

TERAFLOP

118 · OCTUBRE 2012

Més fiabilitat a l'Anella Científica

Avenços en química de ful·lerens

Entrevista a Jordi Isern, medalla
Narcís Monturiol

SGI a Espanya, 1990-2012

Les connexions a l'Anella Científica de la UdL i la UdG, amb doble escomesa

Les connexions de la Universitat de Lleida (UdL) i de la Universitat de Girona (UdG) a l'Anella Científica ja disposen de doble escomesa, és a dir, l'accés a internet que fins fa poc arribava de forma diversificada a aquestes universitats excepte en la seva darrera milla, ho fa ara per camins disjunts també en aquest darrer tram. Aquest fet incrementa la fiabilitat i robustesa de la xarxa en cas d'un tall de fibra accidental.



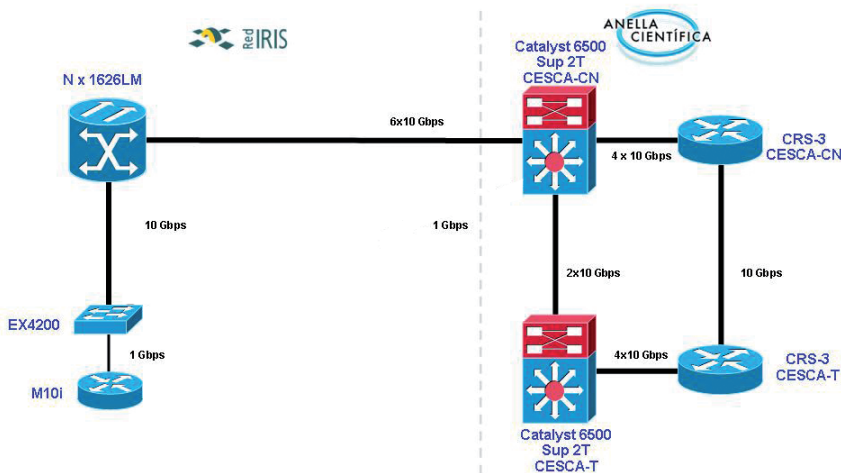
Aquesta millora ha estat possible gràcies a les condicions avantatjoses aconseguides pel CESCA en la prorroga del contracte amb Orange Business Services per al període 2011-13, que va comportar, entre altres, les connexions de la UdL, el passat 16 de febrer, i la UdG, el 28 d'agost, amb doble escomesa sense cost per a les universitats.

En aquest sentit, la rectora de la UdG, Anna Maria Geli de Ciurana, agraeix al CESCA aquesta millora de les connexions que "garanteixen la comunicació des dels campus universitaris gironins i el Parc Científic i Tecnològic de la UdG, i que contribueixen al ple desenvolupament de les activitats de docència, recerca i transferència".

La doble escomesa incrementa la fiabilitat i robustesa de la connexió

La doble escomesa proporciona més fiabilitat a l'accés a internet en general, així com als serveis en xarxa del CESCA: el servei de veu sobre IP, que facilita les trucades telefòniques cap a Barcelona a través de l'Anella Científica; els repositoris digitals, com ara TDX, RECERCAT, RACO i MDX, i els relacionats amb l'administració electrònica, dels que ja estan en marxa e-Registre, e-Vot, e-Arxiu, etc. |

Millores a la xarxa troncal de l'Anella Científica



Interconnexió de l'Anella Científica amb RedIris-NOVA a Barcelona.

Al fi del mes d'agost s'ha ampliat el cabal de l'enllaç principal de l'Anella Científica entre Campus Nord i Telvent en 10 Gbps, gràcies a la infraestructura de RedIRIS-NOVA. Així, l'enllaç principal disposa ara d'un total de 20 Gbps, ja que la recent ampliació se suma als 10 Gbps DWDM existents fins ara, la infraestructura dels quals és proveïda per Orange.

Aquesta millora incrementa no només la capacitat de xarxa, sinó també la redundància i el *backup*, ja que la infraestructura ve donada per proveïdors diferents donant més estabilitat a la xarxa en cas de fallada d'una línia.

Al juliol també es va ampliar de 2 a 10 Gbps el *backup* de la connexió (connexió de nivell 3) a través de la infraestructura de RedIRIS-NOVA. |

EADA es connecta a l'Anella Científica



La Fundació Privada Universitària EADA “Escola d’Alta Direcció i Administració” (EADA) s’ha connectat a l’Anella Científica amb dos

punts d’acces. El seu campus situat a Barcelona ho ha fet el 16 d’agost per mitjà de fibra òptica a una velocitat de 100 Mbps i el campus de Collbató, el passat 31 de juliol amb una velocitat de 20 Mbps.

Per a Marco A. Peña, director de Tecnologies de la Informació d’EADA, aquesta connexió permetrà “modernitzar les nostres infraestructures de connectivitat i desplegar nous serveis per al *faculty* i els participants dels programes, com ara un nou campus virtual que donarà suport a programes *blended-learning*, la mediateca corporativa o nous serveis basats en comunicacions unificades”.

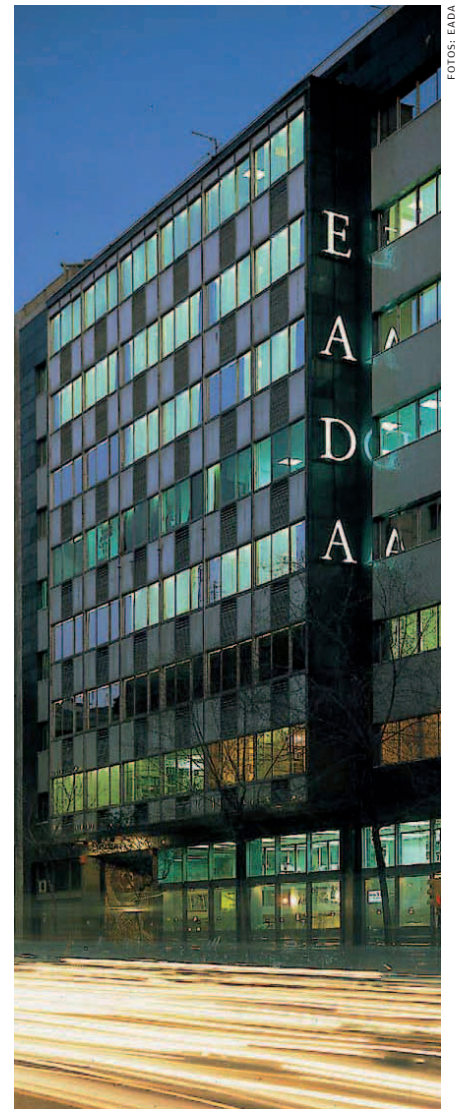
Segons el director de Tecnologies de la Informació d’EADA, “l’Escola, a més de fer docència, fa també recerca i l’esperit de la innovació hi està molt arrelat. En aquest sentit, en els darrers anys EADA està fent una aposta decidida per incorporar les TIC als processos formatius i a la millora de la productivitat i la quali-

tat. És per això que considerem l’Anella Científica com un aspecte fonamental en la nostra estratègia”.

La Fundació EADA porta més de 50 anys al capdavant de la formació per a directius i per a la comunitat empresarial. Aquesta escola de negocis té relació amb més de 350 empreses associades que ofereixen una formació basada en donar resposta a les necessitats del món corporatiu implicant els participants en el seu programa perquè siguin ells els protagonistes del seu propi procés de desenvolupament professional. L’Escola es defineix com una institució oberta, plural i diversa que té per missió formar les persones perquè puguin contribuir a que les organitzacions siguin més eficaçes i eficients.

EADA compta amb dos campus per facilitar els processos d’aprenentatge dels participants en els diferents programes. Un és el campus de Barcelona, la seu principal situada al carrer Aragó, amb un edifici de vuit plantes dissenyat per oferir una formació d’alta qualitat.

El segon campus és un centre de formació residencial situat a la localitat de Collbató, a 40 km de Barcelona. Es troba ubicat en un paratge natural, enfront les muntanyes de Montserrat, en un complex amb infraestructura hotelera i tots els seus serveis associats, cafeteria, restaurant, etc. Disposa de dos auditoris per a conferències amb capacitat per a 100 persones cadascun, 13 auditoris més de 100 m² i diferents aules per a l’aprenentatge. Ambdós campus es connecten a l’Anella Científica per mitjà de fibra òptica, amb una velocitat de 100 Mbps el de Barcelona i de 20 Mbps el de Collbató. “Amb l’Anella Científica volem especialment millorar la interconnexió entre aquests dos campus”, comenta Peña.



FOTOS: EADA

Marco A. Peña

“L’Anella Científica ens ofereix connectivitat d’alta capacitat i qualitat”



Des de 1999, EADA també reforça la seva presència en el mercat llatinoamericà amb la creació de diverses delegacions en diferents països. En aquest sentit, “l’Anella Científica ens ofereix connectivitat d’alta capacitat i qualitat a un preu molt atractiu”, apunta Peña. “A més, el fet d’estar en contacte amb altres institucions ens permetrà compartir coneixement i contrastar idees per a nous serveis”, afegeix.

Pel que fa a la formació, EADA ofereix màsters *full time* i *part time* en les diferents àrees de *management*, *màrqueting*, recursos humans, finances i operacions. També proporciona formació d’alt nivell per a executius en actiu, com el Programa de Direcció General (creat el 1967), adreçat a directius sèniors, i el Programa de Direcció i Administració, per a directius júnior i comandaments intermedis. Disposa d’un ampli ventall de programes de desenvolupament directiu i, des d’enguany, ofereix el primer programa a distància en direcció general. |

Ampliacions de cabal a l'Anella Científica

La Fundació Privada Institut de Neurorehabilitació Guttmann ha ampliat la seva connexió a l'Anella Científica, passant d'un radioenllaç a 10 Mbps a una connexió de 100 Mbps amb fibra òptica proporcionada per la Xarxa Oberta de Catalunya (XOC) a través d'Orange.

Per la seva part, el Centre de Suport Territorial dels Pirineus (CST Pirineus) de l'Institut Geològic de Catalunya (IGC)



disposa d'un nou punt d'accés a l'Anella Científica de 8 Mbps de velocitat a través de tecnologia ADSL. Es tracta del segon punt d'accés de l'IGC a l'Anella, ja que la seu principal d'aquesta institució, ubicada a Barcelona, hi està connectada a una velocitat de 100 Mbps a través de fibra òptica.

Aquest segon punt d'accés substitueix al Centre de Suport Territorial de

Tremp CST (situat a la Plaça Mossèn Casimir Torrent), que hi havia instal·lat a la capital del Pallars Jussà de manera provisional des de 2009 i que es va donar de baixa el 16 de juliol, en inaugurar-se el nou edifici ubicat també a Tremp, al passeig Pompeu Fabra. |

Retransmissió d'aurores boreals en directe des del sud de Groenlàndia

El CESCA ha col·laborat amb "Shelios 2012: Expedición Carla Mendoza, Groenlàndia" en la retransmissió, entre els dies 24 i 28 d'agost, de les aurores boreals que van tenir lloc al sud de Groenlàndia, Dinamarca. La retransmissió, realitzada des dels voltants del glacial de Qaleraliq, s'ha pogut seguir en directe des del portal *sky-live.tv*. Es tracta de la tercera visita que Shelios fa a aquesta zona de Groenlàndia. Les altres dues expedicions van tenir lloc el 2011 i el 2000.

En aquesta expedició, coordinada per l'Institut de Astrofísica de Canaries, hi han participat membres de tres projectes: l'europeu GLORIA (GLOBal Robotic-telescopes Intelligent Array), coordinat per la Universidad Politècnica de Madrid, que va col·laborar en la retransmissió en directe i en el web del fenomen; Ruta de las Estrellas, amb la proposta de formar joves emprenedors en expedicions científiques, i *tierrayestrellas.com* amb l'objectiu d'integrar els grans espectacles del cel a la història, geomorfologia i la flora d'àrees naturals protegides

des a partir de paisatges nocturns.

El CESCA hi ha participat cedint un servidor virtual amb sistema operatiu Linux, 4 GB de memòria RAM, 4vCPU virtuals i una xarxa compartida d'1 GB. D'altra banda, també ha configurat un servidor web Apache i un programari de sincronització remota i automatització de tasques que replica el portal *www.sky-live.tv* cada minut per garantir la bona transmissió del senyal.

A l'expedició de 2011, esdevinguda entre els dies 21 i 28 d'agost, es van observar les aurores boreals que van tenir lloc al mateix glacial, Qaleraliq, des del que s'ha fet la retransmissió enguany. Shelios havia visitat ja aquesta zona del sud de Groenlàndia l'any 2000 i el fet que molts dels espais que es van visitar el 2011 coincidissin amb els de la primera expedició, va permetre que es pogués realitzar una comparació fotogràfica de l'evolució dels glacials al llarg dels deu anys que distaven entre la primera i la segona visita.

Les aurores boreals succeeixen quan partícules molt energètiques al Sol (vent solar) arriben a l'atmosfera de la Terra. L'entrada d'aquestes partícules està dominada pel camp magnètic de la Terra, motiu pel qual només poden accedir-hi pel pol Nord (aurores boreals) i el Sud (aurores australs). Les aurores són immenses cortines lluminoses, que canvien ràpidament i amb tonalitats diverses.

Shelios és una associació de tipus científic i cultural, presidida per l'investigador Miquel Serra-Ricart, de l'Institut de Astrofísica de Canaries. Shelios, des del 1998, organitza expedicions científiques i fa una important tasca de difusió de la ciència.



El CATNIX amplia les connexions entre els seus commutadors

El passat mes de juliol es va ampliar d'1 a 2 Gbps l'enllaç entre els dos commutadors de la xarxa del Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX), instal·lats a cadascun dels seus emplaçaments, Campus Nord (CESCA-CN) i Telvent (CESCA-T).

La infraestructura de xarxa del CATNIX consisteix en dos commutadors Cisco Catalyst 4507R-E, a on es connecten els equips de les entitats que hi pertanyen. Mitjançant aquests dos commutadors, el CATNIX ofereix als seus membres la possibilitat de fer intercanvis privats, a banda de l'intercanvi comú del punt neutre. Aquest increment en la capacitat de connexió entre tots dos commutadors permet a les institucions connectades intercanviar un major volum de tràfic.

D'altra banda, l'operador global de telecomunicacions Jazztel ha ampliat la seva connexió al commutador del CATNIX d'1 a 2 Gbps. ■

El seguiment dels Jocs Olímpics de Londres 2012 a internet

L'Associació Europea de Punts Neutres Euro-IX i el Centre de Coordinació de xarxes IP europees (RIPE NCC) han col·laborat per analitzar el tràfic d'internet durant els Jocs Olímpics de Londres celebrats enguany, d'igual manera que ho van fer uns mesos abans amb l'Eurocopa. Han comptat de nou amb la col·laboració de 17 punts neutres europeus, entre ells, el català CATNIX, gestionat pel CESCA, des dels quals s'han recollit estadístiques del tràfic. La gran diferència amb l'anàlisi del tràfic durant l'Eurocopa és que en aquesta darrera competició els partits tenien lloc a hores establertes fora de l'horari laboral, mentre que en el cas dels Jocs, les competicions tenien lloc durant tot el dia, incloses les hores d'oficina.

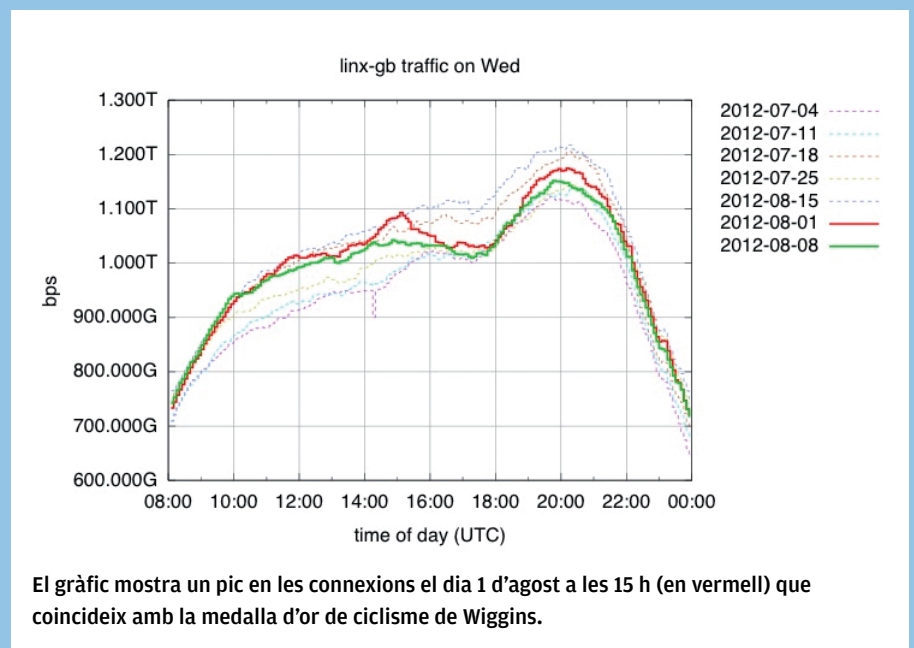


S'ha pogut observar com el tràfic del punt neutre LINX disminuïa amb l'inici de la cerimònia d'obertura dels Jocs Olímpics.

L'anàlisi del tràfic intercanviat ha permès veure com se seguïen amb especial interès determinades competicions o actes, és el cas de la cerimònia d'inauguració dels Jocs que va tenir lloc el 27 de juliol. Així, s'ha pogut observar el tràfic habitual a LINX, el punt d'intercanvi de tràfic de Londres, els divendres tres setmanes abans de la cerimònia. A continuació, s'ha analitzat el tràfic el dia de l'acte d'obertura dels Jocs i el tràfic dues setmanes després, per poder compararlos. En els resultats obtinguts s'ha comprovat clarament la caiguda del tràfic just coincidint amb l'inici de la cerimònia, al voltant de les 20 hores (UTC).

Atès que moltes de les competicions esportives dels Jocs van tenir lloc en horari laboral, en gràfics estudiats s'ha pogut observar un patró quasi oposat al que va tenir lloc a l'Eurocopa 2012, és a dir, en lloc de veure's una disminució del tràfic durant els horaris dels partits, es van observar pics de connexió en hores d'oficina coincidint amb els actes esportius més populars.

Un exemple s'ha pogut comprovar a través del tràfic de LINX el dia 1 d'agost a les 15 hores (UTC), quan es va viure un pic de connexió coincidint amb la medalla d'or de ciclisme per part de l'esportista anglès Bradley Wiggins. ■



Explorant la reactivitat dels ful·lerens i l'efecte del clúster metàl·lic encapsulat

Caps de projecte: **Miquel Solà i Marcel Swart**

L'any 1985 Kroto, Curl i Smalley van descobrir la molècula anomenada buckminsterful·lerè quan intentaven reproduir les condicions al laboratori de les estrelles gegants vermelles. El buckminsterful·lerè (C_{60}), també conegut com a futbol·lè, a conseqüència de la seva semblança amb la pilota de futbol, conté 60 àtoms de carboni i és el ful·lerè més abundant. Des de llavors, s'han descobert altres ful·lerens que es caracteritzen per tenir un nombre parell d'àtoms de carboni i per poder encapsular diferents àtoms o molècules a l'interior de la cavitat. Un bon exemple és l' $Sc_3N@C_{80}$ que presenta un clúster metàl·lic a l'interior de la caixa del C_{80} . La reactivitat d'aquesta molècula, i especialment com canvia quan hi ha diferents metalls (Y, Lu, Gd) a l'interior, és poc coneguda. En aquesta direcció, els professors Miquel Solà i Marcel Swart, de l'Institut de Química Computacional de la UdG i l'últim també d'ICREA, en col·laboració amb el Departament de Química Física i Inorgànica de la URV, liderat

pel professor Josep Maria Poblet, han realitzat càlculs teòrics per investigar la reactivitat de tots els enllaços no equivalents i les dues formes (isòmers) del C_{80} (I_h i D_{5h}) un cop s'han encapsulat diferents metalls a l'interior.

Després del descobriment del futbol·lè el 1985, es va ràpidament considerar la possibilitat d'encapsular àtoms o molècules a l'interior d'aquestes molècules. Inicialment van ser només àtoms, com per exemple gasos nobles o lantani, però aviat es va trobar que clústers metàl·lics com per exemple l' Sc_3N es podien incorporar a dins de la cavitat. De fet, el ful·lerè $Sc_3N@C_{80}$ és el tercer ful·lerè més abundant, després del C_{60} i C_{70} . En el cas del C_{80} , hi ha dos isòmers capaços d'encapsular el clúster Sc_3N , un amb simetria icosaèdrica (I_h) i un altre amb simetria D_{5h} . "Tots dos isòmers s'han detectat experimentalment, i tot i que se sap que l'isòmer D_{5h} de l' $Sc_3N@C_{80}$ és més reactiu que l' I_h , no hi ha gaire coneixement sobre quin n'és la principal causa i quina influèn-

cia té el clúster encapsulat a l'interior sobre la reactivitat de la molècula", comenta el professor Swart.

Per això, "l'any 2006 la Sílvia Osuna va començar la seva tesi doctoral sota la nostra direcció, per entendre els factors que determinen la reactivitat d'aquests ful·lerens", expliquen els professors Solà i Swart. Es van estudiar els ful·lerens $Sc_3N@C_{78}$, $Y_3N@C_{78}$, i $Ng_x@C_{60}$ ($Ng=He-Xe$, $x=1,2$), i la reactivitat superòxid dismutasa del tris-malonil C_{60} (C_3). "En alguns d'aquests estudis es va col·laborar amb el professor Poblet i el Dr. Rodríguez-Fortea de la URV", comenten.

Fa tres anys es va començar un projecte ambiciós, establir la reactivitat dels dos isòmers del C_{80} (I_h i D_{5h}) amb tres diferents clústers metàl·lics a l'interior (Sc_3N , Lu_3N , Gd_3N) en una cicloaddició Diels-Alder amb el *cis*-butadiè. Aquest fet implica estudiar l'addició a tots els enllaços no equivalents dels ful·lerens. En el cas de l'isòmer I_h , només hi ha dos tipus d'enllaços diferents, un entre un pentàgon i un hexàgon anomenat un enllaç [5,6], i un entre dos hexàgons anomenat enllaç [6,6], (vegeu Figura 1).

Per a l'isòmer D_{5h} hi ha nou enllaços no equivalents, quatre de tipus [5,6] i cinc de tipus [6,6]. Els quatre enllaços [5,6] són de tipus corannul·lènic (tipus D), i dels enllaços [6,6] un és de tipus piracil·lènic (tipus A), tres de tipus B, i un de tipus pirènic (tipus C). A part del gran nombre de diferents enllaços a estudiar, una de les principals dificultats és la lliure rotació del clúster metàl·lic a l'interior de la cavitat.

"Així doncs, per a cada enllaç no equivalent, s'han considerat vuit orientacions diferents del clúster metàl·lic respecte a l'enllaç en consideració. Per a tots aquests enllaços amb els tres clústers metàl·lics en vuit orientacions diferents es va optimitzar el producte i l'estat de transició (TS), i es van calcular les freqüències vibracionals dels TS, necessàries per comprovar que el TS tingui una, i només una, freqüència imaginària, i a més que aquesta correspongui amb la

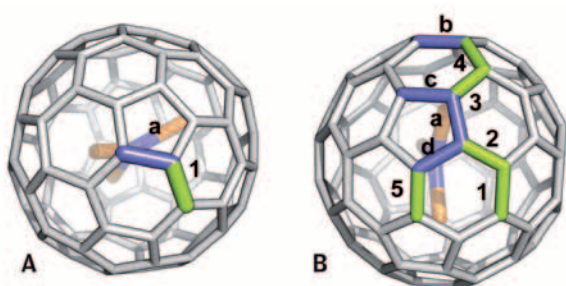


Figura 1. Representació dels dos isòmers del C_{80} : A (I_h) i B (D_{5h}). Els diferents enllaços no equivalents s'han marcat de color blau (els de tipus [5,6]) i verd (els de tipus [6,6]).

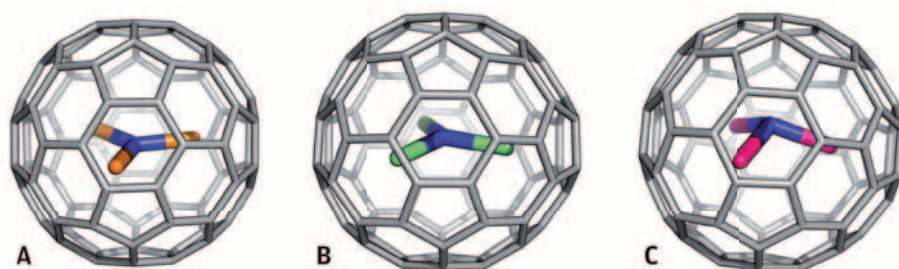


Figura 2. Representació dels ful·lerens: A ($Sc_3N@I_h-C_{80}$), B ($Lu_3N@I_h-C_{80}$) i C ($Gd_3N@I_h-C_{80}$).

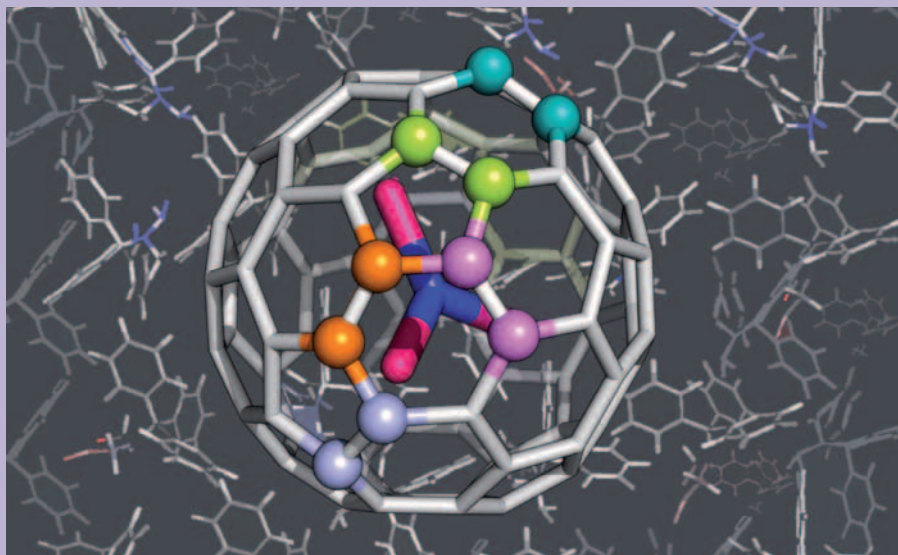


Figura 3. Representació del ful·lerè $\text{Sc}_3\text{N}@D_{5h}\text{-C}_{80}$ amb els enllaços no equivalents considerats, marcats usant diferents colors. També s'han inclòs múltiples 1,3-dipòls que reaccionaran amb l'enllaç més reactiu de l' $\text{Sc}_3\text{N}@D_{5h}\text{-C}_{80}$.

reacció Diels-Alder”, expliquen Solà i Swart. “Per dur a terme aquesta recerca es va haver d’usar la infraestructura de supercomputació del BSC-CNS i del CESCA. En el cas del CESCA, vam utilitzar el nou SGI Altix UV 1000, usant entre 32 i 96 CPU a la vegada, per poder córrer el programari ADF que està paral·lelitzat de manera molt eficient”, assenyala Swart.

“Com a resultat hem trobat¹ que l’isòmer I_h de l' $\text{Sc}_3\text{N}@C_{80}$ és lleugerament més reactiu que l’isòmer D_{5h} pel que fa a l’estabilitat dels productes. Però la situació canvia quan es consideren les barreres que cal sobrepassar per tal de produir-se la reacció Diels-Alder: en aquest cas és l’isòmer D_{5h} el que és més reactiu”, aclareix Swart. Això implica que quan es porta a terme la reacció sota control termodinàmic l’isòmer I_h és més reactiu, i sota control cinètic ho és l’isòmer D_{5h} . Un aspecte interessant a destacar és l’efecte del metall sobre la regioselectivitat i la reactivitat de la caixa. En primer lloc, gairebé totes les energies de reacció són més favorables quan s’encapsulen clústers grans a l’interior (Lu_3N , Gd_3N). A més, els enllaços que tenen un metall a prop queden clarament afectats: amb un escandi els enllaços estan desactivats, amb el luteci (és més gran que l’Sc) passen a ser més reactius i amb gadolini (molt més gran que l’Sc) són encara més reactius.

Encapsular un clúster metàl·lic a l’interior d’un ful·lerè provoca una disminució de la reactivitat, i de manera significativa: l’energia de reacció fa un descens d’11 kcal·mol⁻¹ (de -28 kcal·mol⁻¹ per C_{80} a -17 kcal·mol⁻¹ per $\text{Sc}_3\text{N}@C_{80}$) i la barrera

puja (de 3 kcal·mol⁻¹ cap a 13 kcal·mol⁻¹). Però la preferència pel tipus d’enllaç no queda afectada. Tant per a la caixa lliure com per a la caixa amb un clúster metàl·lic a l’interior, l’enllaç més reactiu correspon a un enllaç [5,6]. Aquesta preferència quasi no canvia amb el clúster, sempre és l’enllaç **b** (per l’isòmer D_{5h}) el que dona el producte més estable.

Conèixer la reactivitat dels ful·lerens és important per les seves aplicacions en biomedicina

Els resultats obtinguts en aquest projecte per a la reacció Diels-Alder amb l’isòmer I_h coincideixen perfectament amb les dades experimentals per a la reacció Diels-Alder i la de Prato, una reacció 1,3-dipolar. Totes dues reaccions són pericíclics i normalment la reactivitat i regioselectivitat són semblants. Per a l’isòmer D_{5h} , un estudi previ publicat per investigadors americans indicava un producte com a més estable que no coincidia amb els resultats obtinguts en aquest projecte. “Aquell estudi tractava de la reacció de Prato, i per això vam estudiar els productes de la reacció 1,3-dipolar, per veure si aquest seria el primer cas on la reacció Diels-Alder i 1,3-dipolar donaven una regioselectivitat diferent. Com era previst, la reacció de Prato té les mateixes preferències que la reacció Diels-Alder”, comenten Solà i Swart. A l’estudi

experimental, s’indicava que la reacció es produïa sobre un enllaç piracil·lènic però es basaven en dades de ressonància magnètica nuclear (RMN), desplaçaments químics, i no en l’estructura de raigs-X del producte. Aquestes dades indicaven la presència de dos productes, un dels quals donava un senyal simètric. Basant-se en aquest senyal simètric, l’estudi experimental va concloure que el producte més favorable corresponia a un enllaç simètric, el piracil·lènic”, afegeixen. “Junta-ment amb el professor Poblet hem calculat aquestes dades d’RMN pels productes obtinguts i hem trobat que només hi ha un candidat per donar aquest senyal. Aquest candidat correspon al producte més estable de l’estudi computacional, així doncs tant per l’energia de reacció com per les dades d’RMN es confirma quin és el producte més estable”, explica Swart. “Aquest descobriment remarca la limitació de predir l’estructura d’un producte basant-se només en la simetria d’un senyal d’RMN. El fet que hi hagi consistència entre les energies de reacció i les dades d’RMN és molt important i ha permès que el treball s’hagi publicat³ a la revista *Chemical Communications*”, comenta Swart.

“El coneixement de la reactivitat d’aquests ful·lerens i com queda modificada amb diferents metalls a l’interior és molt important per la seva possible aplicació en el camp de la biomedicina. Actualment, el gadolini s’usa (en una altra forma) com agent de contrast en ressonàncies magnètiques”, comenta Swart. “El procés es podria millorar disminuint la toxicitat d’aquests compostos, per exemple encapsulant-los a dins de caixes ful·lerèniques. En aquest sentit, els estudis en aquesta direcció són de gran importància per poder aplicar en un futur aquestes molècules en el camp de la medicina i biologia”, conclou. |

1. S. Osuna, R. Valencia, A. Rodríguez-Fortea, M. Swart, M. Solà i J.M. Poblet, “Full Exploration of the Diels-Alder Cycloaddition on Metallofullerenes $\text{M}_3\text{N}@C_{80}$ (M = Sc, Lu, Gd): D_{5h} vs I_h Isomer, and Influence of the Metal Cluster”, *Chem. Eur. J.* 2012, 18, 8944-8956 (VIP paper, destacat a l’*Angewandte Chemie* i amb portada).

2. S. Osuna, M. Swart i M. Solà. “The Diels-Alder Reaction on Endohedral $\text{Y}_3\text{N}@C_{70}$: The Importance of the Fullerene Strain Energy”, *J. Am. Chem. Soc.*, 2009, 131, 129-139.

3. S. Osuna, A. Rodríguez-Fortea, J. M. Poblet, M. Solà i M. Swart, “Product Formation in the Prato Reaction on $\text{Sc}_3\text{N}@D_{5h}\text{-C}_{80}$: Preference for [5,6]-Bonds, and not Pyracylenic Bonds”, *Chem. Commun.* 2012, 48, 2486-2488 (amb portada).



Narcís Fornés

SGI a Espanya 1990-2012

A l'inici de la dècada dels vuitanta, tres empreses americanes, Apollo Computer, a l'estat de Massachussets, i Sun Microsystems i Silicon Graphics (SGI), a Silicon Valley (Califòrnia), van ser pioneres en introduir una nova classe d'equips informàtics: les *workstations* o estacions de treball gràfiques. Els dissenys inicials d'aquestes estacions de treball tenien moltes tecnologies en comú. Per exemple, compartien el sistema operatiu, variants d'UNIX, tenien un microprocessador convencional com a motor, un Motorola 68000 i, finalment, usaven pantalles gràfiques de gran resolució.

Malgrat aquest inici parell, la seva trajectòria ha estat molt diferent. Apollo Computer va ser adquirida per Hewlett Packard l'any 1989 i va desaparèixer com a marca pròpia. Sun Microsystems va anar evolucionant fins a arribar a ser tot un gegant en el mercat de la informàtica empresarial per acabar essent comprada per Oracle el 2010. La història de Silicon Graphics és la que segueix a continuació.

SGI, inicialment anomenada Silicon Graphics Incorporated, va néixer l'any

SGI Origin 2000, del CEPBA (1997).



JORDI PARETO

1982 i vuit anys més tard va crear una sucursal subsidiària a Espanya amb seu a Madrid, essent el primer director en Víctor Canivell. L'any 1993 va iniciar una fase d'expansió amb l'obertura d'una segona seu a Barcelona, amb Joaquim Català al seu capdavant.

Durant la seva trajectòria, la base dels productes d'SGI ha anat evolucionat molt, passant de les estacions de treball d'ara fa vint anys a les infraestructures de supercomputació en els darrers anys. Aquesta evolució ha vingut forçada pels ordinadors personals que, amb targetes gràfiques potents i econòmiques, han anat guanyant pes en el mercat de les estacions de treball.

Des dels seus inicis, SGI ha comptat amb la confiança de nombroses empreses i institucions públiques d'arreu del món. Les seves estacions gràfiques han format part de grans empreses enginyeres del sector del transport, com ara Boeing, EADS, BMW, Nissan, Alstom, entre d'altres. A Espanya cal esmentar els milers d'estacions de treball venudes a SEAT i a les enginyeries que treballaven per a aquesta i també als seus proveïdors. Destaca també el primer simulador de vol que va fabricar l'empresa Ceselsa per a l'exèrcit de l'aire en què, a més de les estacions de treball Onyx, enginyers espanyols d'SGI



JORDI PARETO

Primer Power Challenge a Espanya, a la Universitat Jaume I (1995), avui dia al Museu del CESCA.

també van desenvolupar i proporcionar el programari.

Ja en el terreny de la supercomputació, a partir de la dècada dels noranta, els sistemes d'SGI han ajudat a grans empreses i institucions, com ara el Centre de Computació de Los Alamos, la NASA o Boeing, etc. De fet, aquest passat mes de setembre, el National Energy Technology Laboratory dels Estats Units ha adquirit un equip de 500 Tflops.

A nivell de l'Estat, cal fer esment dels equips venuts a l'antic Centre Europeu de Paral·lelisme de Barcelona (CEPBA), al CIEMAT, al Centro Nacional de Investigaciones Oncológicas, a Sener, al Donostia International Physics Center, a l'Institut de Recerca Biomèdica de Barcelona, al propi CESCA, als centres de càlcul de la Universitat de València i la Politècnica de València, a la Universidad de Granada, la Complutense, la de Alcalá, etc.

Les aportacions tecnològiques d'SGI han estat molt importants, des dels primers xips gràfics fins a l'arquitectura Non Uniform Memory Access (NUMA) implementada en HW, que és la base actual dels servidors de supercomputació

Origin, Altix i UV, sense oblidar les aportacions de programari que ha realitzat SGI a l'organització Open Source.

A més, des d'SGI s'han creat noves empreses amb un gran impacte mundial. Jim Clark, un dels fundadors d'SGI, va marxar per crear l'empresa pionera dels navegadors d'internet, Netscape. Enginyers d'SGI van posar en marxa Nvidia, l'empresa que va afegir als PC

Les aportacions tecnològiques d'SGI han estat molt importants, des dels primers xips gràfics fins a l'arquitectura NUMA, base actual dels seus supercomputadors

una important capacitat gràfica que va permetre que substituïssin les estacions de treball gràfiques de primera generació. La tecnologia gràfica d'SGI també està present als *smartphones* actuals.

L'evolució des de les estacions de treball gràfiques a la supercomputació ha estat obligada per circumstàncies de mercat i també econòmiques. La davallada progressiva de les vendes i, consegüentment, dels treballadors va fer-la arribar a una suspensió de pagaments,

el *chapter 11* de la legislació nord-americana, i a la posterior fusió amb Rackable Systems, que va decidir mantenir l'acrònim SGI per a la nova empresa resultant: Silicon Graphics International, l'any 2008. A nivell local, la subsidiària espanyola ha arribat a donar feina a 65 persones, 16 a l'oficina de Barcelona, amb una facturació màxima de 30,3 milions d'euros entre els anys 1999 i 2000.

Avui dia SGI segueix fabricant servidors d'arquitectura NUMA de memòria compartida, essent l'única empresa que ofereix servidors que escalen fins a desenes de milers de *cores*. De fet, la tendència dels fabricants de processadors a muntar molts *cores* en un simple processador comporta que en el mercat hi hagi una gran oferta de servidors de memòria compartida, amb arquitectura SMP (*symmetric multiprocessing*), escalent fins a 128 *cores* a uns preus molt competitius. Aquesta competitivitat està prenent lloc als servidors NUMA, que es troben a la part baixa del mercat.

Finalment, la dolenta situació econòmica mundial, especialment la dels països del sud d'Europa, amb perspectives d'inversió molt magres, està fent que moltes empreses multinacionals estiguin en procés de reducció de les seves inversions en aquests països. SGI no n'és una excepció i ha tancat les seves portes a Espanya. Desitgem que segueixi el seu camí i confiem en el seu retorn quan la recuperació econòmica esdevingui una realitat. ■

Les TIC, en CATALÀ!

Allotjament

El terme **allotjament** designa el servei que proporciona espai d'un servidor per a pàgines web, fitxers, programari, bases de dades o qualsevol altre tipus d'informació accessible a través d'Internet.

Aquesta és la proposta catalana aprovada recentment pel Consell Supervisor del TERMCAT com a alternativa a la forma anglesa **hosting**, amb l'especificació, quan escau, del tipus exacte de servei: **allotjament (de llocs) web**, **allotjament de correu electrònic**, **allotjament de bases de dades**, etc.

L'allotjament ha esdevingut un negoci lucratiu per a moltes empreses, especialment l'allotjament de llocs web, que quan s'ofereix gratuïtament sol tenir un espai i una capacitat de trànsit limitats, a banda d'incloure publicitat.

També s'ha aprovat, amb el vistiplau de la majoria d'especialistes consultats, el sintagma ja força utilitzat en textos especialitzats **allotjament de maquinari**, conegut en anglès amb les formes **housing** o **co-location** (amb les variants gràfiques **colocation** o **collocation**). L'allotjament de maquinari més habitual és l'allotjament de servidors.

Les empreses o organismes que ofereixen aquest tipus de serveis (en anglès, **hosts** o **hosters**) es denominen en català **allotjadors**.



SGI Altix 3000, instal·lat al CIEMAT entre 2003 i 2005.

“El repte futur de l’astrofísica és mantenir el nivell actual i guanyar terreny en tecnologia”

Entrevista a **Jordi Isern**, medalla Narcís Monturiol al mèrit científic i tecnològic

FOTOS: JORDI PARETO



El director de l’Institut d’Estudis Espacials de Catalunya (IEEC) i professor d’investigació del CSIC, Jordi Isern, porta tota la seva vida professional estudiant els fenòmens que es produeixen a l’espai i que ens donen informació sobre l’origen i les propietats de l’Univers. Enguany, ha estat guardonat amb la medalla Narcís Monturiol al mèrit científic i tecnològic. Aquesta distinció, instaurada per la Generalitat de Catalunya el 1982, vol reconèixer a persones que, com ell, han contribuït de forma destacada al desenvolupament de la ciència i la tecnologia a Catalunya.

El passat mes de juliol li van concedir una medalla Narcís Monturiol al mèrit científic i tecnològic. Què representa per a vostè aquest reconeixement?

D’entrada ha estat una sorpresa atès que no m’ho esperava, i després, un gran honor. Em sento molt agraït per aquest premi que reconeix la tasca de recerca duta a terme durant tots aquests anys al capdavant de l’IEEC. Aquest guardó distingeix els mèrits de persones que han contribuït a l’avenç de la ciència i la tecnologia catalanes i això m’omple de satisfacció.

Per què va decidir dedicar-se a la física i en concret a la física de l’espai?

La meua vocació em ve de relativament jove. En general les ciències naturals sempre m’havien agradat, havia estat oscil·lant entre la física, la biologia i la geologia, segons la influència del professor en els successius cursos a l’escola. Al final em vaig decantar per la física perquè em fascinava el fet que els fenòmens de la natura es poguessin descriure per mitjà d’una equació. Així, durant el batxillerat i recolzat pels professors, vaig encaminar-me cap al món de la física.

La motivació per l’astrofísica em va sorgir a partir del moment en què vaig llegir al diari el descobriment dels púlsars, els estels de neutrons que emeten radiacions periòdiques, impulsos de ra-

diació electromagnètica a intervals regulars induïts pel seu intens camp magnètic. Recordo que estava acabant el batxillerat i em preparava per començar la llicenciatura de física quan els mitjans de comunicació especulaven sobre l’origen d’aquest fenomen, quan encara no sabien que es tractava d’un púlsar. El senyal del primer púlsar descobert es va anomenar LGM-1, de l’anglès Little Green Men, ja que al principi es va creure que era un senyal emès per alguna forma de vida extraterrestre. Aquest fet em va resultar sorprenent. A més, em vaig dedicar a llegir novel·les de ciència-ficció de l’època que encara van fer créixer més la meua passió per l’astronomia. Vaig finalitzar els estudis de física i després vaig dedicar el doctorat a l’astrofísica.

La seva recerca s’ha centrat en l’origen dels elements lleugers, els mecanismes de col·lapse a estrelles de neutrons, les supernoves de tipus Ia, la cristallització de les estrelles nanes blanques i també l’evolució química de la galàxia. Podria explicar una mica aquestes línies d’investigació?

Bàsicament vaig començar la meua recerca intentant comprendre quin és l’origen dels elements químics. Un dels

gran reptes de l'astrofísica del segle passat, de l'astrofísica nuclear, ha estat entendre com s'han format els elements de la taula periòdica amb els seus isòtops. Ara sabem que aquests elements es formen gràcies als estels. Durant el seu cicle de vida, els estels obtenen energia de les reaccions nuclears, quan exploten, expulsen aquests elements cap al medi interestel·lar i s'incorporen a les noves generacions d'estels, de manera que la quantitat de residus nuclears a la galàxia augmenta amb el temps. El que es tractava d'entendre i encara s'està estudiant és conèixer com aquests elements han anat evolucionant des del principi de l'Univers fins a l'actualitat. Aquest fet ens aporta molta informació sobre les propietats dels estels i de la galàxia. La meua tesina se centrava en l'origen dels elements lleugers com el liti, el beril·li i el bor, que es destrueixen molt fàcilment i que encara no sabem ben bé com s'han format.

Una altra línia de recerca és l'estudi de les supernoves, aquells estels que moren i que a l'explotar enriqueixen la galàxia amb nous elements. Les supernoves de tipus Ia són estrelles nanes blanques, que tenen gairebé la massa del Sol però que s'han condensat fins a tenir un diàmetre com el de la Terra. Per això posseeixen una densitat enorme, són potencialment explosives i quan ho fan produeixen un dels fenòmens més violents de la galàxia, les supernoves de tipus Ia. Durant aquesta explosió s'allibera molt de ferro, gairebé més de la meitat de tot el ferro present a la galàxia l'han produït aquestes estrelles.

A més, aquestes supernoves es caracteritzen perquè són molt regulars, les seves explosions es comporten d'una manera molt determinada i gràcies a això es pot arribar a definir un estàndard. Sempre fan la mateixa lluminària i segueixen el mateix patró en explotar. Segons la seva lluminària, quan són més febles estan més lluny. Observant quant s'han afeblit aquestes supernoves podem saber a quina distància es troben i aquest fet és el que ha permès descobrir que l'Univers s'està expansionant de forma accelerada. Per aquest descobriment es va concedir el premi Nobel de Física de 2011 als astrònoms Saul Perlmutter, Brian P. Schmidt i Adam G. Riess.

Darrerament ha estat treballant sobre detecció de raigs gamma mitjançant el satèl·lit Integral. En què consisteix aquesta recerca?

El satèl·lit Integral és va llançar a l'espai ara fa 10 anys, el 2002, i enguany se celebra el congrés del 10è aniversari de la seva posada en òrbita. El ferro alliberat de les explosions de supernoves que esmentava abans no es produeix com a ferro en si mateix, sinó com a níquel radioactiu i es desintegra a cobalt i aquest cobalt a ferro. En aquests processos de desintegració s'emeten raigs gamma i aquesta radiació és la que estem intentant analitzar, per mitjà d'aquest satèl·lit que detecta la radiació gamma. Ara fa un any va explotar una supernova en una galàxia molt propera, la més propera que hi ha hagut en 20 anys, i estem treballant per intentar detectar aquesta radiació gamma per saber la quantitat de ferro alliberat en aquesta explosió. Es-

La societat comença a entendre que un país modern i econòmicament viable necessita tenir una recerca potent i capdavantera

brinar-ho ens permetria poder reconstruir quina és la història passada de l'Univers. Analitzant els productes resultants de l'explosió, entre ells aquest ferro, també podem definir quins són els mecanismes que la produeixen.

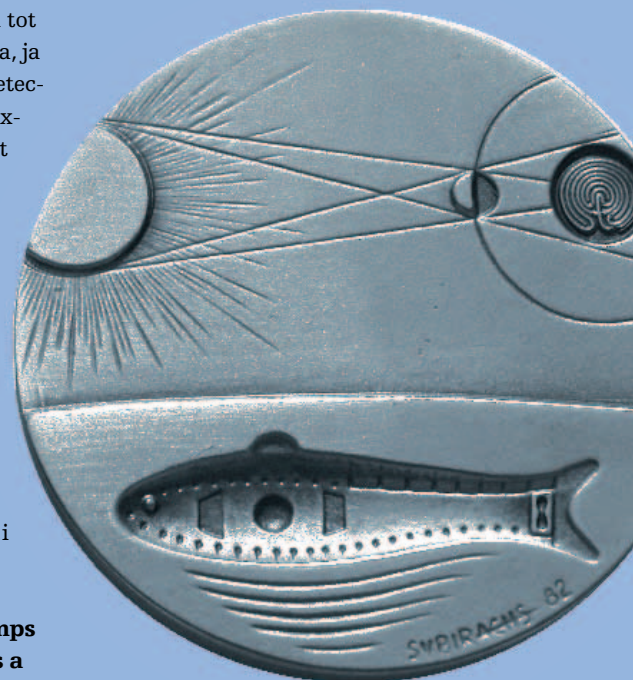
Aquestes observacions amb Integral formen part d'un projecte internacional que encapçalem nosaltres. Val a dir que lamentablement no hem detectat del tot l'explosió de la supernova esmentada, ja que estava a la frontera de la seva detecció. A més, en el moment de la seva explosió, el Sol estava davant i era molt actiu, emetia radiacions que afectaven el satèl·lit i aquest últim, en conseqüència, també començava a radiar impedint l'obtenció correcta de dades, era com, per exemple, intentar mirar els estels amb un telescopi ple en el seu interior de llums de Nadal. Es fa molt complicat. Tot i així, el satèl·lit ens ha proporcionat informació important. Portàvem 10 anys esperant que es produís aquest fenomen i no sempre la sort està del nostre costat.

Com ha evolucionat en aquest temps la recerca i la tecnologia espacials a Catalunya?

La recerca ha evolucionat molt. La Generalitat de Catalunya ha portat durant tots aquests anys una política de recerca encertada. Tot i els canvis de govern, aquesta política ha tingut continuïtat. La recerca és una tasca estratègica que necessita temps i estabilitat. Això ha permès que la recerca evolucionés molt i s'estabilitzés.

Recordo el 1973, quan vaig fer la meua tesina, en aquell temps els tres primers articles que es van publicar a *Astrophysical Journal*, la publicació de referència en el camp de l'astrofísica, van ser de científics catalans. Els tres primers articles sobre astrofísica publicats a *Nature* el 1980 els vam escriure nosaltres des de Barcelona, fins i tot ens van dedicar l'editorial. En aquell moment cap diari se'n va fer ressò, no ho van trobar interessant. Si això hagués passat avui dia, hauria tingut molta repercussió als mitjans.

Aquest canvi social en la percepció de la recerca ha estat molt positiu. La societat comença a entendre que un país modern i econòmicament viable necessita tenir una recerca potent i capdavantera. Però per arribar-hi es necessiten recursos i ara, per desgràcia, els tenim amenaçats. A més, aquesta manca de recursos pot malmetre aquesta sensibilitat social que hem aconseguit al llarg del temps. Aquest és el gran problema i el gran repte. Haurem de continuar al capdavant de la recerca en astrofísica amb menys recursos i ho haurem de fer com puguem.





Jordi Isern i Vilaboy

Jordi Isern és doctor en Física per la Universitat de Barcelona (1978) i actualment és professor d'investigació del CSIC i director fundador de l'IEEC. Ha treballat sobre l'origen dels elements lleugers, els mecanismes de col·lapse a estrelles de neutrons, les supernoves de tipus Ia, la cristallització de les estrelles nanes blanques i també sobre l'evolució química de la galàxia. Darrerament ha estat treballant sobre detecció de raigs gamma mitjançant el satèl·lit Integral. Aquests estudis han donat lloc a més de 300 publica-

cions i 9 tesis doctorals.

És membre de la Societat Catalana de Física i de les societats astronòmiques espanyola i europea. També és membre de la Reial Acadèmia de Doctors de Catalunya. Ha estat coeditor de la revista *Europhysics Letters* des de l'any 1992 fins al 1997 i president de l'Associació de Campus Afiiliats de l'International Space University així com membre del Board of Trustees d'aquesta organització. També ha presidit la Comissió Científica de l'Observatori de Calar Alto.

També dirigeix l'Institut de Ciències de l'Espai (ICE), institut propi del CSIC i una de les primeres unitats de l'IEEC. Quina tasca porta a terme l'ICE dins l'IEEC?

L'IEEC és una confederació d'instituts, una fundació privada formada per quatre instituts, un de la UB, un de la UPC, un de la UAB i un del CSIC. L'IEEC està governat pels quatre directors i en aquest moment jo sóc el que presideix aquest directori. L'ICE és un institut creat el 1999, que l'any 2008 es van convertir en un centre propi del CSIC, del qual també sóc el director. Així, per exemple, en el cas del projecte del satèl·lit Integral, personal de l'ICE i també de la UPC en formen part, juntament amb d'altres instituts francesos, alemanys... L'IEEC actua com a un paraigüa que permet que investigadors de quatre institucions diferents puguin treballar conjuntament d'una manera administrativament més còmode.

L'IEEC està connectat a l'Anella Científica des de la seva posada en marxa. A més, també ha usat la infraestructura de supercomputació del CESCA en diversos projectes. Com valora aquesta col·laboració?

La valoro molt positivament i n'estic molt satisfet. Des de la fundació de l'IEEC, la col·laboració amb el CESCA ha estat molt estreta, fins i tot físicament, ja que tenim les seues socials al mateix edifici i fins i tot hem compartit instal·lacions per exemple quan vam fer un màster en teledetecció. El CESCA sempre ens ha proporcionat la connexió a la xarxa a través de l'Anella Científica, així

com el recolzament necessari. També hem usat la infraestructura de supercomputació per fer simulacions i analitzar les dades obtingudes dels nostres projectes. Vam començar a calcular en un Cray X-MP/14, basat en processadors vectorials amb una potència de càlcul de 0,24 Gflop/s. Tenia una sola

Més de la meitat de tot el ferro present a la galàxia l'han produït les estrelles nanes blanques

CPU a 167 MHz amb 32 MB de memòria principal. Una de les primeres simulacions que vaig realitzar va ser agafar una estrella i simular-la numèricament, provocar la seva explosió i seguir-la per veure totes les reaccions termonuclears que es produïen, com s'escampava. Per a això era necessari disposar de molta potència de càlcul en aquella època.

Quan vaig començar a fer recerca al Departament d'Astronomia de la UB calculàvem les funcions trigonomètriques amb una màquina mecànica, eren calculadores que anaven amb rodetes; després vam tenir els primers HP. Vaig realitzar els càlculs de la meua tesina en un IBM amb 15 KB de memòria. Els portava al meu paquet de targetes perforades i al cap d'uns quants dies em tornaven els resultats. Des de llavors la tecnologia ha evolucionat d'una manera impressionant. Amb els supercomputadors del CESCA ens connectem de forma re-

mota i realitzem càlculs molt potents en poc temps.

Quins reptes creu que ha d'assolir la recerca en astrofísica en els propers anys?

L'astrofísica a Catalunya té una llarga tradició que ve de principis del segle XX, quan es va construir l'Observatori Fabra, un dels més potents d'Europa després de la seva inauguració. Hi havia un nivell extremadament bo. Des de l'Observatori es va descobrir l'existència d'una atmosfera a Tità. La guerra civil i la manca de recursos van fer que l'astronomia no anés endavant. Després, a la fi dels anys 70, la recerca es va reactivar i ara l'astrofísica catalana torna a estar al capdavant. Actualment, l'IEEC està entre els millors instituts del món. Per exemple, sobre 2.000 instituts europeus, en alguns paràmetres, ha sortit valorat com el 8è millor. Per tant, està molt ben situat.

El que hem de fer és continuar així en el futur. L'astrofísica i en general les ciències de l'espai tenen molta repercussió tecnològica i crec que el que hem de fer és guanyar terreny en tecnologia, sense perdre posicions en la part teòrica, d'observacions i simulació. Això és un repte en què ja hem començat a treballar. Per tant, l'astrofísica ha de consolidar els aspectes científics i fer-los créixer per utilitzar-los com a inspiradors de noves tecnologies amb conseqüències econòmiques i industrials. Fer-ho demana molts més recursos i inversió per part dels governs, dels quals esperem poder-los obtenir en un futur pròxim. |

ENSEÑANZA DE LAS CIENCIAS DE LA TIERRA, 5a REVISTA MÉS CONSULTADA A RACO EL 2011

Internet com a font d'informació sobre riscos naturals

Definir i classificar les fonts d'informació disponibles a la xarxa sobre els riscos naturals és l'objectiu d'“Internet y los riesgos naturales: fuente de recursos para la docencia e investigación”, l'article d'Emilio Martínez i Jorge Olcina, el més consultat de la revista *Enseñanza de las Ciencias de la Tierra* al repositori RACO el 2011.



La xarxa ens aporta gran quantitat d'informació, tant per a la docència com per a la recerca, sobre els riscos naturals. Aquest fet és conseqüència de l'interès de la població per la perillositat natural durant les darreres dues dècades. Per això han proliferat multitud de pàgines web amb aquesta temàtica. Com el volum d'informació disponible és tan gran, es fa necessari sondejar-la. Així, l'article ha estat el resultat de la revisió d'aquesta informació per obtenir la millor, més rigorosa i fiable, i que a més tingui caràcter didàctic i transcendència científica. Sobre aquesta base, l'article ofereix una sèrie d'adreces web d'utilitat sobre els riscos naturals per a la docència i la recerca.

L'article ha estat publicat l'any 2009 al número 3, volum 17, d'*Enseñanza de las Ciencias de la Tierra*. Aquesta revista, publicada per l'Asociación Española para la Enseñanza de las Ciencias de la Tierra, amb seu a la Universitat de Girona (UdG), data de l'any 1993 i n'apareixen tres números cada any. El seu contingut se centra en el camp de l'ensenyament de la geologia i les ciències de la Terra en tots els nivells educatius, des de l'educació primària a la universitat.

La UdG és qui introdueix aquesta revista a RACO.

L'estructura de presentació dels recursos presents a internet sobre riscos naturals en aquest article s'ha realitzat partint dels més generals cap als més particulars. És a dir, l'article comença presentant pàgines web que ofereixen informació bàsica sobre desastres i a continuació es posa l'atenció en les pàgines que se centren amb detall en l'ampli ventall de perills naturals presents al territori. Per últim, es detalla una relació dels organismes internacionals o nacionals que s'encarreguen de la protecció ciutadana i la gestió d'emergències.

Pel que fa a la informació de caràcter global sobre desastres naturals, en general l'article aconsella la utilitat de les bases de dades estadístiques presents a la xarxa per a la recerca que mantenen companyies asseguradores com Swiss Re i Munich Re, del sector d'assegurances per a perills naturals.

Com a informació detallada sobre esdeveniments naturals extraordinaris, molt útils per a la docència, destaca la pàgina web de l'Oficina per a la Coordinació d'Assumptes Humanitaris de les Nacions Unides, pàgines web d'organismes



Universitat de Girona

“Internet y los riesgos naturales: fuente de recursos para la docencia e investigación”

• Autors: **Emilio Martínez i Jorge Olcina**

• Publicació:

Enseñanza de las Ciencias de la Tierra

• Consultes a RACO: **0,75%**

mes nacionals encarregats del control i seguiment de fenòmens naturals, organitzacions culturals internacionals, departaments governamentals dedicats al medi ambient, entre d'altres. A l'Estat, el web de protecció civil ofereix àmplia informació sobre riscos naturals o revistes digitals com *Scripta Nova*, de la UB.

Els riscos naturals de causa atmosfèrica, climàtica o geoclimàtica són els de més interès i els més nombrosos a la xarxa. Destaquen el web de la missió planeta Terra de la NASA, el de l'Organització Meteorològica Mundial i l'Institut Nacional de Meteorologia, entre d'altres.

El tema de les inundacions disposa de webs d'utilitat com ara el de l'Oficina Internacional de l'Aigua, el del Centre de Tempestes de la Guàrdia Costera dels EUA o la base de dades d'oceànics del mediterrani. Els ciclons tropicals també són mencionats, en tractar-se d'un fenomen atmosfèric molt espectacular.

L'article ofereix una sèrie d'adreces web d'utilitat sobre els riscos naturals per a la docència i la recerca

Destaca el web de la Universitat de Wisconsin i el d'HurricaneZone. Igual importància tenen els tornados o les allaus de neu, amb el web del Centre d'Allaus.

D'altra banda també són abundants les pàgines dedicades al canvi climàtic o sobre incendis i la gestió d'emergències. El coneixement exhaustiu de la perillositat natural ha de contribuir a la millora de la planificació d'emergències. Sobre aquest tema destaca el web de l'Estratègia Internacional per a la Reducció de Desastres, el de la Direcció General de Protecció Civil a l'Estat, el Comitè Internacional de la Creu Roja, Intermon-Oxfam o Metges sense Fronteres. |

L'avaluació en l'àrea d'educació visual i plàstica a l'ESO

La evaluación en el área de educación visual y plástica en la educación secundaria obligatoria és el títol de la tesi de Juan José Morales, dirigida per José Tejada i presentada en el Departament de Pedagogia Aplicada de la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB), la més consultada del repositori Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) en el període 2001-11, d'entre totes les que té disponibles la UAB per a la seva consulta.

UAB

Universitat Autònoma de Barcelona

“La evaluación en el área de educación visual y plástica en la educación secundaria obligatoria”

- Autor de la tesi: **Juan José Morales**
- Director de la tesi: **José Tejada**
- Consultes a TDX: **1,74%**



tén mostrar com l'alumne d'ESO no ha estat educat o és educat per a ser part activa del procés de percepció o de recepció de l'art, igual que del procés de producció”, explica l'autor. Això situa l'àrea d'educació visual i plàstica en una zona semimarginal, no té la importància que mereix, “dóna la impressió que amb quatre dibuixos més o menys ben fets ja n'hi ha prou per aprovar, no serveix per res més als alumnes que per passar l'estona”, afegeix. A aquest fet se suma molts cops la manca de recursos que han d'aportar els alumnes que no porten a classe el material necessari o l'escàs condicionament de les aules d'aquesta disciplina.

Segons l'autor, “l'assignatura d'educació visual i plàstica no es considera una assignatura fonamental i sembla que l'opinió dels professors que l'imparteixen no compta tant com les d'altres assignatures considerades fonamentals, com ara les matemàtiques”. Per aquest motiu, la tesi avalua el currículum de l'ESO en l'àrea d'educació visual i plàstica i la seves accions formatives i pretén servir com a guia i ajuda als responsables de l'aplicació de l'ESO en la realització de les seves pròpies avaluacions.

Aquest treball de recerca es divideix en tres grans parts. La primera se centra en el marc teòric. S'analitza l'educació artística i les seves tendències per seguidament relacionar-la amb l'educació i la creativitat. També s'estudia la disciplinació de l'educació artística centrant-se en el model pedagògic de l'art com a llenguatge.

Després de l'anàlisi de les diferents

Per al rector de la UAB, Ferran Sancho, “el TDX ha esdevingut una eina molt eficaç per posar a l'abast de tothom, i d'una manera especial de la comunitat científica, els resultats de la recerca que es fa a les universitats. L'accés lliure i les eines de cerca que incorpora el servidor contribueixen amb tota seguretat a millorar l'impacte de les tesis dels nostres investigadors i faciliten, al mateix temps, el desenvolupament de nous projectes d'investigació. Sens dubte, aquest repositori representa un avenç important en l'ús de la xarxa per impulsar la transferència de coneixement a la societat i dota les universitats d'una plataforma per donar visibilitat a la seva tasca investigadora. El nombre creixent de tesis en línia i de consultes així ho corroboren”.

La tesi parteix de la necessitat de situar l'educació artística en el lloc que es mereix en una societat com l'actual on la imatge ho envaeix tot. “L'àmbit artístic es presenta de difícil tractament en el món de l'educació. Es redueixen els continguts i no s'arriben a aconseguir prou objectius en el seu coneixement”, comenta l'autor.

“L'educació artística en els currículums escolars es basa en competències individuals sense un conjunt de teories consistents que recolzin l'actuació didàctica. A l'Estat, el problema de l'educació artística s'ha donat durant tot el segle XX”, afegeix.

L'objectiu de la tesi és recolzar el desenvolupament de les arts en la pràctica docent, igual que sobre els conceptes dels seus aspectes bàsics. “Es pre-

teories en educació artística, es mostra la situació d'aquesta a l'ESO, en especial en l'àrea d'educació visual i plàstica sota el referent normatiu que assenyala la LOGSE. Aquesta anàlisi se centra a Catalunya. A continuació s'estableix una anàlisi del concepte d'avaluació, la seva història i les seves dimensions per després assenyalar les idees sobre l'avaluació que indica el marc normatiu de la LOGSE i com s'aplica a Catalunya.

La tesi vol recolzar el desenvolupament de les arts en la pràctica docent

Per acabar el primer bloc es mostren idees sobre l'avaluació en educació artística. Quins són els dominis de coneixement artístic, què i a qui es pot avaluar, quins són els objectius de les valoracions artístiques, amb què es pot avaluar l'educació artística i quines són les tècniques de valoració. També s'anàlitzava l'avaluació en l'educació artística seguint les directrius de la LOGSE.

El segon bloc descriu les variables implicades en l'estudi empíric de la tesi: la metodologia utilitzada, la població i la mostra seleccionada, els instruments aplicats, així com les actuacions realitzades. A continuació, s'anàlitzaven els resultats obtinguts per les dades dels diferents qüestionaris aplicats a professors i alumnes. A aquestes dades se sumen les facilitades per les entrevistes i l'anàlisi de diferents documents junt amb les idees subministrades per els diferents corrents en matèria d'educació artística.

El darrer bloc apunta les conclusions de l'anàlisi anterior que s'agrupen sobre el desenvolupament curricular de l'educació visual i plàstica a l'ESO, en funció dels continguts, estratègies i recursos. També es mostren conclusions sobre l'avaluació i, per últim, sobre el professorat.

Per acabar, la tesi ofereix una proposta per a l'avaluació en l'àrea artística, al mateix temps que es donen unes bases per a la realització de l'avaluació en l'àrea i es mostren estratègies alternatives.

Com a conclusions s'extreu que hi ha una manca de crèdits dedicats a l'educació visual i plàstica en l'ESO, ja

que està determinada en dos crèdits per cycle, un total de quatre per a tota l'etapa, més els variables que cada centre educatiu vulgui afegir. També són molt amplis els continguts, massa objectius educatius a assolir en poc temps i, molts cops, pocs mitjans per assolir-los. "També s'ha detectat un major interès per part de l'alumnat en les arts plàstiques i visuals", comenta l'autor. Tot i que hi ha dificultat per atendre a la diversitat dels alumnes que poden formar part de les classes, ja que molts cops els centres ofereixen aquesta assignatura en crèdits variables, sembla ser l'espai ideal per a la integració d'alumnes problemàtics.

Quan als continguts, s'arriba a la conclusió que hi ha una gran satisfacció amb el que es realitza en educació visual i plàstica, tot i que els alumnes no creuen que es pugui millorar el que aprenen, es conformen sense demanar més que ampliar les hores de docència. També hi ha absència d'una actitud crítica vers els continguts curriculars per part dels alumnes i també per part dels professors, que no els qüestionen.

Pel que fa a les estratègies educatives, hi ha una falta de motivació per part dels alumnes vers el coneixement del patrimoni artístic social i cultural. També es mostra escàs desenvolupament de la creativitat i del sentit crític.

Es pretén avaluar el currículum de l'ESO en l'àrea d'educació visual i plàstica

Els recursos i mitjans es veuen limitats, els materials i les tècniques plàstiques són escasses i en moltes ocasions les condicions són precàries.

Predomina l'examen com a forma d'avaluació, els alumnes veuen l'avaluació com a un procés extern on no hi participen i l'agent avaluador és únicament el professor. El suspens en educació visual i plàstica no sembla preocupant per als alumnes, ni per als professors d'altres àrees, ni per als pares.

A la tesi també es conclou que cal que els professors motivin i impliquin els alumnes sobretot durant el primer curs i que és necessari dotar-los de majors elements simbòlics i d'interpretació de les obres d'art. |



Juan José Morales Artero

Doctor en Pedagogia per la UAB. Té un màster en Innovació i Sistema Educatiu, també per la UAB, un màster en Disseny d'Aplicacions Multimèdia per la UPC i un altre màster en Administració de Recursos Humans per la Universidad Regiomontana (Mèxic).

És cap de recerca per a l'Ocupabilitat i Competitivitat Permanent de les Professions de la Universidad Regiomontana, així com professor investigador de la llicenciatura en Educació de la mateixa universitat, on ha col·laborat també en el disseny curricular del màster virtual en Direcció i Gestió d'Institucions Educatives.

Les seves àrees de recerca han estat la integració de grups especials al món laboral, tecnologies en les professions, desenvolupament de petites i mitjanes empreses, avaluació institucional i avaluació de competències en l'àrea d'educació.

Com a professor ha impartit docència sobre programes per a emprenedors, d'educació artística i d'avaluació institucional. Ha estat coordinador regional de l'Observatori Mexicano de la Innovació en la Educació Superior (2006-07).

Actualment és membre fundador i part de la taula directiva de la Red de Investigación e Innovación en Educación del Noreste de México (REDIEN).

Una aplicació per generar plans de seguretat i salut d'una obra

El treball de final de carrera d'Eduard Fumàs i Tomàs Modroño de la UdL "Disseny i implementació d'una aplicació que genera informes de Plans de Seguretat i Salut d'una obra aplicant l'enginyeria de la usabilitat" ha estat el tercer document de la UdL més consultat al Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT), en el període 2005-2011.

Aquest treball de final de carrera, afegit a RECERCAT l'any 2008, pertany a l'Escola Politècnica Superior de la Universitat de Lleida (UdL). La idea del projecte va sorgir de l'empresa Laboral Risk, client d'una companyia lleidatana d'enginyeria anomenada Ingreso S.L. Els tècnics de Laboral Risk, empresa especialitzada en prevenció de riscos laborals, necessitaven actualitzar el programa que usaven per crear informes detallats de plans de seguretat i salut d'una obra.

Així, els autors, Fumàs i Modroño, van decidir convertir aquest projecte en el seu treball de final de carrera elaborant una aplicació web, anomenada SegurPlan, que donés resposta a les demandes de Laboral Risk i que usés els

critèris de l'enginyeria d'usabilitat per ajustar-se encara més a les necessitats dels usuaris reals.

El treball s'estructura en cinc capítols amb cinc annexos complementaris. El primer capítol contextualitza el marc del projecte i informació sobre què són els plans de seguretat i salut, el temps de dedicació i el pressupost. El segon descriu el conjunt d'eines i tecnologies emprades per desenvolupar l'eina SegurPlan.

A continuació es tracta el model de procés de l'enginyeria de la usabilitat i l'accessibilitat. El quart capítol especifica el desenvolupament de l'aplicació web SegurPlan: disseny conceptual, gràfic, implementació, llançament i avaluació. Per últim, el darrer capítol conté

una valoració dels resultats i reflexions finals després de realitzar el projecte.

En conclusió, l'aplicació SegurPan s'ha desenvolupat pensant en l'usuari final, tot i que no s'ha pogut avaluar aplicant els criteris de l'enginyeria de la usabilitat i accessibilitat. Per crear l'aplicació s'han usat els llenguatges de programació HTML, PHP, CSS i MySQL, i s'ha aprofundit en el coneixement d'altres tecnologies com l'AJAX, JavaScript i els algorismes d'encriptació.

SegurPlan és una eina que facilita a les empreses especialitzades la realització de plans de seguretat i salut

A més, SegurPlan no és un projecte tancat ja que en tot moment ofereix la possibilitat d'afegir requisits i funcionalitats que els clients desitgin. Per això, el projecte és adaptable a diferents tipus de clients i situacions.

Com a tasques a millorar de l'aplicació hi figura la necessitat d'avaluar-lo amb els usuaris que l'han d'utilitzar per mitjà de sessions personalitzades en un laboratori d'usabilitat realitzant tests d'usuari amb maquinari i programari com ara Morae o altres mètodes d'inspecció com l'avaluació heurística, per obtenir així informes directes sobre el sistema dels propis usuaris.

Pel que fa a l'accessibilitat, cal millorar-la i sotmetre l'aplicació a validadors o tests d'accessibilitat que comproven els nivells de conformitat que pot tenir una pàgina web segons els punts de verificació, per exemple l'eina TAW. |



Universitat de Lleida

"Disseny i implementació d'una aplicació que genera informes de Plans de Seguretat i Salut d'una obra aplicant l'enginyeria de la usabilitat"

• Autors: **Eduard Fumàs i**

Tomàs Modroño

• Consultes a RECERCAT: **8,64%**

Portal d'entrada a l'aplicació web SegurPlan.



Tines del celler cooperatiu de Falset, recolzades sobre voltes tradicionals per aïllar-les del sòl.

CALAIX recull imatges i vídeos de cellers modernistes catalans

El repositori digital dissenyat per emmagatzemar, preservar i facilitar l'accés a materials digitals del Departament de Cultura, CALAIX, inclou un seguit de col·leccions d'imatges i vídeos que mostren cellers modernistes catalans.

Aquestes col·leccions formen part del programa "Cellers Cooperatius", signat el gener de 2009 entre el Departament de Cultura i "la Caixa" per rehabilitar nou cellers cooperatius modernistes catalans. Dins d'aquest programa es va inaugurar el mes de juliol una exposició al CaixaForum de Barcelona, "Cellers: cooperativisme + modernisme, 1918-1923". Part del material exposat es pot veure a CALAIX. Iuris, empresa de serveis de comunicació digital a internet, ha desenvolupat el web vinculat al programa i ha elaborat alguns dels continguts emmagatzemats al repositori.

Entre el material de CALAIX hi ha les col·leccions del Celler Cooperatiu de Falset, del Celler Cooperatiu de baix o dels rics de l'Espluga de Francolí, del Celler

Cooperatiu de Rocafort de Queralt, del Celler Cooperatiu Pinell de Brai i del Celler Cooperatiu de Gandesa. També s'hi inclouen vídeos sobre l'arquitectura dels cellers i el modernisme i màrqueting.

El CESCA ha desenvolupat la infraestructura tecnològica d'aquest repositori, i emmagatzema als seus servidors part del material audiovisual i fotogràfic vinculat a aquest projecte. |

El TDX exporta metadades en format MARC21

A partir d'ara, el repositori Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) també exporta les metadades que es troben en format MARC21. Aquest format és un estàndard de catalogació que pot ser reconegut per un ordinador i s'usa per a l'intercanvi d'informació catalogràfica, és a dir, de registres bibliogràfics.

Gràcies a això, les tesis introduïdes al TDX s'importen de forma automàtica des del Catàleg Col·lectiu de les Universitats de Catalunya (CCUC), gestionat pel CBUC. Abans d'aquesta millora, les càrregues de les tesis al CCUC es feien de forma manual. Per poder carregar-les, s'ha adaptat el format MARC21 a les

pautes del CCUC i s'ha desenvolupat un programa que permet recollir-les i afegir-les a Millennium, el programari que usa el CCUC. Amb aquesta integració, les tesis disponibles al TDX estan també accessibles des del CCUC, afavorint així la seva difusió.

El CCUC és un catàleg amb més de 4 milions de títols que dona accés a 9 milions de documents de més de 170 biblioteques i incorpora els fons de les biblioteques del CBUC i d'altres biblioteques associades. |

Una institució i 10 revistes noves, a RACO

L'Associació Centre Cultural del Collsacabra s'ha incorporat el passat mes de juliol al repositori Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO) amb la seva publicació *Els Cingles de Collsacabra*. Es tracta d'un butlletí que recull els valors culturals i socials d'aquestes terres, una subcomarca natural repartida entre Osona, La Garrotxa i La Selva.

A més d'aquesta revista, nou més s'hi han incorporat al llarg del juliol, sis d'elles pertanyents a la Universitat de Barcelona, és el cas de *l'Anuari de filologia. Antiqua et Mediaevalia*, *l'Anuari de filologia. Estudis de lingüística*, *l'Anuari de filologia. Literatures contemporànies*, *l'Anuari de filologia. Llengües i literatures modernes*, *Crítica penal y poder* i *Revista de educación y derecho*. D'altra banda, la Universitat Ramon Llull hi ha afegit dues revistes més: *Bioètica & debat* i *Lletres de Filosofia i Humanitats*. Finalment, la Universitat Politècnica de Catalunya ha incorporat la revista *Journal of accessibility and design for all*.

Amb aquestes darreres incorporacions, RACO disposa de 376 revistes per a la seva consulta. |



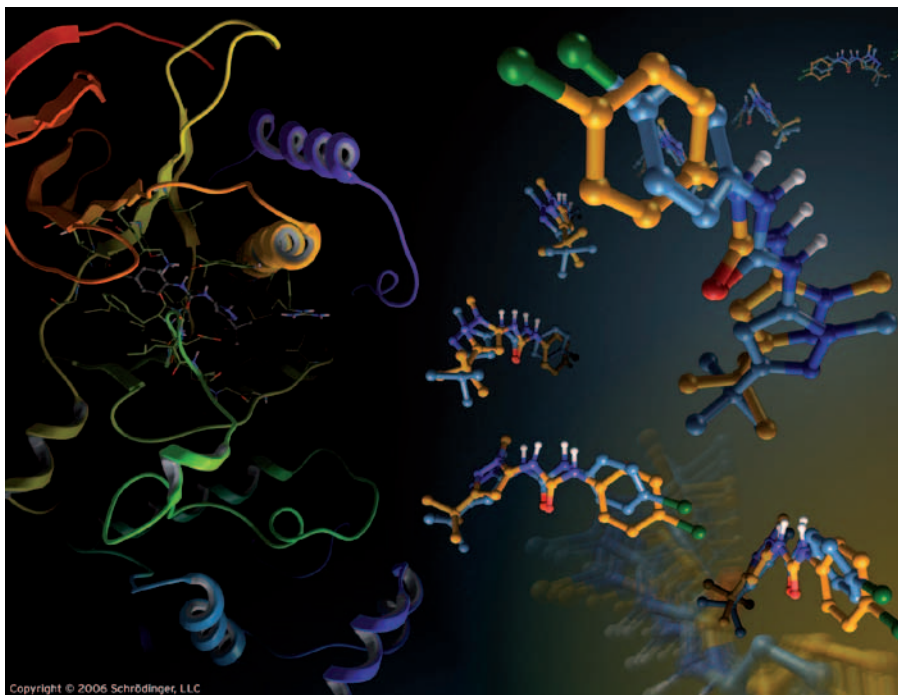
Instal·lat l'Schrödinger 2012

La nova revisió 1 del programari Schrödinger 2012 ha quedat instal·lada a l'SGI Altix UV 1000 (*pirineus*) i al Bull Nova-Scale (*prades*) als nodes de l'SDF. Es tracta d'un paquet de programes de modelització molecular que proporciona eines computacionals per a la recerca en disseny, selecció i optimització de nous fàrmacs. La revisió ha comportat l'actualització i millora del programari. Des de Schrödinger recomanen als usuaris que descarreguin aquesta nova versió.

Entre les novetats destaca, dins del programari BioLuminate 1.0.025, un nou *docking* proteïna-proteïna; en relació a la interfície gràfica Maestro, la correcció d'un error vinculat als treballs de *docking* Glide; mentre que pel que fa a Desmond 3.1.025, la solució de problemes relacionats amb el llançament de treballs amb el sistema de cues. ■

GPAW, nou programari disponible

S'ha instal·lat el programari GPAW, concretament la seva versió 0.7.2, a l'Altix UV 1000 (*pirineus*). GPAW és un programari de codi obert Python que usa la teoria del funcional de la densitat (DFT), basat en el mètode *Projector-Augmented Wave* (PAW) i en l'entorn de simulació atòmica (ASE). Aquest programari es pot utilitzar per simulacions atòmiques específiques en física, química i nanociència.



Schrödinger compta amb una interfície gràfica anomenada Maestro.

Gràcies a la descripció d'espai real utilitzada per a les qualitats físiques es poden fer servir unes condicions de contorn molt flexibles, es proporciona una convergència sistemàtica de les propietats i una implementació paral·lela molt eficient. ■

Actualitzades les versions d'Orca, Vasp i Open Babel

Ja estan disponibles les versions dels programaris de química computacional Orca i Vasp, tots dos instal·lats a l'SGI Altix UV 1000 (*pirineus*) i al Bull Nova-Scale (*prades*), a més, aquest últim tam-

bé disposa de la nova versió d'Open Babel, la 2.3.1, que fins ara només estava a *pirineus*.

La nova versió d'Orca és la 2.9.1. Es tracta d'un programari lliure i flexible, que posa especial èmfasi en les propietats espectroscòpiques de les molècules de capes obertes i disposa d'una àmplia varietat d'estàndards de mètodes químics. Vasp és un paquet de mecànica quàntica per a simulacions de dinàmica molecular a nivell *ab initio*, utilitzant pseudopotencials o el mètode Projector-Augmented Wave (PAW) i una base d'ones planes. La nova versió disponible és la 5.2.12. Per últim, Open Babel és un programari de codi obert usat principalment per convertir arxius de formats químics, i pertany a la categoria de quimicoinformàtica. ■

Si ets un investigador acadèmic,
ja pots demanar hores de càlcul
per al teu projecte

Informació: www.cesca.cat/hores

Tecnologies en xarxa per millorar l'actuació dels esportistes



La tecnologia juga un paper molt important al Centre d'Alt Rendiment Esportiu (CAR) de Sant Cugat, com a part de les preparacions per als jocs olímpics. Tal com comenta Josep Escoda, cap de Tecnologia i Informàtica, "nosaltres volem atletes i entrenadors que es beneficiïn no només d'un entorn esportiu avançat sinó també de les millors pràctiques i que interactuïn amb altres esportistes. La idea és canviar també la manera en què els esportistes i els formadors entrenen, per tal d'expandir el concepte de la llibertat esportiva". I amb aquesta idea va ser creat el 2011 un nou mòdul al Centre, on la tecnologia és primordial a l'hora de crear règims col·laboratius d'entrenament.

En aquest entorn, el CAR participa al projecte Experimedia, una iniciativa europea que té com a objectiu oferir oportunitats per experimentar en tecnologies d'internet per tal de millorar l'actuació dels esportistes professionals. Es tracta d'un projecte col·laboratiu, en el qual intervenen tant atletes com entrenadors de diferents disciplines i entre els objectius hi ha el redisseny del propi procés d'entrenament i millorar la seva qualitat i la compartició d'informació per tal de poder prendre decisions de forma més acurada. A través d'una connexió a l'Anella Científica de 100 Mbps amb fibra òptica, el CAR accedeix a RedIRIS i a la resta de xarxes internacionals amb les quals aquesta es connecta, com ara Géant2, que li permeten compartir informació amb la resta de *partners* europeus implicats en aquest projecte.

El nou mòdul del CAR, amb una superfície de més de 20.000 m² i on s'han invertit 36 M€, inclou tres piscines separades (per natació, waterpolo, natació sincronitzada i salts), i espais per a un total de 12 esports. Molts dels esportistes que allà s'hi entrenen han competit a les darreres olimpíades de Londres, és el cas de l'equip de natació sincronitzada o el de waterpolo.

També hi ha unitats d'entrenament amb tecnologia adaptada a cada tipus d'equipament esportiu, sistemes d'informació basats en IP, enregistrament multidimensional continu, i *biofeedback* permanent, basat en tecnologia sense fils. Existeixen noves eines com la visualització interactiva en 3D dels entrenaments, amb la ubicació de 200 càmeres i *videowalls* HD per debatre i parlar amb els entrenadors. Es disposa d'un sistema de control de la gestió integrada a través del qual es pot seguir la inversió d'energia, controlar el temps, el temps invertit per atleta i la pròpia actuació. També hi ha la integració sota estàndards IP dins un centre de dades unificat de computació de la llum, la seguretat, el clima, el sistema PA (electroacústica), el vídeo i l'àudio, i la informació per a l'esport i la telefonia IP. |

Centre: **CAR**
 Cap de projecte: **Josep Escoda**
 Projecte: **Experimedia**

Edita

CENTRE DE SERVEIS CIENTÍFICS
I ACADÈMICS DE CATALUNYA



Patrocina



Fundació Catalana per a la Recerca i la 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

CESCA

Gran Capità, 2-4
 08034 Barcelona
 T. 93 205 6464
 F. 93 205 6979
 www.cesca.cat



TERAFLOP

DIRECTOR
Miquel Huguet

COORDINACIÓ
Carme Monserrat
Teresa Via

REDACCIÓ
Sílvia Salgado
Sílvia Reyes

COL·LABORACIÓ
Maria Cortés (TERMCAT)

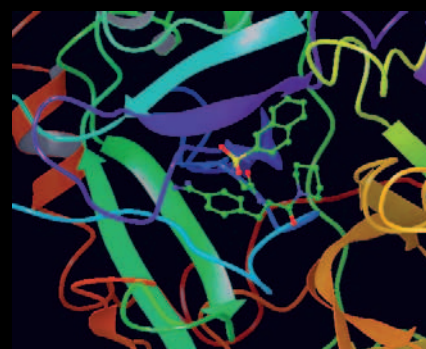
DISSENY I MAQUETACIÓ
Subirà-Associats.com

Propostes d'articles
teraflop@cesca.cat

EXEMPLAR GRATUÏT
 DIPÒSIT LEGAL: B-33512-94
 ISSN: 1134-6671

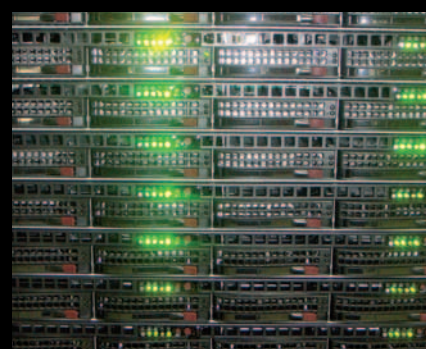
Què és?

- > Programari de química computacional per a la generació de models moleculars que permeten guiar el disseny de nous fàrmacs
- > Afavoreix la recerca de nous medicaments i la transferència de coneixement
- > Servei orientat a usuaris acadèmics i industrials
- > Des de 1996, fomenta la col·laboració universitat-empresa



Infraestructura tecnològica

- > Usa el programari de modelització molecular Schrödinger
- > Instal·lat en un Bull NovaScale
- > Permet l'ús remot amb comprovació de llicències al CESCA



Formació i difusió

- > Suport tècnic i científic
- > Cursos i seminaris relacionats amb el servei
- > Difusió de resultats a través de diferents canals de comunicació



Casos d'èxit

- > Químioinformàtica i disseny d'aliments funcionals, Gerard Pujadas, URV, 2010
- > Nous fàrmacs per bloquejar l'entrada del VIH a les cèl·lules, Jordi Teixidó, IQS (URL), 2007
- > Descobriments de molècules bioactives mitjançant l'ús de bases de dades, Juan Jesús Pérez, UPC, 2006

