

TERAFLOP

Revista del Centre de Supercomputació de Catalunya

Mig segle de CERN, el major laboratori de física de partícules

- **Cinc usuaris reben la Distinció a la recerca universitària**
- **Entrevista a Francesc Illas, Premi de la Real Sociedad Española de Química**
- **Homenatge a Joan Oró, reconegut científic català**

El Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la

Informació (DURSI) ha concedit per cinquè any les Distincions per a la promoció de la recerca universitària. Enguany han estat guardonats 24 científics, dels quals 8 són investigadors reconeguts (42 anys o més) i 16 són joves investigadors (menys de 42 anys). A partir del proper curs, els professors distingits podran dedicar-se de manera prioritària a activitats de recerca a la seva universitat, durant un període de 6 anys si són investigadors reconeguts, i de 4 anys si pertanyen a la categoria de joves investigadors.

Les universitats rebran anualment del DURSI 34.600 euros per cada professor distingit, que podran destinar a contractar professorat per cobrir necessitats docents, invitar investigadors d'alt nivell d'altres centres de recerca o altres despeses del guardonat relacionades amb la seva activitat científica.

Les Distincions de la Generalitat per a la promoció de la recerca universitària es van crear l'any 2000 amb la finalitat d'estimular les activitats de recerca d'alt nivell dels professors investigadors del sistema universitari de Catalunya i dels grups de recerca als quals estan associats. En les edicions anteriors han estat distingits un total de 120 investigadors, 30 cada any.

En aquesta edició han rebut la distinció cinc investigadors que són o han estat usuaris del CESCA: Francesc Xavier Avilés, Manuel Barranco i Agustí Lledós, en la categoria d'investigadors reconeguts, i Núria López i Ignasi Pagonabarraga, en la de joves investigadors.

Distincions de la Generalitat de Catalunya per a la promoció de la recerca universitària

Francesc X. Avilés i Puigvert

Les Planes d'Hostoles, Girona, 1947
Catedràtic de Bioquímica i Biologia Molecular (UAB)

Expert en estructura i biotecnologia de proteïnes, destaquen els seus treballs en l'ús combinat de procediments experimentals i bioinformàtics, així com la seva aplicació a enzims proteolítics i els seus inhibidors. La seva tasca en aquesta àrea ha creat escola a Catalunya.

“Després de rebre la distinció, sens dubte tens una sensació d'agraïment i de satisfacció personal, però també d'alleugeriment ja que saps que et permetrà fer una millor recerca competitiva en comportar una disminució significativa de les tasques docents. Avui dia, és pràcticament impossible dur a terme una recerca de qualitat alhora que s'intenta practicar una bona docència i gestió, als nivells espanyols actuals. I no diguem si, al mateix temps, es vol fer cas als estímuls actuals per a involucrar-se en divulgació científica i/o creació d'empreses d'alta tecnologia!”.

“Realment es faria un gran favor a la investigació si cada any es donessin un centenar de distincions perquè el

col·lectiu més nombrós d'investigadors potencials es troba al món universitari. Al mateix temps, la docència universitària se'n beneficiaria significativament. Un se sorprèn quan es relaciona amb col·legues d'Anglaterra, Suècia o els EUA, professors universitaris que fan recerca de qualitat: trobant-se a un nivell competitiu semblant, donen entre dos i deu vegades menys docència que nosaltres; amb aquest plantejament poden portar a terme ambdues tasques de manera molt més òptima i regular”.

“En el cas de la meua generació no va ser fàcil començar perquè veníem d'un període postfranquista, però vam trobar feina molt més ràpidament que no pas avui dia. Amb dos anys d'estades postdoctorals —un al CSIC i un altre a l'estranger— en vaig tenir prou per aconseguir una plaça pràcticament estable. Actualment, és freqüent que l'investigador espanyol s'estigui entre tres i cinc anys a l'estranger i quan torna ha d'esperar un grapat d'anys per aconseguir una plaça en ferm”.

Manuel Barranco i Gómez

Barcelona, 1950
Catedràtic de Física Atòmica, Molecular i Nuclear (UB)

L'investigador ha estat el motor d'un grup de recerca que, mitjançant tècniques emprades en física nuclear, estudia els sistemes de molts cossos bosònics i fermiònics amb una escala de longitud mesoscòpica.

“Hi ha una part de 'sorpresa' i una altra d'agraïment pel reconeixement d'una feina. Atesa la quantitat d'investigadors que hi ha al país i que fan una bona feina és sorprenent rebre la distinció.

FOTOS: JORDI PARETO





Així que és d'agrair que després de dedicar molt de temps a una tasca, tu mateix i el grup de persones que t'han ajudat, rebem aquesta recompensa".

"Bàsicament els diners de què disposem per fer recerca provenen d'altres convocatòries competitives. Així que és molt probable que aquesta distinció serveixi per potenciar el capital humà del grup i si, a més a més, comporta una descàrrega docent, serà benvinguda".

"La universitat ha canviat molt en els últims 20 anys. Vaig acabar la carrera l'any 1975 i amb 30 anys ja feia el mateix que faig ara. Actualment es considera jove un investigador de 40 anys, mentre que jo als 40 no m'hi considerava des d'aquest punt de vista. Tampoc no crec que fos normal aleshores que investigadors tan joves carreguessin amb el pes d'haver de tirar endavant el grup de recerca, però avui dia tot s'ha endarrerit".

Agustí Lledós i Falcó

Barcelona, 1955

Catedràtic de Química Física (UAB)

Ha portat a terme estudis que han contribuït a la comprensió de les reaccions químiques, especialment de transformacions organometal·liques i processos catalítics. Ha realitzat contribucions importants en aquest camp i té un gran reconeixement internacional en l'àrea dels hidrurs metàl·lics.

"Et fa il·lusió com a reconeixement d'una feina de molts anys, d'una trajectòria i d'un grup de recerca. Representa també un repte perquè, si bé



estàs acostumat a competir amb els científics del teu camp, en aquest cas ho fas amb els d'altres disciplines".

"Anomenem premi a aquesta distinció perquè n'hi ha poques, però que et permetin dedicar-te a dur a terme una recerca de qualitat no hauria de ser considerat un premi".

"Els diners que reps per la distinció et donen la llibertat per poder assistir a congressos, convidar algun col·lega per col·laborar o mantenir un estudiant de postdoctorat un parell de mesos més mentre acaba algun projecte. Alguns altres que amb la rigidesa d'altres subvencions no pots fer. Però no deixa de ser una mica d'economia domèstica".

Núria López i Alonso

Barcelona, 1972

Professora de Química Física (UB)

Ha realitzat contribucions rellevants en una àrea de gran interès com és l'àrea de les interaccions d'òxids metàl·lics suportats i química de superfícies.



"Estic molt agraïda a la gent que ha fet possible que em donin la distinció que, en el meu cas, és un reconeixement per una tasca més petita però que per a mi suposa una major potencialitat. Aquesta distinció em permetrà començar quelcom nou i tirar endavant una sèrie de projectes".

"Espero que l'import de la subvenció em permeti consolidar la recerca i reforçar els contactes amb altres grups, en particular experimentals, tant d'aquí com de fora de Catalunya".

Ignasi Pagonabarraga i Mora

Barcelona, 1966

Professor titular de Física de la Matèria Condensada (UB)

Duu a terme un interessant estudi micro i mesoscòpic de fluids complexos i aglomerats, amb potencialitat d'aplicació a camps que van des de la fisicoquímica de superfícies a les nanoestructures.

"El fet que es valori la recerca és positiu. Tota iniciativa que ajudi al fet que puguem disposar d'uns mitjans addicionals per poder fer millor recerca o engegar projectes és molt satisfactòria".

"Rebre aquesta distinció ha estat una gran satisfacció, tot i que hi ha d'altres que també es mereixen rebre aquest tipus de recolzament. Quan toques de fer una estada a l'estranger has de començar pràcticament tot sol i com a mínim aquesta distinció et dona una empenta. El fet que puguis alliberar-te d'algunes hores de classe i incorporar nous membres et permet poder consolidar les línies encetades". ■



50è aniversari del CERN

El 29 de setembre de 1954, representants dels 12 Estats Membres fundadors del CERN (l'Organització Europea per a la Investigació Nuclear) van ratificar el conveni de l'Organització, establint les bases per a la fundació de la institució líder en el món en física fonamental. En commemoració d'aquell dia, el passat 29 de setembre, per primera

vegada, els 27 km de circumferència de l'anell LHC (el col·lisionador de partícules més gran del món, que actualment està en construcció) es va il·luminar i va ser visible des del cel. El mateix dia, totes les persones nascudes el 1954 van ser convidades a bufar les espelmes d'un pastís d'aniversari: el dels 50 anys del CERN.

El 1959 el laboratori obria les portes a uns 2.500 visitants l'any; deu anys després aquest número havia arribat a 12.700, i avui el CERN dona la benvinguda a uns 30.000 visitants cada any. El 16 d'octubre, per celebrar el seu cinquantè aniversari, el Servei de Visites organitza un Gran Dia de Portes Obertes. Sota el lema "50 anys, 50 visites", el públic podrà visitar cinquanta llocs d'interès al voltant del CERN.

S'estan organitzant multitud d'esdeveniments, exhibicions, debats i altres activitats. Entre elles, cal destacar

la visita a les sales d'experimentació on s'estan construint els detectors pel proper accelerador de partícules, l'LHC, que estarà llest per al 2007; la visita als tallers on el CERN construeix alguns dels objectes més freds de l'univers; la visita on es mostren les aplicacions de la recerca fonamental a la medicina, la ciència dels materials o les tecnologies del buit; o la visita que ens descobreix el GRID, un calculador gegant de la mida del planeta.

Els Estats Membres del CERN s'han volgut unir a la celebració del seu 50è aniversari. En els 20 països

que actualment formen part de la Direcció, des del mes de febrer i fins a la fi d'any s'estan portant a terme tota mena d'actes commemoratius. Espanya, que va entrar a formar part del CERN com a Estat Membre l'any 1983, no ha estat una excepció. Des del mes de març s'han succeït els actes a Madrid, Alacant, València i Vigo. Aquest mes d'octubre estan previstos actes a la Universitat Santiago de Compostel·la, al Museu de les Ciències Príncip Felip de València, al Parque de las Ciencias de Granada, i a la Fundació Focus-Abengoa de Sevilla.

FOTOS: CERN



Vista aèria del CERN als afores de Ginebra. La línia discontinua delimita la frontera entre França i Suïssa. El cercle més petit mostra la posició —sota terra— del PS (Proton Synchrotron); el mitjà, de 7 km, la del SPS (Super Proton Synchrotron); i el més gran, de 27 km de longitud, mostra el recorregut del túnel que es va excavar a la dècada dels 80 per allotjar el col·lisionador LEP (Large Electron-Positron Collider). El LEP es va tancar l'any 2000, i actualment l'anell allotja el futur LHC (Large Hadron Collider).

Fites importants del CERN

Des de la seva creació, el CERN ha fet molts descobriments importants pels quals els científics del CERN han rebut prestigiosos premis, incloent el Nobel. Entre les fites més importants destaca la creació de col·lisionadors de feixos de diferents radiacions. Mentre altres laboratoris de física es concentraven a construir màquines per fer col·lisionar feixos de radiació d'electrons, el CERN es va posar a treballar per aconseguir fer col·lisionar intensos feixos de radiació de protons, creant l'ISR (Intersecting Storage Ring). Aconseguir-ho va significar superar molts reptes tecnològics, s'hagueren de desenvolupar noves tècniques d'alt buit i calgué millorar els mètodes per controlar els feixos de radiació de partícules. El 1971 s'aconseguia fer operar el primer col·lisionador de feixos protó-protó del món.

Aprofitant tot el que havien après amb l'ISR, el 1979 el CERN decidia convertir el seu nou protó sincrotró SPS (Super Proton Synchrotron) en el primer col·lisionador protó-antiprotó del món. L'invent del refredament estocàstic, per Simon van der Meer, va ser la clau d'aquest èxit. Les primeres col·lisions protó-antiprotó van ser dutes a terme just dos anys després que el projecte fos aprovat, i el 1983 l'equip de Carlo Rubbia descobria les llargament esperades partícules W i Z, els transportadors de la interacció feble, donant així confirmació a la teoria del corrent neutre, que havia estat enunciada l'any 1973. Aquest fet els va valer el Premi Nobel de l'any 1984.

Altres fites importants assolides pel CERN són la confirmació del model estàndard de la física de partícules gràcies a la precisió de les mesures efectuades amb l'accelerador LEP (Large Electron-Positron Collider), i la síntesi al 1995 d'àtoms d'antimatèria a partir de les seves antipartícules constituents. El 2002 s'aconseguia fer aquesta producció en grans quantitats, de forma controlada i a baixa energia. Per aquella època també es va demostrar l'existència de la violació de la simetria CP (*CP-violation*), l'efecte subtil que explica la preferència de la natura per la matèria enlloc de per l'antimatèria.

Computadors per als físics

El primer computador del CERN, un gegant Ferranti Mercury de vàlvules de buit, va ser instal·lat el 1958. Amb el seu cicle de temps de 60 microsegons, era un milió de vegades més lent que els grans computadores d'avui en dia. Van trigar tres mesos a instal·lar-lo, i un cop llest ocupava una habitació enorme. Tot i així, la seva capacitat computacional gairebé no igualava la d'una calculadora moderna de butxaca. L'emmagatzematge "massiu" de dades el proveïen quatre memòries de tambor magnètic, cadascun suportant 32K x 20 bits —que no és suficient per guardar les dades d'una única col·lisió protó-protó en l'LHC. El 1960 es va substituir per un computador IBM 709, una màquina equipada ja amb transistors. Malgrat que va ser substituït tan ràpidament, una petita part del Ferranti Mercury encara es conserva, junt amb la campana d'alerta, que els enginyers informàtics varen instal·lar per assenyalar errors de computació.

Des de l'any 1993 fins al 1997 els supercomputadors del CERN varen formar part del TOP500, la llista amb

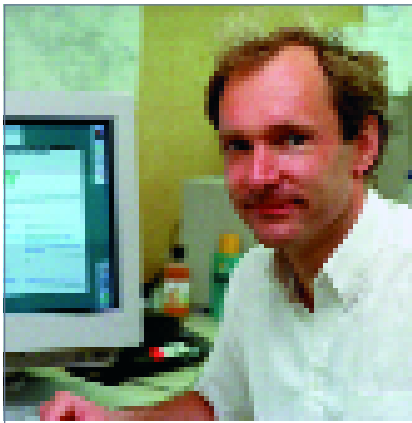
els 500 supercomputadors més potents del món. Eren màquines IBM, Meiko i HP. Avui dia, a Suïssa, només el Swiss Scientific Computing Centre i la Nestlé apareixen en aquesta llista, ja que el CERN va abandonar la utilització de supercomputadors pel seu processament massiu de dades i s'ha convertit en pioner a la construcció de gegantins clústers, originalment amb centenars de nodes RISC i actualment amb milers de nodes PC/Linux.



L'IBM 709 mentre està essent descarregat a l'aeroport de Cointrin, el 1960.



La Federació Suïssa, en ocasió del 50è aniversari del CERN, ha donat una elegant esfera de fusta que va ser construïda per a la Expo'02 a Neuchâtel: el Palais de l'Equilibre. Rebatejada amb el nom de "Globus de la Innovació", està essent reconstruïda al CERN, i s'espera que acollirà al seu interior, a la fi del 2005, un nou centre d'exhibició i, de cara al 2007, també d'experimentació.



Tim Berners-Lee va inventar el World Wide Web al CERN entre els anys 1990 i 1994. Junt amb un petit equip va concebre l'HTML, l'http, les URL, i va posar en funcionament el primer servidor, navegador i editor d'html. Avui dia és director del Consorci Web W3C.

L'any 2000 el CERN anunciava el descobriment d'un nou estat de la matèria, el plasma de quarks i gluons (QGP), que hauria existit just uns microsegons després del Big Bang, abans de la formació de partícules de matèria. No obstant això, que es tracti realment d'aquest estat i no d'algun estat precursor no es podrà confirmar fins que s'hagin dut a terme mesures de més precisió, a partir del 2007, quan estigui a punt el nou col·lisionador de partícules LHC (Large Hadron Collider).

A banda de totes aquestes proeses en el camp de la física de partícules, no podem oblidar que a la fi de l'any 1990, Tim Berners-Lee, un enginyer treballant al CERN, va inventar el World Wide Web. El Web va ser originalment concebut i desenvolupat per cobrir la demanda de "compartició automàtica d'informació" entre científics que treba-

llaven en diferents universitats i instituts del món. La idea bàsica del WWW era fusionar les tecnologies de les computadores personals, xarxa de computadors i hipertext en un sistema global d'informació potent i fàcil de fer servir.

El Web no va ser l'únic sistema de compartició d'informació desenvolupat per funcionar a Internet; un exemple notable és el sistema Gopher desenvolupat a la University of Minnesota, als EUA. El punt clau que va fer que el sistema del CERN s'imposés fou la decisió per part de la Direcció de l'Organització d'alliberar el Web al domini públic, assegurant per tant que els usuaris el podrien fer servir sense cap mena de càrrec. Avui hi ha més de 46 milions de servidors Web a tot el món; el WWW s'ha expandit des del seu entorn científic original i té milions d'usuaris acadèmics i comercials. ■

Quatre anys a l'equip de direcció del CERN: una experiència inoblidable

Després d'un dia al laboratori de l'Institut de Física d'Altes Energies ajudant a construir un detector de partícules, passo pel meu despatx a la Universitat Autònoma de Barcelona i trobo un breu missatge al contestador automàtic: "el nou director general del CERN vol parlar amb vostè". D'aquesta manera van començar quatre anys inoblidables en la meua carrera professional, durant els quals vaig dirigir la Divisió de Tecnologies de la Informació d'aquest laboratori.

Coneixia el seu entorn de computació científica prou bé ja que durant tres anys havia presidit el seu comitè assessor d'usuari. Quelcom molt característic del CERN són els fòrums d'usuaris i les decisions consensuades entre aquests "clients" i els "proveïdors" (en la seva majoria, els grups de la meua Divisió). Aviat vaig descobrir que aquest sistema informàtic eren aplicats a tot, tant en l'administració com per a l'emmagatzematge i el control de modificacions de dissenys d'enginyeria. I és que al CERN hi ha molt poques activitats en les quals no intervingui un ordinador. Això ens

porta a una altra característica de l'entorn d'aquest laboratori: la necessitat constant de renovació acompanyada d'innovació, no tan sols en informàtica sinó també en enginyeria de processos i en tot tipus de tecnologies. I és que el pressupost base de quasi 700 M€ anuals, que podria impressionar, ha d'utilitzar-se molt eficientment per aconseguir els ambiciosos objectius d'aquest laboratori.

Per tenir èxit en aquests incessants cicles de renovació i innovació, cal guanyar-se i mantenir la complicitat dels usuaris i l'entusiasme dels desenvolupadors i enginyers de sistemes. Un no pot adormir-se sobre els llozers. Durant el cicle en el qual vaig estar-hi involucrat, la computació científica va passar d'un complex entramat d'uns quants centenars de nodes en 7 arquitectures diferents a un clúster de més de cinc mil nodes tipus PC (quasi de supermercat, en realitat biprocessadors en minitorres amb Gigabit Ethernet) corrent Linux i multiplicant la capacitat anterior per un factor de 50 aproximadament. Plantejar un canvi d'aquestes característiques el 1999 i completar-lo en dos anys amb



èxit és un exemple de la gran capacitat d'innovació de l'equip humà del CERN.

Amb la comunitat d'universitats i centres d'investigació que col·laboren habitualment amb el CERN i, a més, atraient experts en enginyeria informàtica, van llançar els projectes d'R+D DataGrid, CrossGrid i DataTAG, que van establir les bases de l'actual projecte EGEE, que construeix la infraestructura Grid de producció 24x7 més extensa del món. Si la memòria no em falla, vam executar més de 25 projectes de renovació i innovació en aquells quatre anys. I, evidentment, el CERN continua. I jo m'alegro de poder mantenir avui dia el contacte a través de les col·laboracions que fem des del Port d'Informació Científica. ■

Manuel Delfino, director del Port d'Informació Científica i catedràtic de Física de la UAB. Director de la Divisió de Tecnologies de la Informació del CERN (1999-2002).

Tres supercomputadors de l'Estat a la llista TOP500

Vodafone, Carrefour i el Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) apareixen a l'edició de juny de la llista TOP500 amb els seus supercomputadors Superdome d'HP en les posicions 424, 474 i 475 respectivament. Tant el CESGA com Vodafone van entrar a les posicions centrals de la llista (227 i 312) en l'edició de novembre de 2003. En aquesta edició l'empresa de telecomunicacions mòbils ha baixat un centenar de posicions afegint 96 processadors addicionals, mentre que el CESGA n'ha perdut 250 mantenint la mateixa configuració que l'any passat.

La novetat espanyola d'aquesta edició ha estat l'empresa de distribució i hipermercats Carrefour. Com explica Eustaquio Leganés, el seu director de producció, "els dos servidors HP Superdome replicats allotgen els sistemes operacionals (comercial, financer i de recursos humans) i el sistema de presa de decisions (Datawarehouse) de l'empresa". Fins a l'any 2000, Carrefour mantenia part dels seus sistemes centrals en un entorn *mainframe* IBM S/390 i una altra part en un entorn Superdome HP-UX, i ara s'ha substituït el sistema *mainframe* per un Unix integrat amb l'existent, comenta Leganés. Aquesta empresa té prevista una nova ampliació dels processadors l'any vinent.

Domini dels processadors Intel

Quasi tres-cents supercomputadors utilitzen processadors Intel, mentre que sis mesos abans eren menys de dos-cents. Així, en dos anys el nombre de màquines amb processador Intel ha passat de 44 a 287 (vegeu figura). Els processadors Power d'IBM, instal·lats en 72 màquines, i els d'HP, en 57, són els següents processadors més utilitzats. Els AMD són utilitzats per 34 supercomputadors a la llista.

En aquesta edició de la llista, prop de la meitat dels sistemes sobrepassen el llindar d'un teraflop per segon, és a dir, poden realitzar 10^{12} operacions de coma flotant per segon. L'últim supercomputador de la llista disposa d'un rendiment màxim ($R_{m\grave{a}x}$) de 624 Gflop/s, 3,5 vegades la potència agregada del CESSA.

Pel que fa a la distribució geogràfica, els països asiàtics comencen a

tenir presència a la llista amb 89 sistemes instal·lats, dels quals 34 corresponen al Japó. Europa està present amb 124 supercomputadors i els Estats Units continuen encapçalant la llista amb una mica més de la meitat dels sistemes, 262.

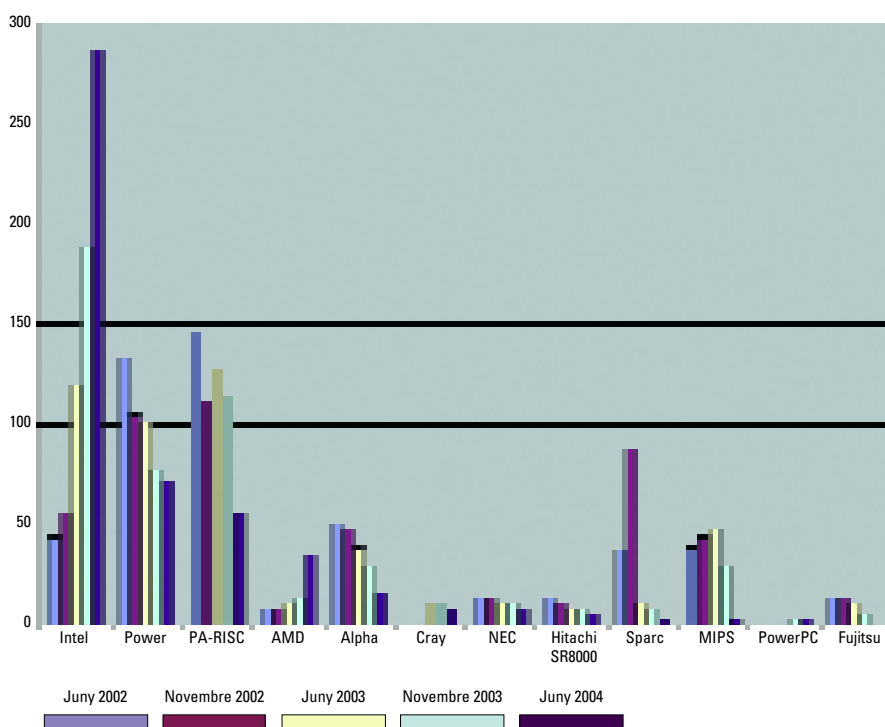
El TOP10 continua liderat per l'Earth Simulator japonès, que porta ja dos anys encapçalant la llista amb un $R_{m\grave{a}x}$ de quasi 36 Tflop/s. Una nova entrada, el Thunder del Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL), s'ha situat en la segona posició. El seu $R_{m\grave{a}x}$, però, de quasi 20 Tflop/s, està molt per sota del rendiment de l'Earth Simulator.

El Thunder ha fet caure a la tercera posició el sistema d'HP ASCII Q instal·lat a Los Alamos National Laboratory. A les posicions 4 i 8 es troben els prototips del sistema IBM BlueGene/L que estan posant en marxa l'LLNL i IBM i que pretén desbancar l'Earth Simulator de la primera posició en les properes llistes.

En el cinquè lloc es troba el Tungsten de l'NCSA nord-americà, un Dell amb 2.500 processadors P4 Xeon, que ha baixat una posició respecte a la llista anterior. En la sisena posició s'ha col·locat el primer supercomputador europeu, un IBM eServer pSeries 690 instal·lat el 2004 a l'European Centre for Medium-Range Weather Forecasts (ECMWF) del Regne Unit.

Un altre supercomputador japonès, construït per Fujitsu i instal·lat a l'Institut de Recerca en Física i Química RIKEN, ocupa la setena posició de la llista. De la cinquena a la novena posició ha baixat l'HP Integrity rx2600 del Pacific Northwest National Laboratory nordamericà, conegut com a Mpp2. Tancant el TOP10 es troba el primer supercomputador xinès que s'ha col·locat entre els 10 més potents; l'equip, instal·lat al Shanghai Supercomputer Center, té un $R_{m\grave{a}x}$ de 8 Tflop/s.

Tipus de processadors en les màquines del TOP500



Francesc Illas

Catedràtic de Química Física de la UB

Francesc Illas i Riera (Barcelona, 1954), catedràtic de Química Física a la Universitat de Barcelona (UB), porta poc més de trenta anys vinculat a aquesta Universitat on ha estat estudiant, professor ajudant i titular i, des de 1992, catedràtic. Dirigeix el grup de Química Quàntica de Materials, que té com a principals línies de recerca l'estudi teòric de la reactivitat sobre superfícies rellevants en catàlisi heterogènia i les interaccions magnètiques i estats excitats en superfícies i sòlids d'interès tecnològic. El proper 15 de novembre, Dia de la Química, rebrà el Premi de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) en l'àrea de la Química Física.

**“Només un
àtom de
cada deu mil
diferencia
la sorra de
platja
d'un robí”**



FOTOS: JORDI PARETO

Què representa per a vostè rebre el premi de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) en l'àrea de la química física?

En primer lloc representa una sorpresa perquè ha estat quelcom inesperat. De fet, em vaig assabentar de la concessió del premi mentre era a Mèxic. No deixa de ser una satisfacció personal veure que els teus col·legues reconeixen l'esforç d'una trajectòria de molts anys.

La comissió que ha decidit concedir-li aquest premi en l'àrea de la química física destaca els seus estudis teòrics de la química de l'estat sòlid. Com van ser els seus inicis com a investigador en aquesta àrea?

Tot va començar amb la meua tesi doctoral que va dirigir el Dr. Fausto Sanz, electroquímic de la UB. Estava interessat en les interaccions en els elèctrodes des d'un punt de vista molecular, així que vam començar a estudiar interaccions entre àtoms i superfícies. Aquest va ser l'inici de tota una línia de recerca que ha anat evolucionant amb el temps. Quan vaig tornar d'una estada d'un any a IBM, als Estats Units, vam continuar amb problemes d'estat sòlid. Ara, per exemple, estem conduint-nos cap a l'àrea de la nanociència.

On trobaríem la seva vocació per la química física?

De petit ja volia ser químic. Feia experiments a casa meua i els meus pares alguna vegada van haver de sortir corrents perquè vaig produir gasos tòxics. Però a mesura que avançava en la meua carrera universitària m'interessava més la part fonamental i teòrica, i vaig anar deixant la part experimental. A més, des del punt de vista de l'habilitat manual sóc un zero a l'esquerra, i tot el que és maneig de laboratori em costa moltíssim.

A l'inici dels anys 80, quan estava fent la meua tesi, començava la computació. Al principi treballàvem amb un ordinador de la Universitat Politècnica, un Facom 25 amb 64 KB de memòria. També utilitzàvem un Univac del Ministeri d'Educació i Ciència a través d'una terminal remota que es menjava totes les fitxes perforades. Així, mica en mica

vam entrar en el món de la computació. Després, l'arribada del CESCA va representar un gir cap a la potenciació d'aquestes eines, com demostra el treball bibliogràfic del catedràtic Miquel Duran, de la UdG (vegeu Teraflop 73).

Com recorda l'època d'estudiant a la Universitat de Barcelona dels anys 70?

Vaig començar la carrera l'any 1972 a Tarragona, en una extensió de la Facultat de Química de Barcelona, on vaig passar-hi tres anys. Per dedicar-me a la química física vaig haver de venir a la Universitat de Barcelona, ja que a Tarragona no s'oferia aquesta especialitat. En aquells anys hi havia molts menys mitjans, els laboratoris eren molt vells i encara no havia aparegut la informàtica en el currículum dels estudiants.

“Moltes aplicacions encara tenen enormes requeriments de memòria i de disc”

En els anys 70 la recerca a la universitat i concretament al Departament de Química Física era pràcticament inexistent. De fet, els primers articles científics d'autors d'aquest departament comencen a l'inici dels anys 80. Fins aleshores no hi havia tradició científica, si més no en aquest departament. Crec que avui dia tenim un nivell d'excel·lència gràcies a l'esforç de tot el seu personal. Alguns han viatjat a l'estranger, d'altres han fet una feina més callada però no menys important dintre del departament, i el resultat és que avui dia tenim un prestigi científic reconegut.

La seva carrera professional l'ha desenvolupada a la UB. Com veu aquesta universitat avui dia?

Malgrat ser una gran universitat i disposar d'una important comunitat científica, la UB manté una imatge d'universitat humanística i de ciències socials que avui dia no es correspon amb la

nostra realitat. Mentre que la UPC té una marcada imatge d'universitat tecnològica i la UAB d'universitat científica, la UB arrossega una imatge que no afavoreix els seus investigadors. Crec que cal fer un esforç perquè el component científic de la nostra universitat sigui molt més conegut i canviï la nostra imatge d'universitat “de lletres”.

Com ha anat evolucionant la investigació en la seva àrea en aquests anys?

Inicialment, a conseqüència de les limitacions computacionals, treballàvem amb models molt senzills i simplificats que representaven superfícies i sòlids. El desenvolupament de les màquines paral·leles i, sobretot, els canvis tecnològics en els últims cinc anys, han estat un altre *tour de force*, un altre gir, per poder treballar amb sistemes cada vegada més grans. Les màquines paral·leles i el desenvolupament de programari adient, dins del que s'anomena la teoria del funcional de la densitat, han permès treballar amb sistemes molt grans.

De tota manera, moltes aplicacions encara tenen enormes requeriments de memòria i de disc. Tot allò que no passa per la teoria del funcional de la densitat, càlculs acurats basats en la teoria de funcions d'ona, requereix accedir a molts gigabytes de memòria simultàniament. Avui dia aquests càlculs encara són difícils i costosos, i sovint no estan al nostre abast.

Precisament aquests canvis en la tecnologia de supercomputació ha acostat aquest maquinari a centres com el CERQT, del qual és actualment director (vegeu Teraflop 77). Quins serveis ha de proporcionar un centre com el CESCA?

Un centre com el CESCA ha de poder realitzar càlculs grans, bé per la capacitat de memòria i de disc necessaris o bé per la quantitat de temps de càlcul que pot proporcionar. Així, ha de poder ajudar a resoldre projectes que no puguin ser abordats d'una altra manera. Potser ha de ser un pont entre la màquina que pot tenir un centre com el CERQT i una màquina de milers de processadors com serà la del Centro Nacional de Supercomputación.

Evidentment, a més de la supercomputació i de les comunicacions, com és el cas del CESCA, cada vegada més es valoraran serveis com ara l'assistència tècnica. Sovint els grups de recerca no tenen el personal amb la formació adient per gestionar l'equipament de càlcul d'altres prestacions propi. Però, sobretot, no disposen de professionals que optimitzin l'ús del maquinari i el programari. Aquests aspectes requereixen una assistència tècnica que tenim d'una manera molt limitada gràcies al programa de tècnics de la Generalitat. Però les nostres institucions no contemplan que per a desenvolupar la recerca necessitem aquest tipus de personal.

El seu grup està entre els que més hores computacionals utilitzen al CESCA. Com incideix la supercomputació en la seva recerca?

El treball de fa uns anys requeria la utilització de models físics, de boles i pals, amb els quals podies visualitzar les estructures que volies estudiar. Després s'havien de calcular, pràcticament manualment, amb relacions trigonomètriques, les coordenades dels àtoms per després introduir-les al càlcul. Mentre que tota aquesta preparació era molt lenta, avui dia, amb els programes de visualització i de disseny molecular, és feina de mig matí.

La supercomputació és imprescindible perquè els sistemes amb que treballem tenen molts electrons i perquè la grandària del càlcul creix com a mínim linealment amb el nombre d'electrons que té el sistema. Cada vegada interessa més estudiar sistemes que són pràcticament d'aplicació pràctica. En l'àmbit bioquímic, per exemple, fragments de proteïnes o d'àcids nucleics que tenen centenars d'àtoms. En el cas de superfícies, catàlisi i estat sòlid ens trobem amb el mateix problema. Per estudiar sistemes de la química que puguin tenir una certa relació o interacció amb allò que fan els experimentals has de treballar amb sistemes de tipus real. Per tant, com més creix el nombre d'àtoms més potència computacional requerim.



Quines són actualment les principals línies d'investigació del Grup de Química Quàntica de Materials i quines són les seves aplicacions?

Tenim una línia d'estudi d'estat sòlid, en la qual estudiem bàsicament estats excitats que tenen relació per exemple amb la superconductivitat d'alta temperatura crítica, determinem paràmetres d'aquests materials i predim quin comportament tindrien com a superconductors. Intentem contribuir al coneixement de l'estructura electrònica d'aquests compostos.

En aquesta línia d'estats excitats també ens interessem per l'estudi de propietats electròniques de defectes. Sovint les propietats dels materials venen provocades per petits defectes, per exemple, el robí és òxid de silici amb impureses de crom en molt petites quantitats, un àtom de cada 10.000, i aquest àtom fa que la sorra de la platja sigui un robí. L'estructura electrònica dels defectes i l'enginyeria de defectes per tenir cristalls amb propietats tecnològiques de conductivitat, refracció, de transport, de transport de propietats magnètiques, etc., són temes en els quals s'està treballant molt. És l'anomenada *spintronics*, en lloc d'*electronics*, és a dir, transportar spins o moments magnètics.

Tenim també una línia de química de superfícies, on la fita última és la catàlisi heterogènia. El 90% de la producció química mundial de qualsevol tipus de compost es produeix industrialment gràcies a la presència de catalitzadors, que permeten produir productes químics d'una manera més eficient i també més selectiva, eliminant els productes secundaris. Els mecanismes de la catàlisi són essencialment desconeguts, i el nostre interès està en aportar informació sobre els mecanismes d'alguns processos que estan fent reaccions catalitzades heterogèniament, és a dir, per superfícies.

Com veu l'actual sistema científic?

Un problema greu i estructural que tenim a Espanya és la manca de sensibilitat per part de les autoritats polítiques. Per exemple, el finançament arriba del govern de la Generalitat a la universitat en termes de nombre d'alumnes, independentment de la recerca que es faci i de la seva qualitat. És hora que les nostres autoritats polítiques comencin a prendre consciència que per tenir recerca d'excel·lència cal un finançament addicional, no per als projectes de recerca, que ja en tenen, sinó per a la pròpia universitat.

Si la universitat només rep diners per nombre d'estudiants i cada vegada ha de gestionar més projectes de recerca i ha de mantenir més màquines a la xarxa elèctrica, comencen a minvar els recursos existents. La recerca és una inversió a llarg termini amb la qual la societat surt guanyant, i si s'ha de fer a la universitat cal que hi hagi una partida addicional.

A més, no hi ha cap distinció de les obligacions docents de cada professor a la universitat en funció de la tasca de recerca que fa, mentre que a d'altres països, com a la universitat Texas A&M, que té un dels millors departaments de química d'Estats Units, la diferència de sou i de càrrega docent entre un professor que tingui una important activitat de recerca i un altre que no en tingui tanta pot ser enorme. La nostra càrrega docent és la mateixa independentment de la tasca investigadora que duguis a terme, i això no deixa de ser una discriminació. ■

Se celebra a la UPF la vintena Reunió de la Xarxa de Química Teòrica

Els passats 12 i 13 de juliol va tenir lloc a l'edifici França de la Universitat Pompeu Fabra (UPF) la reunió del Grup Català de Química Teòrica, organitzada per la Xarxa Temàtica de Química Teòrica (XQT). En la seva vintena edició, la Reunió de la Xarxa de Química Teòrica "ha permès comprovar l'estat de maduresa de la química teòrica a Catalunya", explica el coordinador de la Xarxa i investigador de la Universitat de Girona (UdG), Miquel Duran.



**La reunió va comptar
amb quatre
conferències plenàries,
32 comunicacions orals
i 22 cartells.**

L'acte va ser inaugurat per la rectora de la UPF, M. Rosa Virós, que va destacar la satisfacció de la universitat per acollir una reunió científica de tan alt nivell. També van participar en la inauguració de la reunió el vicerector de Política Científica de la UPF i membre de l'XQT, Ferran Sanz, i Miquel Duran.

A la reunió hi van assistir al voltant de 150 persones. Segons Santiago Olivella, un dels fundadors del grup de química teòrica fa 20 anys i vicepresident de la Comissió de Grans Usuaris de Supercomputació (GUCAP) del CESCA, "en tot aquest temps hi ha hagut un creixement constant del nombre d'investigadors en el camp de la química teòrica, hem passat de ser uns 30 l'any 1985 a ser-ne més de 180 aquest any".

La reunió va consistir en un total de 32 comunicacions orals i 22 cartells, efectuades en gran part per estudiants de doctorat. Precisament la Xarxa estimula que les presentacions les facin els membres més joves per tal que tinguin oportunitat de millorar les habilitats comunicatives: "Malgrat això, el contingut científic és molt alt, reflecteix l'avenç investigador del grup de recerca corresponent", comenta Miquel Duran.

La reunió va comptar amb la participació d'investigadors de renom dins el món de la química teòrica. Es van fer quatre conferències plenàries que van anar a càrrec de Javier Luque, de la Universitat de Barcelona, Vicent Moliner, de la Universitat Jaume I de Castelló, Claudio Mar-

celo Zicovich-Wilson, de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos (Mèxic), i Carme Rovira, del Parc Científic de Barcelona. Cada conferència plenària aprofundia en algun aspecte clau de la química teòrica, com ara la dinàmica molecular, els entorns proteics, la solvatació o el tractament de cristalls.

Com explica Jordi Villà, organitzador d'aquesta vintena reunió, "al voltant de la meitat de les comunicacions i cartells s'han dedicat a estudis sobre molècules d'interès biològic, atès que els organitzadors de l'esdeveniment pertanyem al Grup de Recerca en Informàtica Biomèdica de la UPF s'ha volgut donar un caire biomolecular a les temàtiques de la reunió". Santiago Olivella destaca la gran evolució que han experimentat els temes de treball dels grups de recerca de la Xarxa, ja que "inicialment, la temàtica de les comunicacions científiques girava, essencialment, entorn al desenvolupament de nous mètodes de química quàntica i la seva aplicació a l'estudi de l'estructura electrònica i la reactivitat de les molècules. Actualment, la temàtica de les comunicacions és majoritàriament de caràcter aplicat, i té a veure amb línies de recerca molt diverses". Segons Miquel Duran, la recerca efectuada pels seus membres "intenta mantenir un equilibri entre l'estudi de problemes d'interès aplicat i la creació de coneixement bàsic, malgrat que mantenir aquest equilibri no és fàcil per les dificultats de finançament de la recerca".

“Som pols i a la pols hem de tornar, però som pols d’estrelles... i tornarem a ser pols d’estrelles”

“La trajectòria científica de Joan Oró no l’allunyava del món, ben al contrari. Era un home profundament preocupat per la pau mundial, per la bona entesa de les persones i dels pobles. D’ací derivava el seu compromís i la seva militància política. Des del 1980 es va interessar pels problemes de la contaminació ambiental i per la política amb la finalitat de desenvolupar la investigació i de posar la ciència al servei de la comunitat. Però refusava els dogmatismes de tota mena, era un home lliure. Com ell deia, ‘potser algun dia inventarem prou ciència i ètica científica per evitar que la civilització humana desaparegui’”.

Fragment de l’homilia de Jaume Aymar, sacerdot que va presidir el funeral, amic personal de Joan Oró i degà de la Facultat de Filosofia de la Universitat Ramon Llull.



Joan Oró va morir la nit del dijous 2 de setembre a Barcelona, a l’edat de 80 anys, després d’estar 14 anys malalt de càncer. La comunitat científica i l’opinió pública es van bolcar en l’homenatge a un home que va fer importantíssimes aportacions a la ciència i que va contribuir en gran mesura a impulsar la recerca al nostre país. Per mitjà de les paraules d’amics i personalitats, recordem la trajectòria i les fites d’aquest científic català universal.

Joan Oró, científic de la vida

“Tal com els mags vinguts d’Orient, el doctor Oró, escrutava el firmament. Va cercar tota la vida. L’Estrella el va portar lluny, als Estats Units. L’empenyia el seu entusiasme per conèixer la vida, l’espai i, també per divulgar els seus coneixements. I això el portava al llindar presentit del misteri. També va haver de superar moltes dificultats, però va portar el nom de Catalunya a fites molt altes. Va ser un autèntic científic de la vida”.

Jaume Aymar

Joan Oró va néixer a Lleida el 26 d’octubre de 1923. Fill de forners, les seves inquietuds intel·lectuals l’impulsaren a estudiar Química a la Universitat de Barcelona, on es va llicenciar el 1947. Com afirma a la seva biografia, escrita per Miquel Pairoli (FCR, 1996),

ja aleshores volia aprofundir en qüestions transcendents de l’existència i, en concret, en l’origen de la vida.

L’Espanya de la postguerra no li va oferir gaires opcions: el 1952 va emigrar als EUA amb la dona i els fills, i quatre anys més tard es va doctorar al Baylor University College, a Houston, on estudià el metabolisme de l’àcid fòrmic en els teixits animals, investigacions que foren clau per a l’estudi sobre l’origen de la vida i la interpretació de l’absència de vida al planeta Mart.

L’any 1955 ingressà a la Universitat de Houston. Allà, seguint els passos d’Stanley Miller, va demostrar que era possible crear adenina (molècula que forma part del DNA i de l’ATP, essencial en la reproducció i el metabolisme cel·lulars) a partir de l’àcid cianhídric, compost abundant a la Terra primigènia; era el Nadal del 1959: aquest va ser el moment culminant de la seva trajectòria científica. A partir d’aquest descobriment, les seves enormes inquietuds científiques el traslladaren també cap a altres camps difícils com les col·lisions cometàries com a font de matèria orgànica a la Terra, el que s’anomena panspèrmia. Segons aquesta teoria, com recull el periodista Antonio Madrudejos a *El Periódico*, “si la vida va sorgir en un jove i tòxic planeta, per què no podria succeir el mateix en altres mons?”

A la mateixa Universitat de Houston fundà i dirigí el Departament de Ciències Bioquímiques i Biofísiques, del qual fou catedràtic des del 1963. La NASA el va reclutar a partir d’aquell mateix any: va fer importants estudis sobre els compostos orgànics existents en sediments terrestres, meteorits i mostres de la Lluna; va participar en diversos projectes de recerca espacial de la NASA, com els projectes Apollo i Viking; també va ser membre de la Junta Espacial de l’Acadèmia Nacional de Ciències, que assessora el govern dels EUA sobre els projectes d’exploració espacials fins a l’any 2015. El professor va mantenir la seva col·laboració amb la NASA fins als últims anys de la seva vida.

“El mateix Senyor va fer sortir Abram fora de la tenda i li va dir: ‘mira el cel i compta les estrelles, si és que les pots comptar...’ També Joan Oró, ja des de petit, sortia del forn patern i s’entretenia mirant el firmament i fent-se preguntes sobre la possibilitat de vida en d’altres planetes. Més endavant va poder plantejar la seva hipòtesi de si l’origen de la vida es trobava més enllà del nostre planeta, en els estels. Ja ho va preveure el 1962, i ho va confirmar el 1969 quan es van descobrir les primeres molècules interestel·lars”.

Jaume Aymar

Promotor de la cultura

Ja des de molt jove Joan Oró va ser una persona activa en la promoció de la ciència i la cultura. El 1940 va ser cofundador de l'Institut d'Estudis Ilerdencs, a la seva terra natal, i més endavant, a Houston, de l'Institute of Hispanic Culture, l'any 1965. A la dècada dels 70 va participar en la creació de diverses institucions aquí a Catalunya, com l'Institut de Biologia Fonamental de la Universitat Autònoma de Barcelona el 1971 (actual Institut de Biotecnologia i Biomedicina), el Centre d'Estudis Avançats de Blanes el 1974 o l'Institut de Biofísica i Neurobiologia Flor de Maig el 1975. L'any 1976 ja va formar part d'un reduït grup de persones que idearen i promogueren la creació d'una Fundació Catalana per a la Recerca (FCR), del Patronat de la qual va formar part des de la seva constitució al 1987.

L'any 1980, ja jubilat, va tornar a Catalunya com a professor de la UAB. Va ser diputat de CiU al Parlament de Catalunya (1980-1981) i assessor científic del president Pujol. Va ser només un any, però va tenir temps per desenvolupar les bases de l'actual CIRIT (Consell Interdepartamental per a la Recerca i Innovació Tecnològica) i per impulsar la Fundació Agrícola Catalana. Durant aquella època també va presidir l'Associació d'Amics de Gaspar de Portolà (uns dels catalans que va acompanyar Fra Juníper Serra a Califòrnia i en va esdevenir el primer governador), que ajudava investigadors catalans a establir contactes i relacions amb laboratoris de Califòrnia; Oró també va crear un institut del mateix nom a la Universitat de Berkeley.

"Quan va tornar definitivament, el 1995, no havia perdut el seu entusiasme ni el seu amor per Catalunya, més aviat al contrari. Va continuar treballant per la ciència i la societat, i per fer realitat nous projectes va crear la Fundació Oró amb el seu escàs patrimoni, al no obtenir el recolzament institucional esperat per enlloc. No obstant, va continuar amb la mateixa il·lusió. [...] Aquesta il·lusió, unida a la seva tossuderia i geni, li van permetre aconseguir que l'observatori astronòmic del Montsec veiés la llum, potser, com a colofó a les estrelles que en les seves

nits de fomer observava a simple vista, a uns pocs quilòmetres de distància".

Josep A. Plana, Reial Acadèmia de Doctors de Catalunya. *La Vanguardia*, 11 de setembre de 2004

Divulgador mediàtic i popular

"Joan Oró ha estat també un gran divulgador científic. Per la claredat de les seves explicacions i per la singularitat dels temes que dominava (l'origen de la vida a la Terra) ha estat un personatge mediàtic i popular. Cal recordar aquí, com a anècdota, aquell concurs de Catalunya Ràdio sobre els catalans més famosos, en el qual Oró fou el científic més votat molt per sobre de la resta. El fet de ser un científic català que va desenvolupar la seva carrera científica als EUA i haver tornat a Catalunya l'envoltà de l'interès dels mitjans de comunicació que ell no va decebre. Aparegué a nombrosos programes de ràdio i televisió divulgant temes complexos des del punt de vista científic amb la naturalitat i senzillesa necessàries per arribar al gran públic. Tan de bo hi hagués més investigadors amb la capacitat de traslladar temes científics de gran complexitat al ciutadà amb la naturalitat que el caracteritzava. Tant els científics, com els mitjans i sobretot el públic en sortiríem beneficiats".

Enric Banda, director de la Fundació Catalana per a la Recerca. *Avui*, 5 de setembre de 2004

Reconeixements

Entre altres reconeixements, Joan Oró ha estat investit doctor *honoris causa* per les universitats de Granada (1972), Houston (1998) i Lleida (1999), i guardonat amb la Medalla Narcís Monturiol al mèrit tecnològic i científic (Barcelona, 1982), la Creu de l'Orde Civil d'Alfons X el Savi (Madrid, 1983), l'Alexander Ivanovich Oparin Medal Award per ISSOL (Berkeley, 1986), la Creu de Sant Jordi (1991), la Medalla d'Or de la Fundació Catalana per a la Recerca (1996), la Medalla de President Francesc Macià (2000), i la Medalla d'Or de la Generalitat (juny 2004).

A més, el seu nom perdurà per sempre entre Mart i Júpiter: un cos descobert el 1999 per l'Observatori de Mallorca ha estat batejat recentment en honor seu: asteroide joanoro.

"El millor homenatge que li podríem retre és treballar de valent –com ell va fer– per convertir-lo en només un dels molts grans fills que Catalunya pot produir si, entre tots, entenem que l'única manera de guanyar el futur és impulsar la investigació i la recerca".

Josep A. Duran i Lleida, secretari general de CiU. *Avui*, 13 de setembre de 2004

"Gràcies Joan pel teu mestratge, pel teu amor a la ciència i a la recerca. Pel teu compromís social. Tant de bo que a Catalunya es multipliquin els recursos dedicats a la recerca, com tu hauries volgut!"

Jaume Aymar

DNA, L'escala de Jacob

Salvador Dalí, 1971

Imatge que figurava al recordatori de la missa exequial de Joan Oró celebrada a la Basílica de Sta. Maria del Mar el 4 de setembre de 2004.

"És una manera poètica d'explicar que entre el cel i la terra, entre el diví i l'humà, hi ha comunicació [...] Però l'home, com escriu Joan Pau II, per endinsar-se en aquest misteri necessita dues ales, la de la fe i la de la raó. És una imatge expressiva [...] Per això el pintor de Port-Lligat, amb fina intuïció, hi va pintar l'estructura molecular (símbol de la raó i de la ciència) i els àngels (símbol de la fe)".

Jaume Aymar



Ampliacions de cabal a l'Anella

L'Escola Superior de Música de Catalunya (ESMUC) disposa d'una velocitat d'accés de 10 Mbps a l'Anella Científica des del passat 9 de setembre. Actualment la seva connexió es realitza directament a la xarxa Giganet. L'ESMUC es connectava a l'Anella des del juliol de 2002 mitjançant una connexió ADSL de 2 Mbps. El canvi en el seu cabal coincideix amb el trasllat de l'ESMUC a les instal·lacions de l'Auditori de Barcelona.

També la Unitat Docent de la Facultat de Medicina de la UAB a l'Hospital Universitari Germans Trias i Pujol ha ampliat el seu cabal. Des del passat 28 de juliol disposa d'una velocitat d'accés a l'Anella Científica de 10 Mbps mitjançant una connexió Ethernet. Des de la seva connexió fa 3 anys, aquesta unitat es connectava a 2 Mbps a través d'una línia Frame Relay.

Actualització del programari Amber



El programa de modelat molecular Amber ha estat actualitzat a la versió 8.0 a les màquines HPC320 (*guilleries*) i GS1280 (*montroig*). En ambdues màquines es disposa tant de la versió seqüencial com de la paral·lela MPI. Amber és el nom col·lectiu d'un conjunt de programes de modelat molecular (*molecular mechanics/molecular dynamics*) per a la simulació biomolecular que utilitza el camp de forces Amber.

D'altra banda, també s'ha actualitzat a les màquines HP N4000 i HP V2500 la nova versió 2.7.1. del compilador de f90. Les principals novetats d'aquesta versió són que s'ha incorporat un conjunt de noves directives i opcions i el compilador incorpora les llibreries OpenMP v2.0 completes.

Nou curs Òpera oberta a través de l'Anella

El proper 14 d'octubre comença una nova edició del curs Òpera oberta amb la retransmissió de l'òpera *Boris Godunov*, de Modest Mussorgski, des del Gran Teatre del Liceu. Les universitats de Catalunya rebran aquesta òpera a través de l'Anella Científica, com ja es va fer en les dues edicions anteriors, mentre que les universitats espanyoles ho faran a través de RedIRIS. Aquestes retransmissions van ser segui-

des el curs passat a Catalunya per més de dos mil estudiants.

Òpera oberta consisteix en un curs de lliure elecció sobre iniciació a l'òpera que inclou l'assistència a cinc òperes de la temporada 2004-05 del Gran Teatre del Liceu que són transmises en directe a cadascuna de les universitats, via internet de banda ampla. La propera retransmissió serà el 14 de desembre amb *Rigolletto* de Giuseppe Verdi.



Boris Godunov, primera òpera retransmesa a les universitats per l'Anella.

La RedCLARA connecta l'Amèrica Llatina i Géant

Des del passat 31 d'agost està operativa la connexió entre la xarxa d'investigació de l'Amèrica Llatina, RedCLARA, i Géant. La connexió es realitza entre Sao Paulo i Madrid a 622 Mbps.

Dins la iniciativa ALICE, "Amèrica Llatina Interconnectada amb Europa", s'han connectat les xarxes de recerca i educació d'Argentina, Brasil, Xile, Panamà i Mèxic amb una topologia d'anell i una velocitat de 155 Mbps. Aquest anell està connectat a 622 Mbps a la xarxa paneuropea Géant, a través del node de Madrid. A més, la xarxa de Venècia està connectada a l'anell mitjançant un circuit a 45 Mbps entre Caracas i São Paulo. Posteriorment, es connectaran les xarxes de l'Uruguai i el Paraguai. Així, es proveirà als investigadors de l'Amèrica

Llatina d'un troncal que els permetrà col·laborar entre ells i amb els seus col·legues europeus.

ALICE, coordinat per DANTE, és un projecte cofinançat per la Comissió Europea dins el programa de cooperació @LIS, que pretén promoure la Societat de la Informació i lluitar contra la fractura digital a l'Amèrica Llatina. Per a aquest projecte, DANTE s'ha associat amb quatre xarxes europees que tenen un vincle històric i social amb l'Amèrica Llatina: RENATER (França), GARR (Itàlia), FCCN (Portugal) i RedIRIS (Espanya). A l'Amèrica Llatina i el Carib, s'ha associat amb 18 països.

Segons el director general de DANTE, Dai Davies, "el projecte ALICE és una important iniciativa de la Comissió Europea, que fomenta la transferència de les millors pràctiques del model de xarxes europees d'investigació i les adapta a les necessitats i condicions locals de l'Amèrica Llatina. Dóna un impuls important a les xarxes de recerca regionals i els ofereix per primera vegada un accés directe a Géant".

La Comissió Europea finança amb 93 milions d'euros la modernització de la xarxa Géant

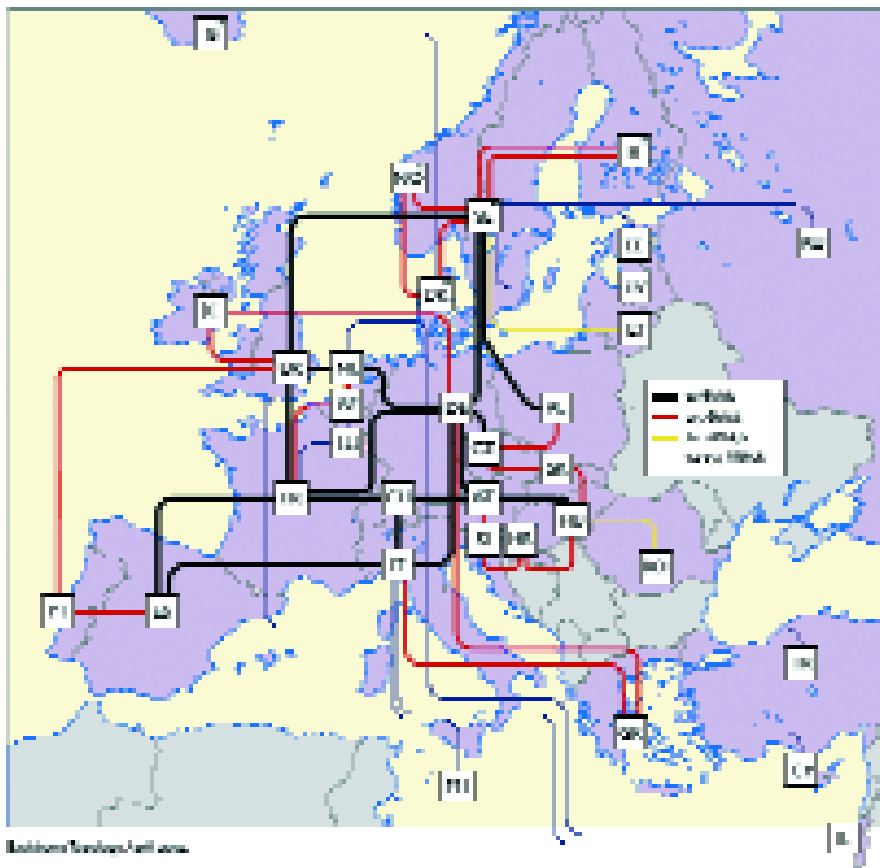
La Comissió Europea contribuirà amb 93 milions d'euros durant els propers 4 anys per a la modernització de la xarxa paneuropea Géant, que interconnecta la comunitat acadèmica i de recerca. A més de millores com ara serveis d'alt rendiment, es proveirà de servei sense fils i d'accés itinerant (*roaming*), que permetrà als científics mantenir-se connectats a Géant.

La modernització comportarà la introducció de serveis de més rendiment per als usuaris més exigents de la xarxa, atorgant als investigadors les seves pròpies longituds d'ona sobre tot el continent, amb una connectivitat punt a punt. Aquestes millores faran possible un accés directe a les capacitats de comunicació avançades de Géant i a les xarxes d'investigació

dels 34 països membres i associats, així com oferir un servei de mobilitat i accés itinerant als investigadors, que els permeti estar connectats allà on es trobin.

El comissionari de Societat de la Informació, Olli Rehn, ha destacat que "la qualitat d'aquesta xarxa és molt superior a la que ofereix la Internet comercial i per aquest motiu permetrà a la UE reforçar la seva capacitat d'innovar i competir". Les ajudes de l'executiu comunitari a aquesta xarxa provenen del sisè Programa Marc d'Investigació de la UE. Entre d'altres, aquesta xarxa ha tingut un paper destacat impulsant l'adopció del protocol d'Internet IPv6. La xarxa Géant modernitzada usarà una arquitectura híbrida que combina la millor tecnologia del món de la telefonia i d'Internet.

Topologia del troncal de Géant



Noves tecnologies... en català

Hackers, crackers o qui és qui?

Quan els especialistes parlen de **seguretat informàtica** es refereixen a tot el conjunt de mesures físiques, lògiques i administratives destinades a protegir la integritat i la confidencialitat de les dades informàtiques. Entre els múltiples perills que corren per la xarxa, hi juguen un paper molt destacat els anomenats **pirates** (coneguts en anglès com a **crackers** o **black hat hackers**) que s'introdueixen il·legalment en un sistema informàtic amb la voluntat de produir-hi un perjudici o de treure'n un profit.

No hem de confondre, però, el **pirata** (que, com els de les pel·lícules, sempre va carregat de males intencions) amb el **furoner** o **hacker** (en anglès, **hacker** o **white hat hacker**). Aquest, com el mateix mot ja deixa entreveure, es defineix com una persona apassionada per la informàtica, amb un gran coneixement de les xarxes i els sistemes informàtics i un viu interès per explorar-ne les capacitats i per posar a prova les seves habilitats en aquest àmbit.

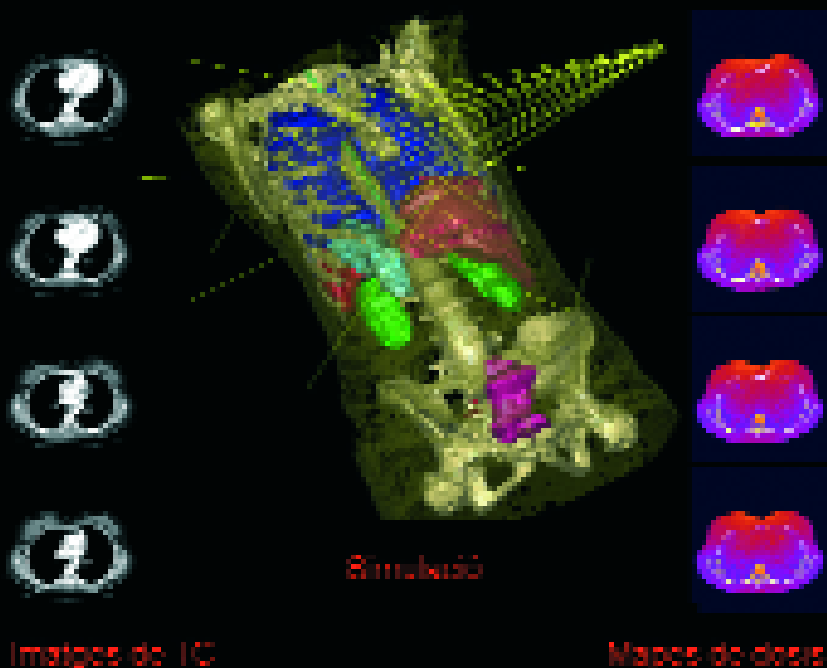
Cal tenir en compte que el terme anglès **hacker** ha anat variant el significat des de la seva aparició a mitjan segle XX. Si bé en un principi feia referència a les persones que tenien una gran passió per conèixer el funcionament intern dels ordinadors, cap a la dècada dels 80 va passar a denominar els protagonistes dels nombrosos assalts i intrusions a sistemes informàtics i, finalment, a partir dels anys 90, amb la popularització del moviment a favor del programari lliure, se n'ha intentat recuperar el sentit original i treure'n les connotacions negatives que s'han desplaçat a la forma **cracker**.

Així doncs, malgrat la confusió semàntica en l'ús d'aquests termes, actualment es tendeix a reservar el mot **furoner** o **hacker** per fer referència únicament al concepte inicial, mentre que la forma **cracker** designa de manera inequívoca el pirata.

Centre de Terminologia **TERMCAT**
www.termcat.net

Exàmens de tomografia computada (TC)

Distribució de l'energia dipositada per la radiació X



Entre les diferents tècniques diagnòstiques que utilitzen els raigs X, les exploracions amb equips de TC suposen la contribució més important a la dosi col·lectiva. D'uns anys ençà, Marçal Salvadó i Miquel López del grup de Física Mèdica de la Universitat Rovira i Virgili han treballat en el desenvolupament i validació d'un programa de simulació, basat en tècniques de Montecarlo, amb l'objectiu de disposar d'una eina per conèixer les distribucions tridimensionals de dosis i energies impartides en estudis de TC. Aquest programa permet simular diferents equips i exploracions de TC i utilitza les pròpies imatges del pacient per tal de reproduir unes condicions més realistes. Cada píxel de la imatge del pacient es converteix en un petit volum, anomenat voxel, que esdevé un dosímetre de pocs mil·límetres cúbics. La simulació dels diferents processos d'interacció

dels raigs X amb la matèria permet obtenir l'energia, i conseqüentment la dosi, que es diposita en cada voxel. A partir de les distribucions de dosis en els diferents òrgans i teixits irradiats, directament o indirecta, s'ha pogut estimar el risc que comporta cada tipus d'examen i optimitzar les tècniques utilitzades. La validació del programa, dissenyat en Fortran77, s'ha realitzat en un ordinador personal mitjançant la comparació dels valors calculats amb els obtinguts a partir de les mesures en objectes de prova. Però el requeriment d'un elevat volum de dades i la necessitat de temps de computació elevats ha fet oportú migrar tot el sistema al CEsCA. Les gairebé 600 hores de computació han servit per realitzar estudis amb imatges de pacients de diferents morfologies, de pacients pediàtrics de diferents edats, i per estudiar l'ús de protectors de radiació específics. ■

Edita

CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA



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
 Universitat Ramon Llull
 CSIC

TERAFLOP

DIRECTOR

Miquel Huguet

REDACCIÓ

Teresa Via

Inés López

COL-LABORACIÓ

Glòria Fontoda (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

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

LA PORTADA. Simulació de la desintegració d'un bosó Higgs a quatre muons aïllats en el detector CMS del col·lisionador de partícules LHC del CERN. Les línies mostren partícules produïdes per la col·lisió d'un parell de protons d'energia ultra-alta. En blau clar, les energies dipositades per les partícules al detector.

