

TERAFLOP

Revista del Centre de Supercomputació de Catalunya



El CESCA instal·la un SGI Altix 3700

■ El Gran Teatre del Liceu i el Centre Tecnològic Forestal de Catalunya, a l'Anella

ENTREVISTA

■ Mario Herreros, director de la tesi més consultada al TDX

OPINIÓ

■ Física i supercomputació, Antoni Giró i Josep Pons

El CESCA instal·la un SGI Altix 3700

El CESCA ha adquirit un servidor Altix 3700 Bx2 a Silicon Graphics (SGI). El sistema, que està format per 80 processadors Intel Itanium2 de 64 bits, a 1,6 GHz, amb 6 MB de memòria cau de tercer nivell, té un total de 240 GB de memòria principal i 5,13 TB de disc. Els 80 processadors en conjunt poden realitzar 512.000 milions d'operacions de coma flotant per segon, és a dir, tenen un rendiment punta de 512 Gflop/s. Amb l'adquisició del nou maquinari el rendiment punta global del Centre ha passat de 177 a 691 Gflop/s.

Amb el nou maquinari, el CESCA quadruplica la seva potència de càlcul.

Amb la posada en funcionament del nou maquinari s'espera poder satisfer la creixent demanda de potència de càlcul que requereixen els grups de recerca en les diferents àrees de coneixement a què dona servei el CESCA. Actualment tots els supercomputadors del Centre registren un nivell d'utilització de més del 90%, fent pràcticament inviable l'execució de treballs paral·lels de més de dos processadors i allargant el temps d'espera pels treballs amb grans requisits de memòria i disc. El nou maquinari, que aportarà 350.000 hores computacionals (HC), ajudarà a alleujar tots aquests problemes, i compensarà les 161.000 HC perdudes amb l'aturada de l'IBM SP2 el passat 18 de gener.

L'elecció del sistema Altix ha estat feta amb la voluntat d'oferir com a centre de supercomputació un servei que sigui capaç de complementar allò que els usuaris poden aconseguir per altres vies. Els superclústers Altix són multiprocessadors simètrics de memòria distribuïda compartida que proporcionen un entorn de treball flexible i competitiu per a les aplicacions característiques dels usuaris del CESCA. En comparació amb un clúster clàssic, un superclúster permet virtualment

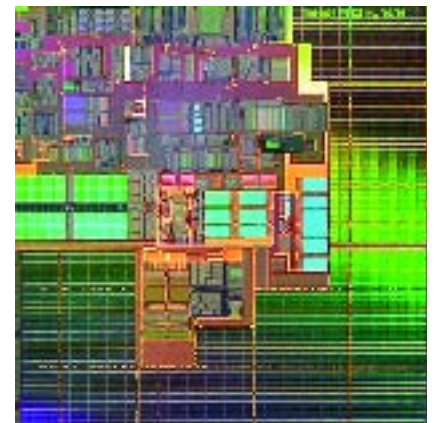
Característiques tècniques i rendiment dels processadors.

Màquina	Beowulf	HPC320	GS1280	3700 Bx2
Any d'instal·lació	2001	2001	2003	2005
Processador	EV67	EV68	EV7	Itanium2
Freqüència (GHz)	600	833	1.150	1.600
Cau de dades (L1 KB/L2 MB/L3 MB)	64/8	64/8	64/1,75	16/0,256/6
R _{punta} (Gflop/s)	1,20	1,67	2,30	6,40
Linpack TPP (Gflop/s)	0,88	1,28	1,90	5,94
Linpack 100x100 (Gflop/s)	0,47	0,64	0,95	1,77
SPECint2000	355	565	900	1.441
SPECfp2000	400	777	1.450	2.647

treballar amb qualsevol dimensió de node que es desitgi, sense que cap aplicació típica de clúster (programada amb PVM o MPI) deixi de funcionar. Té com a avantatges addicionals que el grau de paral·lelisme no està limitat al nombre de processadors dels nodes, i que no presenta restriccions de memòria, que és compartida d'una forma altament eficient per l'enorme amplada de banda i la reduïda latència de les comunicacions internes.

Els sistemes Altix estan basats en els processadors Intel Itanium2, la qual cosa assegura la compatibilitat durant anys de la plataforma més estàndard del mercat. És la segona generació de processadors dissenyada específicament per a l'arquitectura de 64 bits d'Intel. L'arquitectura d'aquests processadors és de tipus EPIC (*Explicitly Parallel Instruction Computing*), que permet l'execució explícita en paral·lel d'un conjunt d'instruccions mitjançant l'ús intel·ligent del compilador. El seu disseny permet suportar arquitectures escalables i latències variables en l'accés a memòria, ja que aquesta es veu reduïda per l'ús de tres nivells de memòria cau en el propi xip, entre altres coses.

La família de servidors SGI Altix inclou el primer sistema operatiu Linux del món que suporta memòria global compartida a través de nodes de fins a 512 processadors en una sola imatge de sistema operatiu per node i un avançat entorn de desenvolupament especialment optimitzat per a aplicacions tècniques. SGI ha contribuït a millorar funcionalitats del sistema operatiu Linux, distribució de Red Hat Enterprise (RHEL) versió 3.0, proporció-



Distribució d'unitats funcionals a l'Itanium2 6M. El xip ocupa una superfície de 4,32 cm² i conté 410 milions de transistors.

nant-li una escalabilitat sense precedents en un entorn *open-source*.

A tot el món ja s'han venut milers de processadors Itanium2 en servidors Altix 3700. El més gran, amb 10.240 processadors, es va instal·lar a la NASA el 2004 dins del projecte Columbia, i actualment és el segon computador més potent del món a la llista TOP500. A Europa, el Leibniz Computing Center (LRZ) d'Alemanya va signar el passat desembre un contracte amb SGI per a la instal·lació d'un Altix 3700 d'última generació l'any vinent, quan estigui disponible al mercat el processador Itanium2 amb tecnologia *dual core*. El 2007 el sistema serà actualitzat fins a la seva configuració final, amb 3.328 processadors. A Espanya els servidors Altix més importants estan al Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas, amb 128 CPUs, i a la Universitat de València, amb 100 CPUs.



Escalabilitat i modularitat

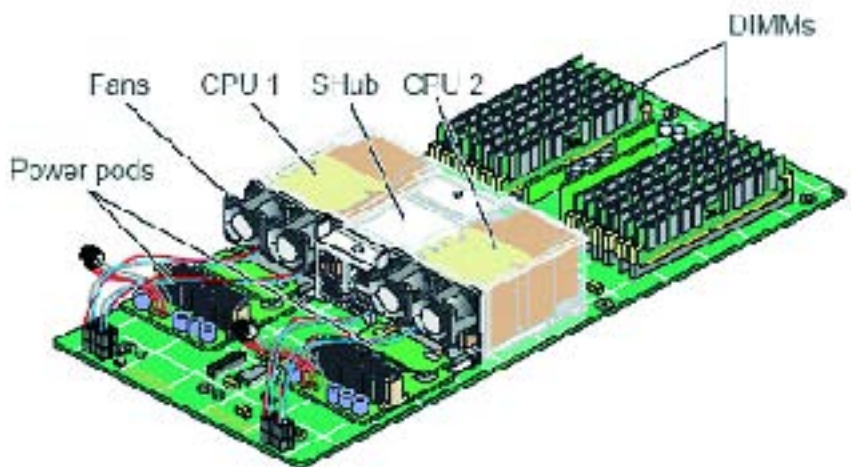
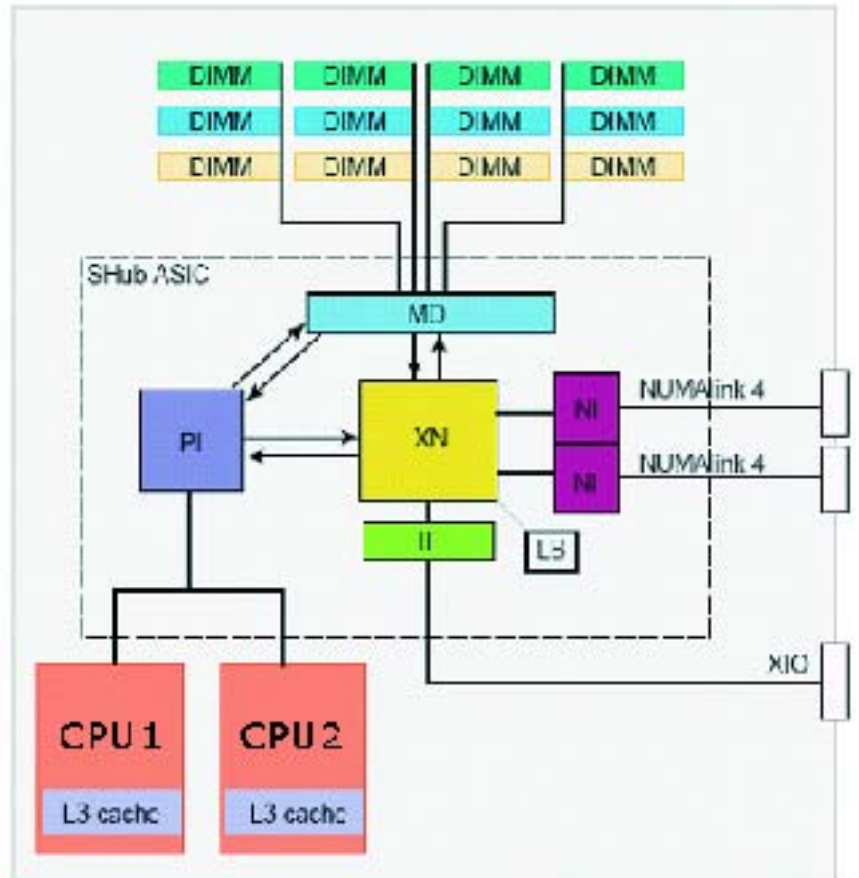
El model 3700 Bx2 multiplica per dos la densitat de computació del model 3700, que va ésser el model inicial de llançament dels Altix. La família Altix 3000 es comercialitza des de l'any 2003 i ofereix unes característiques de modularitat i escalabilitat especialment dirigides a la supercomputació. Aquestes característiques de modularitat i escalabilitat són presents en l'arquitectura dels supercomputadors de Silicon Graphics durant els darrers 10 anys. Els Altix constitueixen la 3a generació de sistemes escalables cc-NUMA (*cache coherent Non Uniform Memory Access*). Aquesta tecnologia constitueix un element diferencial i innovador que permet una escalabilitat fins a un elevadíssim nombre de processadors mantenint altíssims nivells d'eficiència i sempre governats per una única còpia de sistema operatiu.

Així mateix, per evitar l'obsolescència tecnològica dels components, Silicon Graphics ha desenvolupat l'Altix 3000 amb una gran capacitat modular que permet actualitzacions de components sense haver de fer el mateix amb tot el sistema, protegint així considerablement la inversió i permetent que sistemes madurs al mercat puguin adoptar tecnologies més modernes aparegudes amb posterioritat a la seva introducció. La for-

El sistema compta amb 80 processadors Intel Itanium2 a 1,6 GHz.

ma d'implementar la modularitat és que cada component del sistema consisteix en un mòdul aïllat o *brick* independentment de la resta i que s'interconnecta externament. Aquests *bricks* poden intercanviar-se independentment, de forma que quan vagin apareixent les successives famílies de processadors Intel Itanium2, per exemple, es podran realitzar millores significatives de potència de càlcul només reemplaçant aquests elements i conservant la resta. ■

Placa base IP57



Cada placa base IP57 conté dos processadors Intel Itanium2 i 12 DIMMs de memòria. Els DIMMs, formats per xips de memòria DDR SDRAM, poden ser de 512 MB de capacitat a 166 MHz (com és el cas de l'Altix del CESCA), 1 GB a 166 MHz, o 2 GB a 133 MHz. Els processadors, la memòria, E/S i les connexions de xarxa estan connectades a un concentrador SHub 1.2 ASIC. Cada concentrador suporta fins a una amplada de banda de pic amb la memòria de 8,5 o 10,2 GB/s. Els concentradors es connecten llavors a 2 encaminadors ASIC NumaLink 4 de vuit ports que poden arribar a interconnectar centenars de processadors. D'aquesta forma, l'amplada de banda creix a l'augmentar el nombre de processadors interconnectats.

El Centre Tecnològic Forestal de Catalunya a l'Anella Científica

El passat 18 de novembre, el Centre Tecnològic Forestal de Catalunya (CTFC) es va connectar a l'Anella Científica. Inicialment ho va fer a través d'una línia ADSL de 2 Mbps, però el 24 de novembre la seva capacitat es va veure augmentada a 4 Mbps per la nova política de duplicació de velocitat a les ADSL. "La incorporació del CTFC a l'Anella Científica suposa una important fita per a la nostra institució", ha declarat José Antonio Bonet, director de Recerca i Transferència de Tecnologia del CTFC, que destaca la importància del fet que la Internet de qualitat pugui arribar a tots els centres de recerca, independentment de la seva ubicació.

El CTFC va ser inaugurat oficialment l'1 de setembre de 1996. La seva seu oficial és l'edifici de l'antic Seminari Menor de Solsona, als Prepirineus catalans. "La ubicació del CTFC al Solsonès va significar una important aposta de les institucions promotores de deslocalització d'un centre de les grans aglomeracions urbanes, amb l'objectiu de buscar el seu apropament al teixit productiu forestal i de desenvolupament rural",

"L'Anella ens permet gaudir dels mateixos serveis que disposen els investigadors d'altres universitats i centres de recerca de Catalunya."

explica Bonet. "Aquest fet positiu de punt de trobada va comportar, però, inconvenients com ara dificultats d'accés a serveis associats indefectiblement a la recerca, com són les fonts d'informació i intercanvi de dades. El fet de formar part de l'Anella ens permet superar aquests obstacles i gaudir en gran mesura dels mateixos serveis de què disposen els investigadors d'altres universitats i centres de recerca de Catalunya".

El CTFC és un consorci format per la Generalitat de Catalunya, la Universitat de Lleida, la Fundació Catalana per a la Recerca i la Innovació, el Centre de Desenvolupament Rural Integrat de Catalunya, el Consell Comarcal del Solsonès i la Diputació de Lleida. La seva missió és contribuir a la modernització i a la competitivitat del sector forestal i al desenvolupament sostenible del medi natural en l'àmbit mediterrani per mitjà de la recerca, la formació i la transferència de tecnologia a la societat.

Les diferents àrees de treball del CTFC implementen els programes de

treball, que cobreixen temes com ara la gestió del medi forestal, la valorització de productes i serveis forestals, la política forestal i de desenvolupament rural, o la protecció dels recursos naturals. L'activitat investigadora del Centre es reflecteix en diverses publicacions científiques, tesis, tesines, assistència a congressos, participació en xarxes temàtiques europees, etc.

La formació també és una de les seves principals activitats. Es dirigeix tant a titulats universitaris, estudiants, treballadors, empresaris i propietaris forestals, com a facultatius forestals i agents rurals. Per aquest motiu ofereix des d'una escola taller de temàtica forestal, fins a cursos de formació superior i de postgrau, jornades, seminaris i fòrums internacionals. Destaca la participació del CTFC en l'únic Màster Forestal Europeu que s'imparteix a Europa sobre desenvolupament rural i política forestal, i que compta amb el suport de la UE mitjançant la seva convocatòria ERASMUS-MUNDUS.

El CTFC també promou i participa en altres iniciatives que sorgeixen en el seu àmbit d'actuació i entre les quals destaquen el projecte de Centre Regional per al Mediterrani de l'European Forest Institute, l'Agrupació Europea d'Interès Econòmic FORESPIR i el Telecentre del Solsonès.



Seu del CTFC, als Prepirineus catalans. Es tracta de l'antic Seminari Menor de Solsona, una construcció de l'any 1897 en forma de creu amb més de 3.000 m².

El Gran Teatre del Liceu, a l'Anella Científica

El Gran Teatre del Liceu es connecta a l'Anella Científica des del passat 19 de gener amb una connexió Fast Ethernet a 100 Mbps. Com explica el seu director general, Josep Caminal, "el Gran Teatre del Liceu és prou conegut com a referent cultural –especialment a l'àmbit operístic– a tot l'Estat espanyol i cada vegada més, a la resta del món. Des de l'obertura del nou edifici, aquesta activitat cultural s'ha vist ampliada i potenciada per la utilització de les Tecnologies de la Informació i les Comunicacions com un mitjà per superar les barreres físiques que el mateix Teatre imposava. En aquest sentit, la Internet de segona generació amb gran amplada de banda ha estat decisiva".

A la fi del 2001, el Gran Teatre del Liceu va engegar el programa "Digital Òpera. El Liceu a la Universitat", que es compon de tres pro-



ANTONI BOFILL

El Gran Teatre del Liceu col·labora en docència amb les universitats de Catalunya gràcies a l'Anella Científica des de la fi del 2001.

jectes. Òpera Oberta, el més conegut, es configura com un curs universitari d'introducció a l'òpera, en què mitjançant l'assistència a cinc òperes de la temporada del Liceu, una classe prèvia d'introducció a cada òpera i un portal a Internet amb materials complementaris, els alumnes matriculats tenen una primera experiència operística. La particularitat d'aquest projecte és que les

òperes es retransmeten en directe des del Liceu per Internet amb una qualitat d'àudio (Dolby Digital 5.1) i vídeo (MPEG-2 de 8 Mbps), que permeten que els alumnes assisteixin a les òperes a les sales d'actes de les seves universitats. Aquest any, el tercer d'Òpera Oberta, 37 universitats de l'Estat espanyol, tres mexicanes, una a Portugal, una a França i la Universitat d'Andorra, per un total de quasi 60 campus, estan participant al projecte.

El segon projecte del programa d'activitats del Liceu a les Universitats, Opera Learning, tracta de profunditzar en tots aquells aspectes rellevants que envolten un títol operístic, mitjançant sis seminaris que culminen amb l'assistència dels alumnes a l'assaig general d'aquella òpera. En aquest cas, la tecnologia de videoconferència d'alta qualitat per Internet permet la utilització de materials

audiovisuals d'exemple i mantenir una interacció amb els alumnes que pertanyen només a universitats de l'àmbit de la llengua catalana.

Finalment, el projecte Òpera Web, del qual se n'ha celebrat la primera edició, consisteix en un concurs, amb premis en metàl·lic, en què els alumnes participants donen la seva visió sobre una òpera proposada mitjançant un portal web.

Com explica Josep Caminal, "aquest programa ha estat possible gràcies a la col·laboració, des del començament, d'empreses i institucions com ara Telefónica, I2CAT, RedIRIS, TechnoTrends o el propi CESCO i l'Anella Científica, a la qual ara ens connectem per tal de continuar aprofundint en aquests projectes i d'altres com Òpera Oberta sobre IPv6, amb la col·laboració d'empreses i sobretot de centres de recerca i universitats". ■

Experiència Grid en el projecte GAIA

El GaiaGrid ha estat utilitzat amb èxit per a generar simulacions realistes de telemetria per a un miler d'estrelles binàries astromètriques. Les observacions han estat simulades amb el Gaia System Simulator (GASS), i corresponen a cinc anys d'observacions de GAIA, el satèl·lit que l'Agència Espacial Europea preveu enviar a l'espai el 2012. Els resultats han estat recollits en un repositori central de 5 terabytes (TB) hostatjat al CIESCA. Es tracta d'una base de dades que des del 2000 està en procés de disseny i implementació, i que gràcies a GaiaGrid estarà accessible per als proveïdors d'algorismes d'anàlisi de dades.



L'anàlisi astromètric d'estrelles binàries és un dels algorismes *shell* seleccionat per córrer a l'entorn GaiaGrid. Per tal d'assajar aquest algorisme, calia generar simulacions realistes de telemetria, cobrint cinc anys d'observacions de GAIA per unes mil estrelles binàries astromètriques. El Gaia System Simulator genera telemetria realista que pot ser introduïda en el Gaia Data Access and Analysis System (GDAAS). El problema és que la generació d'aquesta telemetria requereix un esforç computacional gens menyspreable, perquè diversos aspectes de la simulació no són relatius al nombre d'objectes sinó més aviat a l'espai de temps simulat.

GASS va ser desplegat a l'entorn GaiaGrid per tal d'explotar la potència computacional que dona. En el cas de GASS aquest desplegament és especialment eficient perquè el disseny de la simulació permet que aquest sigui dividit completament en diferents parts

L'ús d'aquesta eina va simplificar i agilitzar molt la feina, i ha permès avançar en la implementació de la tecnologia Grid per ésser executada en entorns reals de treball.

més petites que poden ser enviades simultàniament a diferents nodes de GaiaGrid, aprofitant els avantatges de l'entorn de computació distribuïda proporcionat.

En el GaiaGrid participen diversos clústers, que comprenen un o més supercomputadors disponibles per al Grid, així com sistemes d'emmagatzema-

matge. Els centres que aporten recursos són l'ESTEC i el Dutch Space dels Països Baixos, l'ARI alemany, l'ESRIN italià, l'ULB de Bèlgica, i el CIESCA. Per a aquesta prova pilot, s'han utilitzat les eines Globus Toolkit 2.2 i 2.4, programari d'ús generalitzat en l'entorn científic, i el programari GridAssist Tool-Client 1.3.1 com a interfície gràfica per definir i gestionar recursos.

La simulació va córrer en 23 nodes distribuïts en 6 instituts de 5 països. S'han utilitzat un total de 1.056 hores computacionals per les tasques, i s'han produït i transferit automàticament un total de 16,5 GB de dades al repositori central del CIESCA. La simulació només va trigar 4 dies a completar-se, incloent diverses aturades per analitzar els resultats parcials. Malgrat que la simulació podria haver estat duta a terme sense GaiaGrid, l'ús d'aquesta eina va simplificar i agilitzar molt la feina, i ha permès avançar en la implementació de la tecnologia Grid per ésser executada en entorns reals de treball.

Una gran base de dades

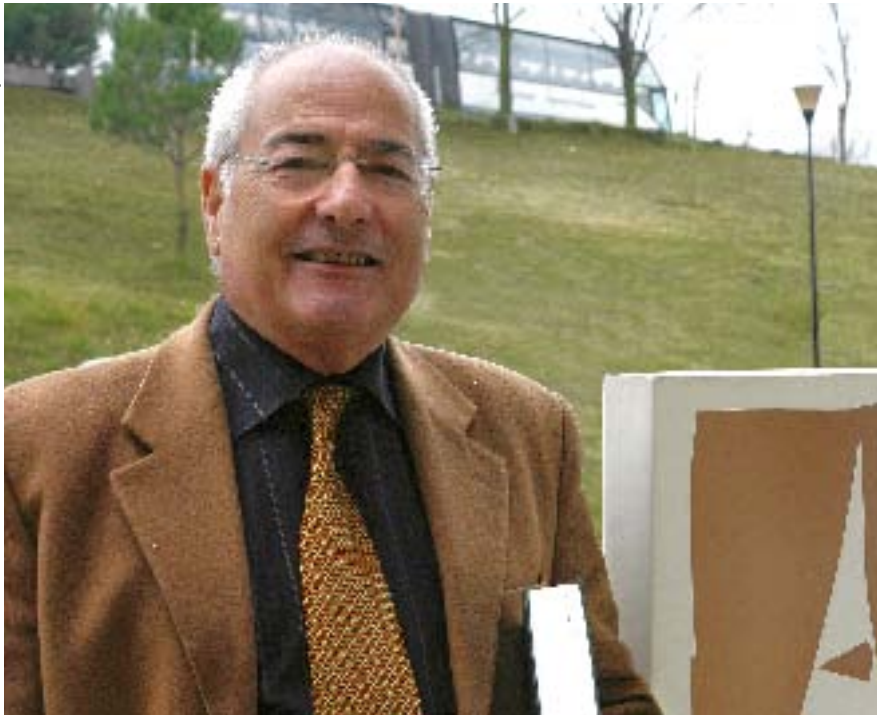
Quan el satèl·lit Gaia estigui en òrbita, cap al 2012, produirà una gran quantitat d'informació a partir de les seves observacions. Es calcula que al llarg dels cinc anys que durarà la missió s'omplirà un volum de dades equivalent a 150 TB. Aquestes dades tindran una precisió 100 vegades millor que les recollides pel satèl·lit Hipparcos el 1989, amb un augment en un factor 1.000 en la magnitud límit i en un factor 10.000 en el nombre d'astres observats. Atesa aquesta gran quantitat d'informació i la seva precisió, el tractament i processament de les dades és una tasca fonamental i crítica de la missió, constituint un repte científic i tecnològic de gran magnitud.

El disseny i implementació del sistema de base de dades de GAIA el porten a terme des del juliol de 2000 un equip d'investigadors de la Universitat de Barcelona i l'Institut d'Estudis Espacials de Catalunya, juntament amb l'empresa Grupo de Mecànica del Vuelo (GMV) i el CIESCA. Aquest projecte forma part del Technological Research Programme de l'Agència Espacial Europea per al desenvolupament de les noves tecnologies necessàries per a les futures missions. ■

Mario Herreros Arconada, catedràtic del Departament de Comunicació Audiovisual i Publicitat de la UAB

“La globalització no és ni més ni menys que comunicació”

JORDI PARETO



Mario Herreros Arconada és professor emèrit a la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB), institució de la qual forma part des de l'any 1977. Jubilat des de fa un any, continua fent cursos de tercer cicle i dirigint tesis doctorals. Ha dedicat tota la vida al que més li agrada: l'estudi de la comunicació persuasiva, tant en el vessant publicitari com institucional i polític. El 2004 la tesi més consultada al servei Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) ha estat “Teorías de la comunicación grupal en la toma de decisiones: contexto y caracterización”, del Dr. Gerardo Javier Macías Cortés, de la qual el Dr. Herreros n'és el director.

Els anys anteriors, la tesi més consultada del TDX havia estat sempre una tesi amb alguna aplicació de tipus tècnic, en enginyeria, arquitectura o similar. És el primer cop que és tan consultada una tesi humanista. Per què creu que ha passat això?

La tesi és eminentment teòrica. L'autor va estudiar de l'ordre de 180 llibres que condensen tot el que se sap sobre

comunicació de grups. Va analitzar els textos, va criticar, i a partir d'aquí, va suggerir. La tesi planteja una anàlisi de la comunicació des de la simbiosi dels diferents enfocaments que hi ha avui dia. En aquest sentit és una tesi pionera. No m'estranya que hagi estat tan consultada. A més, aporta una documentació enorme i molt actualitzada sobre les diferents línies d'investigació en comunicació de grups que hi ha al món.

Qui diria que és el públic objectiu d'aquesta tesi?

El professorat de dins el món de la comunicació en general i els sociòlegs, pel vessant que la publicitat té de sociologia. Els aspectes de comunicació o comunicació social són naturals en nosaltres, i això està enfocat des d'aquest punt de vista. De fet la tesi encara no ha estat publicada però és una cosa que hem de començar a pensar. Per l'interès del seu contingut teòric seria un llibre de referència tant en facultats de sociologia com de comunicació.

Es pot dir que part de l'èxit de la tesi es deu a que tracta un tema que està de moda?

La globalització no és ni més ni menys que comunicació. Ja l'any 1991 es va voler crear una facultat de comunicació europea a instàncies d'una fundació privada, de manera que tots els comunicadors europeus tinguessin la mateixa formació. En el segle XXI, el camp més dur de la competència comercial és la comunicació i no els productes, perquè aquests ja han de tenir una determinada qualitat perquè el mercat els admeti. La comunicació és el camp de batalla actual en tot el que sigui comerç, i fonamentalment en la lluita competitiva.

Com diferenciarà entre comunicació i publicitat?

La publicitat és una forma de comunicació persuasiva, com també ho és la propaganda. Però a tota comunicació hi ha persuasió. El que passa és que hi ha comunicacions que són persuasives perquè han de ser-ho, i altres que tenen la persuasió en segon terme. La persuasió en el fons no és més que fer que els altres creguin que el que nosaltres diem és encertat. Cada vegada que tu parles amb algú, encara que no en siguis conscient, estàs intimament intentant persuadir de la validesa del que dius. En aquest punt hi ha una diferència entre els qui estudiem publicitat i relacions públiques dels qui estudien periodisme. Aquests darrers no són tan conscients de la importància de la persuasió en qualsevol missatge. Al mateix temps que estàs “informant” sobre una cosa també estàs “persuadint” d'algun punt de vista particular sobre aquella cosa: la informació objectiva no existeix. Els mitjans de comunicació són instruments d'informació però, a la vegada, serveixen per guanyar diners:

aquesta és la realitat i és el que està en joc. Qui compra un diari paga un import mínim del que val, perquè per darrere està la publicitat que ja ha pagat pàgines d'aquest diari i és el que dona beneficis. I quant a la ràdio, la televisió i l'Internet, estan pagats exclusivament per publicitat.

La necessitat es crea o es cobreix?

Es diu que la publicitat crea necessitats de consum, però la realitat és que la necessitat existeix, que és evident o latent. La forma de satisfer-la és el que dona lloc a l'aparició i comercialització de diferents productes. La publicitat només incita al fet que satisfaci aquesta necessitat d'una manera o d'una altra, amb una marca determinada. Cal estudiar les motivacions de la gent i de la seva conducta per poder trobar un producte que satisfaci una determinada necessitat a un preu que el consumidor estigui disposat a pagar. Això és el màrqueting. El model humanista de comunicació és el publicitari, perquè està parlant o està incidint sobre la conducta de la gent. Per exemple, actualment al departament

s'està fent una tesi sobre la influència de la publicitat en la cultura de Costa de Marfil. Aquesta és una cultura ancestral africana a la que està arribant des de pasta dentífrica fins a qualsevol altre producte de cultura occidental. Cal estudiar, per eficàcia persuasiva, quins models proposar, si models humans de cultura occidental o models de cultura africana.

Què diria als qui opinen que la publicitat incita al consumisme?

Els publicitaris assumim la nostra prostitució, com a comunicadors, perquè comuniquem per qui ens paga, i comuniquem perquè hi hagi compradors. Ara bé, quan es va contra la publicitat es va en realitat contra la societat de consum i, en conseqüència, en contra del capitalisme. Però l'arrel del sistema econòmic no està en la publicitat, està en altres coses. Si es vol atacar al sistema, cal atacar el capitalisme directament, no la publicitat, que és simplement un subproducte d'aquest.

Com a expert en l'àmbit de la comunicació, què li sembla el servei

TDX per difondre les tesis doctorals a través d'Internet?

Penso que pot tenir un avenir extraordinari, perquè posa a l'abast de la gent que està investigant l'últim que s'ha fet en la seva àrea de recerca. Fins ara una de les coses que més costava aconseguir era tenir accés a tesis doctorals d'universitats diferents. Ara com a mínim tenim accés a les tesis de les universitats que formen part del TDX, tot i que penso que a la llarga aquest concepte s'hauria d'anar ampliant per poder consultar les tesis de qualsevol universitat espanyola o llatinoamericana. I per què no, també hauríem de tenir a l'abast una tesi feta a Bolònia, Heidelberg o Harvard. Aquesta és la funcionalitat d'aquest servei, des del meu punt de vista. Només puc dir que veig mancances en la seva difusió, no és prou conegut dins dels departaments universitaris. Hauríem d'aconseguir que el coneixement d'aquest servei estigués més a l'abast, que formés part integrant de tot el que és el complex d'investigació i de difusió de la investigació. ■

La UAB rep el diploma per la tesi 2.000

El passat 11 de gener la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) va rebre el diploma per haver introduït la tesi 2.000 en el servei de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX), accessible a www.tdx.cesca.es. Aquest servei, coordinat pel CBUC i el CESCA, i patrocinat pel Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació de la Generalitat de Catalunya, permet la consulta lliure a través de la xarxa Internet del text complet de les tesis, així com fer cerques per autor, títol, matèria de la tesi, universitat on s'ha llegit, etc. Els objectius d'aquest servei són difondre els resultats de la recerca universitària, oferint als autors una eina que incrementa l'accés i la visibilitat del seu tre-

ball i millora el control bibliogràfic de les tesis, impulsant l'edició electrònica i les biblioteques digitals.

El TDX és un servei de tesis digitals en xarxa pioner a l'Estat espanyol. Fins ara hi ha dipositades tesis de dotze universitats. En els darrers mesos, el nombre de consultes al servidor TDX ha crescut de forma considerable, passant de 5.000 consultes al mes al començament del 2003 a més de 160.000 actualment. Aquest augment de les consultes ha estat conseqüència, d'una banda, de la creació de documents HTML amb els resultats de les cerques de tesis doctorals de cada universitat, que ha fet possible que les tesis del TDX estiguin disponibles per al cer-

cador Google, i de l'altra banda del fet que, des de la fi del 2003, les tesis estan disponibles per a ser difoses a través dels proveïdors de servei que fan servir el protocol

d'interoperabilitat OAI (Open Archives Initiative), que permet l'intercanvi de metadades. Actualment ja hi ha una dotzena de proveïdors que recullen les tesis del TDX. ■



Joan Majó, president del CBUC, a l'esquerra, i Miquel Huguet, director del CESCA, a la dreta, lliurant el diploma de la tesi 2.000 a Joan Gómez Pallarès, vicerector de Doctorat i Formació Continuada de la UAB.

Gerardo Javier Macías Cortés, autor de la tesi més consultada al TDX el 2004.

“Teorías de la comunicación grupal en la toma de decisiones: contexto y caracterización”

Gerardo Javier Macías Cortés, que va obtenir el seu doctorat per la Universitat Autònoma de Barcelona l'any 2003, és actualment director del Departamento de Comunicación y Humanidades del Campus Querétaro de l'Instituto Tecnológico de Estudios Superiores de Monterrey, a Mèxic. Des del punt de vista acadèmic, Macías s'ha caracteritzat sempre per la inquietud constant per adquirir nous coneixements. Inicialment va estudiar literatura llatinoamericana, però després es va passar a l'administració d'empreses. Això el va portar a la necessitat d'aprofundir en una altra àrea de coneixement: la comunicació, i en particular com la comunicació afecta directament la productivitat de les empreses.

Com va ser que va tenir l'oportunitat de venir a Barcelona a fer el doctorat?

El juliol de 1998 vaig ser seleccionat pel Gobierno de México, a través del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) per rebre una beca per realitzar els meus estudis de doctorat a la Universitat Autònoma de Barcelona.

Ens pot contextualitzar una mica la seva tesi?

Es tracta d'una investigació documental, descriptiva, de caràcter monogràfic. Té com objectiu principal aproximar-se a respondre a la pregunta de com estudiar els grups de treball des de la perspectiva de la comunicació. Per dur a terme aquest objectiu es fa una anàlisi detallada de les dues teories generals de la comunicació de grup desenvolupades entre els anys vuitanta i noranta: la Teoria funcional en la presa de decisions de grup, i la Teoria de l'estructuració en la comunicació de grups petits. Es tracta de dues teories novadores que expliquen el comportament comunicatiu dins dels grups i que tenen la particularitat de referir-se al procés de presa de decisions.

Per què diria que ha tingut tant d'èxit?

És una investigació bastant profunda

no només respecte a les dues teories de comunicació de grup enunciades anteriorment sinó que aquesta tesi constitueix un marc teòric d'obligada referència. La raó és que es revisen en detall, de forma exhaustiva, les diferents conceptualitzacions, perspectives i metodologies respecte als estudis de grups, al concepte de teoria i teoria de la comunicació, la seva caracterització i propostes de classificació. Això es fa tenint en compte un en-

focament multidisciplinar, és a dir, es revisen des de la perspectiva de la psicologia social, la sociologia i la comunicació. Ara bé, el treball de la tesi no només reuneix material que es troba molt dispers, sinó que també proposa criteris propis sobre l'estudi dels grups i les teories de la comunicació, així com la seva classificació basada en els paradigmes.

Què aporta de novedós?

Tradicionalment quan es parla de teories de la comunicació es pensa exclusivament en comunicació de masses; la investigació que presento amplia aquest horitzó perquè el lector conegui les diferents teories de la comunicació que van des de la comunicació humana, la comunicació interpersonal i intrapersonal, la comunicació de grups en els seus diferents processos, la comunicació organitzacional, la comunicació intercultural i altres.



HECTOR FALCON

Hostatjat el web de la Biblioteca de Montserrat

El passat 29 de novembre va tenir lloc a l'Abadia de Montserrat l'acte de presentació de la pàgina web www.bibliotecademontserrat.net. L'acte va ser presidit pel Pare Abat de Montserrat, Josep M. Soler, i va comptar amb les intervencions del vicepresident del Consell de Telefónica a Catalunya, Carles Colomer, el director general de la Fundació Telefónica, Fernando Villalonga, el director de la Biblioteca de Montserrat, Pare Damià Roure, i el director general de la Fundació Abadia de Montserrat 2025, Josep Sinca.

Amb la posada en funcionament d'aquesta pàgina web culmina el procés d'informatització del catàleg de la Biblioteca de Montserrat, que va ser impulsat per la Fundació Abadia de Montserrat 2025 com a part de les actuacions

previstes per a la commemoració del seu mil·lenari. El projecte ha estat realitzat gràcies al conveni signat amb la Fundación Telefónica el 1998, i ha comptat amb la col·laboració de Hewlett-Packard, que ha dotat la Biblioteca de les últimes tec-

nologies disponibles, la Fundació Catalana per a la Recerca i el CES-CA, que ha realitzat tota la part d'hostatjament del web, comunicacions i accessibilitat.

Els continguts digitals

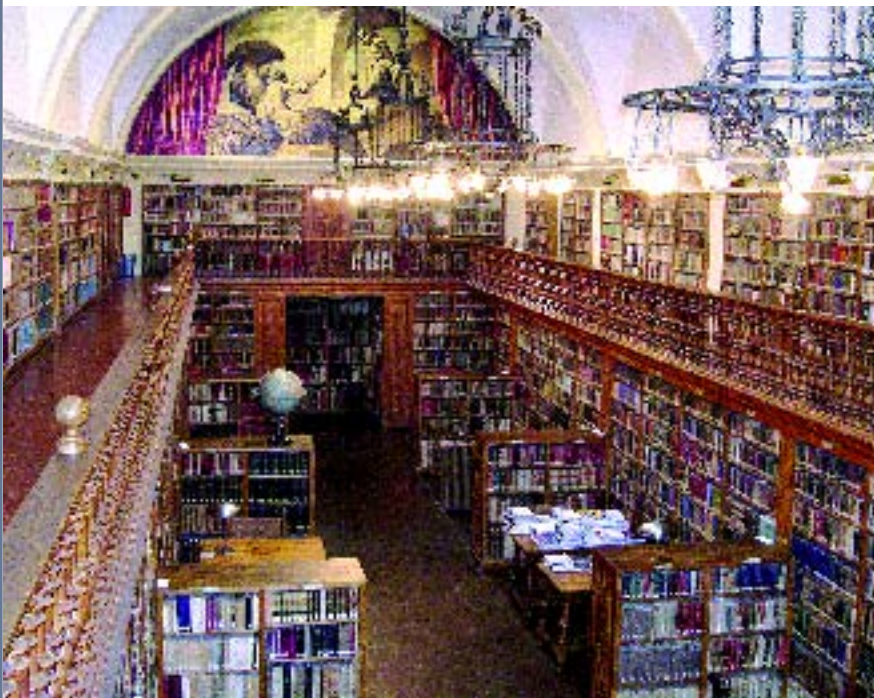
El catàleg de la Biblioteca de Montserrat, especialitzada en ciències humanes i en teologia, amb importants fons d'història, es pot consultar en tres idiomes: català, castellà i anglès. La pàgina web ofereix el catàleg general, el de manuscrits i el d'incunables, i properament serà accessible el de revistes. Dóna accés a les primeres obres que s'han digitalitzat en col·laboració amb la Biblioteca Virtual Cervantes i la Joan Lluís Vives, on es poden trobar alguns dels textos més importants i representatius del fons de la Biblioteca de Montserrat.

La posada en funcionament de la pàgina web forma part de les actuacions previstes per a la commemoració del mil·lenari de Montserrat el 2025.

La Biblioteca ha desenvolupat un apartat d'exposicions virtuals per difondre i apropar al gran públic el patrimoni cultural que forma part dels seus fons. Aquest apartat ha estat inaugurat amb una selecció de mapes i gravats, junt amb l'edició digital del manuscrit *Liber horarum Rothomagensis*, llibre d'hores del s. XVI amb miniatures de vius colors.

Pel que fa al seu fons gràfic, la Biblioteca tot just acaba d'iniciar la seva digitalització. El fons gràfic de la Biblioteca de l'Abadia de Montserrat és de gran importància tant per la seva extensió com per la seva naturalesa i qualitat; comprèn les col·leccions de cartografia i uns divuit mil gravats de temàtica religiosa, mitològica, paisatgística o de contingut històric. ■

FOTOS: BIBLIOTECA DE MONTSERRAT



Acte de presentació de la web. D'esquerra a dreta: Fernando Villalonga, Carles Colomer, Josep M. Soler, Josep Sinca i Damià Roure.

Telvent, un punt alternatiu de connexió al CATNIX

El centre de Telvent Housing a Barcelona es convertirà en un punt alternatiu de connexió al Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX). Així,

aquells operadors i proveïdors d'Internet (ISP) que estan connectats a Telvent podrien intercanviar tràfic també amb els connectats físicament al CATNIX. A

més, a partir d'ara nous operadors i ISP que vulguin connectar-se al CATNIX poden usar aquest punt alternatiu de connexió si per proximitat de les seves instal·lacions amb Telvent els beneficia. A més, aquells operadors i ISP presents a ambdós punts de connexió podrien incrementar la seva redundància.

El conveni que estableix aquesta col·laboració entre el CESCO i Telvent va ser signat el passat 13 de desembre pel secretari de Telecomunicacions i Societat de la Informació de la Generalitat de Catalunya i president de la Comissió Executiva del CATNIX, Oriol Ferran (a la foto, a la dreta), i el director general de Telvent Housing, Isidoro Costillo.

A més d'aquest conveni, també s'ha signat amb els ISP Iberbanda, el 25 de novembre, i Flash10, el 4 d'octubre, la seva incorporació al CATNIX. D'altra banda, l'operador Telefónica ha ampliat la seva capacitat d'accés al CATNIX amb la instal·lació d'una segona línia de 155 Mbps, mentre que l'ISP Intelideias ha estat baixa.



JORDI PARETO

Nous centres es connecten a l'Anella

El Centre de Regulació Genòmica (CRG), vinculat a la Universitat Pompeu Fabra (UPF), es connecta des del 12 de gener a l'Anella Científica amb una amplada de banda de 10 Mbps. Aquest centre es connecta compartint el punt d'accés, de 100 Mbps, i les adreces IP de la UPF. El CRG és un centre de recerca bàsica creat a la fi del 2000, amb l'objectiu de promoure la recerca bàsica en el camp de la biomedicina i particularment en els àmbits de la regulació genòmica i proteòmica.

Així mateix, el Centre d'Aqüicultura de l'Institut de Recerca i Tecnologies Agroalimentàries (IRTA) es connecta des del passat 26 de novembre a l'Anella a través de la connexió ADSL de la Nova Llotja de Pescadors

de l'IRTA. Tant el Centre d'Aqüicultura com la Nova Llotja es troben a Sant Carles de la Ràpita, la qual cosa ha permès a aquest centre connectar-se amb la Nova Llotja mitjançant tecnologia sense fil. Precisament, la velocitat de la línia ADSL amb què la Llotja es connecta a l'Anella Científica va ampliar-se a 4 Mbps el passat 8 de novembre, a conseqüència de la política de duplicació de les línies ADSL.

El Centre d'Aqüicultura forma part del Centre de Referència i Desenvolupament en Aqüicultura de la Generalitat de Catalunya. Els seus objectius de recerca s'emmarquen en tres línies prioritàries: noves espècies i desenvolupament de noves tecnologies, millora i optimització de les tecnologies de cultiu actuals, i qualitat dels productes d'aqüicultura.

Per altra banda, des del 17 de novembre la unitat docent que té la Universitat Autònoma de Barcelona a l'Hospital Universitari Vall d'Hebron i aquest hospital comparteixen l'accés a l'Anella Científica. Fins ara, aquesta unitat docent es connectava mitjançant una línia Frame Relay a 2 Mbps, mentre que l'Hospital ho feia a 100 Mbps a través d'un punt d'accés a la xarxa Gigaset. Amb aquesta compartició la unitat docent de la UAB ha ampliat la seva capacitat a 10 Mbps i ambdues institucions estalvien costos.



Migració d'alguns serveis de comunicacions

Els serveis de secundari del domini .es (DNS), *proxy-cache*, *news*, *ftp-mirror*, el d'accés remot i el d'hostatge, així com el servidor de correu propi, van ser migrats el passat 23 de desembre a set nous servidors, cinc Xeon duals i dos amb processador Pentium 4.

Fins ara, la majoria dels Serveis Addicionals i els d'Hostatge es trobaven a màquines Sun adquirides abans de l'any 2000. El nou maquinari adquirit, que usa programari lliure, disposa de més espai en disc i més memòria, i proporciona més velocitat en el funcionament dels serveis.

Amb la migració, s'ha aprofitat també per actualitzar programari i diferenciar els serveis per VLAN, la qual cosa permet millorar-ne la gestió i la seguretat. Aquesta diferenciació per VLAN ha possibilitat filtrar l'accés a la màquina només a través dels ports necessaris per al funcionament del servei, la qual cosa en millora la seguretat.

Els nous servidors han reduït el cost d'instal·lació i de manteniment i han permès optimitzar també l'ús de l'espai gràcies a la seva instal·lació en un bastidor amb guies (*rack*). En aquest bastidor s'ha instal·lat també un nou commutador on es connecten aquests servidors. ■



La URV usa el servei de transmissió de veu a través de l'Anella

La Universitat Rovira i Virgili (URV), a Tarragona, utilitza des de l'1 de gener la infraestructura de l'Anella Científica per fer les seves trucades telefòniques cap a les altres províncies. D'aquesta manera, aconsegueix reduir la factura telefònica.

L'objectiu del servei Veu per Internet a l'Anella (VIA) és aprofitar la infraestructura de l'Anella per cursar les trucades de les universitats de Girona, Rovira i Virgili, i de Lleida cap a Barcelona amb cost de trucada metropolitana. Així, en mitja-

na, el cost de cada minut es redueix en un terç. A més, les trucades entre les universitats que usen el servei, UdG i URV, seran a cost zero. La UdG usa aquest servei des de l'octubre de 2003.

El servei VIA conviu amb la telefonia tradicional de manera que no s'han de modificar de forma considerable les instal·lacions internes de la universitat ni adquirir nous terminals. L'usuari continua tenint un telèfon convencional i l'adreçament de les trucades és automàtic. ■

Duplicacions de velocitat de les línies ADSL

A data de 24 de novembre, tots els centres i institucions connectats a l'Anella Científica a través d'una línia ADSL han vist duplicada la seva velocitat, que ara és de 4 Mbps de baixada i 512 Kbps de pujada. Els centres que han millorat la seva velocitat són el Consell Consultiu de la Generalitat de Catalunya,

l'Escola de Turisme de la Universitat de Girona, la Fundació Universitat de Girona: Innovació i Formació, l'Estació Experimental Fundació Mas Badia de l'IRTA, la Nova Llotja de Pescadors de St. Carles de la Ràpita de l'IRTA, el Museu de Vilafranca-Museu del Vi, i el Centre Tecnològic Forestal de Catalunya. ■

Rang d'adreces IP propi

El CESCA disposa d'un rang d'adreces IP propi per a les institucions de l'Anella Científica des de mitjan novembre. Fins ara, era la xarxa estatal de recerca, RedIRIS, qui proporcionava al CESCA i a les institucions connectades a l'Anella aquestes adreces que són gestionades per RIPE NCC a Europa. Però, un cop finalitzats una sèrie de procediments i actuacions, el CESCA és qui proveeix les institucions d'adreces IP.

Des de l'any 1992 l'assignació d'adreces IP es duu a terme seguint un esquema distribuït en el qual el Registre Global d'Internet delega grans blocs als Registres Regionals, com ara RIPE NCC. Aquests, al seu

torn, assignen blocs més petits, contigus i agregables als Registres Locals, com ara el CESCA, que, finalment, són els encarregats de portar a terme les assignacions a les organitzacions filials usuàries.

Disposar d'adreces IP pròpies facilita l'agrupament de les adreces en un sistema autònom propi. També possibilita enrutament dinàmic, la qual cosa permet llibertat d'elecció de proveïdor i la sortida per més d'un proveïdor simultàniament. A més, també ha possibilitat l'agrupació al CATNIX de les adreces de l'Anella amb independència de les de RedIRIS, així com ha aportat millores en la gestió. ■

Migració del Servei de Cerca de Farmacòfors a un nou servidor HP

El Servei de Cerca de Farmacòfors (SCF) va ser migrat el passat 18 de gener a un nou servidor HP Proliant, que proporciona un millor rendiment al servei. Des del seu inici, l'any 1996, l'SCF es trobava a una SGI Octane.

El nou servidor HP Proliant disposa de dos processadors Xeon a 3,2 GHz, 4 GB de memòria principal, 73 GB en disc i sistema operatiu Linux Red Hat Workstation Server 3.0. Aquest sistema té instal·lada la versió 4.9.1 del programari Catalyst. El nou sistema conserva el mateix nom que l'antiga SGI (*encantat.cesca.es*) i la mateixa adreça IP, de manera que no cal que l'usuari faci cap modificació a les configuracions actuals per tal d'accedir-hi.

La part unidimensional de les bases de dades de Catalyst de què disposava fins ara aquest servei, ACD, Derwent, NCI, Maybridge, SPECS, ChemDiv New Chemistry i ChemDiv Diversity Chemistry, s'han migrat al servidor de bases de dades HP rp5430, amb Oracle 9i. Aquest servidor va ser instal·lat l'any 2003 amb la finalitat d'hostatjar exclusivament webs i bases de dades.

Per tal de millorar el servei s'estan transformant a format Catalyst diferents bases de dades gratuïtes de compostos químics. Ja estan disponi-

bles les bases de dades Analyticon (7.046 compostos), Aurora (29.307 compostos) i IBS (386.109 compostos). Properament ho estaran també BioFocus, ChemBridge, ChemOvation, Enamine i Tripos. També s'actualitzarà ChemDiv i SPECS, disponibles des del 2003. Aquestes bases de dades contenen compostos químics disponibles comercialment.

A més, s'ha ampliat el nombre de mòduls disponibles del programa Catalyst, amb una llicència perpètua de Catalyst/Shape. Aquest mòdul permet realitzar cerques en tres dimensions (3D) en bases de dades de compostos i identificar aquelles estructures que tenen estructures 3D similars. Atès que les molècules dels fàrmacs han de tenir una forma determinada per tal d'acoblar-se a la cavitat del receptor neurològic, Catalyst/Shape proporciona un mètode ràpid de selecció inicial de candidats a compostos farmacològics.

Pel que fa al grup d'usuaris d'aquest servei, el passat 1 de febrer Laboratoris Salvat va signar el conveni per incorporar-s'hi. Amb aquest nou laboratori, actualment l'SCF compta amb 14 institucions usuàries, cinc empreses farmacèutiques i nou grups acadèmics. ■

Noves tecnologies... en català

El codi font del programari

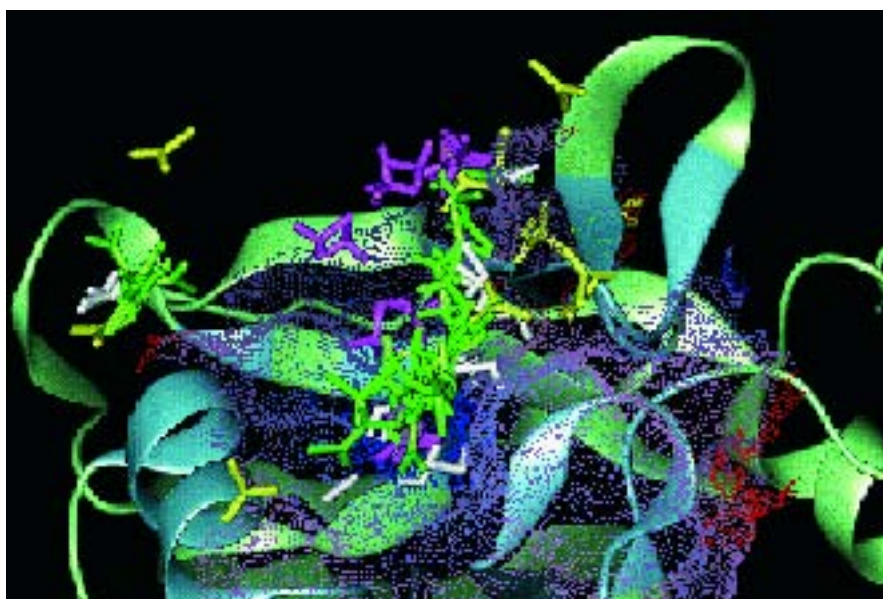
En el número anterior comentàvem les diferències conceptuals entre el programari lliure i el programari de propietat. Dèiem que el programari lliure es caracteritza perquè permet a l'usuari d'executar-lo sense condicions, de distribuir-ne còpies, de modificar-ne el codi font per tal de perfeccionar-ne el funcionament o d'adaptar-lo a usos concrets, i de difondre els resultats d'aquestes modificacions.

El **codi font** (en anglès, *source code*) és el conjunt d'instruccions escrites en un llenguatge de programació que un sistema informàtic ha de processar per poder-les executar. Si no es pot accedir al codi font d'un programa, aquest només es pot executar, però no s'hi pot fer cap canvi ni veure com ha estat dissenyat. En canvi, quan s'hi pot accedir per a modificar o adaptar el programa a qualsevol necessitat es diu que el codi font és un **codi font obert** o, simplement, un **codi obert** (*open source* en anglès).

A la fi dels anys noranta es va començar a fer servir la denominació **programari de codi obert** (en anglès, *open-source software*) en comptes del **programari lliure** (o *free software* en anglès), encunyat per la Free Software Foundation. Darrere aquestes etiquetes s'han anat generant dues maneres diferents d'entendre la filosofia que mou aquests models de programari. Si bé en tots dos casos es garanteix l'accés al codi font, la discrepància s'origina a l'hora de fer-ne la distribució. Mentre que en el programari lliure es fa públic el codi font de qualsevol modificació realitzada, en el programari de codi obert no s'exigeix publicar el codi font d'aquestes modificacions.

Aquestes divergències han fet sorgir una diferència essencial entre tots dos moviments: mentre que per a uns el **programari lliure** s'associa a una qüestió social i ètica, per a altres el **programari de codi obert** és una simple qüestió pràctica que forma part d'una metodologia de treball.

Centre de Terminologia TERMCAT
www.termcat.net



Física i supercomputació

Antoni Giró, coordinador de l'AMF2005 a Catalunya

Josep Pons, president de la Societat Catalana de Física

El desembre de l'any 2000, durant el tercer Congrés mundial de l'European Physical Society, el seu ex-president Martial Ducloy, va llençar la idea de celebrar l'Any Mundial de la Física el 2005 aprofitant el centenari de la publicació dels tres articles d'Einstein que han revolucionat la física moderna. Aquesta iniciativa va ser molt ben rebuda per part del món científic en general i pels físics en particular, essent impulsada en el si de la UNESCO. El 10 de juny de 2004, l'Assemblea General de les Nacions Unides, a proposta de la UNESCO, va proclamar l'any 2005 l'Any Mundial de la Física. El passat 13 de gener va tenir lloc com a tret de sortida, a la seu de la pròpia UNESCO a París, una magna conferència internacional que va comptar amb la participació de 8 premis Nobel de física i amb l'assistència d'una representació de les societats, facultats i centres de recerca de física de més de 60 països de tot el món.

“Dia rere dia augmenta la importància de la simulació gràcies a la supercomputació.”

El text de la declaració de l'ONU (vegeu el requadre) ens convida sens dubte a unes reflexions (Pons, *Avui*, 9/01/05). La primera és que la física és a la base de tot i, en particular, de les espectaculars consecucions tecnològiques esdevingudes en el segle xx, on conflueixen les contribucions, ambdues imprescindibles, dels científics i dels tècnics. Com a part de la ciència en general, la física ha contribuït a examplar extraordinàriament el coneixement del món del qual formem part com a éssers vius: l'estructura de la matèria i les seves interaccions a l'escala microscòpica, les propietats fona-

mentals dels diferents estats en què s'organitza, les bases que fan possible la vida, l'estructura i la història de l'univers observable. D'altra banda, no cal esforçar-se gaire per notar que sense la física quàntica no tindríem els làsers que ens lleigeixen els DVD o que han permès la cirurgia refractiva ocular, ni els xips omnipresents des dels ordinadors fins a les targetes de crèdit, ni la capacitat d'obtenir imatges per detectar un tumor cerebral gràcies al fenomen de la resonància magnètica nuclear (RMN). Per descomptat, tampoc hauríem entès l'hèlix del DNA, ni tindríem els instruments que ens permeten avançar avui en l'estudi estructural de les proteïnes.

Una segona reflexió és que la física i, per extensió, la ciència en general, representen una de les més altes *consecucions intel·lectuals* de l'espècie humana. La creativitat que hi és continguda, la sofisticació matemàtica de què se serveix, la imaginació posada en les seves aplicacions, és d'una bellesa que desgraciadament demana un llarg recorregut d'iniciació per a poder-la apreciar a fons. Però una part d'aquesta bellesa sí que és visible a simple vista: només cal tenir curiositat pel saber i disposar d'explicacions assequibles. És un fet que la física i la ciència en general ens permeten apreciar més aspectes de la bellesa del món. Com digué el gran físic Richard Feynman, “el coneixement és només posar en un marc correcte la meravella que la natura ja és”.

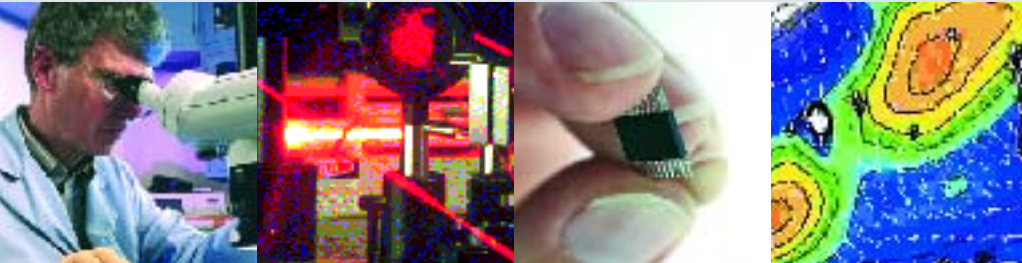
Voldríem aprofitar aquestes línies al *Teraflip* per subratllar un altre aspecte també molt important de principi de la segona meitat del segle xx: el naixement de la modelització i la simulació numèrica. Fins els anys seixanta, el progrés científic en general anava lligat fonamentalment al *feedback* entre la teoria i l'experimentació, al diàleg a dues bandes entre les mesures experimentals i l'observació, per un costat, i la teoria per un altre. A mesura que s'ha anat desenvolupant la capacitat i la potència dels ordi-



nadors cada vegada s'ha anat refermant amb més força una tercera via del progrés científic: la simulació.

Avui dia, en gairebé tots els camps de la ciència i de la tecnologia, el progrés va lligat a una interacció a tres bandes on en els tres vèrtexs del triangle hi trobareu la teoria, l'experiència i la simulació. Sovint s'utilitza la simulació com a pont d'aproximació entre les dues primeres, per tal de veure si les discrepàncies entre els resultats teòrics i els experimentals són conseqüència del propi model o de les aproximacions lligades a la seva resolució. La simulació no té com objectiu substituir el sistema experimental, però sens dubte en molts casos la seva utilització és fonamental. Un simulador de vol, per exemple, mai podrà substituir un avió, però és molt útil per a l'aprenentatge dels pilots. De la mateixa manera que no sempre la teoria ha anat darrera del fet experimental, la simulació tampoc no ho ha fet i, sovint, s'utilitza per orientar la millora dels sistemes experimentals o per dissenyar “experiències virtuals” que ens permetin comprendre millor els sistemes reals o els models teòrics.

El fort desenvolupament del maquinari i del programari a través de la coneguda Llei de Moore, que diu que des del 1965 cada 18 mesos es duplica el nombre de transistors de cada xip, i mitjançant la progressiva substitució del processador vectorial pel multiprocessador en paral·lel, fa que dia rere dia augmenti la importància de la simulació gràcies a la supercomputació. El diàleg entre l'observació, l'experimentació, la teorització conceptual, la mo-



delització i la simulació numèrica ens ha proporcionat síntesis admirables en què un gran cos de coneixement es pot encabir en unes poques expressions matemàtiques i en unes grans bases de dades. Un coneixement posat sempre a prova per la creixent capacitat d'aprofitar-lo per a nous desenvolupaments tecnològics. Efectivament, l'aplicabilitat de la física ha estat immensa, i potser perquè ens habituem ràpidament als ginys proporcionats per la tècnica que d'ella se'n deriva, ens en meravellem sovint ben poc. Massa poc.

Avui per exemple donem per descomptat que la previsió del temps a gran escala a una setmana vista i de demà a nivell local és un fet. Ara bé, us heu entretingut mai a pensar què hi ha darrera d'aquestes prediccions: a nivell conceptual de la física de fluids?, a nivell d'aparells i de recollida de dades experimentals escampats arreu del món?, a nivell de bases de dades?, de comunicacions i hores d'ordinador calculant en línia? Cada vegada que truquem amb un telèfon mòbil, som cons-

“Ens habituem tan ràpidament als ginys proporcionats per la tècnica derivada de la física que fa que sovint ens en meravellem massa poc.”

cients del procés que segueix la nostra veu, a cavall de les ones hertzianes, via la xarxa de satèl·lits? Us heu entretingut mai a pensar la física i tecnologia que hi ha al seu darrere?

Per tot això, al nostre país la declaració de l'ONU ens encoratja a celebrar aquest 2005 com l'Any Mundial de la Física. Per contribuir a aquest objectiu, entitats i institucions que estan vinculades a la física en els aspectes de formació, de recerca o de difusió social de la ciència han constituït la Comissió per l'Any Mundial de la Física a Catalunya. La formen la Societat Catalana de Física i la Societat Catalana d'Història de la Ciència i de la Tècnica, filials de l'Institut d'Estudis Catalans, la Universitat Autònoma de Barcelona, la Universitat de Barcelona i la Universitat Politècnica de Catalunya, el nou Museu de la Ciència CosmoCaixa, el Museu Nacional de la Ciència i de la Tècnica de Catalunya, la Fundació Catalana per a la Recerca i la Innovació, i l'Associació de Professors de Física i Química de Catalunya.

A www.amf2005.org, la pàgina web posada al servei de l'Any Mundial de la Física, hi trobareu totes les conferències, exposicions, demostracions, cartells divulgatius, activitats en els centres d'ensenyament, i moltes altres iniciatives que s'estan desenvolupant durant aquest any amb l'objectiu de fer més present la física al carrer, als mitjans de comunicació i a la vida cultural.

Esperem que aquest Any Mundial de la Física ens faci retrobar i sentir-nos una mica més propers amb aquesta ciència. ■



Declaració aprovada

L'Assemblea General de les Nacions Unides,

reconeixent que la física dóna un fonament significatiu per al desenvolupament de la comprensió de la natura,

constatant que la física i les seves aplicacions són la base de molts dels avenços tecnològics d'avui,

convençuda que l'educació en física dóna a les dones i als homes eines per construir la infraestructura científica essencial per al desenvolupament,

essent conscient que l'any 2005 és el centenari d'una sèrie de grans descobriments científics d'Albert Einstein, que són la base de la física moderna,

1. **Acull** la proclamació de l'any 2005 com a Any Mundial de la Física per part de la UNESCO;
2. **Convida** la UNESCO a organitzar activitats per celebrar l'Any Mundial de la Física, en col·laboració amb societats de física i amb grups d'arreu del món, incloent-hi els països en desenvolupament;
3. **Proclama** l'any 2005 l'Any Mundial de la Física.

IBM SP2, 10 anys al servei dels usuaris



El passat 18 de gener va ser apagat l'IBM SP2, un supercomputador instal·lat el gener del 1995, originalment amb 12 processadors, 2 *wide* i 10 *thin*. Amb aquest supercomputador el CESCA va situar-se a la posició 377 en l'edició de juny de la llista TOP500. El 1996, un any després de ser instal·lat, va incre-

mentar-se la seva capacitat de càlcul amb la instal·lació de 32 processadors *thin2* addicionals. A la llista de juny, l'IBM SP2, amb 44 processadors, va situar-se a la posició 169. El maig de 1997 van actualitzar-se els 32 processadors *thin2* a *thin120* i els 10 *thin* a *thin2*, cosa que va fer mantenir l'IBM a la posició 240 del TOP500 de novembre del 1997. Amb la darrera actualització, el juny de 1998, van ser renovats els 42 processadors a *thin160*. Després d'aquesta última renovació, l'IBM va mantenir-se una edició més a la llista en la posició 439. En aquests 10 anys de servei ininterromput a l'usuari, l'IBM ha proporcionat prop de 2 milions d'hores de càlcul. ■

F O T O / N O T Í C I A

Catàlisi química i desenvolupament sostenible

A nivell públic la indústria química sovint és vista com una indústria bruta, en quant a contaminació mediambiental. Aquesta mala imatge és deguda, en bona part, als excessos comesos en el passat. No obstant, es tracta d'una indústria imprescindible en la societat dels nostres dies, i cal modificar-la per introduir-hi conceptes actuals com ara la sostenibilitat.

En el disseny d'una química sostenible, la catàlisi ha d'ocupar un lloc fonamental. El descobriment de catalitzadors més eficaços ha de portar al desenvolupament de nous processos que consumeixin menys energia i que tinguin el menor impacte ambiental possible.

L'Institut Català d'Investigació Química (ICIQ), creat recentment per la Generalitat de Catalu-

nya, té com a un dels seus objectius prioritaris el disseny de processos catalítics més eficients mitjançant l'ús de les tècniques més modernes disponibles. Aquestes tècniques són fonamentalment experimentals, però entre elles també es troba la química computacional. Aquesta és una de les branques de la química que ha progressat més en els darrers anys, i troba un dels seus camps d'aplicació més exitosos en l'estudi de processos enantioselectius.

En la nostra recerca diària, els grups de química computacional de l'ICIQ utilitzem tant programes comercials de tipus *ab initio* i DFT (Gaussian i ADF), com programes de mecànica quàntica/mecànica molecular desenvolupats en els nostres grups de recerca. Per a la realització d'aquests càlculs, especialment dels corresponents als sistemes més voluminosos, la utilització dels recursos del CESCA és fonamental. ■

Foto: Estat de transició preferit en l'oxidació de sulfurs per peròxid d'hidrogen catalitzada per complexos de vanadi. Codi de colors: el vanadi en color groc fosc (bola gran), el sofre en groc (boles petites), en vermell l'oxigen, en marró el carboni, en blau el nitrogen, en beix el silici, i en blanc l'hidrogen.

Edita

UNIVERSITAT DE BARCELONA
CENTRE DE CÀLCULS



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 Fontova (TERMCAT)

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà-Associats.com

CESCA

Gran Capità, 2-4
08034 Barcelona
Tel. 93 205 6464
Fax: 93 205 6979
<http://www.cesca.es>
teraflop@cesca.es

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