

# TERAFLOP

REVISTA DEL CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA

CESCA 1991  
2001  
anys

Núm. 68 • Gener 2003

## Adjudicacions de supercomputació, Anella, SAR i CATNIX



### ENTREVISTA

- **Ramon Carbó-Dorca,**  
director de l'Institut de Química  
Computacional
- **Conclusions de la TSIUC**
- **Projectes de  
comunicacions avançades**

# ADJUDICACIÓ DELS CONCURSOS Supercomputació, CATNIX, Anella Científica i el seu Accés Remot

**E**l CESCA ha resolt l'adjudicació dels tres concursos públics convocats per renovar tecnològicament l'Anella Científica i el seu Servei d'Accés Remot, el Punt Neutre d'Internet de Catalunya (CATNIX) i l'equipament de supercomputació, amb un pressupost total de 2.813.000 €. En declaracions d'Antoni Oliva, director de la CIRIT i president de la Comissió Permanent del CESCA, "per tirar endavant la recerca d'un país cal posar eines a l'abast dels investigadors i de la comunitat univer-

sitària que els permetin competir a nivell internacional. Pel que fa a les comunicacions, la nova Anella Científica se situa novament, com en ser creada l'any 1993, al capdavant de les xarxes dedicades a la recerca. En l'àmbit de la supercomputació, les adquisicions realitzades enguany no només milloren la capacitat de càlcul i d'emmagatzematge disponibles per als investigadors, sinó que reforcen l'aposta del CESCA d'oferir serveis a projectes internacionals".

## Arriba el nou equipament de supercomputació i d'emmagatzematge

Els usuaris del CESCA disposen des d'aquest mes de gener d'un nou supercomputador, un HP AlphaServer Marvel amb 16 processadors Alpha EV7 a 1,15 GHz, que ha estat adquirit gràcies a una subvenció de la Direcció General de Recerca de la Generalitat de Catalunya. Aquest sistema, un dels primers que s'instal·len a Europa, és la segona generació d'una nova arquitectura dissenyada per Compaq, ara part de la nova Hewlett-Packard, que a més de proporcionar un bon rendiment a treballs monoprocesador (Gaussian en particular), permetrà executar en paral·lel noves aplicacions com Gammess, Amber i Fluent.

També s'ha adquirit un servidor de fitxers DS25 i un subsistema de discos EVA. El primer facilitarà la feina als investigadors centralitzant les seves dades, fins ara disperses en cadascuna de les màquines del Centre, mentre que el segon aportarà una capacitat d'emmagatzematge en disc addicional de 2,7 TB, majoritàriament a usar pel projecte GAIA de l'Agència Espacial Europea.

El Marvel, un GS1280, és un sistema multiprocessador simètric (SMP) format per 16 processadors Alpha EV7 a

1,15 GHz de freqüència, que proporciona una gran potència de càlcul, amb un rendiment punta ( $R_{punta}$ ) de 2,30 Gflop/s; per tant, els 16 processadors instal·lats proporcionen un  $R_{punta}$  agregat de 36,80 Gflop/s. El sistema instal·lat disposa de 16 GB de memòria principal i 655 GB de disc intern. Té 10 discos Ultra3 SCSI de 10.000 rpm que estan connectats a través de 2 controladors Ultra3 SCSI a 160 MB/s, vuit de 72,8 i dos de 36,4. El sistema operatiu utilitzat és Tru64 UNIX 5.1B, com l'actual de l'HPC320.

El model EV7 de la família 21364 està fabricat amb tecnologia CMOS de 0,18 micres amb 7 nivells d'interconnexió de coure i alimentació de 1,65 V. El

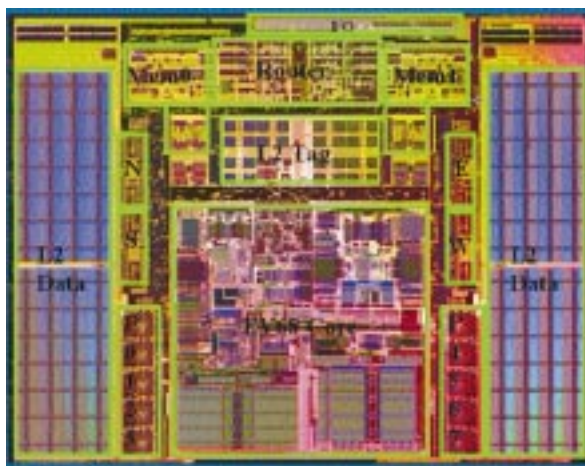
xip ocupa una superfície de 21,1x18,8 mm<sup>2</sup> i conté 152 milions de transistors (figura 1). Com el seu antecessor EV68 (vegeu el TERAFLIP número 59), disposa de dues memòries cau de primer nivell de 64 KB cadascuna, una per a instruccions i l'altra per a dades, ambdues amb una organització associativa de dues vies.

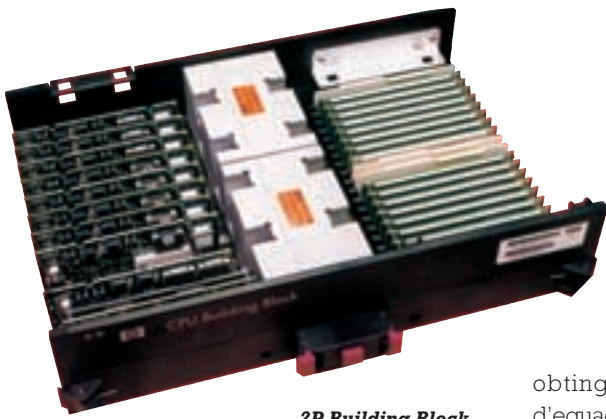
No obstant això, l'EV7 també integra en el xip la memòria cau de segon nivell, la qual cosa ha fet que es reduïsi de 8 a 1,75 MB, amb una organització associativa de set vies, en comptes de directe. El xip també integra dos controladors a memòria amb una capacitat agregada de 12,8 GB/s, quatre ports de comunicació (nord, sud, est i oest) entre processadors de 6,4 GB/s cadascú i un d'entrada/sortida a 3,2 GB/s.

El nou xip ha millorat significativament la relació entre amplada de banda a memòria i rendiment punta: l'EV7 aconsegueix 5,57 bytes per flop (12,80 / 2,30) mentre que l'EV68, 1,56 (2,60 / 1,67). Per tant, proporciona un excel·lent rendiment per a les aplicacions característiques de la nostra càrrega de treball (Gaussian i Amber): un cop la màquina estigui operativa, s'espera que l'*speedup* dels nostres benchmarks s'incrementi proporcionalment a la freqüència del processador (un 37%).

L'arquitectura de la família de servidors basats en el processador EV7, coneguts de forma genèrica com a Marvel, està construïda mit-

Figura 1. Distribució d'unitats funcionals a l'EV7.





**2P Building Block.**

jançant la unió directa dels processadors a través dels seus quatre ports de comunicació formant una estructura toroïdal. La malla de processadors pot formar-se unint blocs de dos o vuit processadors. La màquina instal·lada està formada per dos blocs de vuit processadors, com es pot veure a la figura 2. A diferència de l'ES40, les latències d'accés a memòria són asimètriques, des de 75 nanosegons (ns) per a la memòria local a 270 per a la més remota en una configuració de 16 processadors.

Aquesta arquitectura està especialment dissenyada per executar treballs paral·lels a la vegada que es poden dur a terme un gran nombre de treballs seqüencials sense degradació del sistema. A l'hora d'avaluar el rendiment del node (màquina sencera en aquest cas) pel benchmark UB3JN s'espera obtenir que el nombre de treballs per hora sigui de 14,86. En contrast, per als nodes ES40 (amb quatre processadors) de l'HPC320 se n'obtenen 2,34. Així, 16 processadors donarien 9,36, equivalents a 12,82 si es normalitza el resultat per a una freqüència superior del pro-

cessador en un 37%. Per tant, el Marvel està donant un 16% més de rendiment més enllà de la pròpia freqüència del rellotge.

Les millores de rendiment de l'arquitectura del Marvel també es poden contrastar observant els resultats

obtinguts per resoldre un sistema d'equacions lineal ( $R_{max}$ ): 31,28 Gflop/s, un 85% del seu rendiment punta (36,80). En contrast, l'HPC320, amb el doble de processadors, n'obté 40,84, un 77% del punta (53,31).

### DS25, servidor de fitxers

A més del servidor de càlcul Marvel, s'ha adquirit un DS25 com a servidor de fitxers que facilitarà la feina als investigadors centralitzant les seves dades i un subsistema de discos StorageWorks Enterprise Virtual Array (EVA), model 2C6D-B, que incrementarà la capacitat d'emmagatzematge en disc del Centre amb 2,7 TB, fins a un total de 6,15 TB.

Fins ara, cada servidor de càlcul incloïa el seu propi espai en disc tant per als fitxers temporals com els permanents dels usuaris de manera que cadascuna de les màquines de càlcul funcionava de forma independent. Aquests nous recursos proporcionaran dos avantatges:

D'una banda, els usuaris es podran connectar amb el mateix codi i paraula d'accés a qualsevol supercomputador i veuran les mateixes dades independentment de la màquina a la qual es connectin. A més de les dades perma-

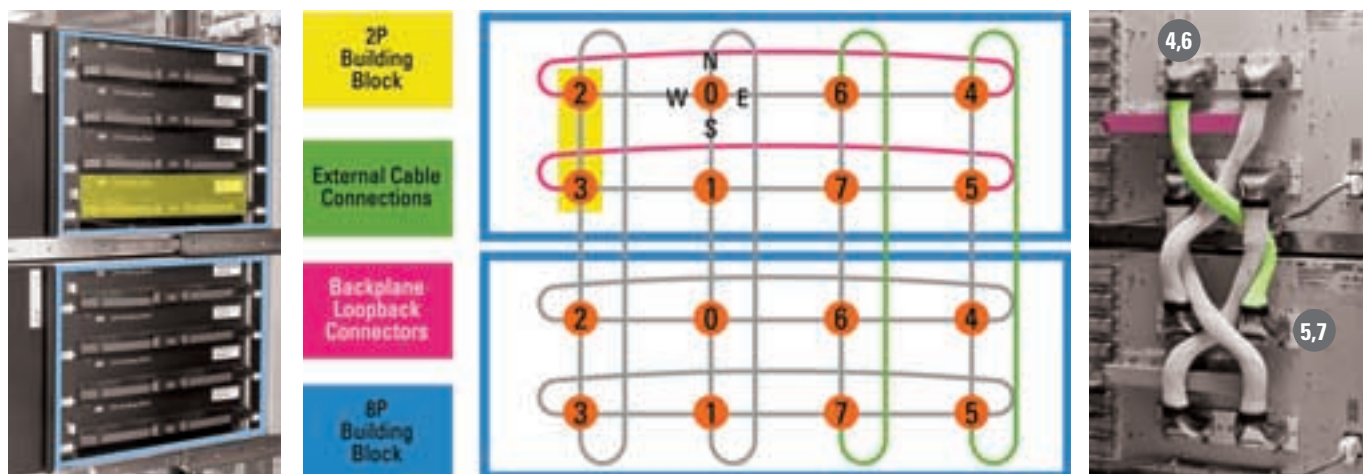
nents, aquest servidor també s'encarrega de l'àrea d'*scratch*, en la qual es guarden dades temporals durant set dies. Així, aquestes dades són visibles des de qualsevol màquina i no només des del supercomputador des d'on han estat generades ja que aquesta serà única per a tot el maquinari.

De l'altra, els discos es podran compartir entre diverses màquines, fins i tot de diversos fabricants amb diferents sistemes operatius (HP-UX, Sun Solaris, IBM AIX, Microsoft Windows NT...). Així, projectes que usen grans bases de dades, com el GAIA, poden experimentar la seva execució en màquines de diferent arquitectura sense necessitat que cadascuna disposi del seu propi espai en disc. També, el seu cicle de vida es fa independent dels propis supercomputadors de manera que es poden continuar usant més enllà quan aquests ja s'han de posar fora de servei.

El DS25 està format per dos processadors Alpha EV68 a 1 GHz (amb 8 MB de memòria cau de segon nivell cadascun), 4 GB de memòria principal i 72 GB de disc Ultra3 SCSI. Per a la connexió a la xarxa i als diferents sistemes d'emmagatzematge disposa de dos controladors Gigabit Ethernet, un controlador ATM a 155 Mbps, un controlador FastEthernet a 100 Mbps, dos adaptadors Ultra SCSI Wide per la connexió al robot StorageTek TimberWolf 9740 i dos adaptadors PCI Fiber Channel a 2 Gbps.

El subsistema de discos EVA és la nova generació de cabines de discos

**Figura 2.** Estructura toroïdal del Marvel.



d'HP que complementa i estén les característiques de l'anterior Modular Array (els nostres MA6000 o els MA8000 del CESGA), incorporant nous elements que li proporcionen més rendiment (fins a 150 MB/s per a escriptura i 350 per a lectura), més capacitat (fins a 6 TB), i més fiabilitat i eficiència en la seva configuració i utilització.

El subsistema instal·lat disposa de dos controladors HSV110, amb 1 GB de cau i dos ports de 2 Gbps cadascú, configurats per alta disponibilitat, i de 52 discos, 28 de 36,4 GB i 24 de 72,8 GB, que proporcionen una capacitat d'emmagatzematge de 2,7 TB, la gran majoria (1,7) a usar pel projecte GAIA i la

resta són per a dades permanents dels usuaris (0,6) i del sistema (0,4). L'espai en disc per cada projecte passarà dels actuals 100 MB a 500.

L'EVA es connecta en una xarxa Storage Area Network (SAN) amb dos

commutadors de 16 ports a 2 Gbps cadascú, amb redundància de camí i balanceig de la càrrega per a un major rendiment d'E/S. De moment, a aquesta xarxa hi ha connectats directament l'HPC320, el Marvel i el DS25. ■

### Característiques tècniques i rendiment dels processadors

	GS1280	HPC320	Beowulf
Processador	EV7 (21364)	EV68 (21264)	EV67 (21264)
Freqüència (MHz)	1.150	833	600
Cau de dades (L1 KB/L2 MB)	64/1,75	64/8	64/8
R <sub>punta</sub> (Gflop/s)	2,30	1,67	1,20
Linpack TPP (Gflop/s)	1,90	1,28	0,88
Linpack 100x100 (Gflop/s)	0,95	0,64	0,47
SPECint2000	900	565	355
SPECfp2000	1.450	777	400

## Al-Pi Telecomunicacions i Auna Telecomunicaciones continuen com a proveïdors de l'Anella i del seu Servei d'Accés Remot

**A** més d'adjudicar-se els concursos per actualitzar el maquinari de supercomputació, també s'ha adjudicat el de prestació de serveis de l'Anella Científica i del seu Accés Remot. La nova Anella, que estarà operativa al maig, continuarà essent proveïda per Al-Pi Telecomunicacions per un període de tres anys, prorrogable dos anys més. L'Anella utilitzarà tecnologia Gigabit Ethernet sobre DWDM (Dense Wavelength Division Multiplexing), una tecnologia òptica puntera que incrementa l'amplada de banda de la xarxa ja que permet la transmissió de múltiples senyals simultàniament. D'aquesta manera, una única fibra es transforma en múltiples fibres virtuals.

La renovació de la tecnologia i la infraestructura de la xarxa permetrà dotar l'Anella d'una més gran capacitat de transmissió de dades entre totes les institucions connectades de manera que es faciliti l'intercanvi d'informació, l'accés als recursos del CESGA i del CBUC, l'enllaç amb les xarxes de recerca RedIRIS i amb totes les que aquesta tinguin intercanvi de tràfic (l'europea Géant, l'americana Internet2 i la canadenca Canarie, entre d'altres), i l'ús i el desenvolupament d'aplicacions de banda ampla.

Auna Telecomunicaciones, que integra les operadores de telecomunicacions Retevisión i Aunacable, proveeix els investigadors amb connexions ADSL, XDSI i XTB amb tarifa plana per facilitar el teletreball a un preu avantatjós des del passat 1 de gener. D'aquesta manera, la comunitat científica pot accedir amb qualitat de servei als recursos de l'Anella Científica d'accés restringit, com poden ser la Biblioteca Digital del Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya, i els serveis de supercomputació del CESGA, entre d'altres. D'aquesta manera, els recursos disponibles per a l'usuari de l'accés remot són els mateixos, indistintament de si es connecta des del seu lloc de treball o des de la seva llar.

Fins ara, investigadors i professors podien connectar-se a l'Anella des del seu domicili a través d'XTB, amb tarifa plana en horari reduït o sense, amb XDSI, sense tarifa plana, i amb ADSL. Des d'aquest mes, poden contractar a més una tarifa plana amb la connexió XDSI i una tarifa plana de 24 hores amb XTB.

L'Anella disposa d'una sortida pròpia a Internet, independent de RedIRIS, amb un cabal contractat garantit de 4 Mbps i amb una excel·lent connectivitat. Aquesta sortida complementa l'accés a Internet per a les institucions de l'Anella afiliades a RedIRIS i és utilitzada per aquelles entitats connectades a l'Anella però sense afiliació a RedIRIS. Aquesta línia pot ésser utilitzada directament pels investigadors que ho necessiten a través del Servei d'Accés Directe. La sortida pròpia a Internet també és utilitzada pel servidor *proxy-cache*, que optimitza els accessos via web.

## El Punt Neutre d'Internet, amb tecnologia gigabit

**L'**equipament del Punt Neutre d'Internet de Catalunya, CATNIX, ha estat renovat perquè suporti aplicacions de banda ampla amb tecnologia gigabit, gràcies al finançament del Centre d'Innovació i Desenvolupament Empresarial (CIDEM). A més d'actualitzar l'equipament de commutació del CATNIX, també ha calgut renovar el d'interconnexió cap a l'Anella Científica. L'empresa Sistemas Avanzados de Tecnología (Satec), guanyadora del concurs, ha instal·lat un Cisco 6506 com a equipament de commutació del CATNIX, i un Cisco 6513 com a encaminador de l'Anella Científica.

Els nous equips compleixen els requisits d'una instal·lació d'alta disponibilitat com són redundància de fonts d'alimentació i processadors, modularitat, mecanismes de reserva d'amplada de banda i creació de Virtual Private Networks de nivell 2, gran capacitat de commutació, *multicast*, IPv6, funcionament sense pèrdua de qualitat de servei sota condicions normals d'explotació, facilitat de gestió, interoperabilitat amb l'equipament incorporat i capacitat d'exportació de tràfic per ser analitzat. ■

Amb la consolidació del servei TDX s'ha implementat la seva interfície en tres idiomes (català, castellà i anglès) i s'ha incorporat una nova classificació de les tesis per matèries per facilitar la cerca per àrees de coneixement, ja que fins ara es classificava únicament per universitat. Si bé aquesta classificació ha servit per incentivar la incorporació de tesis per part de les universitats, un cop superada aquesta primera etapa de posada en marxa del projecte, calia establir un altre sistema classificatori més útil per a l'usuari. Les matèries corresponen a les que actualment són usades per classificar els sumaris de revistes del Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya (CBUC), basades en la Classificació Decimal Universal (CDU). El primer nivell és el següent: generalitats, filosofia i psicologia, religió i teologia, ciències socials, ciències pures i naturals, ciències aplicades, belles arts, lingüística i literatura, i geografia i història.

També s'han incorporat dues noves seccions amb estadístiques d'ús i d'accés. Les d'ús recopilen els indicadors següents: nombre de tesis incorporades al servidor per universitat, tesis per matèria i universitat, nombre de tesis consultades per universitat, accessos a fitxers .pdf per universitat, nombre de megabytes transferits per universitat, i les 30 tesis més consultades durant l'any natural. Els dos primers indicadors reflecteixen la incorporació de tesis al servidor, mentre que els altres n'indiquen l'ús. Les estadístiques d'ús són programes fets a

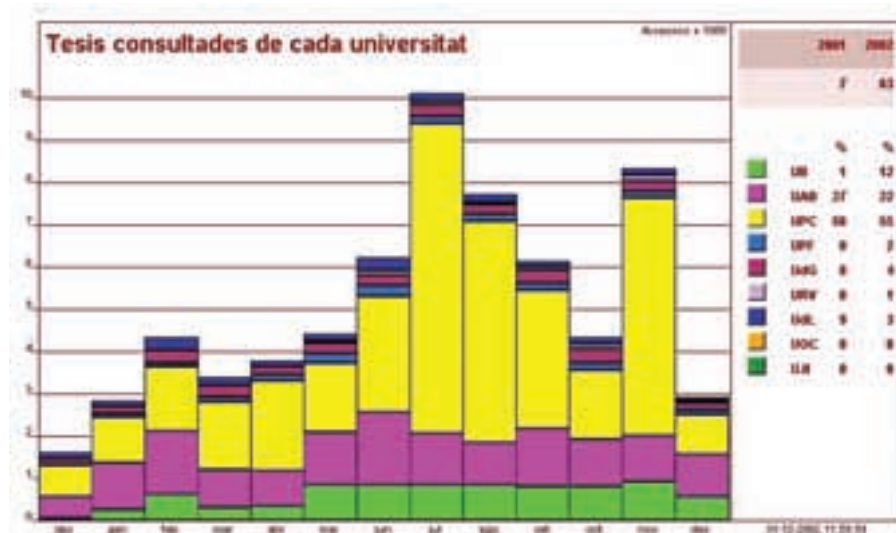
## El TDX incorpora noves funcionalitats al seu web

**A** mitjan d'octubre, el prototip TDC@t es va consolidar com el nou servei Tesis Doctorals en Xarxa, TDX. A més de disposar d'una nova imatge (vegeu TERAFLOR 66), el TDX incorpora al seu web noves funcions: la seva interfície està disponible en català, castellà i anglès; introdueix una nova classificació de les tesis basada en matèries a més de la institució que la publica, i incorpora noves estadístiques i indicadors per fer-ne un seguiment més acurat.

mida pel CIESCA per disposar d'aquests indicadors. A més, proporcionen dades reals ja que filtren els accessos realitzats des de robots d'escaneig de la xarxa.

Les d'accés proporcionen les estadístiques generals d'accés al web següents: els 40 arxius més acceditos durant l'any ordenats per nombre d'accessos, els 40 països o dominis que

més han accedit al servidor durant l'any en curs, els accessos acumulats per hora durant l'any en curs, els accessos per dia durant el mes actual, els accessos per setmana durant les últimes 4 setmanes, i els accessos per mes durant l'any en curs. Aquestes estadístiques són generades pels programes de domini públic wwwstat 2.0, gr\_wwwstat i Image Magick 5.1.



### La Universitat de les Illes Balears s'incorpora al TDX

El rector de la Universitat de les Illes Balears (UIB), Llorenç Huguet; el president de la Comissió Permanent del CIESCA, Antoni Oliva, i el president del CBUC, Joan Majó, van signar el passat 13 de desembre el conveni per a la incorporació d'aquesta universitat al TDX, amb l'objectiu que hi pugui difondre electrònicament les seves tesis doctorals. Amb la incorporació de la UIB, ja són 10 les universitats que utilitzen el servei TDX per posar a l'abast de tothom el contingut de les tesis doctorals que s'hi llegeixen.

**Antoni Oliva, Llorenç Huguet i Joan Majó (d'esquerra a dreta) signen el conveni d'incorporació de la UIB.**

## LA TERCERA TSIUC TRACTA ELS MODELS DE GESTIÓ DELS SERVEIS INFORMÀTICS

# Antoni Oliva: "Competitivitat i cooperació no són excloents"

**E**l passat 5 de novembre, la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) va acollir la tercera Trobada dels Serveis Informàtics de les Universitats de Catalunya (TSIUC). En aquesta edició, sis ponents van presentar, des de la seva experiència, els diversos models a l'abast de les universitats per gestionar els seus Serveis Informàtics: *outsourcing*, *insourcing*, *externalització*, *consorci* i *gestió interna*. Tots ells vàlids sempre que responguin a l'estratègia i als objectius de les universitats, es va concloure al final de la trobada.

Els encarregats d'obrir la tercera TSIUC van ser el rector de la UAB, Lluís Ferrer; el secretari de Telecomunicacions i Societat de la Informació, Jordi Alvinà, i el director del CESCO, Miquel Huguet. Ferrer va afirmar que observava aquesta Trobada "amb

entusiasme, com el nen que mira el futur, però també com el malalt que veu avançar la seva malaltia". El rector de la UAB va explicar que d'una banda "era apassionant" pel que representen les noves tecnologies però també "preocupant per la incertesa d'un ca-

mí poc definit". Jordi Alvinà va assegurar que "quan les universitats han treballat en un projecte comú han aconseguit fites importants, que són referència també fora de Catalunya". Alvinà va posar el CESCO i el Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya (CBUC) com a exemples a tenir en compte "per generar sinergies entre les universitats més enllà d'aquests àmbits". Miquel Huguet va afirmar que, el CESCO, com a consorci, ha pogut constatar durant aquests anys que aquest ha estat un model vàlid en supercomputació i comunicacions i que el Centre està obert a assumir nous reptes.

En aquesta trobada van participar com a ponents Llorenç Guilera, director dels Serveis Informàtics de la UAB; Rafael Macau, director dels Estudis d'Informàtica i Multimèdia de la UOC, qui va substituir Anna Guilló, directora d'Operacions del Centre de Telecomunicacions i Tecnologies de la Informació de la Generalitat de Catalunya; Francesc Solà, soci de TRANS i exgerent de la UPC; Manuel Peña, director executiu de projectes de desenvolupament del Servei d'Informàtica de la UAB, qui va substituir Jordi Montserrat, gerent de la UAB; Joan Majó, president del CBUC, i José Miguel Castellet, director del Servei d'Informàtica de la Universitat Jaume I. El debat va ser moderat per Joan Turro, director executiu de l'Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca. La tercera TSIUC va comptar amb 105 assistents provinents sobretot de les universitats de Catalunya, però també de la resta de l'Estat.

En la cloenda, Antoni Oliva, director de la CIRIT, va afirmar que havia estat un encert la creació del CESCO, ja que proporciona un bon servei als investigadors i permet que els serveis informàtics de les universitats puguin oferir un millor servei a la resta dels seus usuaris. Segons Oliva, aquest tipus de trobades són molt satisfactòries perquè permeten que les universitats col·laborin. Oliva va afirmar que "competitivitat i cooperació no són excloents, ja que la competitivitat és bona per no caure en la mediocritat, però, d'altra banda, les universitats estan finançades amb fons públics i, per tant, cal evitar duplicitats".

JORDI PARETO



D'esquerra a dreta, Jordi Alvinà, Lluís Ferrer i Miquel Huguet.

JORDI PARETO



La TSIUC'02 es va celebrar a les instal·lacions de la UAB.



## Resum de les conclusions

**Joan Turró**

**Director executiu de l'Agència de Gestió  
d'Ajuts Universitaris i de Recerca**

**1.** Els serveis informàtics de les universitats conformen un complex teixit, cada vegada més ampli, de serveis de caràcter divers, que tenen en comú una constant renovació i ampliació. Aquest conjunt de serveis informàtics s'han de prestar necessàriament de forma integrada i, per aconseguir un bon nivell de qualitat global cap als usuaris, és imprescindible que els seus diferents components interactuïn permanentment.

Dintre de la tipologia de serveis que conformen els serveis informàtics, com a síntesi, esmentem els següents:

- L'adquisició, el manteniment i la prestació de serveis de suport del conjunt del maquinari informàtic de les universitats, tant els de caràcter centralitzat com els de caràcter descentralitzat.
- El traçat, el manteniment, l'evolució i el servei de suport de les anomenades xarxes informàtiques. En aquest apartat s'inclouen les connectivitats tant externes com internes, així com les estructures cada vegada més importants de seguretat i acreditació.
- El manteniment i els serveis de suport a un ampli, divers i sofisticat inventari d'aplicacions informàtiques dels diferents equips de recerca dels departaments i centres de recerca universitaris.
- El desenvolupament, el manteniment i el suport de les aplicacions de gestió (en els àmbits econòmics, logístics, acadèmics, de gestió de la recerca, etc.). Es constata la tendència a una forta ampliació dels requeriments dels usuaris, així com nous àmbits de demanda de serveis (gestió del coneixement, plataformes de campus interactiu, programes d'*e-learning*, projectes de recerca, etc.).

**2.** El paper capdavanter en la generació de nous coneixements que tenen les universitats en la societat actual els comporta el compromís de liderar els processos d'incorporació de les noves tecnologies en el si de les

seves pròpies organitzacions. Aquest fet comporta que una bona part dels serveis informàtics universitaris hagin de ser prestats tot incorporant-hi els darrers avenços tecnològics i donant joc, simultàniament, a un ventall molt ampli de tecnologies, eines, programaris, tipologia de xarxes, etc.

**3.** L'existència d'uns serveis informàtics que donin respostes de qualitat als requeriments dels diferents usuaris universitaris (en els àmbits de la recerca, la docència i de la gestió) és, sens dubte, un element clau de caràcter estratègic que diferencia les universitats i que, per tant, passa a ocupar un paper fonamental en les polítiques de diferenciació i de competència interuniversitària.

Sobre la base d'aquest plantejament, es considera que els serveis informàtics requereixen un lideratge estratègic des del primer nivell de direcció de les universitats, és a dir, des dels mateixos equips de govern. Sense aquest lideratge difícilment es pot abordar amb possibilitats d'èxit el conjunt d'elements que són imprescindibles per afrontar i aconseguir uns serveis d'informàtica adequats als requeriments que se'ls planteja.

Cal fer prendre consciència a les comunitats universitàries i, en primer lloc, als seus equips de govern que els serveis informàtics que actualment requereixen les universitats modernes avançades necessiten un suport financer estable i força important. Sense aquest plantejament financer, els resultats seran probablement molt inferiors als esperats. Es planteja, també, la necessitat de fer prendre consciència als usuaris dels costos que comporten els seus requeriments i impulsar que el conjunt dels estaments universitaris incorporin en les seves decisions els necessaris mecanismes de prioritització davant del factor permanentment present de la limitació de recursos.

**4.** És innegable que uns serveis d'aquesta complexitat i magnitud requereixen models de gestió adequats per aconseguir quotes d'eficiència i d'eficàcia. En aquest sentit, són prou conegudes les rigideses contractuals i de decisió que molt sovint s'imposen en el sistema universitari, les quals són incompatibles amb les aspiracions d'aconseguir un bon nivell de qualitat en uns serveis tan complexos i innovadors com són els informàtics.

Es considera imprescindible mantenir actituds obertes i generoses cap a la incorporació de noves eines i fórmules de gestió. La immobilitat i el fet de deixar que els esdeveniments envaeixin la gestió, pel que fa a la qualitat del servei, és la pitjor de les actituds que es poden adoptar.

**5.** En els darrers anys, en el conjunt de les universitats catalanes s'han iniciat noves experiències de gestió en els seus serveis informàtics. A partir de l'anàlisi de resultats d'aquestes experiències, es pot determinar la falsetat del binomi que sovint es planteja en el debat sobre la bona gestió dels serveis informàtics com una simple disjuntiva entre fórmules d'*outsourcing* o *insourcing* de la gestió d'aquests serveis. Aquesta és clarament una falsa disjuntiva, ja que la realitat ens demostra que no hi ha un únic receptor per a la gestió d'un servei tan complex. En tot cas, el més important és que la universitat no perdi la capacitat per continuar dirigint i implantant els valors estratègics que han de regir els seus serveis informàtics. Les fórmules que cal emprar per gestionar-los poden variar segons el temps, els factors culturals i institucionals, els pressupostos, etc.

Es recomana aprofundir en l'establiment de les xarxes de coneixement interuniversitari per tal de compartir el resultat de les millors pràctiques de la gestió dels serveis informàtics i també amb la voluntat de compartir aplicacions i serveis comuns. L'experiència del CESSA, del CBUC i d'altres posen de relleu les possibilitats que ofereix la cooperació interuniversitària per resoldre serveis complexos i costosos. S'insta, en aquest àmbit, les universitats i l'administració autònoma a impulsar aquests processos de cooperació. ■

# Projectes de comunicacions avançades

**Les tecnologies per desenvolupar continguts web evolucionen dia a dia i cada vegada és més freqüent trobar a Internet documents audiovisuals i aplicacions interactives que requereixen certa qualitat en la connexió amb l'usuari per tal de garantir un bon aprofitament d'aquests materials.**

El juliol de 2001 es va presentar la convocatòria extraordinària per a Projectes de Comunicacions Avançades, finançada amb 120.202 € pel Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació a través del CESCA. La seva finalitat era oferir a grups de recerca universitaris la possibilitat d'utilitzar la plataforma experimental

de comunicacions en banda ampla i2CAT o la mateixa Anella Científica per potenciar el desenvolupament i l'ús d'aplicacions de banda ampla.

Els cinc projectes seleccionats es van escollir considerant les línies de política científica que segueix cadascuna de les institucions que van presentar propostes i tenint en compte la

participació de grups de recerca consolidats. Es va valorar el fet de ser treballs que, o bé desenvolupessin aspectes innovadors en l'àmbit de les xarxes de telecomunicacions (tecnologia mòbil, òptica o de commutació), o bé que el seu àmbit d'aplicació es veiés afavorit per l'ús de la computació d'altres prestacions o de les comunicacions amb necessitat d'amplada de banda. A més, es requeria que fossin projectes d'interès per a la potenciació de la Universitat Digital o dels *clusters* existents en el projecte i2CAT.

## Aplicacions de tecnologies audiovisuals per fomentar actituds de col·laboració en l'entorn universitari

### Universitat de Barcelona

Aquest projecte s'emmarca dins del cicle de conferències "Les tardes de recerca de la UB", que té per objectiu donar a conèixer els projectes d'investigació de la universitat que s'adscriuen al Vè Programa Marc de la UE. Aquestes jornades, en què van intervenir científics d'arreu d'Europa que participen en projectes coordinats per investigadors de la UB, es van estructurar en deu taules rodones on es va debatre l'estat actual de les diferents àrees de recerca, les línies de futur i les possibilitats d'aplicació i de transferència a la societat. Per tal que aquestes sessions arribin al màxim nombre de membres de la comunitat universitària, un grup del Centre d'In-

formàtica de la UB coordinat per Manuel Pérez ha posat en marxa un servei de reproducció de vídeos en temps real, estructurat en dos tipus de peticions: d'una banda, l'emissió en directe d'esdeveniments com conferències, seminaris, etc., i de l'altra, la posada a la xarxa d'aquests esdeveniments enregistrats en format videogràfic ASF.

[www.ub.es/video/web/vod/tardes\\_recerca.htm](http://www.ub.es/video/web/vod/tardes_recerca.htm)



D'altra banda, al Laboratori de Mitjans Interactius de la UB i sota la direcció del Dr. Antonio Bartolomé, s'han estat estudiant les noves interfícies i possibilitats del vídeo digital en entorns de banda ampla, en un moment en què els continguts d'Internet estan migrant progressivament d'un multimèdia bàsicament textual i amb gràfics estàtics, cap a un multimèdia amb una gran càrrega visual. En aquest context s'han desenvolupat dues interfícies: una d'elles permet una navegació còmoda en entorns visuals que permeten l'elecció de les escenes i l'altra consisteix en la indexació dels continguts. A més, també s'ha desenvolupat una aplicació per a l'edició remota de vídeo.

[www.lmi.ub.es/i2cat/catala/index0.html](http://www.lmi.ub.es/i2cat/catala/index0.html)

## GIS-I2: Cartografia i imatges de satèl·lit sobre i2CAT

### Universitat Autònoma de Barcelona

Dirigit pel Dr. Xavier Pons, aquest projecte ha consistit en el disseny i el desenvolupament d'una tecnologia de visualització i consulta de dades cartogràfiques a través d'un navegador web, capaç de treure partit de la futura Internet de segona generació, amb una amplada de banda superior a la que ofereix la

Internet actual, que permeti una elevada interacció entre client i servidor. Amb aquesta finalitat s'ha programat una aplicació que genera imatges gràfiques d'alta qualitat dels mapes vectorials elaborats per diverses institucions amb qui s'han establert acords, que es poden visualitzar directament sobre el navegador sense necessitat de *plug-ins*. A més, l'usuari pot interactuar amb la vista, generar consultes i descarregar les dades per a una posterior visualització amb el lector de mapes de MiraMon.



[www.creaf.uab.es/mcsc/mrms/index.htm](http://www.creaf.uab.es/mcsc/mrms/index.htm)



### Teleformació del professorat en entorns 3D

**Universitat Rovira i Virgili, amb la col·laboració dels ICE de les Universitats de Girona i de Lleida**

Els espais 3D evocuen un sentiment perceptiu i psicològic a través dels sentits, donen sensació de realisme als usuaris i són apropiats per a activitats que comporten la resolució de problemes en espais que requereixen un grau de realisme important. Amb l'objectiu d'aprofitar les característiques d'un entorn d'aquest tipus, la Dra. Mercè Gisbert ha coordinat el projecte TEL3D, que ha consistit en el disseny d'un centre virtual de formació del professorat universitari en un

entorn telemàtic en tres dimensions.

Dins d'aquest entorn, els alumnes accedeixen a unes estructures virtuals en forma d'edificis que tenen un aspecte relacionat amb els continguts que s'hi imparteixen i amb els objectius formatius que es pretenen assolir. En concret, en aquesta primera fase s'ha creat un món amb continguts de medicina i un altre amb continguts d'arqueologia on el visitant assumeix un paper actiu i interacciona amb l'espai de formació. L'alumne pot prendre rols diferents que li permeten des de consultar informació fins a simular situacions reals mitjançant materials com documents escrits, audiovisuals, el treball en grup, etc.



[www.sre.urv.es/web/te3D](http://www.sre.urv.es/web/te3D)

### Eines de catalogació i indexació de continguts audiovisuals de banda ampla

**Universitat Ramon Llull**

Amb l'augment progressiu dels continguts audiovisuals digitals ha aparegut la necessitat de catalogar i indexar aquest tipus d'informació per tal de poder realitzar cerques més eficients i accedir més ràpidament a aquests materials. El Centre de TV Digital de La Salle, sota la direcció del Dr. Gabriel Fernández, ha desenvolupat una eina de catalogació d'arxius de vídeo seguint els criteris que proposa l'estàndard MPEG-7, que defineix el conjunt

de normes per descriure continguts audiovisuals sota una estructura jeràrquica d'arbre.

Mitjançant aquesta aplicació es poden ressenyar les característiques generals, els continguts, els detalls temporals i les escenes de fitxers audiovisuals, i emmagatzemar tota aquesta informació, també anomenada metadades, en arxius XML. A més, l'eina de catalogació disposa d'un algorisme de detecció automàtica d'escenes per tal d'agrupar-les segons el seu contingut. L'eina complementària Mpeg7Wizard permet la creació d'esquemes de classificació de manera que es pot particularitzar la informació



a cada fitxer audiovisual segons el seu contingut a partir de la definició de nous descriptors.

[web.salleurl.edu/cetvd/](http://web.salleurl.edu/cetvd/)

### Difusió a través d'Internet de l'activitat de Jutjats de Barcelona

**Centre Docent d'Ensenyament Abat Oliba CEU**

El Centre Universitari Abat Oliba CEU, adscrit a la Universitat de Barcelona, té una tradició de 25 anys de dedicació al dret i l'economia. Amb el seu projecte per a la difusió a través d'Internet de l'activitat dels Jutjats de Barcelona, dirigit per Francisco Guillén, es pretén fomentar i facilitar l'accés a les noves tecnologies, i promoure la generació d'aplicacions per a la millora de la qualitat docent. Els treballs previs desenvolupats en l'àmbit d'aquest projecte han

consistit en l'enregistrament i emmagatzematge dels cursos d'estiu i la retransmissió per Internet en mode *multicast* de les sessions d'un congrés internacional celebrat a Barcelona, en què els usuaris van poder seguir en alta o baixa definició per tal d'aprofitar al màxim l'amplada de banda de les connexions.

En l'actualitat el Centre ja disposa d'una sala dissenyada per al desenvolupament de les pràctiques de judicis mitjançant l'ús d'eines multimèdia, i properament s'iniciaran les activitats de producció de les sessions amb l'objectiu de posar a disposició de la comunitat acadèmica exemples representatius de diversos tipus de procediments.



[www.abatoliba.edu/website/index.php](http://www.abatoliba.edu/website/index.php)



“Cal que els nostres  
doctorands puguin  
integrar-se en la vida  
laboral del país”

ENTREVISTA A RAMON CARBÓ-DORCA, DIRECTOR DE L'IQC I CATEDRÀTIC DE LA UdG

RAMON CARBÓ-DORCA, director de l'Institut de Química Computacional (IQC) i catedràtic de la Universitat de Girona, ha dedicat els darrers 20 anys a treballar, entre d'altres coses, en la semblança molecular quàntica que, com ell explica, va sorgir “de les explicacions dels químics orgànics sobre la semblança molecular i de les lectures que vaig fer dels primers llibres d'intel·ligència artificial”. A més d'aquest vessant científic, en els darrers temps ha publicat llibres com el recull de relats *Històries d'Ultraciència* o *¿Por qué las cosas son así y no de otra manera?*, i recentment ha traduït al català poemes del premi Nobel en Química, Roald Hoffmann. Ara inicia un nou projecte com a investigador emprenedor, crear una *spin-off* que posarà a l'abast de les empreses els seus coneixements i la seva experiència en semblança molecular quàntica. Segons Carbó-Dorca, la creació d'empreses “pot ser la manera que els nostres doctorands puguin quedar-se i treballar pel país”.

**En els darrers anys, la supercomputació ha aportat una potència de càlcul inimaginable. Han crescut en la mateixa proporció els avenços científics com a resultat de l'ús de la química computacional?** És diferent

la velocitat en què la ciència avança de la velocitat a la qual la ciència pot obtenir resultats d'algunes teories que estan fonamentades en el càlcul. Òbviament, l'avenç en la supercomputació ha permès, d'una banda, el càlcul sistemàtic de molècules més grans i, de l'altra, entrar en camps cada vegada més sofis-

tics, però encara estem una mica lluny de l'ideal que seria poder estudiar fàcilment grans agregats moleculars pràcticament sense haver de fer cap mena d'aproximació. És indubtable que s'ha avançat molt en l'estudi teòric de sistemes moleculars molt complexos, tant que fa 20 anys semblava impensable de realitzar.

Seria molt dolent, però, tant per als químics experimentals com per als teòrics, que aquestes facilitats de càlcul portessin els químics teòrics a estudiar temes que només proposessin els quí-

mics experimentals, perquè això no faria avançar la química teòrica com ha de ser, és a dir, com una part de la química per ella mateixa. La supercomputació ha de tenir un paper molt important en l'àmbit de la química teòrica, dir el contrari seria una bestiesa, però també és cert que la química teòrica ha de ser quelcom més que una part de la ciència que es dediqui només al càlcul. L'avenç de la química teòrica també es pot fer amb un llapis i un paper, tan vàlid és un extrem com l'altre. Depèn de l'investigador, del seu tarannà i de l'edat. A mi m'agradava fer càlculs quan era més jove i ara m'atrau més pensar sobre aspectes més estructurals de les matemàtiques aplicades a la mecànica quàntica.

**Què el va empènyer cap a l'enginyeria química als anys 60?** Simplement la meua família em va “oferir” poder estudiar a Barcelona a l'Institut Químic de Sarrià (IQS) i en aquells moments només s'hi feia enginyeria química. Continua agradant-me molt, sobretot els fenòmens de transport i els problemes associats a aquest tema. Fa poc que he publicat un treball sobre l'estructura del temps, que penso que ha d'estar relacio-

nada amb els fenòmens de transport.

**La semblança molecular ha centrat la seva recerca. Com funciona aquest mètode d'investigació i quines aplicacions té?**

La semblança molecular quàntica va començar el 1980 amb un treball que vam publicar uns quants estudiants i jo mateix a l'*International Journal for Quantum Chemistry* i que va obrir aquest camp en la química teòrica. Si això hagués estat fet per un individu a la Universitat de Cornell o la de Califòrnia, ara tothom parlaria de la semblança molecular quàntica. Déu n'hi dó, però, com s'ha estès i les aplicacions que se n'han anat trobant. Aquesta tècnica fonamenta el que podríem anomenar les relacions estructura-activitat quàntiques, tècniques que permeten relacionar paràmetres de semblança quàntica amb les propietats moleculars que no es poden calcular directament mitjançant els operadors típics de la mecànica quàntica. La idea és molt senzilla i va sorgir precisament d'escoltar els químics orgànics de l'IQS. Aquests, quan presentaven un treball de recerca, parlaven sempre que la forma de reaccionar d'una molècula havia de ser d'una certa manera perquè aquella molècula s'assemblava a una altra molècula de la qual es coneixia el seu comportament. Aquestes explicacions, juntament amb algunes lectures que en aquells moments feia dels primers llibres d'intel·ligència artificial, em van portar a pensar que des d'un punt de vista de la mecànica quàntica podia donar una resposta numèrica a les idees que tenien els químics orgànics sobre la semblança molecular. I això té aplicacions en tots els àmbits de la química i de l'estructura de la matèria.

**Tenen més importància el tema o el lloc d'origen que la rellevància del treball?**

No tindrà la mateixa ressonància un tema de bioquímica fonamental que un de mecànica quàntica, en el qual les matemàtiques són molt dures d'empassar. És pràcticament impossible fer-ho arribar a la gent del carrer, tot i que a la llarga puguin veure la seva utilitat a través de la seva aplicació. Fins i tot hi ha molts químics teòrics computacionals que, en els seus treballs, o bé tenen una part matemàtica que els ve donada per programes que no han fet ells o bé l'ignoren. Si un mateix desenvolupa la teoria, construeix els programes i ho publi-

ca, com són aspectes molt locals de la ciència tenen poca ressonància. Si fos un avenç més mediàtic, relacionat amb el genoma humà, per exemple, es podria superar el problema del localisme.

Fins que un desenvolupament matemàtic no s'ha portat a la pràctica i se n'han fet moltes publicacions que demostren la seva aplicabilitat, o fins que no hi hagi un laboratori farmacèutic o químic que s'animi a utilitzar aquesta tècnica i probablement serà molt difícil que ho facin si aquest laboratori no té una capacitat semblant a la que té un laboratori de recerca per fabricar-se els seus propis programes, la llei del mínim esforç indica que tindran tendència a usar programes comercials encara que la seva base sigui menys científica i, per tant, aquest desenvolupament matemàtic continuarà en un àmbit local.

L'article *El mago y el científico*, d'Umberto Eco, publicat el passat 15 de desembre a *El País*, i més modestament, però prèviament, en el meu llibre *¿Por qué las cosas son así y no de otra manera?*, expliquen que el pensament màgic encara persisteix en el comportament del científic. La màgia et permet obtenir resultats immediats, sense haver d'aprendre, comprendre, relacionar, escriure... una tasca a la qual potser dediques 10 anys o tota una vida, mentre que la màgia et permet obtenir-ho en un instant. La sensació que s'han d'obtenir resultats molt de pressa preval per sobre de la reflexió. En altres èpoques, tal com va dir Einstein, la base de la ciència era la reflexió, no la producció.

**La premsa del món també influeix els científics...**

I per què? En tot això s'ha creat una superestructura científica basada en una perversió segons la qual has de demostrar contínuament que estàs treballant i de la manera adequada. Però, qui indica quina és la manera adequada? Qui pot saber si en aquell moment aquella persona que està treballant i no està obtenint els resultats màgics i immediats no està elaborant quelcom a llarg termini que serà tan important com tots aquests resultats immediats? Com més articles publicis per unitat de temps molt millor, et transformes en una metralladora de publicacions. Això, crec jo, està connectat amb el fet que sorgeixen modes i tothom es dedica a estudiar sobre aquests temes, en comptes de reflexionar sobre si val o

no val la pena treballar-hi. I llavors arriba la veritable perversió, que sorgeix del finançament i com el sistema recolza el finançament de la teva recerca. Fas un esforç gegantí i et donen quatre rals. Encara s'està parlant que el nostre país està a la cua de la Unió Europea quant a finançament de la recerca. Fins i tot, la perversió arriba al fet que et fan fer el mateix que a països on després de realitzar els esforços burocràtics oportuns almenys reps una quantitat de diners major que la que reps aquí.

Una altra perversió està relacionada amb qui concedeix el finançament. No sé qui marca aquestes grans línies de recerca, qui nomena la gent de les comissions, quins procediments hi ha, quins criteris s'utilitzen. Tot i que la teva consciència professional estigui tranquil·la, sembla que algú està controlant els teus moviments, un déu indiferent al qual li has de demostrar contínuament que ets el millor. Qualsevol individu que estigui fent recerca a qualsevol lloc del planeta està essent catalogat per mitjans electrònics sempre que publicis en revistes mitjanament conegudes.

La burocràcia és una altra perversió, cada estament et demana un currículum en un format diferent. No s'ha pensat en crear un currículum que sigui com un DNI i que serveixi per a tots els organismes. No té cap sentit continuar amb aquest model. I a escala molt més gran encara hi ha una perversió més. Sempre que canvia una estructura burocràtica els nous caps tendeixen a anorrear tot el que hi havia abans i a intentar instaurar noves grans estructures. Per què no potenciem el que tenim en comptes de canviar-les o de crear-ne de noves?

**Després de 40 anys, què el motiva a continuar investigant?**

Em motiva plantejar-me molts problemes i veure com coses que aparentment semblaven insolubles, de cop i volta es fan solubles. De vegades, tens idees sobre una qüestió que des de feia molt de temps et preocupava i per resoldre el problema desenvolupes un determinat tipus de tècniques. Per exemple, portava molt de temps pensant en com estudiar el problema del temps i l'espai i no trobava les matemàtiques adequades. He buscat problemes de semblança molecular que em van portar a desenvolupar un determinat tipus de matemàtiques associades

a una nova àlgebra de matrius i vectors que vaig veure que podia estar-hi relacionada i vaig poder acabar aquest treball. Relacionat amb aquesta àlgebra desenvolupada per la semblança molecular, em vaig adonar també que es podien estudiar els signes més i menys, que es podien separar, descriure... en conjunts de nombres ordenats. És molt curiós perquè una vegada saps com resoldre un problema sorgeixen moltes altres possibilitats. La meua altra motivació són els alumnes que em sofreixen, que fan el doctorat amb mi... que em plantegen problemes de caire més pràctic.

**Quins projectes de futur té?** El futur no existeix, només hi ha present. Un dels projectes és continuar en la recerca de la semblança quàntica, m'agradaria dedicar-me personalment a coses molt bàsiques de mecànica quàntica, sobre les que curiosament sembla que no s'hi ha reflexionat i que donen peu a computacions, no complexes, però originals i que òbviament no tenen cap aplicació immediata (*riu*). Per exemple, en el marc d'aplicació de les relacions d'estructura-activitat quàntiques, es contemplen signes negatius, quan tots els números que hi intervenen haurien de ser positius.

**I per què tots els números positius?** Vostè va a comprar alguna vegada i demana menys dos quilos de peix? Les coses del món són, en primer lloc, finites. El concepte d'infinít és interessantíssim però per a la comprensió de la naturalesa s'ha de pensar en termes de nombres finits de coses, d'objectes, i l'altra és la definició positiva del món que ens envolta. La temperatura en graus centígrads pot ser negativa però en graus absoluts és positiva. Les masses, els pesos, les longituds, els volums són positius en el mateix sentit que els nombres i els operadors de la semblança quàntica ho són. Els números que es dedueixen de comparar dues molècules sempre han de ser positius, fins i tot el zero no cal, sempre hi ha quelcom.

Això, curiosament, està relacionat amb la descripció de fenòmens macroscòpics com poden ser el flux de fluids en recipients i els moviments de les onades al mar. Les equacions que governen aquests fenòmens es poden plantejar de tal manera que ni el zero ni l'infinít tenen sentit. Aquestes són les co-

**RAMON CARBÓ-DORCA I CARRÉ** va néixer a Girona, el 19 d'octubre de 1940. Va fer el batxillerat a Girona. A Barcelona va aconseguir un dels primers títols de doctor enginyer químic, atorgats per l'Institut Químic de Sarrià. Més tard, va doctorar-se en ciències per la Universitat Autònoma de Barcelona. Va ser professor de les dues institucions per un període de més de vint anys. Ha fet estades postdoctorals a la Universitat d'Alberta al Canadà, treballant amb els professors Fraga i Huzinaga, dels qui se sent deixeble. El 1985 va traslladar-se a Girona, per formar part del Col·legi Universitari. Va viure l'emoció del naixement de la Universitat de Girona. Actualment, és catedràtic de química-física i director de l'Institut de Química Computacional (IQC) de la UdG, que va fundar fa 10 anys. Ha estat distingit amb la medalla Narcís Monturiol de la Generalitat de Catalunya. Ha estat professor invitat a les Universitats de Tòquio, Alberta, Tromsø i Hyderabad, entre altres. En els àmbits de la química quàntica i la química matemàtica, té publicats més de 200 treballs i és autor o editor de 15 llibres, tant especialitzats com de divulgació científica. Fa deu anys que organitza els anomenats *Seminars on Molecular Similarity*, un congrés d'abast internacional a la ciutat de Girona. Recentment, ha publicat un recull de prosa poètica i uns quants poemes a la *Revista de Girona*. Li agraden la filosofia, les religions i les llengües orientals, així com la jardineria, les tècniques de reinvençió de la cuina tradicional i la música clàssica de tot el món.



ses que m'apassionen i si no se m'acut res... doncs escric quelcom. Ara mateix he traduït al català set poemes de Roald Hoffmann que han estat publicats a la *Revista de Girona*. Això m'entreté, em motiva i em descansa suficientment per després continuar treballant.

**Un dels seus projectes és crear una spin-off.** Es tracta de treure profit dels nostres coneixements i de la nostra experiència en semblança molecular quàntica per crear una empresa que comercialitzi aquestes tècniques i el programari que hem creat. Per això, hem aprofitat les facilitats que avui dia hi ha a la universitat per connectar amb estaments de la Generalitat com el Centre d'Innovació i Desenvolupament Empresarial (CIDEM), a través del qual hem aconseguit un ajut del Centro para el Desarrollo Tecnológico Industrial (CDTI), que depèn del Ministerio de Ciencia y Tecnología, per a la creació d'aquesta nova empresa.

Si el projecte va endavant potser serà una forma que els nostres doctoreds puguin quedar-se i treballar per

al país, de manera que els diners gastats per l'Estat en la seva formació reverteixin a la nostra societat. Aquest motiu passa per davant de tot. Cal que els nostres alumnes puguin integrar-se al món laboral del país. Tenim la recerca, sabem com aplicar la tecnologia, només ens mancava fer aquest últim pas. Espero que a mitjan de gener l'empresa estigui funcionant.

**Els 40 anys que porta dedicats a investigar l'ajudaran a tenir un bon karma?** Pot ser que siguin la conseqüència d'un karma anterior, el meu karma està molt embullat ara mateix i l'acumulació de malifetes és considerable, encara que procuro que siguin les mínimes. Però bé, sempre hi ha la possibilitat d'arreglar-ho amb una reencarnació (*riu*).

**Continuaria fent ciència, o li agradaria fer una altra cosa, si es pogués triar?** Si pogués triar, continuaria intentant fer una mica de ciència, mirant de contribuir a fer-la avançar, tot i que per millorar el meu karma hauria de fer-me monjo budista (*riu*). ■

## La Salle On Line, classes en vídeo a la xarxa



Les classes, enregistrades en vídeo, estan disponibles amb les presentacions al web.

Durant el curs 2001-2002, Enginyeria i Arquitectura La Salle ha incorporat dos nous mètodes d'aprenentatge, que aposten per la combinació de l'educació presencial i la virtual. Aquests mètodes, englobats en el marc de formació La Salle On Line, utilitzen les noves tecnologies per tal de flexibilitzar els programes de formació per a estudiants que comencen a treballar o professionals amb experiència que es veuen obligats a combinar la formació amb la seva activitat laboral. Un d'aquests mètodes en línia, que s'aplica a una desena de màsters, està basat en un sistema de gravació i reproducció audiovisual de classes a través d'Internet. Per tal que aquest material audiovisual estigui

sempre disponible i tingui garantida la seva perdurabilitat, La Salle està usant el Servei d'Emmagatzematge de Dades del CESCA.

Com explica Guillem Bou, director del màster d'*e-learning* La Salle, el projecte La Salle On Line "obeeix a una concepció totalment oposada a la filosofia del contingut simple". "Si volem fer un curs de dret penal, per exemple, el fet de posar el text del codi penal a la xarxa no genera un contingut, el qual ha de ser fons i forma, això és, una forma adequada pensada perquè pugui ser comunicada i, per tant, sigui possible el teleensenyament", afegeix Bou. "La idea d'aulaplato neix d'una actitud molt curiosa amb els continguts. És a dir, tota la

tecnologia, el farciment pedagògic, les estructures organitzatives d'assistència a l'alumne... tot forma les diferents capes d'un sistema en el centre del qual hi ha la unitat de contingut", afirma.

Per proporcionar a aquests continguts una màxima disponibilitat, el CESCA allotja a les seves instal·lacions un servidor de La Salle, el qual conté tant el web *lasalleonline.net* com vídeos de les classes. Aquest servidor no només es beneficia d'una bona connectivitat, sinó també de la fiabilitat d'aquesta connectivitat i la seguretat de les instal·lacions. A més, per garantir la perdurabilitat d'aquests continguts audiovisuals, La Salle usa el Servei d'Emmagatzematge de Dades. Com explica Jordi Hernández, coordinador del CTT La Salle-CeSEL (Centre de Serveis i Solucions d'*e-Learning*), "gràcies al servei de còpies de seguretat que ens ofereix el CESCA podem garantir la consistència de les nostres dades d'una forma econòmica i molt estable i robusta pel fet que el sistema funciona sota Linux; alhora tindrem la seguretat que l'alumne final podrà disposar del contingut sense preocupar-se que hi hagi fallides en el servidor".

"Ara mateix, un dels nostres propers fronts d'atac és la gestió del coneixement generat per les comunitats que posem en marxa en els màsters", afirma Guillem Bou, "i per tant hem d'obrar amb molta cura perquè els alumnes ens ho demanen, és a dir, els fòrums o xats enregistrats són, per a ells, tant valuosos com els apunts". ■

[www.lasalleonline.net](http://www.lasalleonline.net)

## Servei d'Emmagatzematge de Dades

Les còpies de seguretat automàtiques es realitzen mitjançant una llibreria de cintes StorageTek TimberWolf 9740 i el programari VERITAS NetBackup. El robot disposa de 252 ranures i dos dispositius de transport 9840 amb una velocitat de transferència de 10 MB/s ca-

dascun i d'intercanvi de cartutxos de 350 per hora.

**Amb les 60 cintes addicionals adquirides, el robot disposa ara de 200 cintes que proporcionen una capacitat sense compressió de 3,9 TB.**



JORDI PARETO

## ESADE amplia a 34 Mbps la seva connexió a l'Anella

ESADE (Escola Superior d'Administració i Direcció d'Empreses) ha ampliat la seva velocitat d'accés a l'Anella Científica. Des del 13 de novembre, disposa d'una connexió ATM a 34 Mbps. Anteriorment, aquest centre d'ensenyament superior tenia un cabal de 2 Mbps a través d'una línia punt a punt connectada al CESCA.

A més d'ESADE, de les institucions federades a la Universitat Ramon Llull, també es connecten a l'Anella la Fundació Blanquerna i l'Institut Químic de Sarrià, a 2 Mbps, i Enginyeria i Arquitectura La Salle, també a 34 Mbps. La URL és una universitat privada integrada per institucions federades que ofereix estudis d'humanitats, ciències socials, ciències de la salut, ciències experimentals, enginyeria i arquitectura. ■

[www.esade.es](http://www.esade.es)

## EUCEN, amb les iniciatives d'eLearning

EUCEN, la xarxa europea d'educació continuada a universitats, va celebrar del 16 al 18 d'octubre la seva 24a Conferència Europea a la Universitat de Tecnologia de Viena (Àustria). El tema d'aquesta edició fou l'eLearning amb el títol "eLearning, Cooperative Learning and Co. New solutions to old challenges?". A la conferència van assistir uns 100 participants d'arreu d'Europa.

La propera cita d'EUCEN en el món de l'eLearning està relacionada amb el projecte ICETEL, que té com a primer objectiu la identificació de les millors eines d'eLearning i el seu desenvolupament. Aquest projecte, becat per la Comissió Europea sota la Iniciativa eLearning, té 14 associats (un d'ells és EUCEN) d'Àustria, Bèlgica, Finlàndia, Portugal, Espanya i el Regne Unit. ■

[www.eucen.org](http://www.eucen.org)



ANTONI BOFILL

L'òpera *Norma* va ser retransmesa el passat 9 de gener dins del projecte Òpera Oberta.

El passat 9 de gener va tenir lloc la tercera retransmissió en directe d'una òpera a les universitats dins del projecte Òpera Oberta, uns cursos impartits pel Gran Teatre del Liceu per als universitaris i que usen la infraestructura de l'Anella Científica a Catalunya per a les retransmissions. L'òpera *Norma*, de Bellini, va ser seguida per 1.591 estudiants d'onze universitats, tant de Catalunya com de la resta de l'Estat. De moment, uns cinc mil estudiants han seguit en directe a través d'Internet la retransmissió de les òperes des de les seves universitats.

El passat 17 de desembre, l'òpera

*Don Giovanni*, de Mozart, va ser seguida per 1.950 persones de catorze universitats, a la mateixa vegada que aquesta òpera era representada al Liceu. La primera retransmissió, realitzada el passat 12 de novembre, *Ariadna auf Naxos*, d'Strauss, va comptar amb l'assistència de 1.618 estudiants.

Les universitats catalanes usen la infraestructura de l'Anella Científica per rebre la transmissió, mentre que les espanyoles la reben a través de la xarxa estatal RedIRIS. La propera retransmissió, el 12 de febrer, portarà a les universitats l'òpera *Pikovaia Dama*, de Txaiikovski. ■

## Grups de recerca del CSIC i de la Universidad de Navarra treballen amb el Servei de Cerca de Farmacòfors

El grup de recerca de la Dra. Ana Castro integrat a l'Instituto de Química Médica del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) va signar el passat 2 d'octubre el conveni per poder utilitzar el Servei de Cerca de Farmacòfors (SCF). Aquest grup desenvolupa una línia d'investigació en el camp de la química mèdica, concretament en la cerca de noves estratègies terapèutiques per al tractament de la malaltia d'Alzheimer. Se centren fonamentalment en el disseny, síntesi i avaluació biològica de nous fàrmacs.

La Unidad de Modelización Molecular de la Facultat de Farmàcia de la

Universidad de Navarra també es va incorporar al grup d'usuaris de l'SCF el passat 1 de novembre. Aquest grup de recerca, encapçalat per la responsable d'aquesta unitat, María Font, té previst desenvolupar productes anti-tumorals usant l'SCF per mitjà de dos mecanismes molt diferents. D'una banda, induint la mort cel·lular per apoptosi, a través de l'activació de l'enzim caspasa-3 i, de l'altra, inhibint l'enzim telomerasa, que s'encarrega de recuperar la grandària del telòmer dels cromosomes, perquè a cada cicle de divisió cel·lular es redueixi la seva grandària fins arribar a un mínim en el qual la cèl·lula mor. ■

## El CIRI actualitza el seu IBM amb 36 processadors Power4

El CEPBA-IBM Research Institute (CIRI) ha ampliat la seva capacitat amb un IBM p630, format per 36 processadors Power4 a 1 GHz distribuïts en 9 nodes i amb 18 GB de memòria. A més, el CIRI disposa d'un IBM RS-6000 SP amb 128 processadors Power3 a 375 MHz i 64 GB de memòria. Amb l'arribada dels 36 processadors Power4, el ren-

diment punta d'aquest Centre, 192 Gflop/s, ha augmentat fins a 336 Gflop/s.

El CIRI va ser creat l'octubre del 2000 quan IBM Corporation i la UPC van signar un acord per a la creació d'aquest centre, que té com a principals objectius la recerca, el desenvolupament d'aplicacions i la transferència de tecnologia avançada. El primer supercomputador instal·lat, un IBM SP Power3 amb 64 processadors a 375 Mhz, va ser ampliat a 128 processadors al novembre del 2001. ■

[www.ciri.upc.es](http://www.ciri.upc.es)



CIRI

Els nous processadors aporten un  $R_{punta}$  addicional de 144 Gflop/s.

Processador	Power3	Power4	Power4
Freqüència (GHz)	0,375	1,0	1,3
Cau de dades (L1 KB/L2 MB/L3 MB)	64/8	32/0,72/32	32/0,72/32
$R_{punta}$ (Gflop/s)	1,5	4,0	5,2
Linpack TPP (Gflop/s)	1,21	2,17	2,89
Linpack 100x100 (Gflop/s)	0,42	n/d	n/d
SPECint2000	252	639	839
SPECfp2000	337	886	1.266

## L'IBM del Cineca es col·loca a la posició 30 del TOP500

El consorci interuniversitari italià Cineca s'ha col·locat en la posició número 30 en la vintena edició de la llista TOP500 amb un IBM pSeries 690 Turbo. Aquesta màquina disposa de 512 processadors Power4 a 1,3 GHz, distribuïts en 16 nodes de 32 processadors. Té 64 GB de memòria per node, excepte un que disposa de 128 GB. La memòria DRAM total és de 1.044 GB i el seu rendiment punta ( $R_{punta}$ ) és de 2,7 Tflop/s. L'IBM utilitza el sistema operatiu

AIX 5.1, té disponibles els compiladors Fortran F90, C i C++ i les llibreries paral·leles MPI, OpenMP i LAPACK. El rendiment màxim d'aquesta màquina, que va entrar al TOP500 en l'edició de juny a la posició número 32, ha millorat amb l'actualització de la xarxa interna a HPSwitch "Colony". ■

[www.cineca.it](http://www.cineca.it)



Els 512 processadors Power4 proporcionen un  $R_{punta}$  de 2,7 Tflop/s.

## PROGRAMES DE MOBILITAT

Andrei A. Bytsenko, de la **University of Trento** (Itàlia), ha vingut convidat per Emili Elizalde, de l'**IEEC-CSIC**, per treballar en el projecte *Quantum Geometry of Fields*. Bytsenko va arribar l'1 de desembre i finalitzarà la seva estada el 28 de febrer.

Benoît Baïda, de la **Université Paris-Sud** (França), ha vingut convidat per Enric Canadell, de l'**ICMAB-CSIC**, per col·laborar en el projecte *Molecular Dynamics Studies of Heterogeneous Catalysis Processes Using First-Principles Methods*. Baïda va arribar l'1 de novembre i finalitzarà la seva estada el 31 de gener.

Hannes Krasser, de la **Graz University of Technology** (Àustria), ha vingut convidat per Ferran Hurtado, de la UPC, per participar en el projecte *Improving Order Type Data Base*. Krasser ha treballat del 3 de novembre al 21 de desembre.

Zbigniew Lodziana, de la **Denmark Technical University** (Dinamarca), ha vingut convidat per Francesc Illas, de la UB, per treballar en el projecte *Structure at Pd Nanoclusters Adsorbed on Alumina*. Lodziana va arribar el 10 de novembre i va finalitzar la seva estada el 24 de novembre.

Emiliana d'Oria, de la **Facoltà di Scienze MM FF NN** (Itàlia), ha vingut convidada per Juan José Novoa, de la UB, per treballar en el projecte *Estudio Teórico de las Interacciones Moleculares en Cristales Iónicos*. D'Oria hi ha treballat de l'1 d'octubre al 20 de desembre.

Jacko Koster, de la **University of Bergen** (Noruega), ha vingut convidat per Jesús Labarta, de la UPC, per participar en el projecte *The Solution of Sparse Linear Systems of Equations Arising from Large Scale Industrial Finite Element Applications*. Koster va arribar l'1 de desembre i va marxar el 15 de desembre.

## L'Institut Nacional de Meteorologia adquireix un Cray

L'Institut Nacional de Meteorologia ha adquirit un nou sistema Cray per millorar la previsió meteorològica. La màquina instal·lada, un Cray SV1, multiplica per quatre la potència que proporcionava fins ara el Cray C90 amb quatre processadors. A mitjan del 2003 s'instal·larà un Cray X1 i a principis del 2005 s'ampliarà l'X1 per arribar als 1.178 Gflop/s de rendiment punta. El nou supercomputador, dedicat a la modelització numèrica del temps i del clima, permetrà a l'INM millorar la fiabili-

tat de les previsions a curt termini mitjançant l'ús de models numèrics més avançats i augmentar la resolució d'aquests models.

[www.inm.es](http://www.inm.es)



Un nou Cray per a la previsió del temps.

	Cray SV1	Cray X1 (mitjans 2003)	Cray X1 (principis 2005)
Freqüència (MHz)	300	n/d	n/d
Processadors (vectorials)	16	44	76
Memòria	16	176	304
Disc (GB)	160	4.200	n/d
R <sub>punta</sub> (Gflop/s)	19,2	563	1.177
Linpack TPP (Gflop/s)	9,17	n/d	n/d
Linpack 100x100 (Gflop/s)	7,51	n/d	n/d

## La CEOE premia per primera vegada un químic teòric

El professor d'investigació del Consell Superior d'Investigacions Científiques i vicepresident de la Comissió de Grans Usuaris de Supercomputació del CESA, Santiago Olivella i Nel·lo, ha estat distingit amb el Premi Solvay a la investigació en ciències químiques per les seves aportacions en el camp de la química quàntica i la seva activitat com a formador d'investigadors. El Premi Solvay, dotat amb dotze mil euros, l'atorga anualment la Fundació CEOE (Confederación Española de Organizaciones Empresariales) des de 1987 i és patrocinat per l'empresa Solvay. "Ha de ser un motiu de satisfacció per a tots els químics teòrics del nostre país el fet que aquest prestigiós premi de la CEOE

s'atorgui per primer cop a un químic teòric", explica Santiago Olivella. "Aquesta decisió del jurat representa el reconeixement implícit per part de la indústria química espanyola de la utilitat de les contribucions que la química teòrica i computacional pot fer pel progrés de la recerca en el camp de la química".

El jurat, que es renova cada any, ha estat presidit enguany per Juan Bertrán, catedràtic emèrit de Química Física de la UAB, i integrat per Enrique Otero, catedràtic de Ciències Materials i Enginyeria Metal·lúrgica de la Universidad Rey Juan Carlos; Miguel Valcárcel, catedràtic de Química Analítica de la Universidad de Córdoba; Jaime Veciana, professor d'investigació del Consell Superior d'Investigacions Científiques; Luis Gutiérrez Ruesga, cap del servei de laboratoris de Solvay Química, i Juan Manuel del Amo, secretari del jurat i de la Fundació CEOE. ■

## Noves tecnologies... en català

### Cibertermes II

En aquest número continuarem parlant de termes creats amb el prefix **ciber-**, és a dir, termes relacionats amb les xarxes de telecomunicacions, generalment Internet, i amb la realitat virtual.

La **cibercriminologia** (en anglès **cybercriminology**) és l'estudi dels delictes que es duen a terme mitjançant aquestes xarxes; per mitjà de les quals tenen lloc els **ciberdelictes** (en anglès **cybercrimes**), que són actes il·legals i sovint fraudulents.

Un dels ciberdelictes més estesos és el **robatori d'identitat** (en anglès **identity-theft**), que consisteix a utilitzar les dades personals d'altri (nom, data de naixement, número de targeta de crèdit, etc.), per tal de cometre un frau.

Els i les **ciberdelinqüents** (en anglès **cyberdelinquents**) són persones que cometen un acte il·legal i sovint fraudulent també per mitjà d'una xarxa telemàtica, generalment Internet. Fixem-nos que és un terme invariable, per la qual cosa cal escriure'l de la mateixa manera tant en masculí com en femení.

D'altra banda, la **ciberlegislació** (en anglès **cyberlegislation**) aplega el conjunt de lleis que regulen les activitats desenvolupades en el ciberespai i els **ciberpolicies** (en anglès **cybercops** i **cyberpolices**) són els policies que investiguen delictes comesos per mitjà d'una xarxa.

En el proper número, més **cibertermes**.

Centre de Terminologia **TERMCAT**  
[www.termcat.es](http://www.termcat.es)



# La Xarxa de Química Teòrica i Computacional de Catalunya

Santiago Olivella i Nel-lo, professor d'investigació del CSIC

**És innegable que en els darrers anys la recerca en el camp de la química teòrica i computacional a Catalunya ha assolit un nivell de qualitat i reconeixement internacional molt alt. Aquesta afirmació l'avalua el gran nombre d'articles publicats pels químics teòrics catalans en les millors revistes científiques internacionals i la creixent participació com a conferenciants invitats d'aquests científics en congressos internacionals de gran prestigi. Un altre indicador molt significatiu és el fet que un 10% de totes les Distincions de la Generalitat per a la Promoció de la Recerca Universitària que han estat atorgades fins ara les han rebut químics teòrics.**

Indubtablement, un dels elements que ha contribuït a la consolidació de l'alt nivell de la recerca en química teòrica a Catalunya ha estat la Xarxa de Química Teòrica i Computacional de Catalunya (XQTC). Enguany, l'XQTC ha arribat a la seva majoria d'edat en complir 18 anys d'existència. Crec que és interessant recordar-ne breument els orígens històrics.

Com a resultat d'una iniciativa del professor Ramon Carbó-Dorca i de l'autor d'aquest estudi, el 15 d'abril de 1985 es va crear el Grup de Química quàntica de Catalunya (GQQC), com a grup de recerca especialitzat de la Secció de Ciències i Tecnologia de l'Institut d'Estudis Catalans (IEC). En aquell temps els investigadors que treballàvem en el camp de la química teòrica empràvem únicament mètodes de la química quàntica i per això ens anomenàvem "químics quàntics". L'objectiu principal del GQQC era acostar tots els químics quàntics que treballaven en les diferents universitats i institucions públiques de recerca catalanes amb la intenció de promoure la recerca d'alta qualitat en química teòrica. Per assolir aquest objectiu el GQQC va proposar organitzar reu-

nions científiques anuals per facilitar el coneixement mutu de la recerca en aquest camp realitzada pels diferents grups teòrics dels països de parla catalana i impulsar la col·laboració científica entre ells. Cal destacar de forma especial el fet que les reunions del GQQC van ser des del seu començament un fòrum privilegiat per als joves investigadors on hi podien presentar oralment el seu treball de recerca a la comunitat científica local. Atès que als congressos i simposis científics les comunicacions científiques orals les presenten generalment els investigadors sèniors, el fet que els doctorands poguessin presentar oralment els seus treballs en les reunions del GQQC va ser una gran novetat.

L'acte formal de constitució del GQQC i la inauguració de la primera reunió del grup va tenir lloc el dia 29 de maig de 1985 a la sala Sant Pau de la seu de l'IEC al carrer del Carme de Barcelona. En aquest acte, el professor Alan Hinchliffe del Departament de Química de la Universitat de Manchester (UK) va pronunciar una conferència intitulada "The Quantum Mechanical Calculation of Electric and Magnetic Properties". Les sessions de

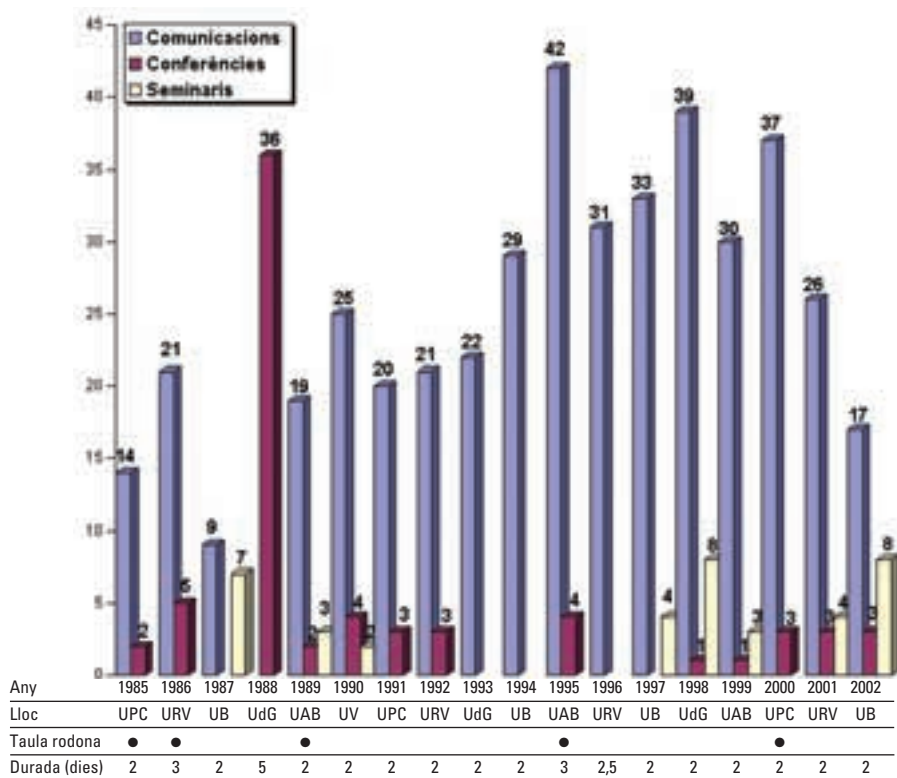
comunicacions científiques d'aquesta primera reunió del grup, organitzada pel Dr. Juan Jesús Pérez, van continuar durant la tarda i tot el dia següent a l'aula-capella de l'Escola Tècnica Superior d'Enginyers Industrials de Barcelona de la Universitat Politècnica de Catalunya.

Les reunions posteriors les van organitzar els grups de recerca en Química Teòrica de la Universitat Rovira i Virgili (URV, 1986), Universitat de Barcelona (UB, 1987 i 1994), Universitat de Girona (UdG, 1988 i 1993), Universitat Autònoma de Barcelona (UAB, 1989), Universitat de València (UV, 1990) i Universitat Politècnica de Catalunya (UPC, 1991). Aquestes primeres reunions, amb una durada d'entre dos i tres dies, van adoptar un format que s'ha mantingut al llarg dels anys amb petites variacions:

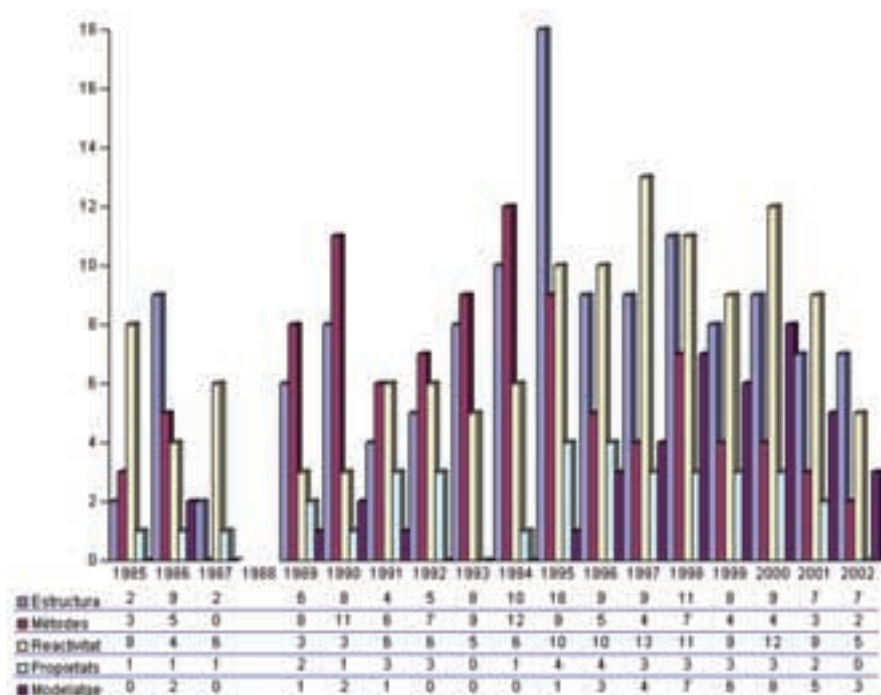
- Entre una i cinc conferències d'una hora sobre temes d'actualitat, a càrrec de professors invitats espanyols o estrangers.
- Entre dos i vuit seminaris de 40 minuts per descriure les línies de recerca dels grups del GQQC, generalment a càrrec dels seus caps.
- Una taula rodona per debatre problemàtiques d'especial interès per a tots els grups de recerca.
- Un gran nombre (entre 9 i 42) de comunicacions científiques de 20 minuts, a càrrec dels joves investigadors.

La IV reunió, organitzada pel professor Ramon Carbó-Dorca a Girona els dies 12-18 de juny de 1988, va tenir un format excepcional. En realitat va ser el "Workshop on Quantum Chemistry. Basic Aspects and Actual Trends" i va consistir en un total de 36 conferències d'una hora cada una, a càrrec de químics quàntics de gran prestigi internacional: M. Dupuis (EUA), I. Guseinov (USSR), G. Berthier (França), Ch. F. Fischer (EUA), P. Jorgensen (Dinamarca), C. J. Roothaan (EUA), N. C. Handy (UK), J. Almlöf (U.S.A.), R. J. Buenker (RFA), B. Roos (Suècia), J. Shavitt (EUA), E. Canadell (França), Ph. Duran (França), C. Valdemoro (Madrid), J. Weber (Suïssa), H. Weinstein (EUA), R. Colle (Itàlia), V. Bonacic-Koutecky (RDA), C. A. Nicolaiades (Grècia), A. Hinchliffe (UK), G. L. Malli (Canadà), W. Kutzelnigg (RFA), P. Pyykko (Finlàndia), R. J. Bartlett (EUA),

**Figura 1** Contingut, lloc i durada de cada una de les 18 reunions.



**Figura 2** Temàtica de les comunicacions.



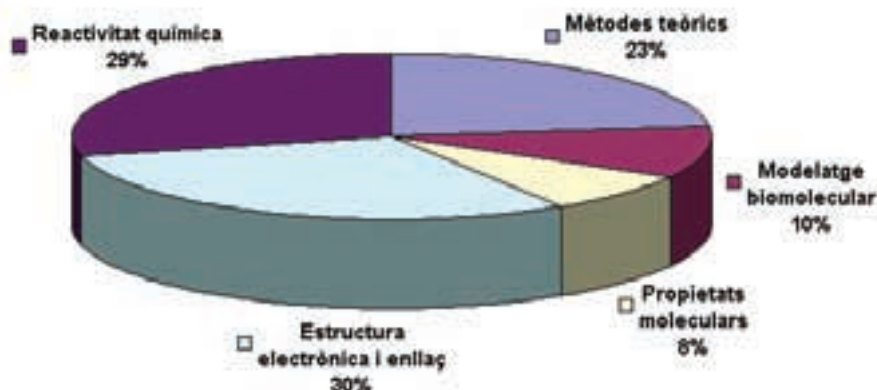
K. Hirao (Japó), R. Paunz (Israel), J. Karwosky (Polònia), P. Fantucci (Itàlia), M. Benard (França), J. Koutecky (RDA), P. S. Bagus (EUA), M. Robb (UK), R. M. McWeeny (Itàlia) i O. Löwdin (EUA). El *workshop* va ser per a molts investigadors del GQQC l'inici de futures col·laboracions científiques molt profitoses amb alguns d'aquests il·lustres conferenciantes.

A causa d'una davallada en el pressupost ordinari de l'IEC, les reunions dels anys 1993 i 1994 es van organitzar sense el suport econòmic d'aquesta institució. Aprofitant la creació de Xarxes Temàtiques dins del 1r Pla de Recerca de la Generalitat de Catalunya, l'any 1994 el GQQC va decidir deixar de pertànyer a l'IEC i esdevinir l'actual XQTC. Cal esmentar que va ser una de les primeres xarxes temàtiques reconegudes per la Generalitat de Catalunya.

En el "Symposium on Electronic Structure and Chemical Reactivity in honor of Professor Joan Bertran", celebrat a Bellaterra els dies 19-21 de setembre de 2001, vaig presentar els resultats d'una anàlisi detallada del nombre i temàtica de les comunicacions presentades, del nombre i filiació dels seus autors i dels corresponents grups participants a les reunions anuals que s'havien fet fins l'any 2001 ("The Theoretical Chemistry Group of Catalonia: 17 years of scientific meetings"). Crec que aquesta anàlisi, actualitzada amb les dades de la reunió d'enguany, pot servir per veure l'evolució de la recerca en Química Teòrica a Catalunya els darrers 18 anys.

A la **figura 1**, per a cada una de les 18 reunions que s'han fet fins avui, es dona el nombre de conferències, seminaris, comunicacions, dies de durada de la reunió i la universitat que la va organitzar. També s'indica si va haver-hi o no una taula rodona a la reunió. Resulta interessant recordar els noms de tots els conferenciantes que han participat a les reunions: H. Hinchliffe (1985); J. P. Malrieu, J. Fernández Rico, E. Canadell, M. Benard i R. Benard (1986); N. C. Handy (1987); J. Karwosky, J. Fernández Rico i F. Spiegelmann (1990), A. Sadlej i A. Xenopoulos (1991); R. Colle, P. Hiberty i J. Ugalde (1992); J. T. Hynes, Y. Jean, A. Dedieu i E. Canadell (1995); P. G. Me-

**Figura 3.** Desglossament global de la temàtica de les 436 comunicacions.

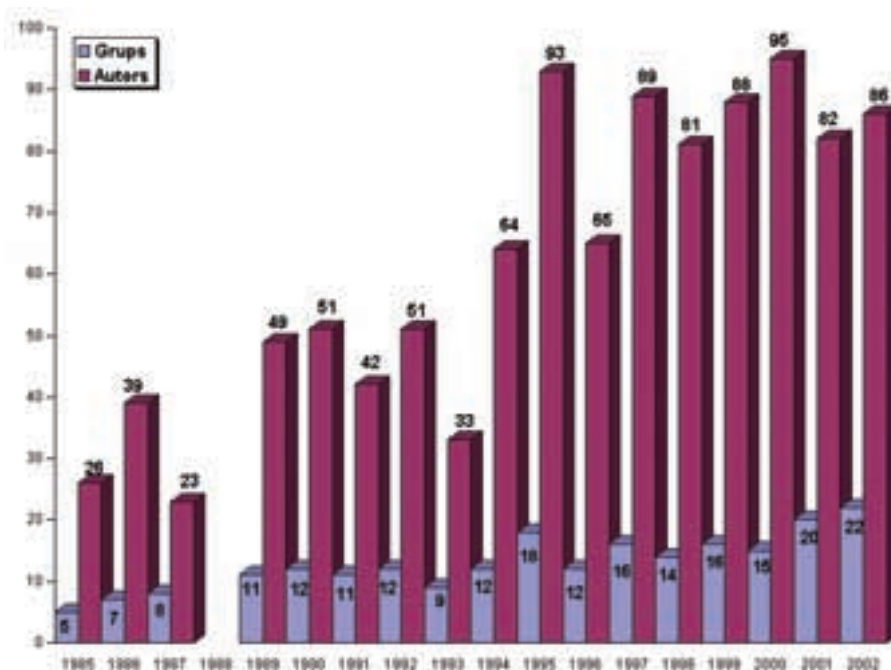


zey (1998); R. J. Boyd (1999); R. Carbó-Dorca, M. Laso i R. Pou (2000); A. Douhal, M. Sodupe i M. Yañez (2001); D. Bermejo, D. Mukherjee i L. M. Tel (2002).

De taules rodones només n'hi ha hagut cinc. Els temes de debat han estat els següents: "Organització i continuïtat de les reunions del Grup de Química

Quàntica de Catalunya" (1985); "La situació informàtica al nostre entorn" (1986); "Utilització dels ordinadors en l'ensenyament de la Química Teòrica" (1989); "Aportació dels càlculs teòrics a l'estudi de l'estructura i reactivitat de compostos dels metalls de transició" (1995) i "La Química Teòrica del segle XXI" (2000).

**Figura 4** Nombre d'autors i grups de recerca de les comunicacions.



La temàtica de les comunicacions científiques presentades es dona a la **figura 2** de forma detallada per a cada reunió i a la **figura 3** de forma global per al total de les 436 comunicacions presentades fins avui. Per facilitar la seva descripció, els temes s'han agrupat en els següents cinc grans blocs:

- Desenvolupament de mètodes computacionals de la química teòrica.
- Reactivitat química.
- Estructura electrònica i enllaç de les molècules, sòlids i superfícies.
- Càlcul de propietats moleculars.
- Modelatge biomolecular i simulació de processos biològics.

Finalment, a la **figura 4** es dona el nombre total d'investigadors que han participat com a autors de les comunicacions i el nombre de grups de recerca a què pertanyen.

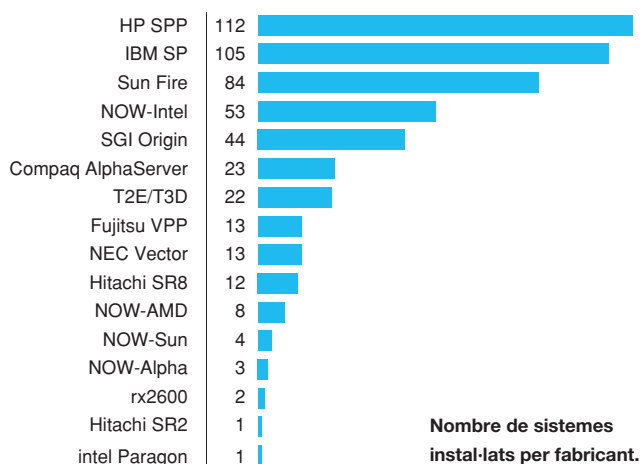
Resulta interessant indicar que els investigadors que van participar en les primeres reunions pertanyien a departaments o unitats de Bioestadística, Enginyeria Química, Química Física i Química Orgànica. En les reunions posteriors es van anar incorporant investigadors de departaments o unitats de Biomedicina, Bioquímica i Química Inorgànica, la qual cosa indica el caràcter multidisciplinari de la recerca en Química Teòrica a Catalunya. Una altra característica per a destacar és el fet que gairebé a totes les reunions de l'XQTC hi han participat o assistit investigadors de països de parla catalana de fora del Principat, principalment del País Valencià i de les Illes Balears.

L'anàlisi de les reunions de l'actual XQTC indica clarament que la recerca en química teòrica a Catalunya ha experimentat en els darrers 18 anys un creixement espectacular. Una dada que ho corrobora és el fet que el nombre d'investigadors de l'XQTC ha passat de ser 31 (any 1985) a 183 (any 2002).

Finalment, voldria esmentar que aquest creixement tan espectacular no hauria estat possible sense el suport dels recursos de supercomputació del CESCÀ. En aquest sentit, és prou il·lustratiu el fet que el 72% del temps de CPU del CESCÀ corresponen al període 1996-2002 ha estat utilitzat pels grups de recerca de l'XQTC. ■

# 10 anys de la llista TOP500

L'Earth Simulator japonès instal·lat a principis del 2002 continua a la posició número 1 amb un rendiment punta de 40,96 Tflop/s. La segona i la tercera posició estan ocupades per dues màquines idèntiques, sistemes ASCI Q, instal·lades a Los Alamos National Laboratory, i que tenen un rendiment punta de 10,24 Tflop/s cadascuna. Aquests sistemes de



la nova Hewlett-Packard estan basats en el sistema AlphaServer SC.

Per primera vegada, dos clusters de PC s'han situat entre els 10 supercomputadors més potents. A la posició número cinc es troba el cluster construït per Linux NetworX and Quadrics i instal·lat al Lawrence Livermore National Laboratory. A la

vuitena posició hi ha el cluster d'HPTi amb xarxa Myrinet, instal·lat al Forecast Systems Laboratory de la National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA). Per segona vegada, Hewlett-Packard lidera la llista amb 137 sistemes instal·lats, seguit d'aprop per IBM, amb 131. Sun, amb 88 sistemes, ocupa la tercera posició. ■

Edita



Patrocina

Generalitat de Catalunya



Universitat de Barcelona

Universitat Autònoma de Barcelona

Universitat Politècnica de Catalunya

Universitat Pompeu Fabra

Universitat de Girona

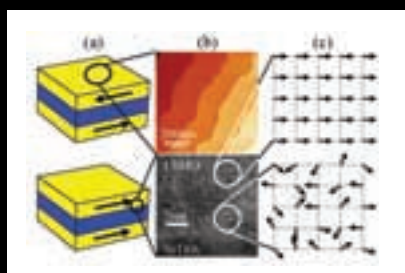
Universitat Rovira i Virgili

Universitat de Lleida

Universitat Oberta de Catalunya

CSIC

## FOTO / NOTÍCIA



La tecnologia de la informació actual està basada en el control del flux de càrregues elèctriques —en els microprocessadors— o l'orientació de l'espín dels electrons —en els discs durs i capçals de lectura—. L'ús simultani de la càrrega i l'espín podria ser la clau per obtenir microprocessadors més ràpids, més petits i poder augmentar la densitat d'informació en els ordinadors. Aquest és l'objectiu de la magnetoelectrònica. L'ús de memòries magnètiques MRAM, no volàtils, en lloc de les actuals DRAM capacitives ens permetrà, per exemple, arrencar més ràpidament els ordinadors, una integració major i un consum menor. Al Laboratori de Magnetisme ([www.icmab.es/dmag](http://www.icmab.es/dmag)) de l'Institut de Ciència de Materials de Barcelona (CSIC), dirigit per Josep Fontcuberta, s'estan desenvolupant alguns dels ele-

ments actius d'aquesta nova tecnologia —unions túnel [Fig. (a)]— i cercant nous i millors materials, adequats per a aquesta nova funció. L'estructuració necessària, que implica fer epitàxies nanomètriques [Fig. (b)], fa que els efectes de desordre atòmic, interfícies i superfícies siguin molt importants. Les simulacions numèriques desenvolupades per Carlos Frontera ens permeten entendre alguns aspectes del comportament magnètic dels nous materials [Fig. (c)] i dissenyar estratègies adequades per a la seva millora.

(a) Estructura bàsica d'una unió túnel: dues capes ferromagnètiques metàl·liques (groc) separades per una barrera aïllant (blau). L'orientació relativa de les imantacions determina la resistència elèctrica de la unió.

(b) Dalt: Imatge de microscopi de forces atòmiques d'un elèctrode de SrRuO<sub>3</sub> on es poden veure graons de ~3nm corresponents a la mida d'una cel·la unitat. Baix: Imatge de microscopi electrònic de transmissió on es mostra l'ordenament atòmic prop de la interfície capa/substrat.

(c) Dalt: ordenament dels moments magnètics atòmics. Baix: Desordre magnètic prop de la interfície capa/substrat. ■

TERAFLOP

DIRECTOR

Miquel Huguet

COORDINACIÓ

Xavier Pereira

REDACCIÓ

Teresa Via

Helena Pujol

COL-LABORACIÓ

Gemma Mas

(TERMCAT)

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà-Associats.com

CESCA

Gran Capità, 2-4

08034 Barcelona

Tel. 93 205 6464

Fax: 93 205 6979

<http://www.cesca.es>

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

DIPÒSIT LEGAL: B-33512-94

ISSN: 1134-6671