



## L'Earth Simulator nipó lidera el TOP500

- Entrevista a Antoni Gurgú, director general d'Indústria
- Sisena edició de la Trobada de l'Anella Científica
- L'Escola Superior de Música de Catalunya entra a l'Anella

# La Trobada de l'Anella Científica arriba a la sisena edició

**E**l passat 26 de juny va tenir lloc la Trobada de l'Anella Científica (TAC), que va reunir una vuitantena de professionals de la informàtica i les comunicacions de les institucions que s'hi connecten.

En la seva sisena edició, aquesta trobada anual es va dur a terme a les instal·lacions de la Universitat Pompeu Fabra (UPF), precisament a l'Edifici França on s'imparteixen els estudis d'informàtica i telecomunicacions, com va comentar la rectora M. Rosa Virós, amfitriona d'aquesta edició de la TAC. Virós va destacar la importància d'aquestes trobades, ja que "és necessari el diàleg entre les institucions".

El director general adjunt de la Fundació Catalana per a la Recerca (FCR), Jordi Mas, va destacar que la TAC tingués cada vegada més assistents, cosa que "demostra que s'estan lligant més les relacions entre els integrants de l'Anella i s'està establint una comunitat dins d'ella". Mas també va aprofitar per anunciar el recent nomenament de Lluís Jofre com a nou director general de la FCR, càrrec que el mateix Mas va ocupar en funcions fins al passat 11 de juny. Amb aquest nomenament, Mas continua a l'equip directiu com a director general adjunt.

Amb la incorporació de Jofre, "la FCR pretén relançar la institució i potenciar els serveis a la comunitat científica", va afirmar Jordi Mas.

L'encarregat de cloure la Trobada va ser el director del CESCO, Miquel Huguet, qui va presentar als assistents les millores que des de l'anterior Trobada s'han realitzat tant en infraestructura com en serveis, amb la posada en marxa d'un nou sistema d'alimentació ininterrompuda i un grup electrogen, la quadruplicació de la velocitat del troncal de l'Anella i el pas a 34 Mbps de les universitats que restaven a velocitats inferiors. Huguet va explicar també els dos nous serveis que el Consell de Govern del passat 24 de maig va aprovar posar en marxa: Veure sobre Internet a l'Anella (VIA) i videoconferència (SAV).

Aquesta sisena edició de la Trobada de l'Anella Científica va ser possible gràcies a la tasca dels membres de la comissió organitzadora formada per Teresa Grané (UPF), Llorenç

Guilera (UAB), Dídac López (UdG), Miquel Huguet i Xavier Pereira (CESCA), i va comptar amb la col·laboració de la UPF i el suport de Satec, Telindus i Unitronics.

## L'Administració Oberta de Catalunya: l'e-government català

**Manuel Sanromà**, PuntCat

Sota el concepte d'Administració Oberta de Catalunya (AOC), que té una concreció en el pacte polític subscrit per totes les forces parlamentàries catalanes el juliol del 2001, s'han configurat un seguit de projectes en els diferents àmbits d'acció de les administracions públiques catalanes. Alguns d'aquests projectes s'inclouen dins el Consorci Administració Oberta Electrònica de Catalunya, format per la Generalitat i Localret i que han portat a la creació de l'Agència Catalana de Certificació (ACC) i de l'empresa Serveis Públics Electrònics (PuntCat).

En el nou model configurat per aquestes dues noves organitzacions, l'ACC serà l'autoritat certificadora reconeguda per totes les administracions catalanes per regular les interaccions entre els ciutadans i les administracions i entre aquestes mateixes,



M. Rosa Virós i Jordi Mas van obrir la TAC'02.



Víctor Castelo, director de RedIRIS.



mentre que PuntCat gestionarà la plataforma tecnològica a través de la qual es prestaran els serveis de les administracions als ciutadans. El nou model té com a objectiu un profund canvi en les relacions entre el ciutadà i les Administracions i entre aquestes mateixes, mitjançant l'ús de les tecnologies de la informació i la comunicació. Així, la tecnologia és el mitjà i no pas la finalitat del projecte.

## RedIRIS, cap a una nova infraestructura

**Víctor Castelo**, RedIRIS

RedIRIS és la xarxa del Plan Nacional de Investigación y Desarrollo, gestionada des del CSIC, que disposa d'una xarxa troncal amb 17 punts de presència distribuïts per totes les Comunitats Autònomes i que connecta pràcticament la totalitat d'universitats i centres d'investigació espanyols mitjançant una xarxa estructurada en forma d'estrella amb velocitats de fins a 155 Mbps.

En les seves connexions amb les xarxes europees, RedIRIS es connecta a GÉANT, la xarxa paneuropea que disposa d'un nucli de 10 Gbps i que enllaça les xarxes de recerca de 31 països. RedIRIS també té dues línies de 155 Mbps per a la connexió amb els proveïdors comercials a Espanya i dues línies de 2,5 Gbps com a connexió global a Internet mitjançant dos operadors. A més de la infraestructura, RedIRIS coordina serveis i aplicacions, disposa de servidors centrals i desenvolupa nous sistemes, en temes com correu electrònic, distribució de News, FTP anònim i buscador, sistemes d'autenticació, seguretat, etc.

La nova RedIRIS permetrà disposar de més velocitat per als serveis actuals i, a més, s'hi podrà experimentar i posar en marxa nous serveis de treball col·laboratiu, biblioteques digitals, educació a distància, teleimmersió, control remot d'instrumentació, *computer grids*... Per estendre aquestes aplicacions, la infraestructura experimentarà un canvi substancial i passarà de l'estrella actual a una xarxa mallada amb un nucli de 2,5 Gbps, en el qual es troba Catalunya, accessos de velocitat intermitja a 622 Mbps i 155 Mbps com a capacitat mínima, amb dobles enllaços a les comunitats amb menys

Administració Oberta de Catalunya (AOC)

**·CAT**  
**Orientació al ciutadà i canals de prestació**

**El projecte de desenvolupament del portal de les Administracions Públiques Catalanes (-CAT) pretén crear un nou marc de relació amb el ciutadà en què aquest esdevingui el centre dels processos de l'Administració i tingui a l'abast els serveis que necessita.**

**Aquest nou model de relació no es circumscriu exclusivament a un marc electrònic, sinó que abastarà tots els medis d'interrelació que puguin existir entre Administració i el Ciutadà: Presencials, Internet i Telefònics (multicanal).**

Correu Electrònic

Internet

Correu Ordinari

Telefón

Centre d'Atenció Telefònica

Presencial als Departaments

Quiosc d'accés a Internet

FAX

**En el moment que un servei passi a ser prestat a través de ·CAT, tots els canals tindran el mateix procediment electrònic de tramitació**

**Nova xarxa nacional**

- > Xarxa mallada
- > Dues connexions per node com a mínim
- > Nucli de 2,5 Gbps
  - Matriu de necessitats mínimes
  - 155 Mbps-622 Mbps-2,5 Gbps
  - SLA
  - IP a 2,5 Gbps

Nucli a 2,5 Gbps  
Catalunya, CESCA, node del nucli

Administració Oberta de Catalunya

Per considerar que les **relacions electròniques estan protegides**, els mecanismes que s'utilitzen han d'aportar elements de:

<b>Autenticació</b>	➡	Certificat digital
<b>Integritat</b>	➡	Firma electrònica
<b>Confidencialitat</b>	➡	Encriptació
<b>No repudi</b>	➡	Infraestructura de clau pública

necessitats d'amplada de banda. Tot plegat serà el resultat d'un concurs públic que es va convocar el mes de juny.

## La certificació digital a les administracions públiques de Catalunya

**Xavier Sanz**, CTITI

El desenvolupament de les tecnologies de la informació i de les comunicacions està modificant d'una manera ràpida i intensa els instruments de què disposa la nostra societat per relacionar-se. Un dels elements que ha ajudat de manera més significativa que aquestes circumstàncies es produeixin i es consolidin és sens dubte la seguretat, el compromís i la garantia que aporta a les relacions electròniques l'aplicació de tecnologies basades en certificats digitals.

Per considerar que les relacions electròniques estan suficientment protegides, els mecanismes que s'utilitzen han d'aportar elements que garanteixin l'autenticació de la personalitat electrònica, la integritat i, si s'escau, la confidencialitat de les

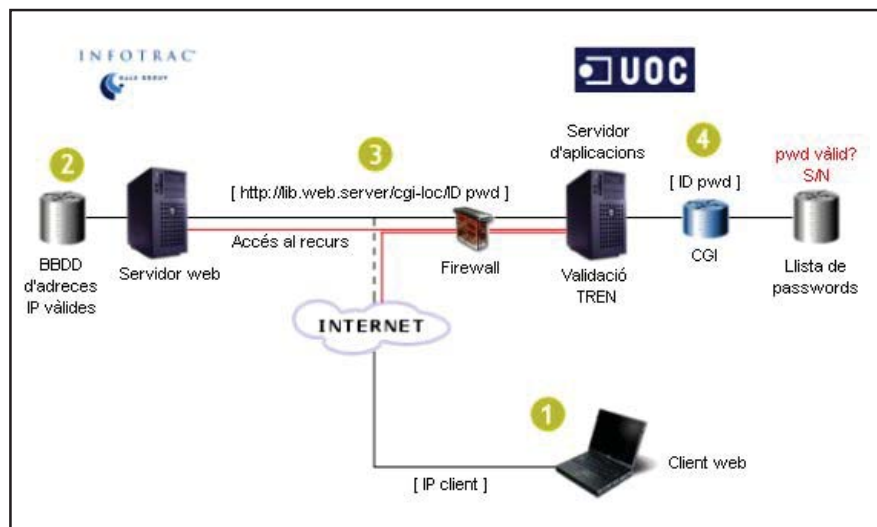
comunicacions i la garantia que no es pot produir la negació de l'autoria del fet electrònic. L'assoliment d'aquest objectiu planteja una solució que considera la constitució d'una jerarquia que englobi totes les entitats de certificació que es creïn en el marc de les administracions públiques catalanes. La seva titularitat l'ostentarà l'Agència Catalana de Certificació. El model establert permet, a més d'obtenir els beneficis de reconeixement automàtic que són inherents a aquest tipus d'estructuració, la possibilitat de personalitzar la solució de cada una de les entitats de certificació i adequar-la a les necessitats reals que cada àmbit pugui tenir.

Per garantir la llibertat del ciutadà per dotar-se de la certificació digital que més li convingui, acceptaran les acreditacions expedides per qualsevol administració pública espanyola i europea. El Govern de la Generalitat ha encarregat al Centre de Telecomunicacions i Tecnologies de la Informació que actui com a entitat prestadora de serveis públics de certificació de la Generalitat de Catalunya.

## Accés remot a bases de dades: el cas de la UOC

David Maniega, UOC

La Biblioteca de la UOC ha contractat bases de dades en línia fent servir les vies d'accés més esteses entre els proveïdors: el control d'accés per rangs d'IP i l'autenticació mitjançant un nom d'usuari i una paraula de pas. Cal establir però noves formes d'accés flexibles i segures. A nivell de seguretat interna, l'usuari ja ha estat autenticat pel Campus, de manera que la Biblioteca pot controlar, gràcies al sistema de control d'accessos (TREN), que l'usuari té privilegis per accedir al recurs.



## T A U L A R O D O N A

Pel que fa al problema de l'*spam*, tots tres van coincidir en la importància de definir i implantar una política de seguretat i buscar la implicació tant dels usuaris com dels administradors de la xarxa. Segons Fernando Planas, "existeixen eines de monitorització i control que permeten evitar allaus de correus electrònics, a més, els programes de correu i alguns programes antivirus permeten bloquejar determinats remittents i correus, i els sistemes més avançats comparen la identitat del remitent amb una base de dades de remittents habituals d'*spam* i busquen també signatures conegudes dins els missatges". Jordi Batlle va explicar que "hi ha diversos mètodes per pal·liar el seu efecte com ara el control sobre el nombre de còpies del mateix correu, control de les adreces d'origen o filtres per paraules clau encara que, un dels millors mètodes és la conscienciació dels usuaris, proposant unes normes bàsiques d'utilització i difusió de les adreces de correu". Miguel A. Sanz va compartir les possibles solucions amb els altres ponents i va afirmar, però, que "la solució definitiva passa necessàriament per introduir canvis en el protocol de missatgeria electrònica i mesures legislatives".

Segons els tres participants de la taula rodona, el problema del control dels continguts s'ha de resoldre limitant

### Reptes a les xarxes universitàries: una visió dels integradors tecnològics

**Martí Grieria, cap de la unitat de comunicacions del servei d'informàtica de la UAB i membre de la Comissió Tècnica de l'Anella Científica (CTAC), va plantejar als participants de la taula rodona els tres problemes que els integradors de la CTAC havien considerat d'alta importància a les xarxes universitàries perquè fossin tractats en aquesta edició de la TAC: l'*spam*, el control dels continguts i el de l'accés. En el debat van intervenir Fernando Planas, de Telindus; Jordi Batlle, d'Unitronics, i Miguel A. Sanz, de Satec.**

i no prohibint. Com va assenyalar Fernando Planas "amb funcions avançades, com Rate Limiting, els equips de comunicacions de la xarxa es converteixen en una eina molt útil, ja que Rate Limiting permet establir una amplada de banda màxima en el port d'accés de l'usuari per limitar la quantitat de tràfic que pot introduir a la xarxa". Jordi Batlle va assegurar

que "la solució no passa només per ampliar l'amplada de banda, sinó que és necessari un control sobre els recursos consumits, fent ús de tècniques de qualitat de servei i de classificació de tràfic, entre d'altres". Miguel A. Sanz recomana, a l'hora de seleccionar una solució, "tenir en compte la varietat de tràfic que permet identificar, criteris de classificació, riquesa de l'anàlisi del tràfic, granularitat i flexibilitat de control de l'amplada de banda, facilitats per generar informes i escalabilitat de la solució. Sens dubte, una de les millors solucions, implantada ja en centenars d'universitats i milers d'empreses de tot el món, és la proporcionada per PacketShaper de Packeteer".

Per controlar l'accés, els representants de Telindus, Unitronics i Satec van proposar l'ús de tecnologia de xarxes privades virtuals (VPN) que permeten a una empresa establir enllaços entre diverses seues fent servir infraestructures de comunicacions externes tot encriptant la informació i, a més, ofereixen la possibilitat d'establir diversos túnels per a diferents tipus de tràfic. A més, els tallafocs poden distingir els usuaris per evitar que els no autoritzats surtin fora dels límits de la xarxa corporativa. Miguel A. Sanz va suggerir com a solució la utilització combinada de Cisco VPN 3000 Concentrador i Cisco VPN Client.

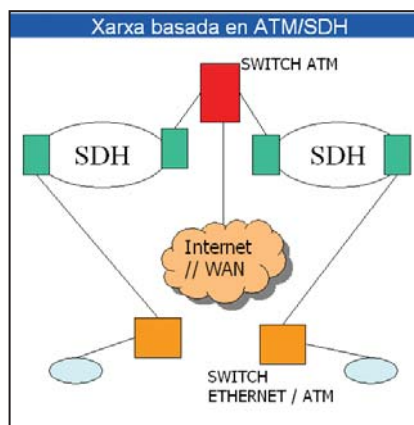
Un sistema híbrid és l'InfoTrac RPAS de Galegroup, que combina l'autenticació per rangs d'IP i el control alternatiu per paraula de pas. RPAS valida primer l'adreça IP del client web que vol accedir-hi. Si no és reconeguda es demana a l'usuari el seu identificador i s'executa un sistema remot centralitzat per al control d'accés (semblant a Athens).

El sistema *url referring* i el d'encriptació del nom d'usuari i de la paraula de pas (CGI login/pwd) ens donen gran flexibilitat en la gestió i el control d'accés. En el primer cas, la Biblioteca UOC genera un CGI que crida una pàgina intermitja (protegida) que permet reconèixer l'enllaç amb la base de dades com a vàlid. El proveïdor reconeix des d'on s'ha executat la crida a la base de dades i permet l'accés. En el segon, només cal instal·lar al servidor propi el mòdul "Crypt::HCE\_SHA" que genera l'encriptació de variables passades al client web. Es crea un CGI on es determinen les variables d'URL destí, identificador vàlid, paraula de pas i clau d'encriptació. Quan l'usuari executa la crida es concatenen els diferents valors vàlids de forma encryptada sense que es pugui conèixer ni el nom d'usuari ni la paraula de pas d'accés.

## Tecnologies de xarxa en l'entorn universitari

**Ricardo Orcero**, LambdaNet

La capacitat en els entorns d'àrea local s'ha multiplicat per 100 en els últims anys, assolint velocitats des d'1 Gbps. Paral·lelament, s'han desenvolupat tecnologies òptiques de gran capacitat a les xarxes troncals de llarga distància. No obstant això, els serveis de telecomunicacions que s'ofereixen en entorns



universitaris intercampus representen un coll d'ampolla pel seu cost, baixa escalabilitat i l'elevat temps de provisió.

L'ús de solucions tecnològiques tipus LAN/WAN en entorns universitaris permet dissenyar xarxes més senzilles, homogènies i optimitzades per a la transmissió de dades a alta velocitat. Dins d'aquestes tecnologies es pot destacar Ethernet sobre fibra amb interfícies de llarga distància (100Base-LH, 1000Base-LH), multiplexació de longituds d'ona (DWDM), IP sobre SDH, IP sobre DWDM, MPLS, etc.

Les noves xarxes de telecomunicacions en l'entorn universitari han de poder suportar l'intercanvi de grans quantitats d'informació i el desplegament de noves aplicacions: bases de dades multimèdia, teleeducació, telemedicina, simulació interactiva de supercomputadors, accés remot a recursos compartits, centres d'investigació virtuals... Per tant, les solucions de xarxa hauran de tenir en compte els següents paràmetres de disseny: disponibilitat, flexibilitat per suportar noves aplicacions, escalabilitat de l'amplada de banda, cost, seguretat, gestibilitat i qualitat de servei. ■

## PROGRAMES DE MOBILITAT

**Hadrien Perron**, de la **University of Paris-Sud** ha vingut convidat per **Agustí Lledós**, de la UAB, per col·laborar en el projecte *Theoretical Study of transition Metal Complexes with Two Diphosphetene Ligands*. Perron va arribar el 15 de maig i va finalitzar la seva estada el 12 de juny.

**Boubakar Diawara**, del **CNRS** (França), ha vingut convidat per **Francesc Illas**, de la UB, per participar en el projecte *DFT Study of the Adsorption of NH<sub>3</sub> on Al and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: Bonding and Reactivity*. Diawara va treballar-hi del 15 al 30 de juny.

**Víctor Polo**, de la **Göteborg University** (Suècia), ha vingut convidat per **Miquel Solà**, de l'IQC-UdG, per treballar en el projecte *A theoretical Study on the Comparison of AIM and ELF Indices of Localization and Delocalization*. Polo va arribar el 3 de juny i acabarà la seva estada el 31 de juliol.

**Hervé Lesnard**, de la **University of Paris-Sud** (França), ha vingut convidat per **Agustí Lledós**, de la UAB, per participar en el projecte *Theoretical Study of the Dihydrogen and Dihydride Forms of [CpW(CO)<sub>n</sub>(PR<sub>3</sub>)<sub>3-n</sub>(H)2]<sup>+</sup> Complexes*. Lesnard va arribar l'1 de juny i marxarà el 31 de juliol.

**Alexis Markovits**, de la **Pierre et Marie Curie University** (França), ha vingut convidat per **Francesc Illas**, de la UB, per treballar en el projecte *Structure and Reactivity at Hydrocarbur Fragments on Metal Surfaces*. Markovits va arribar l'1 de juliol i finalitzarà la seva estada el 31 de juliol.

**Pedro Trancoso**, de la **Cyprus University** (Xipre), ha vingut convidat per **Josep L. Larriba**, de la UPC, per treballar en el projecte *Power-Aware Optimizations for Database Workloads*. Trancoso hi treballarà de l'1 al 31 d'agost.



JORDI PARETO

Els ponents i els membres de la comissió organitzadora de la TAC'02.

# L'Escola Superior de Música de Catalunya, a l'Anella



JORDI PARETO

***“La connexió de l'Escola a l'Anella Científica és un pas endavant per a la plena integració dels estudis superiors de música en l'àmbit universitari”, afirma el seu director, Gerard Claret.***

**Acte inaugural del curs 2001-2002 celebrat a l'Auditori.**

L'Escola Superior de Música de Catalunya (ESMC) és un centre d'iniciativa pública que imparteix grau superior de música i que dóna un títol equivalent a llicenciat. El 2001-2002 ha estat el primer curs impartit per l'Escola, en el qual han participat 117 alumnes. Per al proper, que encara s'impartirà a les instal·lacions del carrer Berenguer de Palou, és previst que l'ESMC compti amb 300 alumnes. A partir del curs 2003-2004, l'Escola tindrà la seu definitiva a l'edifici de l'Auditori de Barcelona.

El disseny actual de l'Escola Superior de Música es fonamenta sobre quatre punts d'especial rellevància: oferir una oferta curricular flexible i integradora, d'acord amb l'objectiu de la LOGSE, que garanteixi la capacitat de respondre a les característiques pròpies de cada estudiant; crear un espai de confluència a l'Escola per al desenvolupament de tots els àmbits d'estudis relacionats amb el món de la música que siguin de la seva

competència; ser un centre obert que, a més de dur a terme les tasques acadèmiques, tingui voluntat de fer-se un espai en el panorama musical nacional i internacional, i incorporar les noves tecnologies, tant en els àmbits de la docència, la creació i la recerca com en el de la comunicació, per poder desenvolupar noves formes de docència, establir interaccions amb altres centres musicals d'arreu del món i potenciar la seva capacitat de projecció.

Amb la seva integració a la Anella Científica, l'ESMC pretén “universalitzar la utilització de les noves tecnologies en els àmbits de la recerca, la investigació i la mateixa educació a l'escola així com posar les bases per estrènyer les relacions amb la resta d'institucions universitàries del nostre país i més enllà”, explica el seu director, Gerard Claret.

Un cop l'Escola hagi consolidat plenament la seva estructura està previst que s'hi puguin cursar

els estudis de grau superior de música en els àmbits, modalitats i itineraris següents: instrument de música clàssica i contemporània, instrument de jazz i música moderna, instrument de música antiga, instruments de la música tradicional i popular, direcció, musicologia, pedagogia, composició, sonologia i promoció i gestió. En un termini de quatre anys des de la creació de l'ESMC, es preveu que el centre tingui una capacitat màxima de 600 alumnes, amb una previsió de places anuals no superior als 150 alumnes. ■

**L'ESMC es connecta a l'Anella a 2 Mbps mitjançant ADSL.**



## “Cal convèncer demostrant, no predicant”

**A**ntoni Gurgu i Ferrer és director general d'Indústria i director del Centre d'Innovació i Desenvolupament Empresarial (CIDEM) des de fa poc més d'un any. La seva trajectòria professional, però, està vinculada a Indústria ja fa 15 anys. Gurgu és doctor enginyer industrial per la Universitat Politècnica de Catalunya i compta amb diverses titulacions internacionals. La seva activitat professional s'ha desenvolupat a l'empresa, la consultoria, la universitat, tant en docència com en recerca, i des del 1987 dins de la Generalitat, on ha ocupat diferents càrrecs.

**Actualment, el CIDEM s'està connectant a l'Anella Científica i està impulsant la posada en marxa d'un nou servei, la videoconferència, que usará, d'entrada, per connectar la seva seu central amb les delegacions a Girona, Lleida i Tarragona, i el Centre Català de Qualitat. Amb la incorporació a l'Anella, el CIDEM busca “l'efecte demostració, no haver d'explicar que a Catalunya hi ha bones infraestructures perquè els nostres interlocutors ho estaran comprovant”.**

**Ara fa un any que és al capdavant del Centre d'Innovació i Desenvolupament Empresarial. Quin balanç en fa?**

El CIDEM és una organització que porta molts anys funcionant. Per tant, em vaig trobar una organització amb un llarguíssim rodatge i que ja tenia una extensa experiència en els projectes que duia a terme. Durant aquest any hem continuat treballant-hi i, com a novetat, hem reforçat la política d'innovació i hem acabat de definir les diferents línies del pla d'innovació, concretament les de digitalització i

*manufacturing* i logística, que ara estem acabant de definir.

**El passat mes de maig el CIDEM va presentar el Programa de digitalització d'empreses. Què persegueix concretament aquest programa?**

La digitalització és per a nosaltres sobretot un instrument de competitivitat de les empreses, no un objectiu. És una eina per treballar millor, ser més competitiu, més eficaç i més ràpid. Per tant, el nostre plantejament del programa de digitalització és aconseguir que les empreses de Catalunya incorporin els avantatges derivats de les tecnologies digitals, tant informàtiques com de telecomunicacions, abans que els nostres competidors. És a dir, cal que aquest procés sigui més ràpid a Catalunya que a aquells països amb els quals ens volem comparar, com serien Alemanya, Regne Unit, Itàlia, EUA, Japó, etc.

**La digitalització d'empreses és un dels eixos del primer “Pla d'Innovació de Catalunya 2001-2004”, posat en marxa pel Departament d'Indústria, Comerç i Turisme a través del CIDEM. Quins són els**

**“La digitalització és sobretot un instrument de competitivitat de les empreses.”**

**principals objectius d'aquest primer pla d'innovació?**

Impregnar l'economia catalana del concepte d'innovació. Conscienciar tots els empresaris catalans que la innovació ha de ser un procés continu i sistemàtic que cal incorporar als seus negocis de la mateixa manera que ho han fet amb els temes de màrqueting, finançament i producció. Hem de fer entendre a totes les nostres empreses, però sobretot a les més petites que són les que menys temps tenen per pensar-hi, que la innovació és un requisit, fins i tot, per a la pròpia supervivència de l'empresa en el futur. La competència derivada de la globalització és salvatge i, en alguns temes, ja no podem competir. En aquestes

circumstàncies cal trobar altres avantatges competitiu i, clarament, en les economies avançades aquests avantatges es derivaran de la capacitat d'innovar. L'objectiu és aconseguir que la nostra economia sigui innovadora en tots els sectors, perquè així serà forta, sana i tindrà capacitat de proporcionar al país cada cop més benestar.

**Fa tres anys es va posar en marxa la Xarxa de Centres de Suport a la Innovació Tecnològica (Xarxa IT) amb la finalitat d'incrementar la capacitat d'innovació de les empreses a través de la potenciació del mercat de la subcontractació d'R+D. Quina valoració fa de l'evolució d'aquesta xarxa?**

La Xarxa IT ha demostrat que allò que moltes vegades s'ha anomenat com a distància entre universitat i empresa era una separació artificial que podia ser resolta. Era fàcil trobar ponts que unissin les dues institucions. Durant molt de temps la Universitat s'ha dedicat sobretot, primer, a crear titulats i, posteriorment, a assolir un nivell científic i tecnològic cada cop més

important, al mateix nivell que les millors universitats europees i mundials. Mancava, però, que proveís de servei a la indústria. Estem convençuts, perquè ho hem comprovat, que el procés d'innovació no és un procés intern a l'empresa sinó que se subcontracta.

En aquest sentit, la Xarxa IT crea el mercat, el punt de trobada d'empreses i oferta universitària per permetre l'intercanvi. Es parla sovint de transferència tecnològica, però m'agrada més parlar d'intercanvi perquè en un mercat sempre es pressuposa un intercanvi. En aquest mercat tecnològic, els centres de la Xarxa IT proporcionen diferents serveis a les empreses pels quals aquestes paguen, però hi intervé també un diàleg i una interconnexió, que permet a les universitats saber quin tipus de tecnologies i d'aportació científica requereixen les empreses. Per tant, passa a ser una roda que es realimenta i que es potencia mútuament.

La Xarxa IT va néixer sobretot dedicada a petits grups de recerca dintre de les mateixes universitats. Els primers centres en incorporar-s'hi eren excel·lents a nivell científic i tecnològic però d'estructura petita. Ara ens hem trobat amb la sorpresa que hi volen entrar els centres grans. Això demostra que la Xarxa IT, a més d'estar tenint un gran èxit, s'ha prestigiat.

**El propi CIDEM s'ha connectat a l'Anella Científica i ha incentivat la posada en marxa d'un nou servei addicional, el de videoconferència. Quines són les expectatives?**

El sector de les TIC és un sector que presumeix d'innovador, però, després de patir-lo moltíssims anys, haig de dir que és dels més barroers. És un sector que sistemàticament ofereix més del que dona. Aquesta és la situació de les TIC arreu del món. En aquestes circumstàncies, què és el que pretenem al CIDEM en el moment que ens connectem a l'Anella Científica i, per tant, entrem a utilitzar el seu potencial? Simplement, posar a la pràctica allò que una imatge val més que mil paraules. Volem que quan parlem amb l'empresari o amb multinacionals estrangeres que estan pensant a invertir a Catalunya, no els haguem de fer cap discurs dient que tenim grans infraestructures.

**“El CATNIX és molt important per garantir que les empreses catalanes no estiguin en desavantatge.”**

Pretenem que ho vegin i ho comprovin. Per tant, el que pretén el CIDEM en el moment en què s'integra a l'Anella Científica és predicar sense dir res, és a dir, demostrar que disposem d'unes infraestructures que permeten una sèrie de prestacions que deixin bocabadats els qui ens visiten i que constatin els seus avantatges, no perquè nosaltres els els expliquem, sinó perquè els viuen. Busquem l'efecte demostració.

**L'Anella Científica ha estat fins ara una infraestructura dedicada a potenciar la recerca i el desenvolupament als centres d'investigació i a les universitats. En l'últim Consell de Govern del CESCO, el passat 24 de maig, a iniciativa del CIDEM, es va aprovar que les empreses es puguin connectar a l'Anella Científica per experimentar la “I” d'innovació tecnològica en una plataforma d'alta velocitat amb servei garantit. Com es pot potenciar la seva participació?**

Lliga amb l'efecte demostració de què parlava. A la majoria de les empreses els han venut tantes vegades els avantatges derivats de les noves tecnologies que al final acaben bastant escèptiques. Pretenem posar-los a l'abast una infraestructura en la qual poden entrar amb un cost raonable. Evidentment, això té el perill que algú pugui pensar que aquesta infraestructura, amb recursos públics, passa a competir amb el mercat. Aquesta no és la intenció, sinó que el que pretenem és que aquestes empreses provin les potencialitats de la banda ampla i dels recursos de les TIC potents, perquè a partir d'aquí se'n derivi la necessitat. Serà el moment llavors en què passin a l'entorn privat. És una roda, com totes les que des del CIDEM intentem fer, en la qual tothom surt guanyant.



JORDI PARETO



**El passat mes de juny el CATNIX va complir tres anys. Què ha representat aquesta infraestructura de telecomunicacions en el desenvolupament de la Societat de la Informació a Catalunya?**

CATNIX juga el rol fonamental d'interconnectar tràfic a la xarxa. Internet, i crec que qualsevol persona que pensi en la seva experiència quan navega hi estarà d'acord, genera una cultura extraordinàriament impacient. Quan et mous amb el ratolí vols que les coses passin ràpid i, si veus que tarden molt, perds la paciència i te'n vas a una altra pàgina. Des d'aquest punt de vista, si les empreses de Catalunya estan accedint al món a través d'una xarxa en la qual la interconnexió no està propera, els seus webs són més lents del que haurien de ser, des del punt de vista de l'usuari. Per tant, hi ha una gran probabilitat que l'internauta se'n vagi a visitar una altra de les empreses de la llarga llista que ofereix qualsevol buscador. Des del govern estem obsessionats en què això no succeeixi.

L'estructura de la xarxa Internet espanyola és extremadament centralista i això penalitza el tràfic de les empreses d'aquí, tant des de Catalunya cap a l'exterior com a l'inrevés. Per tant, el CATNIX és molt important per intentar garantir que les empreses no tinguin cap desavantatge de velocitat d'accés als seus webs. En aquest sentit, ha estat important la darrera incorporació de Telefónica perquè encara és l'empresa que canalitza la part més important de tràfic i confio que Telefónica hi entrarà de ple. És molt important que hi hagi interconnexió entre tots els operadors perquè sinó representaria una penalització per a les nostres empreses.

**Durant la seva presidència de la Comissió Executiva del CATNIX, ha impulsat la seva renovació tecnològica i la incorporació d'operadors de telecomunicacions. Quin balanç fa del seu pas per aquest òrgan de govern?**

El meu paper a CATNIX ha estat molt reduït. He intentat, però, transmetre la meua fe en aquest organisme i la importància que li atribueixo. Tot el que ha anat passant aquest mes ha estat sobretot perquè els integrants de



JORDI PANIETO

**Gurquí és director general d'Indústria des de fa poc més d'un any.**

CATNIX ho han volgut, el meu rol ha estat testimonial.

La valoració que en faig és molt positiva. D'una banda, el tràfic intercanviat al Punt Neutre ha anat creixent de manera molt ràpida i, de l'altra, com he comentat, s'ha incorporat Telefónica. Quan van quedar aclarides les competències de la Secretaria de Telecomunicacions i Societat de la Informació

i va prendre possessió del càrrec el nou Secretari, Jordi Alvinyà, em va semblar més lògic, i el conseller Mas-Colell va estar-hi d'acord, que la presidència d'aquest organisme l'ocupés ell. Evidentment, jo continuo relacionat amb CATNIX i continuaré impulsant-lo exactament igual que fins ara. ■



El CIDEM ha impulsat la posada en marxa d'un servei de videoconferència dins la infraestructura de l'Anella Científica. Aquest servei facilitarà la comunicació, en una primera fase, entre la seva seu central, les seves delegacions a Girona, Lleidà i Tarragona, i el Centre Català de Qualitat, amb amplitud de banda garantida i qualitat de servei quan aquest sigui necessari. En una segona fase, s'hi podran incorporar els centres de recerca, especialment els de la Xarxa de Centres de Suport a la Innovació Tecnològica. Aquest servei afavoreix el treball en equip evitant desplaçaments i rendibilitza el temps de directius, gestors de projectes i investigadors.

# El Japó torna a liderar el TOP500 després de cinc anys d'hegemonia nord-americana

El supercomputador instal·lat a l'Earth Simulator Center japonès ha trencat sobradament la supremacia dels EUA al capdavant de la llista TOP500, que mantenia des del juny de 1997. L'actual supercomputador més potent del món, l'Earth Simulator (ES), està format per 640 nodes connectats mitjançant una xarxa amb una velocitat de transferència de dades de 12,3 GB.

Cada node conté vuit processadors vectorials amb un rendiment punta de 8 Gflop/s i una memòria de 16 GB. L'ES disposa d'un total de 5.120 processadors, que proporcionen un rendiment punta de prop de 41 Tflop/s i disposen de 10 TB de memòria principal. Segons la llista TOP500, el seu rendiment màxim ( $R_{max}$ ), 35,86 Tflop/s, quintuplica el de l'anterior número 1,

l'ASCI White, amb un  $R_{max}$  de 7,22 Tflop/s i 12.288 processadors.

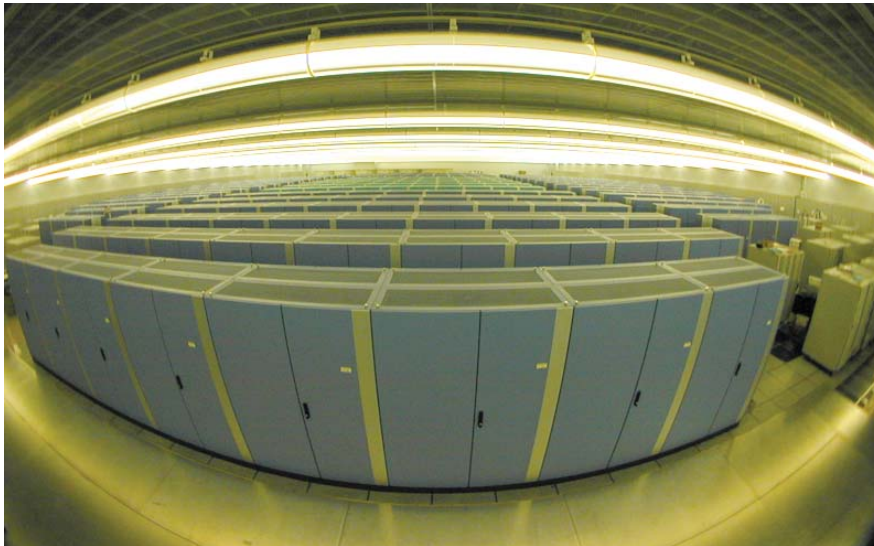
L'ES ha estat desenvolupat a l'Earth Simulator Research and Development Center, un consorci de la National Space Development Agency of Japan, el Japan Atomic Energy Research Institute i el Japan Marine Science and Technology Center. Aquest supercomputador contribuirà a l'anàlisi i la predicció de canvis ambientals a la Terra a través de la simulació de diferents fenòmens d'escala mundial com el sobreescalfament global, l'efecte *El Niño*, la pol·lució atmosfèrica i marina, les pluges torrencials i altres efectes ambientals complexos. També estarà al servei de la recerca sobre fenòmens com la tectònica i els terratrèmols.

De les 19 edicions de la llista TOP500 publicades, 12 han estat encapçalades per un supercomputador instal·lat als EUA i les 7 restants, al Japó. Els EUA van liderar la primera edició del TOP500, el juny de 1993, Japó la del novembre i, de nou, la de juny de 1994 va comptar amb una màquina nord-americana en la primera posició. El mes de novembre d'aquell any va començar l'hegemonia japonesa, que els EUA van trencar el juny de 1997. D'aleshores ençà, la nissaga dels ASCI havia ocupat la primera posició del TOP500, conquerida ara de nou pel Japó.

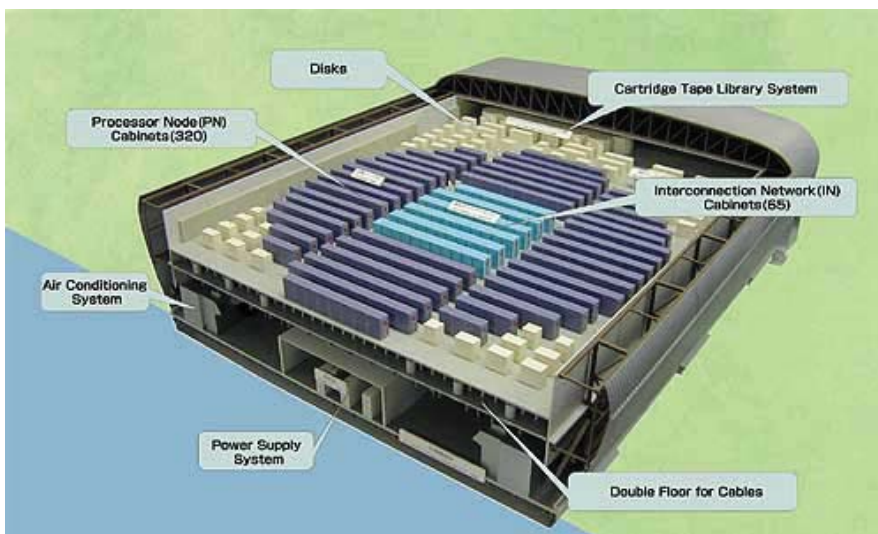
A més de l'ES, hi ha tres sistemes nous al TOP10. En la quarta posició, l'HP AlphaServer SC ES45 instal·lat al Commissariat a l'Energie Atomique, el primer supercomputador instal·lat a França que es col·loca entre els 10 primers des dels inicis del TOP500. En vuitè lloc, l'IBM Power4 instal·lat a l'Oak Ridge National Laboratory nord-americà i, en desena posició, també un IBM que s'està provant en un centre d'aquest fabricant i que s'instal·larà a l'Army Research Laboratory nord-americà.

Europa, amb 170 supercomputadors a la llista TOP500, continua per darrera dels EUA, que n'hi té 225. La distància entre els dos continents, però, s'ha escurçat respecte el juny de l'any passat, en què els EUA disposaven de 254 supercomputadors entre els més ponents i Europa, de 160. Malgrat la millora europea a la llista, l'Estat espanyol no compta en aquesta edició amb cap màquina al TOP500.

Earth Simulator Center



Earth Simulator Center



Els 5.120 processadors de l'ES quintuplicuen el rendiment màxim dels 12.288 de l'ASCI White.

# Jornada conjunta de les Xarxes de Bioinformàtica i de Genòmica i Proteòmica

El passat 22 de maig va tenir lloc a l'Institut d'Estudis Catalans la jornada científica *Perspectives in Structural Bioinformatics*, organitzada conjuntament per les Xarxes de Bioinformàtica, coordinada per Modesto Orozco, i de Genòmica i Proteòmica, per Francesc Xavier Avilés, i amb el suport de la Societat Catalana de Biologia, presidida per Pere Puigdomènech. L'acte va ser inaugurat pel conseller del Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació, Andreu Mas-Colell.

La jornada va comptar amb ponents d'alt nivell. Va intervenir Robert Huber, premi Nobel de química l'any 1988, que va parlar de les proteïnes i les seves regulacions per innovar en el disseny de fàrmacs. Huber s'ha incorporat recentment com a professor visitant a la UAB per tal d'impulsar els estudis i la recerca en

biologia estructural i impartir cursos de doctorat. Aquest investigador ha estat convidat a iniciativa de l'Institut de Biotecnologia i Biomedicina, dirigit per Francesc Xavier Avilés, un centre amb el qual manté forts lligams d'intercanvi científic.

També van intervenir en aquesta jornada Michael J.E. Sternberg, de l'Imperial College de Londres, qui va

presentar la ponència "Aprofitant l'estructura de les proteïnes en l'era postgenòmica"; Andrej Sali, de la Rockefeller University de Nova York, qui va parlar de "Modelització d'estructures 3D i acoblament de proteïnes", i Alfonso Valencia, del Centro Nacional de Biotecnología del CSIC de Madrid, que va presentar "Xarxes d'interacció de proteïnes". ■

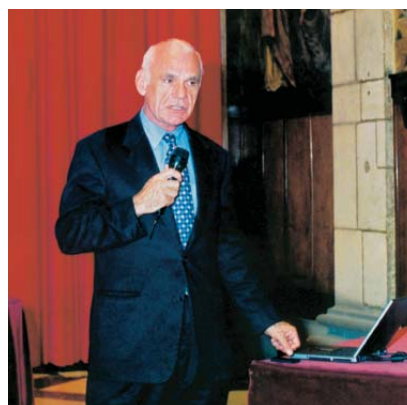


D'esquerra a dreta, Modesto Orozco, Pere Puigdomènech, Andreu Mas-Colell i Francesc Xavier Avilés.

## Els pares d'Internet, premi Príncep d'Astúries d'Investigació Científica i Tècnica

Lawrence Roberts, Robert Kahn, Vinton Cerf i Tim Berners-Lee, pares d'Internet, han estat guardonats amb el premi Príncep d'Astúries d'Investigació Científica i Tècnica, "per la seva contribució pionera al desenvolupament d'Internet i de la World Wide Web, sens dubte un dels avenços tecnològics més importants del nostre temps", segons el jurat d'aquest premi. L'acte de lliurament dels guardons es farà aquesta tardor a Oviedo.

Els premis Príncep d'Astúries estan destinats a guardonar la tasca científica, tècnica, cultural, social i humana realitzada per persones, equips de treball o institucions en l'àmbit internacional. El d'investigació científica i tècnica ha estat el tercer dels vuit premis Príncep d'Astúries que es concediran enguany. Cadascun dels



Lawrence Roberts va ser el conferenciant d'honor en els actes de celebració del desè aniversari del CESCA.

premis està dotat amb cinquanta mil euros, l'escultura creada i donada per Joan Miró, un diploma i una insígnia acreditatius. ■

## Introduïda la tesi número 500 al web del TDC@t

La Universitat de Barcelona va publicar la tesi número 500 a la base de dades TDC@t el passat 4 de juny. La tesi duu per títol *El tipo penal en Beling y los neokantianos* i el seu autor és Sergi Cardenal Montraveta. En el pròleg d'aquest text, el director de la tesi i càtedratic de Dret Penal, Santiago Mir, afirma que és molt positiva la difusió en línia de les tesis, ja que "són molts els avantatges d'una publicació en línia, des del seu abast universal i immediat [...], fins a les facilitats que implica la cerca de conceptes dins del text, a més del caràcter gratuït de l'accés. En qualsevol cas, la difusió de la ciència es veu alliberada dels condicionaments comercials i econòmics que restringeixen l'ús universal al coneixement". ■

[www.tdcat.cesca.es/TDCat-0604102-83801](http://www.tdcat.cesca.es/TDCat-0604102-83801)

## Intel i la UPC crearan un centre d'R+D en microprocessadors



Intel Corporation i la UPC han acordat desenvolupar conjuntament activitats de recerca i desenvolupament en l'àmbit dels microprocessadors i crear un centre d'R+D, l'Intel Labs Barcelona (ILB), abans d'acabar aquest any.

Aquest centre de recerca centrarà la seva activitat en el desenvolupament de tecnologies avançades de microprocessadors per als futurs dissenys de la sèrie Intel®, Itanium® i Intel® Pentium®. L'objectiu serà incrementar el rendiment dels processadors, reduir el consum i estendre la durada de la bateria. L'ILB serà dirigit per un equip d'investigadors del Departament d'Arquitectura de Computadors de la UPC, format per Antonio González (a la foto), que porta més de 16 anys investigant en microarquitectura de computadors, i Roger Espasa i Toni Juan, experts en microarquitectura amb experiència prèvia en el desenvolupament de processadors d'alt rendiment de 64 bits. ■

## Mateo Valero, Menció FIBIT a la investigació

La Facultat d'Informàtica (FIB) de la UPC va celebrar el passat 16 de maig el seu 25è aniversari amb un sopar, en el qual van participar més de 400 persones. Durant aquest acte, es van lliurar les primeres Mencions FIBIT (Premis a la Tecnologia de la Informació). La FIB i el cercle Fiber d'exalumnes de la facultat van decidir distingir el catedràtic i director del CEPBA-IBM Research Institute (CIRI), Mateo Valero, amb la Menció FIBIT a la investigació. La menció honorífica va ser la de l'exdegà de la Facultat d'Informàtica i un dels seus fundadors Martí Vergés. ■



## Es presenta l'Agència de Qualitat i d'Autoregulació d'Internet

El passat 10 de juny es va presentar l'Agència de Qualitat i d'Autoregulació d'Internet, promoguda pel Consell de l'Audiovisual de Catalunya (CAC) i per altres institucions públiques i empreses privades entre les quals es troba el CESCA. Els principals objectius de l'Agència són fomentar l'adopció de criteris i mesures d'autoregulació dels continguts que es posen en circulació per la xarxa; actuar com a plataforma de mediació en la resolució de conflictes entre proveïdors d'accés, distribuïdors de serveis i usuaris; contribuir a la creació de patrons contractuals i a l'establiment d'un sistema d'avaluacions i certificacions de qualitat; realitzar el seguiment de l'evolució i del respecte de drets com ara els de la propietat intel·lectual i industrial a la xarxa; impulsar el coneixement i la implantació voluntària de tecnologies i de filtres de protecció dels usuaris; vetllar pel compliment de la normativa sobre protecció de menors i sobre continguts indesitjables a la xarxa; fer un seguiment de les formes i de la quantitat

de publicitat present a la xarxa, i realitzar estudis i informes relatius a Internet, els seus usos, la seva influència social, el seu funcionament i els seus continguts.

Durant la presentació, els diversos ponents representants dels promotors de l'Agència van agrair al CAC el seu interès per impulsar l'autoregulació "en un medi incontrolable com és en si mateix Internet". A més, tots van destacar com a positiu el fet que l'Agència nasqués a Catalunya, l'autonomia amb més usuaris d'Internet de l'Estat, però van recordar que la seva vocació també havia de ser estatal i internacional, ja que "aquesta iniciativa puntera servirà d'exemple per a tota la xarxa". Francesc Codina, del CAC, va tancar la presentació ressaltant que si bé les noves tecnologies obren nous camins, "cal protegir els drets i les llibertats de sempre" i va demanar a tots els assistents la seva col·laboració en les diferents comissions de treball per tal que hi hagi una implicació de tots els estaments interessats. ■



## BCU organitza una recepció per als estudiants estrangers

Com cada any, el consorci Barcelona Centre Universitari (BCU) ha organitzat una recepció per als estudiants estrangers a les universitats catalanes. Aquest curs uns 7.500 estudiants de fora de Catalunya estan ampliant estudis a les universitats barcelonines o formen part d'algun programa d'intercanvi. La recepció es va fer al Palau Reial de Pedralbes i després dels parlaments va començar una festa als jardins del Palau, en la qual van participar un miler d'estudiants. El conseller Andreu

Mas-Colell va demanar als estudiants estrangers que quan tornin als seus països facin d'ambaixadors de la realitat cultural, lingüística i universitària catalana. Aquesta va ser la demanda també de l'alcalde de Barcelona, Joan Clos, i el rector de la UB, Joan Tugores, que va intervenir en nom de les 6 universitats barcelonines que formen part del consorci BCU (UB, UAB, UPC, UPF, URL i UIC). ■

[www.bcu.cesca.es](http://www.bcu.cesca.es)

# Modelització, bioinformàtica i supercomputació

**El començament del segle XXI passarà probablement a la història com la dècada del genoma. Mai un descobriment científic no ha tingut tanta repercussió mediàtica com la determinació del genoma humà, resultat dels esforços simultanis fets tant des de la recerca pública com la privada.**

## Modesto Orozco

Departament de Bioquímica i Biologia Molecular (Facultat de Química, Universitat de Barcelona) i Bioinformatics & Molecular Modeling Unit (Parc Científic de Barcelona).

## Xavier de la Cruz

Departament de Bioquímica i Biologia Molecular (Facultat de Química, Universitat de Barcelona), Bioinformatics & Molecular Modeling Unit (Parc Científic de Barcelona) i Institució Catalana per a la Recerca i Estudis Avançats (ICREA).

## F. Javier Luque

Departament de Físicoquímica (Facultat de Farmàcia, Universitat de Barcelona).

Hi ha diverses raons que justifiquen plenament aquest entusiasme. D'una banda, el coneixement del codi genètic obre unes expectatives insospitades en la determinació de les regles fonamentals que governen el nostre funcionament. A més, i potser encara més important, donarà claus sobre els mecanismes bàsics de les patologies. Finalment, amb menys repercussió pública, però indubtablement amb un gran impacte científic, els projectes de seqüenciació de molts altres organismes d'interès, com ara patògens o organismes bàsics a la dieta humana, tindran repercussions d'enorme interès terapèutic i biotecnològic (vegeu taula 1). No és fàcil sobreestimar l'efecte que aquest coneixement tindrà en la millora de la nostra qualitat de vida.

Els projectes genoma, amb tota la seva importància, no són més que la primera etapa en el procés d'extreure informació útil sobre la informació gènica. Així, una vegada coneguda la seqüència gènica d'una espècie encara cal:

- Localitzar els gens, els quals representen només una petita fracció de la totalitat del DNA d'un organisme superior.

- Assignar una funció per als gens localitzats.

- Determinar la variabilitat poblacional dels gens i les possibles conseqüències patològiques d'aquesta variabilitat.

- Esbrinar els "perfils d'expressió" dels diferents gens, és a dir, quins gens i per què són expressats en diferents etapes del desenvolupament o com a conseqüència de canvis en l'estat de l'organisme (malaltia, envelliment, dejuni...).

- Determinar la seqüència dels RNA missatgers corresponents al DNA genòmic seqüencial, és a dir, descobrir les regles de "l'splicing del RNAm".

- Esbrinar les pautes d'interacció entre proteïnes que modulen l'activitat metabòlica de l'organisme.

- Conèixer l'estructura tridimensional de les proteïnes codificades al genoma.

- Caracteritzar els centres de reconeixement de les proteïnes per part d'altres proteïnes, àcids nucleics o de petites molècules.

Només al final d'aquest procés estarem en condicions de desenvolupar nous fàrmacs i noves estratègies

terapèutiques. Encara resta, doncs, molt camí per recórrer.

Els reptes formulats com a conseqüència dels projectes genoma han conduït al desenvolupament de noves àrees del coneixement. Així, després de la localització i anotació dels gens, típicament teòrica, la genòmica funcional tracta d'obtenir informació sobre la variabilitat gènica, els perfils d'expressió, i les pautes "d'*splicing* alternatiu". La proteòmica estudia les pautes d'expressió del genoma a nivell proteic i tracta d'establir les pautes d'interacció entre proteïnes. La genòmica estructural pretén determinar massivament l'estructura tridimensional de totes les proteïnes d'un organisme. Finalment, la modelització molecular localitza i caracteritza els centres d'unió de proteïnes i, a partir d'aquesta informació, procedeix a dissenyar noves estratègies terapèutiques.

Tot aquest procés es caracteritza per un flux enorme de dades heterogènies i molt pobres en informació. Només inspeccionant l'evolució de les bases de dades de seqüència i estructura (vegeu figures 1 i 2) podem veure que el volum de dades per a processar actualment és enorme, i que el previst per als propers anys pot desbordar totes les nostres capacitats d'anàlisi. És per això que ha sorgit una altra àrea del coneixement, la bioinformàtica, que té per objectiu fonamental accelerar l'obtenció d'informació biològicament útil a partir de dades disperses, molt contaminades per soroll i intrínscament

Taula 1. Volum de genomes seqüenciats en diverses espècies.

Regne	Total Genomes	Total Espècies	Total Parells de Bases
Archaea	15	15	33.855.871
Bacteri	90	69	271.694.081
Eucaryotes	11	11	3.632.030.499
Virus	493	53	11.357.807

pobres en informació.

L'ordinador ha estat probablement el protagonista principal de la revolució genòmica. L'impressionant èxit de l'empresa Celera en la seqüenciació del genoma humà hauria estat impossible sense l'ús extensiu de supercomputadors, que van permetre ordenar correctament el trencaclosques de seqüències extret dels robots de

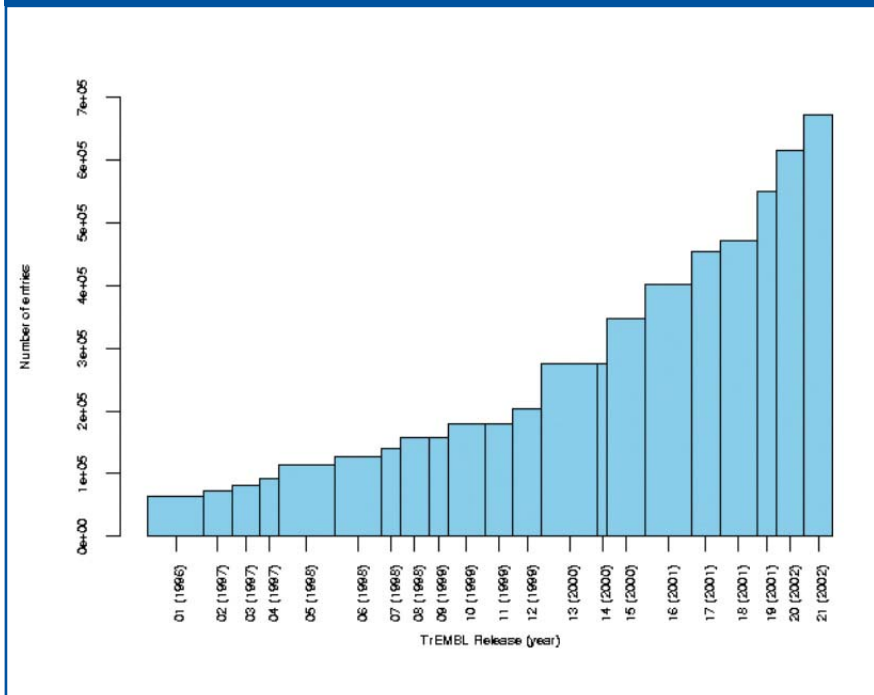
seqüenciació. La localització i l'anotació de gens és també una àrea on els superordinadors són actualment les eines més potents de treball, ja que l'anotació experimental és lenta, difícil i molt sensible a errors. Algorismes computacionals de mineria de dades són els que permeten netejar les dades derivades d'experiments de genòmica funcional, determinar agrupa-

cions de gens expressats de manera coordinada i trobar correlacions sovint difuses entre perfils d'expressió i la situació metabòlica de l'organisme. La resolució d'estructures tridimensionals de proteïnes implica també un gran esforç computacional i encara és més elevat l'esforç necessari per caracteritzar centres d'unió de proteïnes i dissenyar molècules que puguin interaccionar amb ells. No és arriscat, doncs, dir que els bioinformàtics són un dels col·lectius amb més necessitats de grans equips de càlcul.

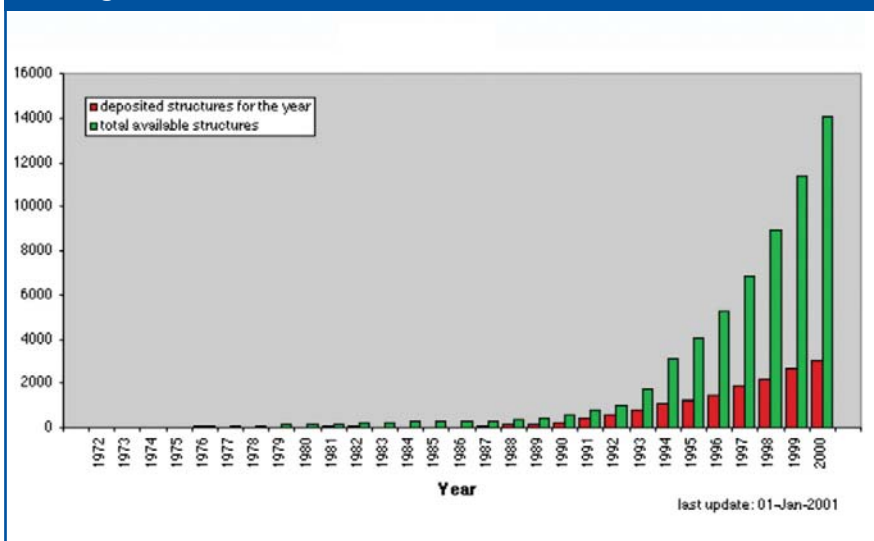
La bioinformàtica es caracteritza per l'heterogeneïtat de problemes per a estudiar. Des de localitzar un gen a interpretar un "xip" de DNA, des de trobar relacions metabòliques entre dues proteïnes fins a determinar el mode d'unió d'un fàrmac a un receptor biològic. Això fa que el tipus d'algorismes computacionals, i fins i tot el tipus de maquinari necessari, siguin diversos i canviïn a gran velocitat. L'experiència del nostre grup de recerca és potser il·lustrativa de l'evolució del camp. Fa cinc anys un 95%-100% de la programació al nostre grup era en Fortran i pràcticament tots el programes comercials que fèiem servir eren també codis Fortran. El coll d'ampolla era el càlcul numèric i les operacions de coma flotant. Actualment, cada vegada és més necessària la programació i l'ús de programari en C o Perl, fet que indica un augment en el nombre de problemes relacionats amb el tractament de cadenes de caràcters alfanumèrics. En general, la bioinformàtica requereix d'un gran poder computacional en operacions de coma flotant, així com manipulació de cadenes de caràcters. És necessària també una gran capacitat d'espai permanent en disc que permeti accedir de manera eficient a bases de dades de manera local i per molts càlculs és convenient disposar de gran quantitat de memòria. Amb aquests requisits no pot estranyar que alguns dels ordinadors actuals més potents estiguin dedicats de manera exclusiva a la bioinformàtica.

Les operacions de coma flotant han estat tradicionalment relacionades amb càlcul numèric, lligades a programes

**Figura 1. Dimensió de la base de dades de seqüència TrEMBL**



**Figura 2. Dimensió de la base de dades d'estructura PDB**



### Va de ratolins

En català s'han normalitzat els termes següents, que especifiquen els diversos tipus de ratolins en el camp de la informàtica.

El **ratolí de bola** funciona mitjançant el moviment d'una esfera que sobresurt de la part superior del ratolí i que pot estar incorporada a la mateixa superfície del teclat o en un dispositiu a part.

El **ratolí òptic** es val d'un sensor òptic que transmet la informació necessària per al desplaçament de la busca per la pantalla.

El **ratolí sense cable** emet ones de radiofreqüència que són captades per un receptor connectat a la unitat central de processament.

El **ratolí de botó** és el que té forma de botó integrat al teclat, la part superior del qual es fa girar per dirigir el desplaçament de la busca.

El **ratolí tàctil** funciona fent desplaçar el dit per una superfície plana sensible.

De fet, el ratolí convencional i més habitual actualment se sol designar simplement amb la forma **ratolí**, tot i que també se'n pot dir **ratolí de bola**, perquè té una esfera situada a l'interior que desplaça dos eixos que regulen el moviment del cursor.

de mecànica quàntica, clàssica modelització molecular. Els primers són programes amb elevats requeriments computacionals, però amb un avantatge clar: el càlcul mecanoquàntic és en general estàtic i, per tant, la simulació té un temps de CPU finit. Les simulacions de mecànica clàssica són molt més eficients computacionalment, però per la visió dinàmica del sistema, el temps de CPU del càlcul pot ser

### Alguns dels ordinadors més potents estan dedicats de manera exclusiva a la Bioinformàtica.

quasi infinit (vegeu taula 2). Finalment, molts dels programes de modelització molecular, com ara els programes de *docking* són extremadament eficients computacionalment i poden finalitzar en pocs segons de CPU. El problema és que aquest tipus de càlcul s'ha de repetir milers de vegades per ser útils. A tall d'exemple: el nostre programa de *docking* cMIP permet en condicions òptimes trobar els modes d'unió d'un fàrmac a un centre actiu en només 4 segons de CPU d'un processador de l'ordinador Guillerries (Compaq Alpha-Server HPC320) del CESCO. No obstant això, analitzar una quimioteca normal d'una empresa farmacèutica d'uns

500.000 compostos respecte a 20 possibles dianes terapèutiques requeriria més de 15 mesos de CPU.

Les operacions amb llistes de caràcters són les típiques de manipulació de seqüències. Programes com Blast, Fasta o Psiblast formen part del decorat natural de qualsevol laboratori de biologia molecular. Els codis són en general sorprenentment eficients, però una vegada més el problema és la necessitat de repetir els càlculs milers de vegades, accedint sovint a grans bases de dades, la qual cosa retarda molt el càlcul. A tall d'exemple, el nostre grup ha estat localitzant possibles seqüències diana per teràpies d'antigen i d'antisensit al virus de la sida. Determinar aquestes seqüències implica 30 segons de CPU de Guillerries i, si aquestes seqüències es troben a l'home, 2 hores. Fer l'anàlisi creuada per a tots els patògens humans implicaria un esforç computacional de mesos de CPU.

L'horitzó de treball que podem veure implica unes necessitats computacionals que ultrapassen les capacitats dels actuals ordinadors. L'increment de seqüències dipositades, i especialment el resultat dels projectes de genòmica estructural, produirà un augment en el nombre de problemes per a tractar que incrementarà la demanda de recursos computacionals. Grans ordinadors paral·lels que permetin distribuir un treball en centenars de processadors i CPUs almenys deu vegades més potents que les actuals seran necessaris els propers anys perquè la supercomputació no sigui el fre de la revolució genòmica. ■

Taula 2. Diferents sistemes proteics en simulació de dinàmica molecular clàssica al nostre grup\*

Proteïna (codi PDB)	# àtoms	Durada trajectòria (ns)	Temps CPU (hores) (Guillerries)
TAFii320	15.372	5x100	90.000
2CI2	10.685	30	2.400
1ARK	13.270	30	3.000
1SRO	15.632	30	4.000
4ICB	12.817	30	2.900
2GB1	12.408	30	3.000
1ICE1	14.907	30	3.500

\*La durada de la trajectòria està especificada en nanosegons ( $10^{-9}$  seg) i el temps de CPU (per processador) està sempre referit a l'ordinador Guillerries del CESCO.

## Constituïda la nova GUCAP

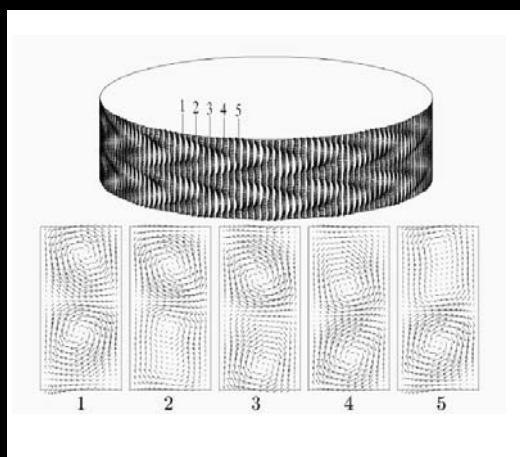


Els membres de la comissió es van reunir el passat 17 d'abril.

El passat 17 d'abril es va constituir la nova Comissió de Grans Usuaris de Supercomputació (GUCAP), que s'encarrega de debatre els temes de càlcul (polítiques d'assignació de recursos, criteris per a les noves ad-

quisicions de maquinari i programari, formació...) per tal de millorar els nostres serveis. Aquesta comissió està formada pels Caps dels 10 projectes de més consum i un màxim de vuit experts. ■

## F O T O / N O T Í C I A



*L'estudi de molts problemes governats per equacions en derivades parcials dissipatives requereix un bon coneixement del sistema dinàmic subjacent. Això implica el càlcul de les seves varietats invariants (punts fixos, òrbites periòdiques, etc.) tant si són estables com si no. Amb aquest coneixement és possible entendre la dinàmica global i construir, si cal, estratègies de control del sistema.*

*Aquestes tècniques són emprades sovint en sistemes de dimensió baixa. L'objectiu del projecte que presentem és l'aplicació d'aquestes tècniques a sistemes que provenen de la mecànica de fluids. Una vegada discretitzades les equacions, els sistemes que s'obtenen són de dimensió molt elevada (entre milers i milions d'equacions). Cal, llavors, desenvolupar tècniques específiques de càlcul adaptades a aquesta situació.*

*L'objectiu de l'equip investigador del Dept. de Física Aplicada de la Universitat Politècnica de Catalunya format per M. Net, A. Alonso, J. Antoni-joan i J. Sánchez és el desenvolupament de codis d'aplicació general en el context abans esmentat i la seva aplicació a problemes específics de fluids impulsats pel moviment de las parets del recipient que els contenen o per diferències de temperatura (convecció tèrmica). La figura mostra una solució de l'anomenat problema de Taylor-Couette consistent en l'estudi d'un fluid confinat entre dos cilindres coaxials que poden girar de forma independent. És un exemple de les moltes configuracions complexes que el fluid pot adoptar quan els dos cilindres giren en el mateix sentit amb diferents velocitats angulars. Es mostra una perspectiva del camp de velocitats sobre una superfície cilíndrica i diverses seccions verticals del fluid. ■*

Edita



Patrocina



Generalitat  
de Catalunya



FUNDACIÓ  
CATALANA  
PER A LA  
RECERCA

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

CSIC

TERAFLOP

DIRECTOR

Miquel Huguet

COORDINACIÓ

Xavier Pereira

REDACCIÓ

Teresa Via

Helena Pujol

COL-LABORACIÓ

Gemma Mas

(TERMCAT)

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà & Associats

CESCA

Gran Capità, 2-4

08034 Barcelona

Tel. 93 205 6464

Fax: 93 205 6979

<http://www.cesca.es>

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

DIPOSIT LEGAL: B-33512-94

ISSN: 1134-6671