el grup estudia les seves estructures mitjançant els diferents mètodes de la química computacional amb dues línies de recerca principals: la simulació de propietats macroscòpiques de polímers mitjançant tècniques de dinàmica molecular i l'estudi a nivell *ab-initio* de les

interaccions entre els monòmers que porten a la formació de polímers.

La imatge mostra els càlculs portats a terme al CESCA per a l'estudi d'interaccions  $\Pi$  que es produeixen entre imides, interaccions relacionades amb l'espectre ultravioleta visible i l'empaquetament dels polímers. L'estudi s'ha dut a terme per a un model petit amb un grup imida: la metil-ftalimida, per a la qual s'ha confeccionat la superfície de potencial utilitzant diferents funcionals DFT que han estat comparats amb la superfície MP2. El funcional M05-2X és el que millors resultats proporciona i aquí es representa la seva superfície de potencial i la geometria, densitat electrònica i mapa de potencial electrostàtic del mínim. ■



Edita

CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ  
DE CATALUNYA



Patrocina



Generalitat  
de Catalunya



FUNDACIÓ CATALANA  
PER A LA  
RECERCA  
I INNOVACIÓ

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

Universitat Ramon Llull

Consell Superior  
d'Investigacions Científiques

## TERAFLOP

DIRECTOR

Miquel Huguet

COORDINACIÓ

Carme Monserrat

REDACCIÓ

Teresa Via

Sílvia Salgado

COL-LABORACIÓ

Glòria Fontova (TERMCAT)

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà-Associats.com

CESCA

Gran Capità, 2-4

08034 Barcelona

Tel. 93 205 6464

Fax: 93 205 6979

<http://www.cesca.cat>

[teraflop@cesca.cat](mailto:teraflop@cesca.cat)