

# TERAFLOP

## 10 anys de punt neutre a Catalunya

ENTREVISTA

Imma Tubella, rectora de la UOC

Materials docents, a un clic

Avenços en Química Teòrica



# 10 anys de punt neutre a Catalunya

El 7 d'abril de 1999, 12 entitats signaven el conveni de creació del Punt Neutre d'Internet de Catalunya (CATNIX) amb la finalitat d'encaminar localment el tràfic dels diferents proveïdors d'Internet (ISP) i operadors, i el 4 de juny d'aquell mateix any s'intercanviaven els primers gigabytes de tràfic. Al llarg d'aquests anys, tant el nombre d'entitats connectades com el tràfic que han intercanviat ha anat creixent. El 2008, una vintena d'ISP i operadors van transmetre al CATNIX més de 750 terabytes (TB) de tràfic, equivalent a enviar tot el text de la Gran Enciclopèdia Catalana cada tres segons.

Abans de la creació del CATNIX, el tràfic s'intercanviava a l'únic punt de commutació a Espanya, l'Espanix, ubicat a Madrid des de l'any 1997, i en d'altres punts neutres europeus. A partir del 1999, el CATNIX va permetre poder encaminar localment part del tràfic, que no havia de sortir de les xarxes de Catalunya. L'objectiu era que els usuaris finals rebessin un millor servei ja que es reduïa el camí que la informació havia de recórrer des que es demanava (a través del web, de l'ftp, etc.) fins que es rebia i que el seu accés a les pàgines web de Catalunya també fos més ràpid. A més, el CATNIX també va afavorir l'intercanvi del tràfic comercial

amb l'acadèmic i de recerca, gràcies a la connexió amb l'Anella Científica.

Com explica el secretari de Telecomunicacions i Societat de la Informació, Jordi Bosch, "aquesta interconnexió ha estat molt important, ja que ha permès que les xarxes acadèmiques i de recerca del país estiguin connectades amb les xarxes comercials d'una manera més segura i amb més qualitat. La integració de les institucions catalanes de recerca a la xarxa d'alta velocitat permet oferir un millor servei als usuaris i crear sinergies al voltant del món científic i del coneixement en general, potenciant l'intercanvi d'idees, informacions i projectes".

Avui dia, el CATNIX continua treballant per incorporar noves funcionalitats, com ara la Veu sobre IP (VoIP) per permetre que operadors i ISP puguin intercanviar també veu a través del punt neutre. La Comissió Tècnica per a l'Intercanvi de Veu del CATNIX va debatre i establir al maig els requisits de la nova plataforma de VoIP, basada en el programari lliure OpenSer (Kamailio). A més, s'està avaluant el desplegament territorial del CATNIX a Girona, Lleida i Tarragona.

També es preveu instal·lar rèpliques dels servidors arrel de noms A i J, així com dels dominis .com i .net, que gestiona Verisign, a través d'anycast, que complementarà la rèplica del servidor arrel F, de l'Internet Systems Consortium, disponible des del 2005 amb IPv4 i IPv6. Així, el CATNIX contribuirà encara més a augmentar la qua-

## El CATNIX facilita una interconnexió de xarxes més segura i de més qualitat

litat de servei en la millora del temps de resposta per a les consultes al Servidor de Noms (DNS), i a incrementar la seguretat, ja que garanteix el servei en cas d'atacs de Denegació de Servei Distribuït (DDoS) i minimitza el seu impacte global.



### 10 anys en imatges

1. Acord de creació del CATNIX (1999)
2. Puig i Español durant la signatura (1999)
3. Visita d'una delegació del Japó (2001)
4. RedIRIS s'incorpora al CATNIX (2003)
5. Inauguració de nou maquinari (2003)
6. Telvent, punt de connexió alternatiu (2004)
7. Inauguració de la rèplica del servidor arrel de noms F (2005)
8. Digital Parks, l'última connexió al CATNIX (2009)



## Serveis de valor afegit

Al llarg d'aquests 10 anys, el CATNIX ha incorporat diferents serveis de valor per als ISP i operadors. Des de la creació del punt neutre es disposa del *Looking Glass*, que s'usa per a la consulta interactiva d'alguns dels encaminadors i per al seguiment de problemes d'encaminament. Des del 2000, del *multicast*, que va començar com a experiència pilot i que està disponible tant en IPv4 com IPv6. Per accedir als equips sense utilitzar les interfícies habituals, hi ha la gestió fora de banda des del 2002, que és especialment útil en cas de problemes a la xarxa o al mateix encaminador de l'entitat.

Des del 2003 està instal·lat un servidor IXP-Watch, una eina dissenyada per monitorar a nivell 2 i detectar el tràfic potencialment perillós per al bon funcionament del punt neutre (tràfic de *broadcast*, tràfic no IP...). També es disposa d'un servidor NTP des del 2004, un servidor de temps NTP stratum 1, basat en programari lliure, amb el que poden sincronitzar els seus equips. A més, per impulsar l'IPv6, la infraestructura del CATNIX permet l'intercanvi d'aquest tràfic i s'ha utilitzat activament per a esdeveniments, com ara l'IPv6 Summit englobat dins de l'Internet Global Congress 2005, on es va utilitzar per primer cop el *multicast* IPv6.

També des del 2005, a més de la rèplica del servidor arrel de noms F mencionat abans, es disposa de dos encaminadors del projecte Bogon Route Server, gestionat pel Team Cymru, i amb els quals es pot establir una sessió BGP determinada per obtenir, de manera automàtica, rutes que no s'han d'encaminar a nivell global i que sovint s'utilitzen com a font per a atacs de denegació de servei, anomenades prefixos bogon, i això permet facilitar-ne el filtrat.

## Avui dia es connecten al CATNIX 22 entitats

A més, per tal de garantir la màxima disponibilitat i fiabilitat i afavorir la connexió d'ISP i operadors, el 2005 es va crear un punt alternatiu de connexió al CATNIX ubicat a les instal·lacions de Telvent Housing a Barcelona. En cada emplaçament del CATNIX hi ha un commutador Cisco Catalyst 4507R-E, a on es connecten els equips de les institucions que hi pertanyen. Els commutadors, renovats el 2008, disposen de fonts d'alimentació i supervidores redundants 6-E amb capacitat de commutació de 320 Gbps i 48 ports Ethernet 10/100/1.000 Mbps. A CESCA-Campus Nord, a més, es disposa de 12 ports de fibra a 1 Gbps i, a CESCA-Telvent, 6 ports de fibra a 1 Gbps.



## Què és un Punt Neutre?

A internet, els punts neutres són llocs físics on els diferents proveïdors de serveis d'internet i operadors connecten les seves xarxes i intercanvien tràfic internet mitjançant acords de *peering*. A Espanya s'han anat creant al llarg dels anys diferents punts neutres, com ara l'estatal Espanix, i CATNIX, a Catalunya, Euskonix, al País Basc i Madix, a Madrid.

Els punts neutres permeten als ISP i operadors intercanviar tràfic internet entre les seves xarxes (sistemes autònoms) gràcies als acords d'interconnexió, que permeten l'intercanvi de tràfic sense cost.

Els punts neutres redueixen el volum de tràfic que ha de ser adreçat per mitjà dels proveïdors de trànsit, reduint així el cost mitjà per entrega de bit (APBDC, *Average Per-Bit Delivery Cost*) del seu servei. A més, l'increment de camins apresos a través dels punts neutres millora l'eficiència de l'encaminament i la tolerància a fallades.



FOTO 5: JORDI PARETO





## Intercanvi local, projecció internacional

Des dels seus inicis, el CATNIX ha estat un punt neutre actiu dins la comunitat internacional. Així, el 2001 va ser membre fundador de l'associació europea de punts neutres Euro-IX, una associació sense afany de lucre creada pels principals punts neutres europeus, que ajuda a coordinar els estàndards tècnics al continent, desenvolupar procediments comuns, i compartir i publicar diferent tipus d'informació, com ara les estadístiques. De fet, el primer fòrum d'Euro-IX va ser hostatjat pel CESCA l'any 2002, i va comptar amb una quarantena de representants de punts neutres europeus.

El 2007, a més, el CATNIX va ser patrocinador associat de la segona edició de l'European Peering Forum (EPF), gràcies a la col·laboració del CESCA en la seva organització a Barcelona. L'EPF, organitzat pels punts neutres europeus AMS-IX, DE-CIX i LINX, és un esdeveniment social nascut amb la finalitat de crear nexes d'unió entre punts neutres europeus i operadors i proveïdors d'internet, així com per posar en comú experiències i coneixements sobre els aspectes operacionals de l'intercanvi de tràfic a la xarxa.

## El CATNIX és membre fundador de l'associació europea de punts neutres Euro-IX

Aquesta col·laboració internacional s'ha enfortit el 2009 amb el conveni signat el passat 22 de maig per representants dels punts neutres de Catalunya (CATNIX), Madrid (Espanix), Torí (Topix), Milà (MIX), Roma (NameX) i Lió (Lyonix). Aquest conveni de col·laboració té l'objectiu de promoure i potenciar el tràfic d'internet del sud d'Europa i reduir d'aquesta manera les diferències existents amb el nord. Així, s'ha creat el 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 és el sud d'Europa, però també l'àmbit mediterrani i l'Orient Mitjà, com a regions on potenciar i desenvolupar el tràfic d'internet. ■

La creació del CATNIX és portada del *Teraflop* 41.



Participants del primer fòrum d'Euro-IX, celebrat el 2002 a Barcelona.



Segona edició de l'European Peering Forum celebrada a Barcelona el 28 i 29 de novembre de 2007.



Acord de creació del Southern European Internet Exchange Points (SEIXP) el 22 de maig de 2009.

## “A la UOC, hem de tornar a somniar l'impossible”



La rectora de la Universitat Oberta de Catalunya (UOC) acaba d'assumir la presidència rotatòria de l'Associació Catalana d'Universitats Públiques (ACUP), en un moment de consolidació, després d'haver presentat fa poc més d'un any el *Llibre Blanc de la Universitat de Catalunya*, un bon full de ruta per construir el futur del sistema universitari català. Però, per a Tubella, a més, la seva importància rau en el camí que les universitats han fet conjuntament, “el seu viatge a Ítaca”, que ha ajudat a veure com encaixen les unes amb les altres i ha permès encetar nous camins de cooperació. La col·laboració és, precisament, una de les peces clau que assenyalen per assolir els reptes del sistema universitari i, també, els de la seva universitat. Ara que la UOC acaba de fer 15 anys, cal “defensar la seva diferència” i “somniar l'impossible, com ho va fer el rector Ferraté”.

**L'ACUP va néixer l'any 1997 per tal d'afrontar conjuntament l'escenari posterior a la LOU, el paper de la universitat en l'espai europeu i, en especial, per articular un espai universitari català. Com ha evolucionat l'Associació al llarg d'aquests anys?**

Des dels seus inicis, l'ACUP ha tingut la voluntat de representar les universitats públiques de Catalunya, unir esforços per

compartir coneixements i fomentar la cooperació. Al llarg d'aquests anys, l'associació ha treballat definint les prioritats del sistema universitari català i en la negociació conjunta dels interessos de les universitats públiques amb el Parlament de Catalunya i el Govern de la Generalitat.

L'ACUP ha anat assolint el grau de maduració i de consolidació, que ha desembocat en la publicació el juny de l'any

passat del *Llibre Blanc de la Universitat de Catalunya*. Aquest llibre vol ser un document de reflexió general en matèria de política universitària i és, alhora, la configuració d'un full de ruta comú de les universitats públiques catalanes, en el marc de l'ACUP, per treballar conjuntament en aquest procés de reformes amb garanties d'èxit.

**Quins són els seus valors principals?**

Et podria explicar els nombrosos projectes que recull aquest *Llibre Blanc*, les seves línies estratègiques... però per a mi, personalment, el més important, ha estat el camí que hem fet tots plegats per redactar-lo, perquè l'hem treballat i l'hem escrit entre tots nosaltres, ha estat el nostre viatge a Ítaca. Un camí durant el qual hem après com encaixem uns i altres en el sistema universitari de Catalunya, com les universitats de Barcelona són complementàries amb les territorials i com la UOC ho és amb totes elles.

Evidentment aquest *Llibre Blanc* té un valor extraordinari, no tant per les dades que aporta sobre les universitats, sinó especialment per les propostes que s'hi realitzen per construir la universitat que necessitem. Les línies d'acció que proposa han estat la base per a un ampli debat en la comunitat universitària i en la societat en general.

**A la fi de 2007, l'ACUP va presentar un nou lloc web per promocionar la marca Universitat de Catalunya. Quins beneficis ha aportat la creació d'aquesta marca?**

La marca Universitat de Catalunya, que ha sorgit precisament de l'elaboració del *Llibre Blanc*, ens ha proporcionat, de moment, visibilitat conjunta. Per exemple, el mes de setembre hem participat a la major fira d'universitats d'Europa, conjuntament amb el Consell Interuniversitari de Catalunya, amb un estand conjunt. L'estand de les universitats catalanes, el segon de major capacitat de tota la fira europea, ens ha proporcionat una imatge i un posicionament conjunt molt més important de la que obtindríem de manera individual.

Si volem ser competitives al sud d'Europa la clau està en fer pinya i anar a una; aquesta és una tendència internacional. Avui dia la Universitat de Catalunya acull una de les comunitats universitàries més grans del sud d'Europa, formada per més de 200.000 estudiants, més de 14.000 professors i més de 7.000 professionals d'administració i serveis, repartits entre les vuit universitats públiques. S'ofereixen més de 400 carreres universitàries,





## IMMA TUBELLA

Doctora en Ciències Socials. Des del 13 de desembre de 2005 és rectora de la Universitat Oberta de Catalunya (UOC). Ha estat vicepresidenta de la Societat Catalana de Comunicació de l'Institut d'Estudis Catalans, vicerectora de recerca i codirectora del Programa de Doctorat de la UOC, vicepresidenta de l'Internet Interdisciplinary Institute, membre de la Comissió Assessora sobre Telecomunicacions i Societat de la Informació del Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació de la Generalitat de Catalunya i presidenta de la Fundació de la Universitat Catalana d'Estiu. Ha ocupat el càrrec de directora d'Estudis i Continguts de la CCRTV, on també ha estat membre del Consell d'Administració.

Sense abandonar la recerca sobre comunicació i identitat, els darrers sis anys ha codirigit amb el Dr. Manuel Castells el programa de recerca *Projecte Internet Catalunya*, amb la col·laboració de 66 investigadors i 10 projectes. Dins d'aquest programa, ha codirigit la recerca sobre la societat xarxa a Catalunya i ha dirigit la recerca *La comunicació com a factor de canvi en la societat de la informació: Internet en el context audiovisual de Catalunya*. Ha publicat nombrosos llibres i articles.

que compleixen sistemes d'acreditació i de qualitat internacional.

La Universitat de Catalunya és un model inspirat en el exemples que trobem a les universitats de Luxemburg, Scotland... De fet, jo que sóc llicenciada per la Sorbona, vaig reconèixer la consciència que tenen les universitats de la importància d'unir-se quan fins i tot aquesta universitat francesa, que després de la revolta del 68 havia separat l'ensenyament de les ciències i les humanitats i va crear nou universitats, s'agrupen ara sota l'etiqueta de París-Sorbona.

**Fins a quin punt la cooperació és essencial en l'entorn universitari? A quins altres àmbits es pot estendre aquesta cooperació dins el sistema universitari?**

No em cansaré mai de repetir la importància de cooperar, per aprofitar i aprendre els uns de les experiències dels altres, per no tornar a inventar coses que altres ja han inventat. La cooperació és bàsica i, especialment, l'hem de promoure en l'entorn universitari, on hi ha nombrosos àmbits en els quals es poden utilitzar serveis cooperatius, com ara en temes de gestió, de *help-desk*...

El propi *Llibre Blanc* ja recull alguns exemples d'infraestructures comunes, com ara el Centre de Supercomputació de Catalunya, el Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya, l'Oficina de les Proves d'Accés a la Universitat, el Projecte Campus de la Secretaria de la Societat de la Informació i, d'alguna manera, la mateixa UOC, que té vocació de treballar com a universitat complementària del sistema presencial i d'acord amb les seves necessitats.

**Una de les paraules que recull el *Llibre Blanc* i que vostè usa quan parla del sistema educatiu és canvi, concretament vostè es refereix a la necessitat de canviar el sistema educatiu perquè sinó seran els propis estudiants els que ho faran. Quines són les peces clau d'aquest canvi?**

El propi *Llibre Blanc* recull aquesta necessitat, però crec que encara hem de fer més valents. El canvi és difícil i provoca inseguretats, però és del tot necessari. En aquests moments, però, sóc optimista. Sé que si nosaltres, les institucions educatives i fins i tot el govern, no fem un canvi en el sistema educatiu seran els propis estudiants els que el faran.

Els estudiants, tant els de casa nostra com els d'altres països, no abandonen

la universitat sinó que hi van d'una altra manera. Avui dia, es té un accés més fàcil al coneixement i hi ha experiències molt avançades com ara l'Earth Academy, als Estats Units. Les mateixes universitats col·loquen a la xarxa els seus cursos i els seus recursos perquè els estudiants puguin seguir des d'allà on vulguin els ensenyaments. A nivell internacional hi ha preocupació perquè els alumnes estan estudiant d'una altra manera, accedeixen al coneixement d'una altra manera. El Massachusetts Institute of Technology (MIT), per exemple, conscient que els seus grans auditoris cada cop eren més buits, a la fi de 2005 va obrir un canal a Youtube, que avui dia compta amb més de 40.000 subscriptors i més d'un milió de reproduccions.

## “La UOC ha de defensar la seva diferència”

Al *Llibre Blanc* també parlem de canvi en el sistema de governança, tot i que tímidament. Fins i tot en la LOMLOU (Llei orgànica que modifica la llei orgànica d'Universitats) es va plantejar donar la possibilitat no obligatòria a les universitats espanyoles per canviar-lo. Reconec que és més fàcil que sigui jo, que estic en un altre tipus de governança, qui ho digui. I sóc conscient de les dificultats que tenen els meus col·legues i, per això, entenc perfectament la dificultat del canvi. Però tenim exemples d'altres països on ja ho estan fent. A Portugal, on el canvi és semivoluntari, la Universidade da Aveiro, on curiosament hi ha una rectora, Maria Helena Nazaré, ja ha fet el canvi. Va haver de vèncer moltes reticències, però s'ha de ser valent. D'altres universitats portugueses també estan ara en procés de fer aquest canvi.

**El passat 6 d'octubre es complien 15 anys de la creació de la Universitat Oberta de Catalunya. Com vostè deia recentment a *Els matins de TV3*, l'èxit dels impulsors de la UOC va ser portar la universitat a la xarxa i l'èxit futur serà anar més enllà i convertir-la en una universitat en xarxa. Com aconseguiran aquesta universitat?**

La UOC ja és una universitat xarxa, perquè té professors i estudiants a tot el món i tenim gestors a tot el territori. Però anem una mica més enllà. Haurem d'acabar col·laborant, no només amb les catalanes, sinó

també amb les espanyoles i les internacionals. El que menys em preocupa és la competència amb les altres universitats, i el que més la competència amb els negocis del coneixement. Em preocupa que cada vegada n'hi ha més, i no necessàriament ho han d'estar fent malament, són apostes amb ànim de lucre. No com les universitats privades com ara la Universitat Ramon Rull, que no tenen afany de lucre, sinó apostes amb ànim de lucre, *teaching universities*, que poden captar amb un talonari el millor investigador del Max Planck o de qualsevol altre centre punter.

Aquestes empreses han vist que la branca del coneixement pot ser un bon negoci i han comprat universitats arreu del món. Em preocupen aquests negocis, perquè han sorgit de nou amb una mentalitat, tecnologia, models... totalment nous, i són els que estan arrasant al tercer món, a l'Àfrica, per exemple, on hi ha una classe mitja que està arribant a la universitat.

La clau està en la col·laboració. Hi haurà xarxa si hi ha col·laboració. A la llarga, les universitats tradicionals, on hi incloc la UOC perquè no som un d'aquests negocis virtuals sinó que tenim vocació d'universitat, hem de trobar sistemes de col·laboració i, ara, la xarxa ens permet trobar-los. Si tenim estudiants a Girona som també universitat de Girona, però no fem competència directa a la UdG, perquè tenim uns altres estudiants. No vull que la UOC vagi a l'Amèrica Llatina, l'Àfrica, Espanya o el Ripollès sense comptar amb la col·laboració de les institucions del territori. Si som capaços de poder articular-ho, construirem la xarxa.

#### **Fa 4 anys que va assumir el càrrec de rectora, quines són les principals fites assolides en aquest període?**

La nostra primera preocupació era la sostenibilitat a la universitat i això ho hem aconseguit. Volíem convertir el gran projecte que era la UOC en una universitat de qualitat i, a banda de la sostenibilitat econòmica, volíem incidir en la qualitat del professorat i dels materials educatius, en la de la recerca i en la de tecnologia. Aquests quatre anys hem estat treballant molt per consolidar la UOC com a referent universitari, no només com a soci tecnològic. El rector Gabriel Ferraté sempre explica que li van deixar fer la UOC perquè tothom es pensava que estava "torrat", com ell acostuma a dir, perquè l'any 1994 era impensable imaginar a Catalunya una universi-

tat a internet. En aquella època jo era als EUA i tenia correu electrònic, però no coneixia ningú aquí que en tingués. Per tant, ningú es pensava que funcionaria.

Quan vaig ser vicerectora de recerca a la UOC vaig dir que havíem d'evitar córrer a tots els projectes europeus o del Ministeri com a soci tecnològic, perquè no se'ns veia com a universitat. Calia fer un pas més endavant. I en aquests anys no només hem innovat en tecnologia, sinó que també ho hem fet en model educatiu. Aquest és el nostre gran èxit. El nostre gran encert va ser adaptar el model pedagògic a la tecnologia.

Hem insistit en la qualitat i ara apostem pel campus global amb oferta multilingüe com a estratègia d'internacionalització. Cal utilitzar l'expansió per construir la xarxa mitjançant aliances estratègiques

amb la resta del territori, tant a Espanya, com a l'Amèrica Llatina, amb el nord d'Àfrica... amb el món.

#### **Quins són els principals reptes que ha d'afrontar a mitjà termini la UOC?**

Defensar la nostra diferència. Fa uns dies ho deia en un article, tenim quinze anys, som adolescents i podem somniar l'impossible. La UOC, amb el rector Ferraté al capdavant, va somniar l'impossible i ho va aconseguir. Ara, la nostra tasca, i concretament la meua tasca com a rectora i amb l'admiració que tinc al rector Ferraté, és defensar la diferència que ell va construir perfectament conscient de que o bé érem diferents o no calia existir. Juntament amb la construcció de la xarxa i del campus global, la defensa de la nostra diferència són els principals reptes que tenim per endavant. ■

## Impuls de l'e-administració a les universitats

El Departament d'Innovació, Universitats i Empresa de la Generalitat de Catalunya (DIUE), el Consorci de l'Administració Oberta de Catalunya (AOC) i les universitats que formen l'Associació Catalana d'Universitats Públiques (ACUP) han signat un conveni per impulsar l'avenç de l'administració electrònica a les universitats.

El projecte e-universitat permetrà millorar la gestió a les universitats en tots els seus àmbits mitjançant la implantació de tecnologies informàtiques i telemàtiques, així com una major proximitat entre l'administració universitària, els estudiants i tots aquells vinculats amb el món universitari. Aquest projecte, amb una aportació del DIUE de 5,2 milions d'euros per al 2009, serà desenvolupat per les universitats amb la col·laboració de l'AOC i del CESCA.

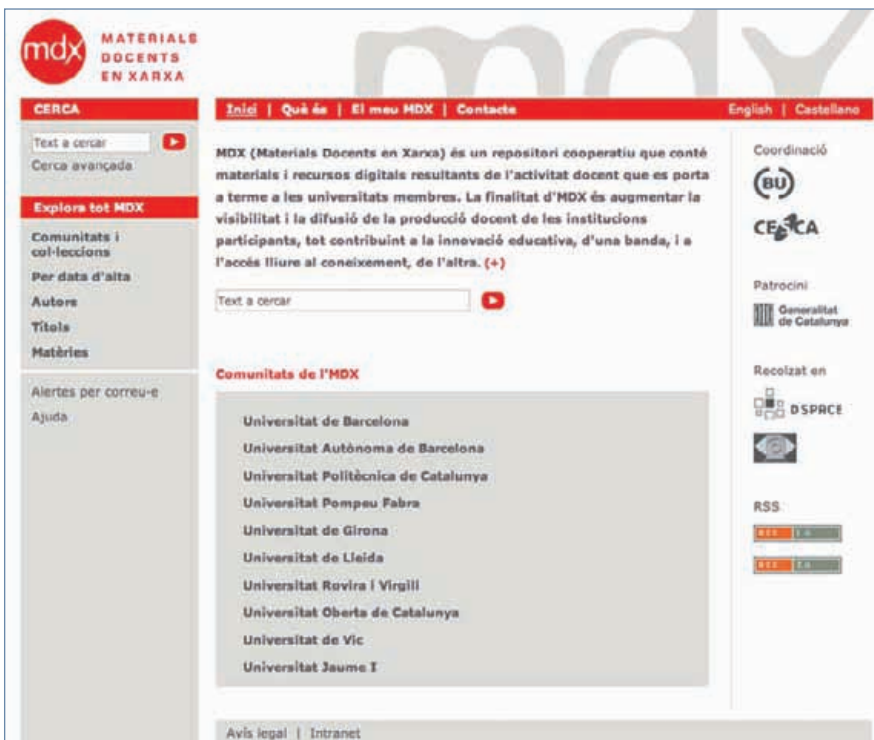
En concret, el CESCA serà l'encarregat a nivell tecnològic de desenvolupar diverses eines i donar el suport necessari per al desplegament del projecte. Així, el CESCA instal·larà una plataforma de registre telemàtic (e-Registre), una d'e-Arxiu, que permetrà l'emmagatzematge i preservació dels expedients i documents electrònics, una plataforma d'e-Vot perquè les universitats puguin implementar la votació electrònica en els seus processos electorals, i eines comunes d'e-Identitat i e-Signatura. A més, estudiarà la viabilitat d'instal·lar una plataforma comuna de contractació electrònica i una de gestió de registres de seguretat de les universitats de Catalunya. Per dur a terme la implementació d'aquestes eines, el DIUE ha assignat que les universitats aportin al CESCA un total d'1.075.000 euros dels 5,2 milions d'euros que aporta al projecte.

JORDI PARETO



# Materials docents, a un clic

El Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya (CBUC) i el Centre de Supercomputació de Catalunya (CESCA), amb el patrocini de la Direcció General d'Universitats, han posat en funcionament un nou repositori cooperatiu de Materials Docents en Xarxa (MDX) amb més de 700 documents consultables. MDX dóna accés a recursos digitals resultants de l'activitat docent que es porta a terme a les universitats participants. La seva finalitat és contribuir a la innovació educativa, d'una banda, i al lliure accés al coneixement, de l'altra.



Pàgina d'inici d'MDX.

Avui dia, la majoria dels materials elaborats per a l'ensenyament o aprenentatge que confeccionen els professors perquè els alumnes puguin cursar les seves assignatures es troben en format digital. Documents, imatges, esquemes, presentacions, audiovisuals, agendes, resums, calendaris... formen part de l'ampli ventall de recursos disponibles que es creen cada dia a les universitats i que molts cops resten dispersos i oblidats. Preservar aquesta valuosa informació, compartir-la, augmentar la seva visibilitat i afavorir que es pugui tornar a usar són els objectius d'MDX, un dipòsit d'e-informació que serveix de porta d'accés comuna a aquest contingut di-

fícil de gestionar i classificar atesa la seva gran diversitat i manca de definició.

Per a Josep Ribas, director general d'Universitats, "la informació digital ha anat entrant de mica en mica a les universitats. Ho va fer primer amb les bases de dades i les revistes acadèmiques els anys 90, després, a principis d'aquest segle, amb la informació de recerca produïda a les mateixes universitats que es posa en accés lliure a través dels repositoris digitals. Ara, les universitats d'arreu del món comencen a posar la seva atenció en la informació produïda amb finalitats docents. A Catalunya hem seguit les pautes d'aquest moviment internacional, primer amb les bases de dades i revistes elec-

tròniques de la Biblioteca Digital de Catalunya, després amb el repositori per a tesis doctorals, TDX, i una mica més tard amb el de treballs de recerca, RECERCAT. Ara, MDX ens permet continuar sumant-nos, des de posicions d'avantguarda i de cooperació, a la tendència mundial de compartir els resultats del treball universitari entre la comunitat universitària".

MDX facilita la gestió i proporciona un accés permanent als materials i objectes docents produïts a les universitats, tot integrant-los i organitzant-los en un servidor comú. A més, ofereix al personal acadèmic de les universitats participants un servidor de recursos per a l'arxiu i emmagatzematge de tots els materials docents que es produeixen i la seva posterior reutilització.

Aquest nou repositori compta amb la participació de la Universitat de Barcelona, la Universitat Autònoma de Barcelona, la Universitat Politècnica de Catalunya, la Universitat Pompeu Fabra, la Universitat de Girona, la Universitat de Lleida, la Universitat Rovira i Virgili, la Universitat Oberta de Catalunya, la Universitat Jaume I i la Universitat de Vic.

La idea del projecte va sorgir el 2007, amb la creació d'un grup de treball del CBUC creat específicament amb aquesta missió i liderat per la Universitat Pompeu Fabra (UPF). Per a Mercè Cabo, vicegerent de Serveis, Tecnologia i Recursos d'Informació de la UPF, "MDX és una iniciativa innovadora i necessària alhora. En el context de l'EEES, l'activitat docent-discent recupera un protagonisme que durant molts anys no ha tingut i passa a ocupar una posició central en l'àmbit universitari. Així, les universitats seran avaluades per la qualitat i l'impacte de la seva recerca però també per la qualitat i l'impacte de la seva docència. Per això, són tan importants els instruments que donen suport a aquesta activitat que ara es 'represtigia' i es revaloritza. Amb la posada en marxa d'MDX disposem d'una nova eina per donar visibilitat, de forma col·lectiva, als materials docents produïts a les universitats participants".

"Estem molt satisfets del producte final ja que hem aconseguit tenir un re-





Alguns dels integrants del grup de treball del CBUC per al projecte MDX a l'abril de 2008.

positori que dona resposta a les realitats actuals i a les necessitats diferenciades de cada universitat respecte a la introducció de documents, a les polítiques d'accés i a la tipologia de drets d'autor. A més, MDX se suma a les diferents iniciatives a escala mundial que promouen l'accés lliure al coneixement", afegeix Cabo.

Els materials que es poden consultar a través d'MDX són actualment més de 700 i en la majoria dels casos d'accés obert. Tot i això, n'hi ha que estan restringits als usuaris de les pròpies universitats.

A banda de la implementació del programari, els aspectes que s'han tractat més àmpliament dins del grup de treball, han estat l'esquema de metadades i els drets d'autor. Pel que fa a les metadades, s'ha optat per utilitzar Dublin Core Qualificat, d'ampli ús a tot el món. Donat el caràcter híbrid d'aquest repositori, s'han treballat especialment els elements i qualificadors usats, tenint en compte les dues casuístiques, quan es dipositen els documents i quan es recol·lecten. Respecte als drets d'autor, s'ha aconseguit oferir a l'autor la possibilitat de dipositar els documents triant una llicència Creative Commons o amb tots els drets reservats.

MDX és un repositori que usa un model híbrid, és a dir, actua com a repositori amb els materials que incorporen les universitats participants i, alhora, en recol·lecta d'aquelles universitats que ja disposen d'una eina similar i usen la col·lectiva, MDX, per donar més visibilitat als materials. La recol·lecció d'aquests recursos és diària i es dona gràcies a que MDX usa el protocol d'interoperabilitat OAI-PMH de l'Open Archives Initiative que permet la recol·lecció de metadades d'al-

tres repositoris que usen el mateix protocol. A més, el fet d'usar aquest protocol incrementa la visibilitat d'MDX, en oferir-se conjuntament amb d'altres repositoris internacionals.

## El programari

El repositori funciona amb la darrera versió del programari de codi lliure DSpace, creat pel Massachusetts Institute of Technology (MIT) i l'empresa Hewlett Packard (HP), adaptat a les necessitats específiques com per exemple la modificació del flux d'ingesta de documents.

A més, a la nova versió de DSpace 1.5.1 s'ha reorganitzat el codi, separant algunes de les funcionalitats en mòduls independents del nucli del DSpace, de manera que sigui més fàcil la seva escalabilitat i manteniment. Per a la seva gestió s'ha incorporat Maven, de l'Apache Software Foundation.



Un d'aquests nous mòduls que s'ha adaptat per a MDX és XMLUI (anomenat Manakin), que implementa una interfície gràfica amb tecnologia XML+XSL+CSS que li dona més versatilitat i flexibilitat a l'hora de visualitzar la informació per pantalla, permetent així oferir la possibilitat de personalització de l'estil de cada institució participant i de cadascuna de les seves col·leccions. Per tal d'incorporar aquest mòdul ha estat necessari fer-ne la traducció al català, que després s'ha contribuït a la comunitat de DSpace.

Per això, MDX es troba disponible en tres idiomes, català, castellà i anglès. Des del seu portal es poden cercar els materials per autor, títol, matèria, resum, col·lecció, llengua, tipus de document i text lliure. Els continguts estan organitzats en comunitats, que corresponen a les universitats participants, estructurades en di-

## MDX engega amb més de 700 materials consultables

ferents col·leccions. A més, disposa d'una part privada o intranet amb la qual les universitats participants poden gestionar els continguts que mostren, compta amb un servei d'alerta de nous materials disponibles i possibilita la sindicació RSS dels nous continguts que es vagin incorporant.

Aquest repositori es troba en la línia d'altres projectes cooperatius, d'aquestes mateixes institucions, per posar continguts d'accés lliure i gratuït a la xarxa, com ara Tesis Doctorals en Xarxa (TDX), Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT) i Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO).■

## Clúster d'e-informació d'alta disponibilitat

MDX es troba hostatjat al clúster d'e-informació d'alta disponibilitat del CIESCA, igual que els repositoris TDX, RECERCAT, RACO i Patrimoni Digital de Catalunya (PADICAT). Aquest clúster està estructurat en tres nivells de servei; un primer de balanceig de peticions IP, un segon de servidors d'aplicacions i un tercer nivell de gestors de bases de dades. Tots ells són redundants davant fallades i permeten el balanceig de consultes.

# La catàlisi heterogènia i la química computacional



La catàlisi heterogènia és la principal via per a la síntesi de productes químics en la indústria. El seu pes en l'economia mundial és tan important que fins i tot s'ha arribat a considerar que la quantitat de persones que la Terra pot mantenir depèn de la quantitat de fertilitzant que podem sintetitzar i que, finalment, depèn de la nostra habilitat per produir amoníac. Tradicionalment, la indústria química ha sintetitzat molts candidats per a una determinada transformació química, fent una mena de cribratge (*high-throughput screening*) als laboratoris. Aquest tipus d'assaig-error s'ha traduït en molt coneixement empíric de les transformacions químiques i dels processos associats, però no és el procediment més adequat ja que alenteix el procés de cerca de nous catalitzadors, consumeix recursos humans i materials i no és ni econòmicament ni ecològicament sostenible. El grup de la Dra. Núria López, de l'Institut Català d'Investigació Química (ICIQ), realitza estudis computacionals de reactivitat química per aconseguir catalitzadors més actius, selectius i estables.

Tot i que els principis de la Química Teòrica i Computacional semblen prou llunyans a aquests aspectes més pràctics de la indústria química, recentment diversos grups arreu del món han demostrat que aquestes diferències poden ser més aparents que reals. Així, des de la introducció massiva de la supercomputació ha estat possible indagar en els aspectes més íntims de les reaccions químiques. S'han

## Amb la supercomputació ha estat possible indagar en els aspectes més íntims de les reaccions químiques

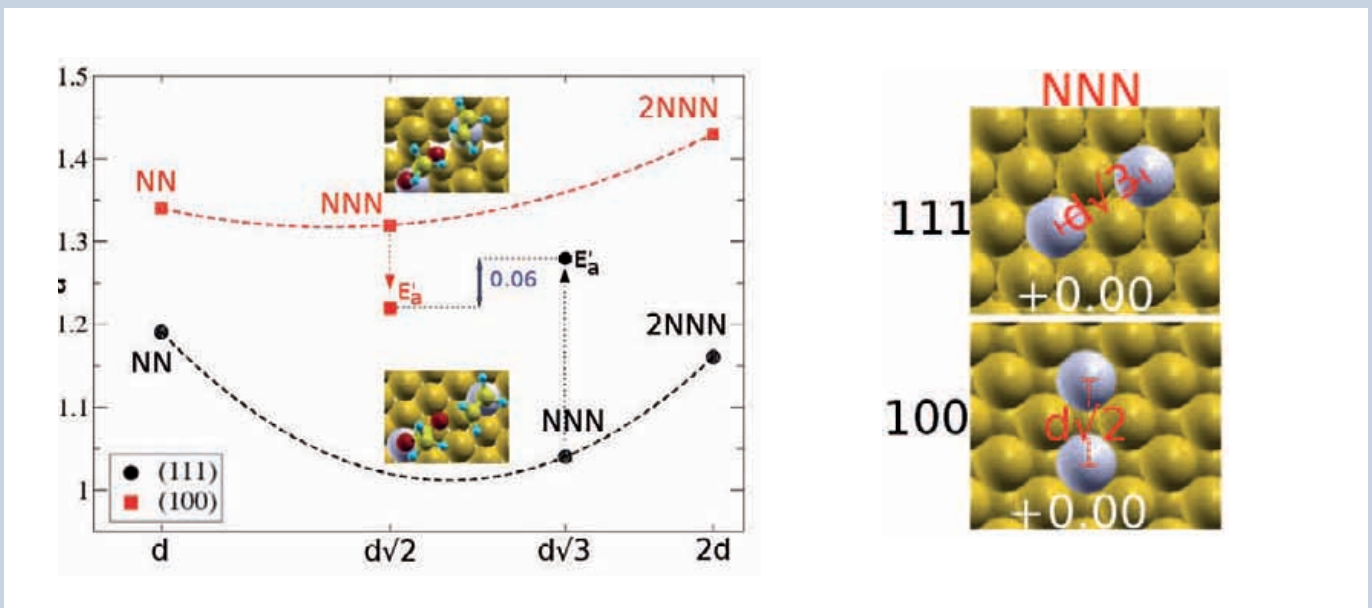
pogut determinar camins de reaccions simples primer, i més complexes, després, i determinar quins són els paràmetres de control més efectius i més interessants.

Darrerament, aquest grup de l'ICIQ s'ha dedicat a l'estudi d'aliatges d'or. Com explica Núria López, "l'or ha captivat la hu-

manitat des de l'inici dels temps a conseqüència de les seves propietats. En particular, l'estabilitat, ja que sembla que no reacciona amb cap de les substàncies amb què es tracta de manera habitual. Tanmateix, s'ha trobat que la seva noblesa depèn fortament de la grandària de les partícules de catalitzador que es preparen. Tot i que aquesta nova química s'ha desenvolupat des dels anys 80, això ha obert un nou camí que fins aleshores semblava completament tancat. A més de presentar-se com a nanoestructura, l'or té la capacitat de formar aliatges amb altres materials, particularment amb el pal·ladi (Pd)". Recentment, experiments del grup del Prof. D. Wayne Goodman, de la Texas A&M University, van demostrar que les aleacions de PdAu posseïen unes capacitats excel·lents per a la síntesi d'un dels intermedis sintètics més versàtils, l'acetat de vinil.

Els experiments realitzats en condicions d'ultra alt buit eren tan acurats que fins i tot proposaven que de tots els aliatges amb poc contingut de Pd existia una configuració que era molt més activa i més selectiva per a l'acoblament de l'àcid acè-

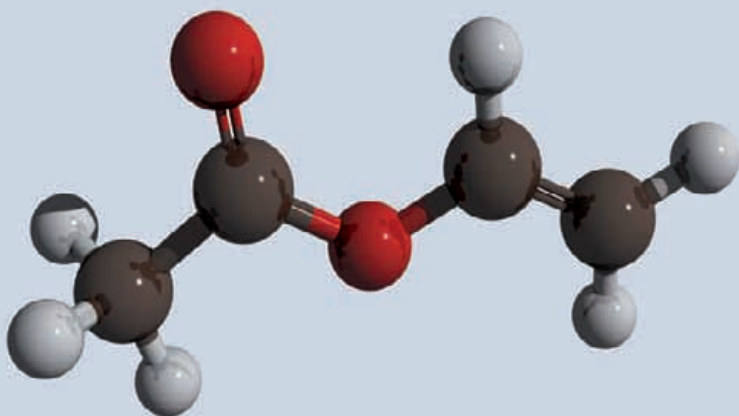
FIGURA 1. Barreres de reacció per a l'etapa limitant de la formació de l'acetat de vinil a les diferents superfícies que contenen dímers de Pd en Au.





## L'ACETAT DE VINIL

L'acetat de vinil és un líquid incolor i molt inflamable. És soluble en la majoria dels dissolvents orgànics i insoluble en l'aigua. Es polimeritza espontàniament i, per conservar-lo, s'estabilitza amb inhibidors com ara la hidroquinona i la fenilamina. Industrialment, s'obté sobretot per reacció en fase de vapor entre l'àcid acètic i l'acetilè emprant acetat de zinc com a catalitzador. També es pot obtenir a partir d'etilè i àcid acètic, per oxidació posterior en presència d'un catalitzador de pal·ladi. S'utilitza principalment com a monòmer per fabricar polímers tan emprats, com el poli-acetat de vinil, del qual deriven l'alcohol polivinílic i els acetals polivinílics, i els copolímers clorur de vinil-acetat de vinil i acetat de vinil-acrilats. Aquests productes s'utilitzen principalment en les pintures i els adhesius.



Model de la molècula d'acetat de vinil.

tic i l'etilè en presència d'oxigen. A més, aquest centre actiu era molt més productiu en una de les cares de l'aliatge (100) que no pas en la cara més comuna (111), explica López.

Dins el grup de l'ICIQ, la investigadora Mónica García Mota ha dissenyat una sèrie d'experiments computacionals per tal de distingir totes aquestes possibilitats. D'una banda, ha construït les dues cares més abundants (111) i (100). A més, ha generat diversos dímers que poden actuar com a potencials centres actius. Finalment, una vegada determinat el cost energètic de la formació dels dímers, ha calculat les propietats energètiques i termodinàmiques de l'etapa que controla la velocitat de la reacció.

"Tot i que essencialment les barreres indicaven que el mínim requeriment energètic era el que experimentalment es trobava, existia encara un petit obstacle. Les reaccions semblaven ser energèticament més econòmiques sobre la cara (111). Tanmateix, no

s'havien considerat totes les etapes prèvies del mecanisme. En incloure tots els termes de la reacció s'obtenia l'ordenament produït experimentalment i, fins i tot, es podia determinar quantitativament la diferència entre les dues cares. A més, la utilització de càlculs permetia determinar el perquè del sistema més actiu", explica Núria López. El centre actiu més favorable presenta diferents característiques que són difícils d'identificar experimentalment. Així, no s'emmetzina per un dels reactius, presenta les barreres més baixes de totes les possibles i adsorbeix de manera raonable, és a dir, ni molt fortament ni molt feblement, els reactius.

Aquests resultats, publicats a *J. Am. Chem. Soc.* el mes de novembre de 2008, demostren la possible enginyeria de centres actius i la manera com, a través de càlculs teòrics, es pot aconseguir determinar quins són els factors a millorar o eliminar si es volen aconseguir catalitzadors més actius, selectius i estables. ■

## Noves tecnologies en CATALÀ!

### Què és una bibliografia web?

Generalment, en les bibliografies consignades en llibres, articles, tesis doctorals, treballs de recerca i altres publicacions científiques es troben referenciats documents de tipologia tan diversa com ara monografies, publicacions en sèrie, documents audiovisuals, materials gràfics o recursos electrònics.

Des de fa un temps, també comença a ser habitual utilitzar la denominació **bibliografia web** per a designar la bibliografia que inclou exclusivament documents disponibles a internet. Una bibliografia web pot contenir, per exemple, referències d'articles, vídeos, fitxers de so, llocs web, pàgines web, etc.

En la normalització del terme català **bibliografia web**, conegut en anglès com a **webliography** o **webography**, s'ha tingut en compte que es tracta d'una forma descriptiva, lingüísticament adequada i transparent. A més, se'n documenten formes anàlogues en altres llengües: **bibliografía web**, en castellà, **bibliographie web** en francès i **web bibliography** en anglès (juntament amb les denominacions reduïdes esmentades anteriorment).

En relació amb aquest concepte, també cal tenir en compte el terme **bibliografia electrònica** o **bibliografia en línia** (en anglès, **electronic bibliography** o **online bibliography**), que fa referència de manera general a qualsevol tipus de bibliografia consultable per internet.

Es tracta de termes formats a partir del substantiu normatiu **bibliografia** ('conjunt d'obres relatives a una disciplina o a un tema' i 'relació d'obres que precedeix o segueix una monografia, un article, etc.'), que és la forma general que es fa servir quan no cal especificar quin tipus de documents es recullen ni la forma com es difonen.



**termcat**

centre de terminologia

www.termcat.cat

# L'IMPPC es connecta a l'Anella Científica



L'Institut de Medicina Predictiva i Personalitzada del Càncer (IMPPC) s'ha connectat a l'Anella Científica a una velocitat de 100 Mbps per mitjà d'un radioenllaç. Adrià Palomino, responsable de seguretat i tecnologies de la informació a l'IMPPC, explica que "hem decidit connectar-nos a l'Anella per la velocitat d'accés que ens proporciona i la seguretat que ofereix. A més, també hem decidit formar-ne part per tal de poder gaudir d'altres serveis del CESCA com ara el de certificació digital o l'emmagatzematge de dades".

dels laboratoris de recerca, l'IMPPC disposarà d'un banc d'ADN que contindrà unes 50.000 mostres d'ADN de la població sana de Catalunya, laboratori de patologia, serveis de genòmica, microscòpica i cultius cel·lulars.

L'IMPPC, inaugurat el passat mes de juny, ha començat a treballar amb nou equips de recerca, que integren a 39 especialistes, nombre que s'anirà ampliant fins arribar als 70 a la fi de l'any i fins a 150 quan l'Institut estigui en ple funcionament.

A l'IMPPC es fa recerca en àrees de la genètica i epigenètica del càncer fent servir tecnologia d'última generació de genòmica, epigenòmica i en bioinformàtica. El ràpid progrés d'aquestes disciplines, juntament amb la disponibilitat de tecnologies de gran capacitat, estan permetent detectar canvis en gens que aporten informació sobre la susceptibilitat de patir alguna malaltia. En aquest sentit, "l'Anella Científica ajudarà sobretot els nostres grups de bioinformàtica, que treballen amb un volum de dades molt gran, perquè puguin transmetre àgilment per la xarxa la informació necessària per desenvolupar la seva activitat", explica Palomino.

"Tot i que els que en faran un major ús seran els grups de bioinformàtica i genòmica, l'Anella donarà connectivitat a tota la institució", comenta Palomino. A més, "tenim previst, segons ens demanin els grups de recerca i quan el banc d'ADN estigui operatiu, augmentar el cabal de connexió per cobrir noves necessitats de connectivitat", afegeix.

El projecte de l'IMPPC va començar a desenvolupar-se l'any 2006 amb la creació de la fundació que porta el mateix nom, i es va construir el 2008. L'IMPPC ha estat creat pels departaments d'Innovació, Universitat i Empresa, i de Salut de la Generalitat de Catalunya, en col·laboració amb el Consell Superior d'Investigacions Científiques (CSIC); la Universitat Autònoma de Barcelona; l'Ajuntament de Badalona; l'Institut Català de la Salut; l'Hospital Universitari Germans Trias i Pujol, i la Fundació Institut d'Investigació en Ciències de la Salut, Germans Trias i Pujol.



Els grups de recerca de l'IMPPC estudien les bases moleculars del càncer.

L'IMPPC és una institució que té per objectiu identificar les bases moleculars que permetin la predicció del desenvolupament del càncer i el seu tractament personalitzat. Així, la seva activitat està orientada al descobriment de marcadors moleculars amb valor pronòstic i diagnòstic, la identificació de les variants genètiques i epigenètiques que determinen la resistència i susceptibilitat al desenvolupament del càncer, i la personalització del tractament mitjançant la identificació de factors amb valor predictiu de la resposta. És a dir, preveure la malaltia coneixent els factors que la poden causar en lloc de curar-la un cop manifestada.

L'Institut es troba ubicat en un edifici de tres plantes i 3.000 metres quadrats en l'entorn de l'Hospital Universitari Germans Trias i Pujol de Badalona. La

planta baixa està destinada als serveis comuns (banc d'ADN, sala d'esterilització, informàtica, unitat de genòmica, etc.) i de suport a la recerca (gestió administrativa, sala d'actes, cafeteria, etc.). La primera

## L'IMPPC es connecta a l'Anella Científica des del mes d'agost

planta concentra la investigació traslacional dels factors moleculars que poden predir el risc i l'evolució del càncer incloent-hi el Programa Conjunt ICO-IMPPC de Diagnòstic Molecular del Càncer Hereditari. En la segona planta es localitzen els grups de recerca bàsica dedicats a l'estudi de les bases moleculars del càncer. A més



# La integració grupal de l'adolescent



**La conducta social es pot entendre com les relacions que establim amb els altres i alhora com aquell comportament que s'adequa a les normes socials i que implica respectar la persona i els seus drets. És des d'aquestes dues vessants des d'on Sabino Ayestarán ha volgut estudiar el desenvolupament psicosocial dels adolescents bascos a *El grupo de pares y el desarrollo psicosocial del adolescente*, l'article més consultat de la revista *Estudi General* en el repositori de Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO) dins el període 2006-08.**

**■** *Estudi General* és una publicació que edita la Universitat de Girona (UdG) i que recull actes de congressos celebrats a la Facultat de Lletres de la UdG. El 2006, va rebre un dels ajuts per a la digitalització retrospectiva de revistes patrocinats pel llavors Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació, gràcies als que va poder digitalitzar un total de 21 exemplars entre els que hi havia aquest article, escrit el 1987 i publicat en l'exemplar número 7 de l'esmentada revista.

## Sabino Ayestarán "RACO és l'expressió més clara de la riquesa i fortalesa de la cultura catalana"

L'article mostra els resultats d'enquestes realitzades a adolescents bascos per tal d'analitzar les conseqüències psicosocials de la integració del jove en el grup de semblants i en les funcions que exerceix aquest grup en la seva conducta. A més, també especifica els diferents tipus d'iguals i detalla les característiques del grup d'adolescents antisocials per tal d'identificar-los i prevenir la delinqüència en els adolescents escolaritzats.

Per a l'autor, el fet que l'article sigui tan consultat és conseqüència "possiblement d'oferir, de manera breu i amb un estil sobri i concís, dades empíriques i una referència a les teories psicosocials que permeten donar una interpretació de les dades. No desenvolupa models teòrics, però sí es refereix a les teories i als seus autors". A més "també considero que pot ésser tan consultat perquè ofereix suggeriments per evitar que es produeixin actes antisocials,

reduir aquest tipus d'activitats i conèixer la manera per tractar els adolescents delinqüents reincidents".

Pel que fa a RACO, l'autor comenta que "és un repositori que conec molt bé perquè he consultat diverses revistes que hi conté com ara *Anuario de Psicología* i la *Revista d'Innovació Docent Universitària* i crec que les seves revistes tenen un gran valor". A més, "crec que RACO és l'expressió més clara de la riquesa i la fortalesa de la cultura catalana, quelcom que envegem i admirem aquells que estem involucrats en la cultura del País Basc", afegeix.

L'article comença amb l'anàlisi de la importància de formar part d'un grup d'iguals per a l'adolescent basc i continua estudiant les conseqüències socials i psicològiques del fet de sentir-se valorat dins del grup. "Per tal d'aconseguir aquesta capacitat d'autoafirmació cal confiança en un mateix, a més de gaudir d'una satisfacció a nivell escolar i una bona relació amb la família. Així, els adolescents que formen part d'un grup d'iguals aconsegueixen un

major equilibri i maduració personal, sexual i social que repercuteix positivament en les relacions familiars", explica l'autor.

L'estudi continua analitzant les funcions del grup d'iguals que són principalment de diversió i recolzament mutu. "Els objectius dels grups estan en relació directa amb el nombre de membres que el formen. Per tant, la pinya, formada per 20 integrants i constituïda a partir de diferents colles d'uns set membres, es relaciona sobretot per participar en activitats formalment organitzades", comenta l'autor. D'altra banda, afegeix que "els membres de la colla es relacionen principalment per tal d'aconseguir recolzament, estabilitat emocional i seguretat, entre altres beneficis".

Seguidament, l'article posa l'atenció en el grup d'adolescents antisocials. Considera com a decisius tres criteris per definir un adolescent delinqüent: la presència d'actes antisocials greus, la consciència de la seva desviació en relació a les normes socials i l'acceptació de subjectes antisocials com a models a imitar. Amb aquestes característiques definitòries, "s'obtenen uns resultats que concorden amb el model del desenvolupament social de la delinqüència usat pel Departament de Justícia dels EUA", explica l'autor.

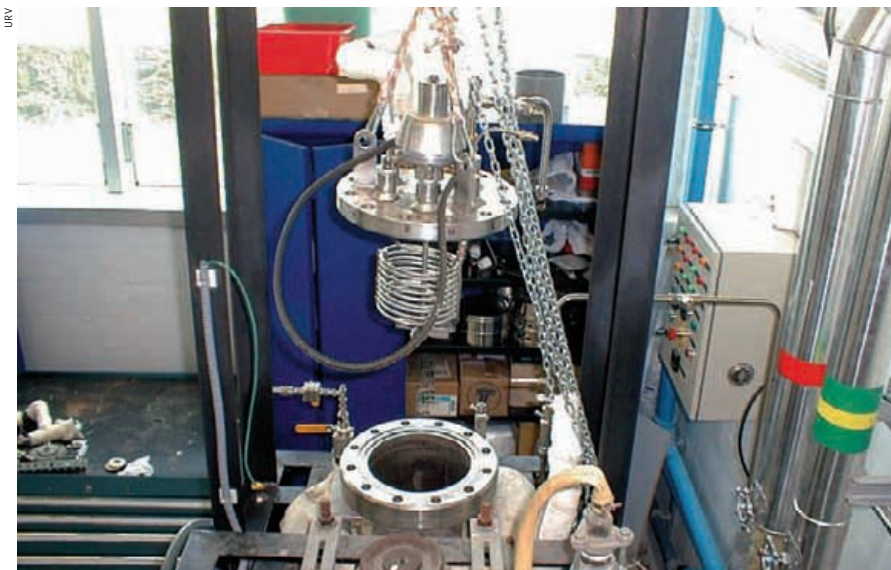
Finalment l'article conclou oferint suggeriments per tal de prevenir els actes antisocials en els adolescents escolaritzats. L'autor explica que "cal evitar que es produeixin o procurar-ne la seva reducció". També afirma que "és necessari, en cas d'adolescents delinqüents reincidents o crònics, tractar i reeducar aquestes conductes". "Aquests suggeriments, tot i estar reflectits en aquest article que data de 1987, segueixen sent vàlids en l'actualitat i, per això, el fan tan atractiu", conclou l'autor. ■



# Obtenció de carboximetilcel·lulosa de plantes anuals



**La preparació i caracterització de mostres de carboximetilcel·lulosa (CMC) a partir de diferents materials lignocel·lulòsics tant residuals com no fusters, així com l'estudi de la influència de les condicions de preparació de la fusta de partida i les seves característiques sobre les propietats finals de les CMC obtingudes ha estat l'objecte d'estudi de *Síntesis de carboximetilcel·lulosa (CMC) a partir de pastes de plantes anuals*, de Claudia Barba, la tesi doctoral més consultada de la Universitat Rovira i Virgili (URV) en el repositori de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX).**



Reactor de cocció ràpida que permet preparar cel·luloses de qualsevol matèria primera amb temps de digestió curts i controlats.

Aquesta tesi ha estat dirigida pels Drs. Xavier Farriol i Daniel Montané, presentada al Departament d'Enginyeria Química de la URV, llegida el mes de juny de 2002 i introduïda al TDX l'agost del mateix any. A més de ser la més consultada d'entre totes les tesis que té incorporades la URV, també ocupa la 29a posició en el rànquing acumulat de consultes entre les tesis de totes les universitats participants al repositori.

Per al rector de la URV, Francesc Xavier Grau, el TDX "compleix molt bé amb la funció de donar a conèixer a la societat en general i al món científic en particular els resultats de la feina més bàsica que en recerca fan les universitats, la de formació de nous doctors; a més, disposar d'una eina única i oberta a nivell de sistema universitari català potencia la visibilitat d'a-

quests resultats i, per tant, la seva difusió". Per als directors de la tesi, el TDX constitueix "una eina indispensable per al treball de recerca a les universitats catalanes. El seu valor com a font d'informació és obvi, cal ressaltar però que la seva funció com a plataforma de difusió del treball dels nostres investigadors és encara més valuosa. Com és ben sabut, la valoració externa i la visibilitat científica de la nostra recerca depèn directament de les citacions que es generen en les publicacions científiques. És evident que el TDX contribueix a facilitar la consulta del nostre treball i per tant a millorar la seva valoració externa".

La carboximetilcel·lulosa (CMC) és l'èter de cel·lulosa industrialment més important. És similar a la cel·lulosa, però a diferència d'aquesta és molt soluble en aigua. Gràcies a la versatilitat de les se-

ves propietats, la CMC s'utilitza com a additiu en un ampli ventall de sectors industrials, com ara pintures, agricultura, tèxtils, detergents, llots de perforació i paper. La CMC refinada a un alt grau de puresa s'utilitza en aplicacions lligades directament amb el consum humà, com ara aliments, medicines, etc. on actua com a espessant, producte de farcits, fibra dietètica, agent antigumoll i emulsionant.

Per a l'autora, el fet que la tesi sigui tan consultada pot ser perquè "proposa usar matèries primeres alternatives per obtenir un dels derivats de la cel·lulosa més usat en gran nombre d'aplicacions. Tot i que s'han sintetitzat gran varietat d'èters de cel·lulosa amb diferents nivells de viscositats, puresa i comportaments reològics, només uns pocs han guanyat importància a nivell comercial, i la carboximetilcel·lulosa és precisament l'èter de cel·lulosa més important. Segurament per això el meu treball suscita tant interès".

Com a matèria primera per obtenir CMC, s'han utilitzat materials lignocel·lulòsics residuals: estelles de pi, serradures de pollancre i palla de blat (Espanya); fibres de plantes no fruïteres: *Miscanthus sinensis* (Espanya), bagàs de canya de sucre i sisal blanc (Mèxic); a més de pastes papereres d'abacà (Equador), sisal (Àfrica), jute (Bangladesh) i lli (Europa).

Tradicionalment, els derivats de cel·lulosa es preparen a partir de pastes que provenen de processos paperers. Aquests processos donen com a resultat pastes que han de complir amb característiques moleculars específiques, com ara una llarga longitud de cadena per millorar les propietats mecàniques del paper i la preservació d'hemicel·luloses que ajuden a millorar el seu rendiment. Per donar resposta a aquestes especificacions, els processos paperers requereixen una gran selectivitat de les seves matèries primeres, generalment estelles de pi, coccions de baixa temperatura i durant un llarg temps, reactors grans i plantes industrials integrades. En canvi, per desenvolupar derivats de cel·lulosa són necessàries pastes amb un alt grau de puresa i una longitud de ca-



dena limitada. “Per aquest motiu, no és estrany que es vulguin desenvolupar processos per a la fabricació de derivats de cel·lulosa que es diferenciïn dels processos paperers, modificant les condicions d’operació i utilitzant materials lignocel·lulòsics no convencionals”, explica l’autora.

Actualment, l’estudi de l’obtenció de derivats de cel·lulosa “està recobrant importància a conseqüència de les múltiples aplicacions innovadores en el consum directe amb l’ésser humà, on la biocompatibilitat d’aquests derivats és un factor essencial per a aplicacions relacionades amb la medicina, cosmetologia, farmàcia i aliments”, comenta Barba. Per això, “l’interès ha recaigut en optimitzar la tecnologia de producció i diversificar els mètodes d’obtenció de derivats fets a mida per a un ús específic”, afegeix.

La tesi s’estructura en cinc capítols centrats cadascun d’ells en una part específica del treball desenvolupat. En el primer capítol s’introdueixen breument els temes a tractar i objectius a assolir. El segon capítol comporta una revisió biblio-

## La CMC és l’èter de cel·lulosa industrialment més important

gràfica sobre els antecedents de la matèria, es destaca la importància dels materials lignocel·lulòsics, la seva composició i les principals vies del seu aprofitament. Es mostren els processos, transformacions i separacions de les fraccions cel·lulòsiques, especialment en processos de fabricació de pastes de cel·lulosa.

El capítol tercer mostra els materials, substrats lignocel·lulòsics emprats per a la fabricació de pastes de cel·lulosa, les seves característiques principals i també les de les pastes papereres comercials usades per a la síntesi de CMC. També es mostren amb detall els diferents equips usats i el seu procediment d’operació.

Els resultats obtinguts en les diferents fases de la recerca es repassen en el quart capítol. En concret, es mostren els resultats referents a la caracterització de matèries primeres emprades en les diferents coccions: els resultats obtinguts de l’obtenció de pastes de cel·lulosa amb coccions ràpides i mitjançant el mètode IRSP, els resultats de propietats de les pastes papereres comercials, de plantes no fusteres

i, finalment, els resultats obtinguts de la síntesi de carboximetilcel·lulosa a partir de les pastes de cel·lulosa descrites.

Els resultats de la caracterització reològica de les mostres de CMC han demostrat que és possible obtenir derivats de cel·lulosa a partir de pastes que no provenen de la fusta, com ara la palla de blat, amb propietats diferents a les obtingudes en materials comuns com la fusta o els línters de cotó. Aquests nous materials presenten un potencial important per a la producció de derivats de cel·lulosa amb característiques innovadores per a aplicacions industrials específiques, especialment l’estabilitat de la viscositat amb la

temperatura. “Aquest comportament és avantatjós si el comparem amb gels físics com ara la goma gellan, que basa la seva estructura únicament en enllaços d’hidrogen, els quals es trenquen en augmentar la temperatura”, explica Barba.

Així, “la CMC, obtinguda a partir de cel·lulosa d’abacà (fibres molt llargues i resistents provinents de l’Equador), presenta una molt bona estabilitat de la viscositat en funció de la temperatura. Aquest derivat de cel·lulosa podria utilitzar-se en aliments, medicina... amb una viscositat constant fins i tot després d’haver estat ingerit o d’entrar en contacte amb el cos humà”, conclou Barba. ■

**Claudia Barba** és doctora en Enginyeria Química per la URV el 2002. De 2002 a 2004 va fer un postdoctorat a Rhodia Recherches en col·laboració amb l’Escola Nacional Superior d’Indústries Agrícoles i Alimentàries a França. El mateix 2004 va entrar com a investigadora de l’Àrea de Recerca i Desenvolupament de l’empresa cosmètica l’Oréal dins el Laboratori de Maquillatge per a Llavís. Actualment forma part del Laboratori de Maquillatge per a Ulls de l’Àrea de Recerca i Desenvolupament de l’Oréal (París, França).



**Xavier Farriol** és catedràtic del Departament d’Enginyeria Química de la URV, on treballa des de 1980 havent dedicat la major part de la seva activitat de recerca a la cel·lulosa i els seus derivats. Des de 1987 i després d’una estada a la Universitat de Sherbrooke (Québec, Canadà), va posar en marxa el grup de recerca en materials lignocel·lulòsics que després d’una dilatada trajectòria en la qual els seus membres han produït desenes de tesis doctorals i centenars d’articles, respon actualment al nom d’Structured Systems Engineering for Energy, Materials and Chemistry (SYSTEMIC), dirigit pel Dr. Daniel Montané.



**Daniel Montané** és professor titular des de 1997 en el Departament d’Enginyeria Química de la URV, on va incorporar-se després de treballar dos anys com a investigador a la Universitat de Sherbrooke (Québec, Canadà) i al National Renewable Energy Laboratory (Colorado, EUA). Ha publicat més una cinquantena d’articles en el camp de l’aprofitament dels substrats lignocel·lulòsics per a aplicacions en materials renovables i biocombustibles. És cap del grup de Biorefinatge i Conversió Termoquímica de la Biomassa, integrat dins l’àrea de Bioenergia i Biocombustibles del recentment creat Institut de Recerca en Energia de Catalunya.



# Taller mecànic de reparació de vehicles



**Disseny de les instal·lacions d'un taller mecànic de reparació de vehicles és el títol del projecte de final de carrera de Gerard Ventura Sans, el document més consultat de la UdL i el cinquè més consultat d'entre tots els documents disponibles al Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT) en el període 2005-08.**



Aquest document, que pertany a la col·lecció Projectes de final de carrera d'Enginyeria Tècnica Industrial Mecànica de la UdL, va ser introduït a RECERCAT el mes de març de 2007. D'aleshores, ha rebut un 0,77% del total de consultes. La UdL disposa de 158 documents incorporats a RECERCAT i 40 d'aquests pertanyen a l'esmentada col·lecció.

El fet que aquest projecte sigui tan consultat pot ser perquè “és un projecte prototip, és a dir, serveix de guia per poder realitzar altres projectes de disseny d'instal·lacions en naus industrials”, comenta l'autor. Així, “es pot usar d'exemple i pot esdevenir una bona guia pels que estiguin interessats en el disseny d'instal·lacions”, afegeix. A més, “el disseny d'aquests tipus d'instal·lacions dóna certa fluïdesa amb els reglaments que els hi són d'aplicació i com aquesta normativa és la que s'usa en el món laboral constantment, el meu projecte pot ésser també tan consultat per aquest aspecte”.

Per a l'autor, RECERCAT és “una eina

de consulta important per a tot aquell estudiant o investigador, ja que pot donar una ullada a tot tipus de material de recerca que li pot ser d'utilitat i així conèixer altres recerques relacionades, resoldre dubtes, etc.”.

## El taller

El projecte té per objectiu el disseny de les instal·lacions de climatització i calefacció elèctrica, pneumàtica i de protecció contra incendis, necessàries per poder desenvolupar en l'interior d'una nau industrial, l'activitat pròpia d'un taller mecànic de reparació de vehicles.

“Vaig decidir-me a fer un projecte com aquest perquè és molt pràctic i serveix per conèixer quina és la normativa d'aplicació en les diferents instal·lacions, aprendre a realitzar els càlculs necessaris... És a dir, de forma més general et dóna una certa pràctica de cara al món laboral”, explica Ventura.

La nau industrial on es desenvoluparà el taller mecànic ja existeix, encara

que no ha estat posada en ús abans, es troba situada en el polígon industrial Pla de l'Estació del municipi de Roquetes, dins de la comarca del Baix Ebre, a Tarragona. L'activitat que es desenvoluparà a la planta correspon amb la d'un taller de reparació i, per tant, se centrarà en la reparació de tot tipus de problemes mecànics, com ara problemes de motor, suspensions, frens, realitzar les revisions periòdiques de canvi d'oli, filtres, canvi de pneumàtics, etc., excepte reparacions elèctriques o de xapa i pintura.

La nau té una superfície total en planta de 496 m<sup>2</sup>, que es troba dividida en dues plantes (planta baixa i altell) on s'ubicaran la zona de treball, el magatzem de residus, el de recanvis, l'oficina, el vestidor, serveis, el menjador i la sala de màquines.

Per dur a terme tot el disseny, s'ha realitzat un estudi complet de l'objecte del projecte, les seves característiques, determinacions i normativa. També s'ha realitzat una anàlisi de l'impacte mediambiental, el tractament de les aigües residuals i dels residus sòlids, les emissions a l'atmosfera i els sorolls, entre d'altres. També s'han especificat les instal·lacions a realitzar, com ara l'elèctrica (enllumenat, alimentació del maquinari i la potència a contractar), l'especificació de la recollida selectiva dels residus inerts i no especials, la disposició d'un sistema de captació i tractament de gasos de combustió dels motors dels vehicles.

Tota aquesta informació es troba repartida entre la memòria del projecte i cinc annexos que amplien informació de forma concreta. Aquests annexos especifiquen els materials (eines i aparells) que

## El document més consultat de la UdL pertany a l'àrea de l'enginyeria tècnica industrial

necessitarà el taller per desenvolupar la seva activitat; la protecció contra incendis; els detalls de la instal·lació elèctrica; els de la climatització i calefacció, i les característiques de la instal·lació pneumàtica. A més, el projecte es complementa amb un document que conté el plec de condicions, un altre on figura l'estat d'amidaments i un darrer que inclou el pressupost. ■





## Nova institució i més revistes

El Museu Episcopal de Vic s'ha incorporat al repositori Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO) amb la seva revista *Quaderns del Museu Episcopal de Vic*. Aquesta publicació conté articles de recerca científica especialitzada, vinculada al Museu i a les seves col·leccions.

A més, durant els mesos de juliol i setembre s'hi han afegit vuit revistes més: *Col·lecció papers de relacions Govern-Parlament: recull anual*, de la Generalitat de Catalunya; *Sessió d'Estudis Mataronins, Recull de treballs, Miscel·lània ceriverina*, totes tres editades per l'Institut Ramon Muntaner; *Journal of Industrial Engineering and Management*, de la Universitat Politècnica de Cata-

lunya; *Quaderns de Vilaniu*, de l'Institut d'Estudis Vallencs, i *Fonts: butlletí del Centre d'Estudis Argentonins Jaume Clavell*, del Centre d'Estudis Argentonins Jaume Clavell.

D'altra banda, des del mes de juliol, RACO està disponible a través d'SFX, un gestor de recursos electrònics que permet a les biblioteques que disposen d'aquest programari que activin les revistes electròniques (en aquest cas les de RACO), les bases de dades, els llibres electrònics... que tenen contractats per tal d'unificar i controlar l'accés telemàtic des d'una única plataforma. Així, tots els clients d'SFX poden activar les revistes que conté RACO i mostrar-les com a part de la seva col·lecció, facilitant-ne l'accés i la difusió de les revistes.

Amb la incorporació d'aquestes revistes, RACO ja en disposa de 252 de 50 institucions participants. ■

## Noves col·leccions disponibles



El Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT) compta amb set noves col·leccions: la Universitat Autònoma de Barcelona ha incorporat dues, una per als *working papers on environmental sciences* de l'Institut de Ciència i Tecnologia Ambientals i una altra per als treballs de recerca i de postgrau del Departament d'Art.

D'altra banda, la Universitat de Lleida hi ha afegit una per als treballs pràctics tutorats d'Enginyeria Tècnica Agrícola-Hortofruticultura i Jardineria de l'Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Agrària de Lleida.

Per la seva banda, la Fundació Catalana per a la Recerca i la Innovació hi ha afegit una nova col·lecció per als informes científics per a la presa de decisions i l'Institut de Recerca i Tecnologia Agroalimentàries n'hi ha incorporat tres, una per als articles científics del seu programa d'Aqüicultura, una per als articles científics del seu programa de Fructicultura i una darrera per als congressos i simposis del programa d'Altres Àmbits Alimentaris. ■

## Certificats de reconeixement del TDX

Coincidint amb l'inici del curs acadèmic, el passat 18 de setembre, es van emetre per quart any consecutiu els certificats de reconeixement a les tres tesis més consultades durant el curs acadèmic 2008-09 de cada universitat que participa al servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX).

Amb el lliurament d'aquests 49 certificats, signats pel conseller d'Innovació, Universitats i Empresa, Josep Huguet, i pels respectius rectors, es pretén reconèixer la popularitat de la re-

cerca universitària duta a terme, contrastada per l'elevat nombre de consultes rebudes.

La tesi més consultada en aquest curs acadèmic ha estat *Teorías de la comunicación grupal en la toma de decisiones: contexto y caracterización* del Dr. Gerardo Javier Macías i Cortés, dirigida pel Dr. Mario Herreros i presentada al Departament de Comunicació Audiovisual i Publicitat de la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB), que ho ha estat els quatre darrers cursos acadèmics. ■



Certificat de la tesi més consultada durant els darrers quatre cursos acadèmics.

## Cinema i cant de Bellaterra a São Paulo



Durant els dies 8 i 9 de setembre s'ha dut a terme un taller d'aprenentatge en línia entre la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) i la Universidade de São Paulo (USP), a Brasil. Per poder connectar ambdues ubicacions a través de l'Anella Científica s'ha proveït d'una VLAN que ha connectat el Campus de Sabadell de la UAB amb la Fundació i2CAT, que participa en el projecte, amb una amplada de banda de 65 Mbps. D'aquí, la senyal ha viatjat cap a RedIRIS, RedClara i fins a la USP.

En concret, el taller ha comptat amb dues sessions. En la primera, s'ha retransmès des de la USP fins a la UAB una classe magistral de cinema sobre el film *Espalhadas pelo Ar*, presentat a la Setmana de la Crítica del Festival de Cannes i produït per estudiants de la USP. La segona sessió ha comptat amb una retransmissió d'una classe magistral de piano a càrrec del pianista i professor de la Texas Christian University, Jose Feghali, i de Josep Gil, professor del Conservatori de Sabadell. Ambdues sessions han comptat amb retransmissions de gran qualitat: s'ha captat el so estèreo mitjançant micròfons (2.0) i la imatge amb càmeres de vídeo digital. El sistema de retransmissió ha estat DVTS.

Aquestes retransmissions es troben emmarcades dins el projecte d'Opera E-learning (ELS), projecte d'ensenyament en línia impulsat per la Ciutat de la Música, en conveni amb la Fundació i2CAT i la Universitat Politècnica de Catalunya, i amb la col·laboració de la UAB i la USP, amb l'objectiu d'impartir ensenyaments artístics musicals i cinematogràfics de màxima qualitat, sense necessitat que el professor i l'alumne comparteixin el mateix espai. ■

## Euro-IX difon un vídeo divulgatiu per explicar el funcionament d'internet

En la 59a reunió de RIPE (Réseaux IP Européens), que ha tingut lloc a Lisboa del 7 al 9 d'octubre, s'ha presentat el vídeo guanyador del Film Competition The Internet Revealed, una iniciativa de l'associació europea de punts neutres Euro-IX que ha plantejat a directors de cinema amateurs i professionals el repte de fer un curt que expliqui al públic en general i als agents implicats com s'interconnecten les xarxes per crear la world-wide web o xarxa de xarxes.

El vídeo guanyador, de 5 minuts de duració i premiat amb 25.000 euros, és un audiovisual de caràcter didàctic que explica de forma fàcil i clara la història del funcionament d'internet, centrant-se en la seva infraestructura interna, des de la perspectiva de l'usuari final. A més, el vídeo inclou la definició d'un punt neutre i de les polítiques d'intercanvi de tràfic que porten a terme. Es pot veure i descarregar el vídeo a [www.euro-ix.net/film](http://www.euro-ix.net/film). ■



## Nous membres i modificacions de cabal

VozTelecom i Digital Parks s'han connectat al Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX) a 100 Mbps a través de Telvent, el punt alternatiu de connexió al punt neutre. A més, els ISP Nexica, Adam i Sarnet han traslladat la seva connexió

a Telvent i els dos darrers també l'han ampliat a 1 Gbps cadascun. També Jazztel, Acens i Iberbanda han ampliat la seva velocitat de connexió a 1 Gbps. El CATNIX compta ara amb 22 membres entre operadors i ISP. ■



Jordi Bosch, de l'STSI, i Xavier Casajoana, de VozTelecom, a la signatura del conveni.



## Èxit en les proves de transmissió de dades a gran escala del PIC

El Port d'Informació Científica (PIC) ha participat amb èxit a l'Exercici de Gran Escala STEP'09, dues setmanes d'experiments dins el projecte LHC Computing Grid del Large Hadron Collider (LHC), l'accelerador de partícules més gran del món que es troba al CERN. Per a aquestes proves, durant les quals s'han batut rècords tant en transmissió de dades com en execució de grans quantitats de treballs, s'han utilitzat les xarxes de recerca Géant, Red-IRIS i Anella Científica, a la qual el PIC es connecta a 10 Gbps per poder participar en el projecte de l'LHC.

Com explica el director del CESCA, Miquel Huguet, "amb la tercera renovació tecnològica de l'Anella Científica, que es va dur a terme ara fa un any, s'ha donat suport a noves funcionalitats. Un aspecte molt important, a més a més, són les noves modalitats de connexió, que ofereixen un ampli ventall de possibilitats que arriben fins als enllaços de 10 Gbps per a projectes especials, com el de l'LHC al PIC. En

aquest sentit, projectes com l'LHC demostren que avui en dia l'Anella Científica és una infraestructura capaç de suportar les elevades exigències de la recerca internacional de primer nivell".

El PIC, situat al campus de la Universitat Autònoma de Barcelona, és un dels 11 centres d'arreu del món anomenats Tier-1, que es connecten amb el CERN, Tier-0, i que emmagatzemen les dades primàries de l'LHC i executen processos de calibració i de reconstrucció. Durant STEP'09 es van realitzar proves a gran escala d'escenaris d'anàlisi d'usuaris finals, amb el suport de grups d'experts en aplicacions i Grid, entre ells els del PIC i de grups de recerca del Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas, el Consejo Superior de Investigaciones Científicas, l'Institut de Física d'Altes Energies de Barcelona i les universitats Autònoma de Barcelona, Autònoma de Madrid, de Barcelona i de Santiago de Compostela. ■

## Noves versions de programari disponible

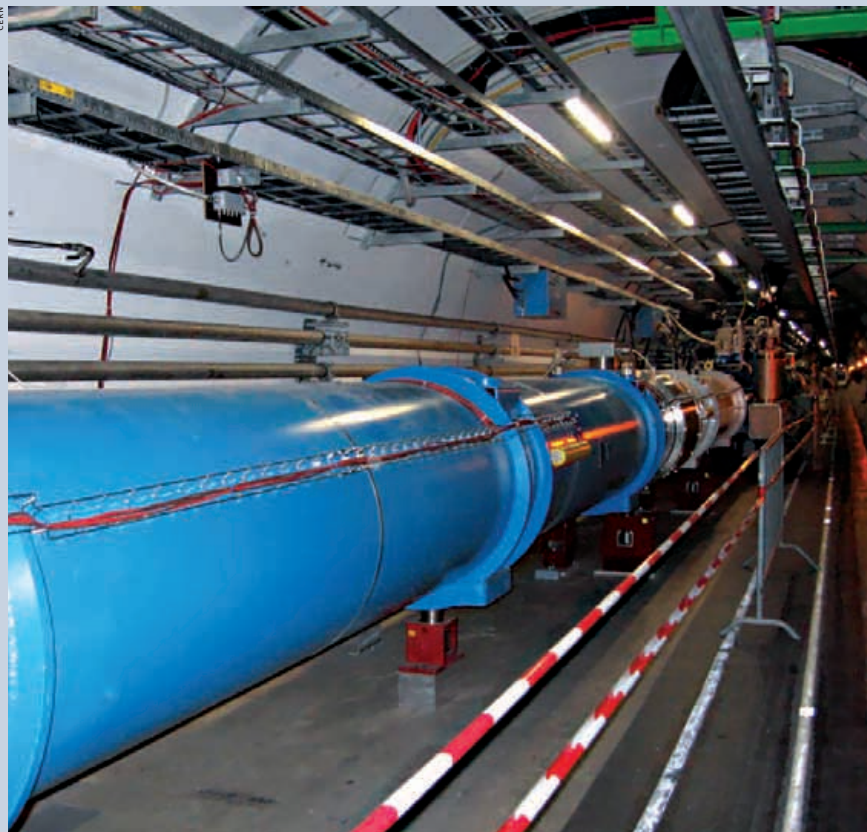
Ja està disponible la nova versió del programari Gaussian a totes les màquines del CESCA en la seva revisió A.02. Aquesta darrera versió del programari incorpora un gran nombre de noves funcionalitats en diferents àmbits teòrics, i suposa un canvi substancial respecte a l'anterior versió (Gaussian 03).

A més, el programari de visualització molecular multiplataforma i de codi lliure, Molekel 5.3, ha quedat instal·lat al NovaScale (*prades*). Aquesta nova versió del 2008 ha estat desenvolupada pel Swiss National Supercomputing Centre i presenta una interfície gràfica amb un disseny renovat que permet llegir fitxers en format Gaussian, GAMESS i Molden, entre d'altres.

D'altra banda, TURBOMOLE ha quedat instal·lat al CP4000 (*cadí*) i al NovaScale (*prades*), en la seva versió 6.0. Aquest programari és un paquet de programes de química quàntica que s'utilitza en àrees tan diverses com ara la catàlisi homogènia i heterogènia, la química orgànica i inorgànica, diversos tipus d'espectroscòpia i bioquímica. ■

## Ampliacions a l'Anella Científica

L'Escola Superior de Comerç Internacional, vinculada a la Universitat Pompeu Fabra, s'ha connectat a l'Anella Científica amb un punt d'accés a 100 Mbps. D'altra banda, l'Institut d'Investigació Biomèdica de Bellvitge ha ampliat el seu cabal de connexió de 4 Mbps a 100 Mbps amb fibra òptica i el Parc Científic i Tecnològic de la Universitat de Girona, connectat a l'Anella a 100 Mbps, ja disposa de connexió amb fibra d'Orange Business Services, conegut fins ara com a Al-Pi Telecomunicacions. ■



Un dels túnels del Large Hadron Collider (LHC).

## Seminari sobre vot electrònic

El passat 13 de juliol es va celebrar al CESCA un seminari sobre la implantació d'una plataforma unificada de vot electrònic i telemàtic per al conjunt de les universitats catalanes que va comptar amb la participació de 37 assistents de 15 institucions.

El seminari es va adreçar a secretaris generals i integrants de la Comissió d'e-Administració de l'Associació Catalana d'Universitats Públiques (ACUP), amb la qual es va coorganitzar el seminari.

Antoni González i Lluís Ariño, secretari general i director del Servei de Recursos Informàtics i TIC de la Universitat Rovira i Virgili, respectivament, van presentar l'experiència realitzada al març en les eleccions de representants a la junta de centre de l'Escola Tècnica Superior d'Enginyeria. També van intervenir Gerard Cervelló, d'Scytl, i Jesús Orbezo, d'Indra, que van explicar les solucions d'aquestes empreses per a la implantació del vot electrònic.

Edita

CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ  
DE CATALUNYA



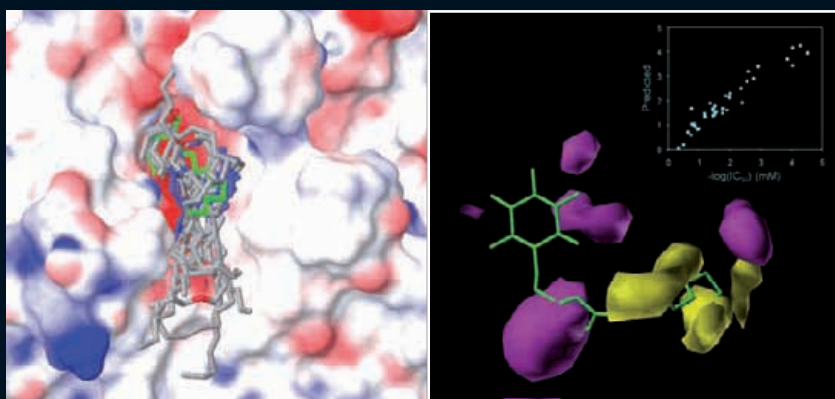
Patrocina

 **Generalitat  
de Catalunya**

 **FUNDACIÓ CATALANA  
PER A LA  
RECERCA  
I L'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

### F O T O / N O T Í C I A



El disseny computacional de fàrmacs és avui dia una eina ben implantada en la química mèdica. La Unitat de Modelització del Grup de Química Bioorgànica de l'Institut de Química Avançada de Catalunya (IQAC-CSIC), dirigida pel Dr. Jordi Bujons, treballa en el desenvolupament de models que ajudin a entendre la interacció de molècules bioactives amb dianes d'interès farmacològic i terapèutic, i que permetin el desenvolupament de nous compostos amb propietats optimitzades. Amb aquest objectiu s'estudien dianes relacionades amb càncer, dolor i diverses disfuncions metabòliques, entre d'altres, emprant el programari disponible al Servei de Disseny de Fàrmacs del CESCA per tal de dur a terme el cribatge de grans col·leccions de molècules, habitualment en l'ordre de  $10^4$ - $10^6$ , i poder definir quines d'elles poden ser potencialment més interessants. Recentment, a través

d'una col·laboració amb el Dr. Antonio Delgado, del mateix Institut, s'ha abordat un estudi sobre glucocerebrosidasa (GlcCer), l'enzim responsable de la malaltia de Gaucher. Es coneix que diferents mutacions en aquest enzim donen lloc a canvis estructurals que condueixen a la seva inactivació. L'activitat d'aquests enzims modificats pot ser, no obstant això, restaurada per molècules capaces d'interaccionar amb el seu centre actiu o d'altres regions, afavorint el plegament correcte de la proteïna, motiu pel qual s'ha qualificat aquests compostos com a xaperones farmacològiques.

A l'esquerra es representa un model d'unió de diferents inhibidors de GlcCer en el centre actiu d'aquest enzim. A la dreta es mostra un model 3D-QSAR amb l'estructura superposada d'un inhibidor de GlcCer, així com la correlació obtinguda entre les dades predites i experimentals.

### 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>

#### Propostes d'articles

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