

TERAFLOP

Catalunya exporta e-informació

RACO en marxa

Nova e-infraestructura

Entrevista a Oriol Ferran

El CESCA inaugura la nova e-infraestructura de càlcul, d'informació i d'emmagatzematge

Per continuar ampliant l'abast dels serveis del CESCA i millorar-ne l'ús, s'han inaugurat, aprofitant la celebració del 15è aniversari del Centre, dos nous clústers Linux, un de càlcul i un altre d'informació, adquirits a Hewlett-Packard (HP) i una llibreria automatitzada per a l'emmagatzematge de dades, comprada a Internacional Periféricos y Memorias España (IPM).



Oriol Ferran durant el parlament inaugural.

L'acte d'inauguració, que va tenir lloc el 7 de març, va estar presidit per Rafael Español, president del CESCA, acompanyat per Oriol Ferran, secretari de Telecomunicacions i Societat de la Informació; Francesc X. Hernández, director general de Recerca; Josep Peralta, director a Catalunya d'HP; i Albert Orriols, director de serveis professionals d'IPM.

Amb motiu del 15è aniversari, Español va afirmar que "el trajecte que s'ha fet al llarg d'aquests 15 anys és força satisfactori, ja que s'ha anat ampliant l'àmbit horitzontal dels serveis científicotècnics del CESCA per a la universitat i la recerca, els quals han demostrat amb escreix la seva utilitat per al progrés del nostre país".

El clúster de càlcul CP4000 està format per 16 nodes ProLiant DL145 G2 i s'usa per reforçar l'execució de treballs

poc paral·lels i amb una ocupació moderada de memòria, complementant així els grans servidors amb memòria compartida ja existents. Amb aquest nou maquinari, el rendiment punta agregat del Centre ha superat el teraflop per segon, passant de 691 a 1.046 Gflop/s, és a dir, es poden fer teòricament 1 bilió d'operacions de coma flotant per segon.

Segons Hernández, "aquest clúster reforça l'oferta en càlcul d'altres prestacions i satisfà la creixent demanda que requereixen els grups de recerca en les diferents àrees de coneixement a què dona servei el CESCA".

El clúster d'informació el componen 10 nodes ProLiant DL360 G4p i s'utilitza per hostatjar els dipòsits d'informació i els portals universitaris de les institucions consorciades o de les adherides a l'Anella Científica. La migració dels serveis a

aquest nou maquinari els oferirà una alta disponibilitat i els proporcionarà un millor rendiment i una major escalabilitat en les consultes que rebien.

Ferran va indicar que "cal treballar per garantir la generació de continguts oberts i de lliure accés en la línia del grup de treball Aliança Digital que impulsa el Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació". Per a Ferran "és molt important que aquesta mena d'entendre la transmissió del coneixement guanyi espai, sobretot partint de l'àmbit universitari, com ja promou el programa Universitat Digital de la Generalitat".

El servei d'emmagatzematge de dades es va iniciar l'any 1999 i en l'actualitat ha arribat al màxim de la seva capacitat (20 terabytes, 20×10^{12} bytes). Per això, s'ha substituït per una llibreria automatitzada Scalar i2000 d'ADIC que té una capacitat de 34 TB, amb 100 cel·les habilitades de 300 i 85 cintes de 400 GB de capacitat cadascuna, i és ampliable fins a 120 TB.

15 anys al servei de la universitat i la recerca

Fa 15 anys que es va signar el conveni per crear un consorci "amb l'objectiu de gestionar un gran complex de sistemes de càlcul". Ja en els seus inicis, es va detectar que per poder accedir als recursos de supercomputació era necessari desplegar una xarxa de comunicacions d'altres prestacions; aquesta es va posar en operació l'any 1993 i es va anomenar Anella Científica. Per això, l'objecte fundacional del CESCA es va ampliar posteriorment per afegir-hi "i de comunicacions".

Al llarg d'aquests anys l'Anella Científica ha passat de connectar 6 institucions a 54 i ha renovat la seva tecnologia dos cops, l'any 1998 de DQDB a ATM i l'any 2003 a Gigabit Ethernet. A més de permetre l'accés a internet, l'Anella Científica també ofereix tota una sèrie de serveis de valor afegit que s'han anat incorporant gradualment: accés remot, per facilitar el teletreball; seguretat, per respondre de forma coordinada a les incidències produïdes (infeccions, atacs, correu brossa...); certificació digital, per fer les transaccions electròniques més segures; autenticació, per facilitar la mobilitat dels investigadors arreu d'Europa; veu sobre IP, per reduir el cost de les trucades interprovincials a Barcelona, etc.



(Esquerra) Francesc X. Hernández iniciant el clúster de càlcul. (Dreta) Rafael Español introduint la primera cinta a la llibreria automatitzada.

Per assegurar l'accessibilitat de la informació científica a tots els ciutadans, l'any 1999 es va crear el Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX) que afavoreix a més l'intercanvi de tràfic amb qualitat de servei entre els diferents proveïdors d'Internet, que han passat dels 10 inicials als 20 actuals. El CATNIX també ofereix diversos serveis de valor afegit com ara el *multicast*, l'IPv6, l'NTP, el servidor arrel de noms F, el servidor de prefixos *bogon*...

La potència de càlcul també ha crescut significativament, dels 1.000 milions d'operacions per segon que es podien fer en els dos equips vectorials inicials (de Cray i IBM) s'ha passat a les més d'un bilió d'avui dia, en set màquines de diverses característiques funcionals (d'HP i SGI) per tal que 60 grups de recerca investiguin sobre l'estructura electrònica de les molècules, els cristalls moleculars d'interès tecnològic, el reconeixement molecular, les reaccions implicades en química atmosfèrica i en processos de combustió, la química d'hidrurs de metalls de transició, l'estructura d'enzims i la catàlisi, l'estudi de les galàxies... i així trobar nous materials, avançar en el tractament de malalties o reduir l'impacte de l'ésser humà en el medi ambient. La seva tasca s'ha vist reconeguda amb diversos guardons (la medalla Narcís Monturiol, les distincions del DURSI, el premi de la Real Sociedad Española de Química, el premi Solvay d'Investigació Química, el premi Laboratoris Salvat, etc.).

Els serveis de supercomputació s'han anat ampliant cap a altres àrees: des de 1996, el disseny de fàrmacs que ofereix a 6 laboratoris farmacèutics eines per la cerca de farmacòfors en bases de dades

de compostos d'interès biològic; des de l'any 2000, els portals i les bases de dades universitàries que ofereixen un accés eficient i segur a 13 webs institucionals; des de l'any 2001, els dipòsits d'informació en accés obert com ara el servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) que recull, avui dia, el text íntegre de més de 3.200 tesis doctorals i compta amb 14

de la revista *Teraflop*, del web i d'altres mitjans.

Aquest creixement constant reflecteix l'eficàcia i el dinamisme del CESCA, que ha sabut generar els consensos necessaris entre tots els consorciats (Govern i universitats públiques i privades) per assolir els nous reptes que la societat li demana. El Govern de la Generalitat de Catalunya així ho ha considerat, atorgant-li el 2002 la Placa Narcís Monturiol.



El CESCA ha sabut generar els consensos necessaris entre tots els consorciats per assolir els nous reptes que la societat li demana

universitats participants, el RECERCAT operatiu des de la fi de l'any passat i el RACO, operatiu des de la fi de març.

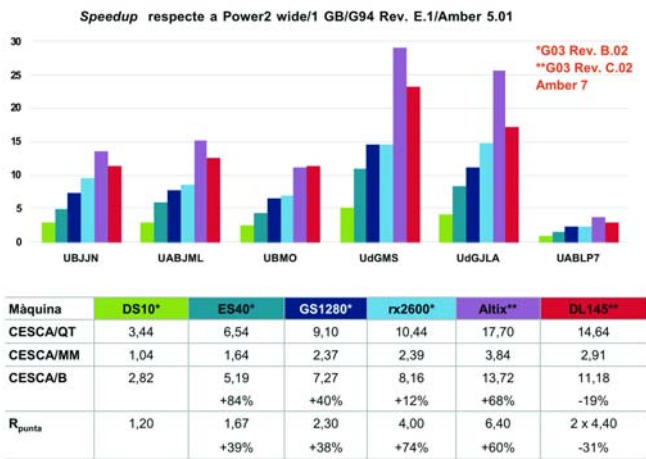
Des de l'any 1994, aquestes dues àrees d'activitat, els sistemes i les comunicacions, s'han complementat amb una tercera, la promoció, per formar en l'ús dels recursos del Centre i per difondre les pròpies activitats i els beneficis que les tecnologies d'altres prestacions reporten a la societat en general, a través

El clúster de càlcul

El clúster de càlcul CP4000 està format per 16 nodes ProLiant DL145 G2 de memòria compartida, enllaçats per tres xarxes Gigabit Ethernet (una externa i dues internes, de les quals una és per a càlcul i l'altra per a gestió), amb un total de 256 GB de memòria principal i 4,56 TB de disc. El clúster usa el sistema operatiu SUSE Linux Enterprise Server 9 amb nucli 2.6 i els nodes són gestionats per l'eina Cluster Manangement Utility (CMU) resident en un node ProLiant DL385 independent. El rendiment punta (R_{punta}) és de 281,60 Gflop/s i el rendiment màxim ($R_{màx}$) de 177,41 Gflop/s.

Cada node DL145 disposa de dos processadors AMD Opteron 275, de 64 bits i doble nucli, a 2,2 GHz. Els processadors estan fabricats amb tecnologia de 0,09 micres amb 9 nivells d'interconnexió de coure i alimentació d'1,30 V. El xip ocupa una superfície de 202 mm² i conté 233 milions de transistors. Cada nucli disposa de dues memòries caus de primer nivell de 64 KB cadascuna, una per a instruccions i l'altra per a dades, i una de segon nivell d'1 MB.

El rendiment de l'Opteron 275 a 2,2 GHz



tres ports Gigabit Ethernet, dos de tipus RJ45 PCI i l'altre amb connector SC, i un disc intern de 36 GB a 15.000 rpm per a l'àrea de swap i fitxers temporals.

El sistema operatiu és el Red Hat Enterprise Linux ES versió 4 de 32 bits amb nucli 2.6. A més també s'incorpora el Red Hat Cluster Suite que proporciona l'alta disponibilitat a través de les funcionalitats de failover d'aplicacions i balanceig de peticions.

La llibreria automatitzada

L'equipament adquirit a IPM consisteix en una llibreria de cintes ADIC Scalar i2000, d'una capacitat de 34 TB ampliable a 120 TB, amb 100 cel·les habilitades de 300, dos dispositius de transport de tipus LTO-3 de 80 MB/s i 85 cintes de 400 GB de capacitat nativa. Aquesta llibreria ha substituït la d'StorageTek, una de les màquines més antigues en operació i que es trobava al límit de la seva capacitat.

El rendiment del clúster de càlcul HP CP4000

Un cop el nou maquinari ha estat plenament operatiu, s'han repetit el conjunt de benchmarks que caracteritzen la càrrega del Centre i que avaluen el rendiment d'un sol processador, la capacitat de treball del sistema globalment i l'escalabilitat per treballs paral·lels.

El rendiment del processador s'ha avaluat mitjançant els cinc benchmarks de química teòrica (QT) basats en Gaussian i un de modelització biomolecular (MM) basat en Amber. Els resultats obtinguts per al processador Opteron 275

han estat en mitjana geomètrica d'11,18, un 19% menor que el rendiment del processador Itanium2 del sistema Altix 3700 instal·lat el febrer de 2005.

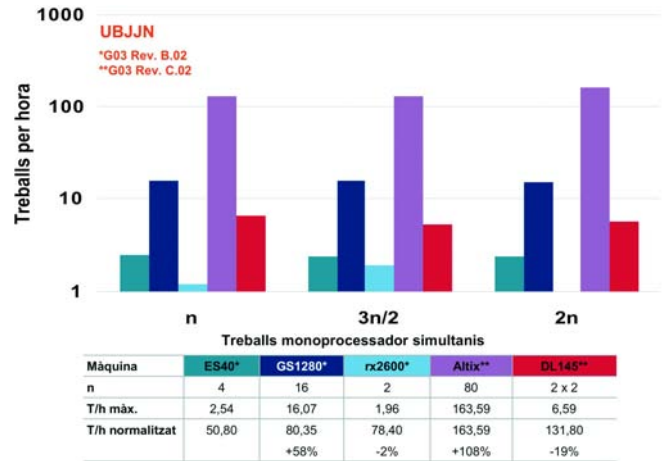
Cal destacar que si bé en mitjana el QT de l'Opteron és inferior al de l'Itanium2, 14,64 enfront a 17,70, en el cas del benchmark UBMO l'Opteron proporciona un rendiment lleugerament superior, 11,43 enfront a 11,23. Això s'explica pel fet que el

Amb el clúster de càlcul, el rendiment punta agregat del Centre ha superat el teraflop per segon

Gaussian de l'Opteron 275 ha estat compilat utilitzant les llibreries matemàtiques PGI ACML que proporcionen millor rendiment que les ATLAS que s'usen habitualment. Per tant, en aquells casos en què el càlcul està fortament dominat per operacions de multiplicació de matrius, l'ús de llibreries optimitzades afecta sensiblement els resultats obtinguts. En aquest cas concret s'obté un 15% de millora en el rendiment pel fet d'utilitzar les ACML en lloc de les ATLAS.

També s'ha avaluat el rendiment de cada sistema amb una càrrega de treball d' n , $3n/2$ i $2n$ del mateix benchmark (UBJJN), on n és el nombre de processadors (nuclis) per node de cada sistema. Cada node proporciona un rendiment de 6,59 treballs per hora per una càrrega d' n treballs, la qual cosa significa que 20 nodes (80

El rendiment del DL145 G2



nuclis) del CP4000 donar un rendiment d'uns 132 treballs per hora enfront dels 164 de l'Altix.

Finalment, s'ha avaluat l'escalabilitat per treballs paral·lels mitjançant l'execució d'un benchmark de Gaussian (UDGMS) en 2 i 4 processadors (nuclis), obtenint-se en mitjana una eficiència del 92%, la qual cosa supera l'eficiència obtinguda a l'ES40 (87%), el GS1280 (86%) i l'Altix (86%). Cal tenir en compte que els resultats per l'ES40 i el GS1280 es varen obtenir amb la versió de G03 Rev.B.02 de Gaussian, mentre que els resultats de l'Altix i del CP4000 s'han obtingut amb la revisió C.02.

D'aquests resultats es desprèn que el nou sistema adquirit proporciona un bon rendiment tant en treballs seqüencials amb requisits moderats de memòria com en treballs paral·lels de fins a 4 processadors. Durant el 2005, un 12% dels treballs executats van ser paral·lels, dels quals un 91% van utilitzar un màxim de 4 processadors i van consumir un 22% del total d'hores computacionals utilitzades al llarg de l'any. Cal destacar que el percentatge de treballs paral·lels el 2005 va ésser 3 vegades superior al de 2004, on només representaven un 4% del total, tendència que s'ha mantingut durant el primer trimestre d'aquest any.

En conseqüència, el sistema adquirit podrà absorbir gran quantitat de la càrrega de treballs actual de l'Altix 3700, saturat des de la seva posada en servei, permetent dedicar aquest últim a treballs de major nombre de processadors i de gran quantitat de memòria, tant seqüencials com paral·lels, en els quals demostra un rendiment excel·lent. ■



Institut Ramon Muntaner



RACO, un nou dipòsit per exportar e-informació

S'ha posat en marxa el dipòsit de Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO) que permet la difusió de revistes científiques, culturals i erudites catalanes. El servidor, que compta amb 93 publicacions de les 15 institucions ressenyades al marge, facilita l'edició digital en mans de cada editor i assegura la preservació del patrimoni documental per difondre la producció científica i acadèmica.



JORDI PARETO

Presentació de RACO a la Comissió Tècnica del CBUC el dia de la seva posada en operació (27 de març).

El Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya (CBUC), el Centre de Supercomputació de Catalunya (CESCA) i la Biblioteca de Catalunya (BC) han desenvolupat RACO, el dipòsit de Revistes Catalanes amb Accés Obert, que permet consultar en accés obert els articles a text complet de revistes científiques, culturals i erudites catalanes, alhora que facilita la seva difusió. El servidor està patrocinat pel Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació (DURSI) i recolzat pel Departament de Cultura.

El secretari de Telecomunicacions i Societat de la Informació i president de la Comissió Permanent del CESCA, Oriol Ferran, considera que "des del DURSI, s'ha fet un especial esforç per impulsar i donar suport a projectes que afavoreixin l'accés lliure a recursos i fons documentals, en especial aquells que ja havien estat finançats amb diners públics. Els dipòsits TDX, RECERCAT i ara RACO, en són exemples concrets".

RACO funciona amb el programa de codi lliure OJS, desenvolupat pel Public Knowledge Project (PKP) amb l'objectiu

de fomentar l'accés a la investigació, facilitant la gestió i publicació de revistes científiques. Aquesta aplicació permet fer, entre d'altres, cerques per autor i/o títol d'article, títol, matèria o editorial de la revista.

Els sumaris i el text complet dels articles són introduïts a RACO per les quinze institucions editores. En la majoria de les revistes s'ofereix el text complet de tots els números publicats. Tot i això, en alguna revista hi pot haver una carència entre la introducció del resum i la del text complet.

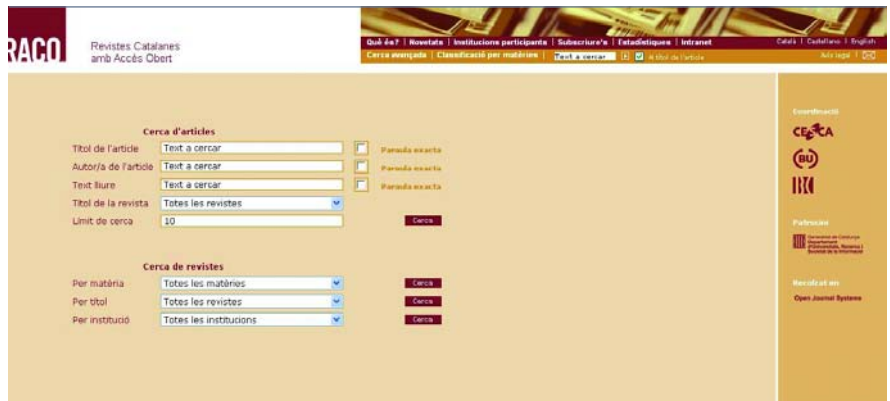
Els articles a text complet inclosos en aquest dipòsit són propietat dels seus autors i/o institucions editores i, per tant, qualsevol acte de reproducció, comercialització, comunicació pública o transformació total o parcial necessita el consentiment exprés i escrit d'aquests.

RACO permet consultar en accés obert articles i revistes, ahora que facilita la seva difusió

RACO és el tercer dipòsit col·laboratiu que el CIESCA i el CBUC posen al servei del sistema universitari i que contribueix a difondre la producció científica catalana, atorga més visibilitat, tant als autors com a les comunicacions, i contribueix perquè aquestes últimes es puguin preservar en excel·lents condicions, combatent el deteriorament que suposa el pas del temps.

Programari

Per construir el servidor de RACO s'han avaluat diversos programes que puguin complir, totalment o en part, les funcionalitats desitjades. Encara que s'ha estudiat utilitzar els programes DSpace, CWIS, uPortal, ContentDM i LODEL, finalment s'ha escollit l'Open Journal Systems (OJS), ja que és el que millor s'adapta als requeriments del projecte. Tot i no acomplir totalment amb els requeriments



Pàgina d'inici de RACO.



Classificació de les revistes per matèries.



Exemple de com es visualitza una publicació al servidor.

desitjats, el fet que sigui de codi lliure permet modificar certs aspectes i adaptar nous mòduls desenvolupats al CESCO.

Un cop realitzada la primera instal·lació del programari, s'han fet proves més exhaustives per definir més acuradament les mancances a què s'havia de fer front. Entre d'altres tasques en les quals s'ha treballat, cal destacar les realitzades en la internacionalització del text de l'anglès al català i al castellà, i en la importació de revistes ja publicades de manera que es puguin afegir-hi de cop totes les revistes de què es disposa.

Un altre dels punts on s'han dedicat esforços és en un nou mòdul de càrrega d'articles, que s'ha integrat totalment amb el programari perquè l'usuari no s'hagi d'autenticar contínuament al sistema i perquè aquest no noti cap diferència en l'entorn.

Uns altres aspectes desenvolupats han estat els canvis de disseny fets al programari per personalitzar l'eina, així com modificacions dels fulls d'estil o dels elements per adaptar la portada HTML i per complir amb els criteris d'accessibilitat.

També s'han fet modificacions a l'OJS per solucionar requeriments per fer les cerques, com el tractament dels accents diacrítics, les *stop words* i les distincions entre majúscules i minúscules. Així, originàriament el cercador del programari distingia els accents a l'hora de cercar; és a dir, per poder trobar la paraula "computació" s'havia de fer la cerca escrivint l'accent al cercador. En canvi, des del punt de vista

del món bibliotecari, es feia necessari poder trobar el resultat escrivint la mateixa paraula, tant accentuada com no i, fins i tot, admetent errors d'accentuació.

Un altre dels aspectes que calia canviar era indicar que hi havia paraules que no s'han de tenir en compte a l'hora de fer una cerca. Aquestes són les *stop words*, o articles determinants que acompanyen als noms i estan buits de significat. Per exemple, si s'escriu "la casa petita" al cer-

Aquest és el tercer dipòsit col·laboratiu que el CESCO i el CBUC posen al servei del sistema universitari

cador, el determinant "la" és una *stop word* que no es tindrà en compte. De la mateixa manera, calia donar indicacions al cercador perquè no fes distincions entre majúscules i minúscules per buscar el nom d'una publicació o d'un article.

Tot i que hi ha un gruix important de feina ja feta, encara queden alguns aspectes que cal enllestir, com ara realitzar un mòdul per automatitzar el procés de verificació de la integritat dels continguts de les revistes. ■

www.raco.cat

FUNCIONAMENT

El servidor permet fer cerques d'articles a partir del seu títol o de la revista on apareix, de seu autor o, fins i tot, de paraules clau i fragments del text a cercar. També es poden buscar revistes per matèria, títol o institució a la qual pertanyen.

Un cop localitzada la publicació, es pot trobar informació sobre aquesta en quant a contacte, institució, matèries, etc. En el cas dels articles, es poden trobar detalls sobre el document, així com el text complet de la publicació.

RACO incorpora, a més, diverses opcions addicionals com poden ser versions per imprimir, recomanacions de lectura, estadístiques de consulta tant d'un article com d'un número complet, metadades que el descriuen o fins i tot les citacions bibliogràfiques recomanades.

Així mateix, també ofereix la possibilitat de subscriure's al servei d'alerta de qualsevol de les revistes que incorpora per tal de rebre per correu electrònic l'avís de nous números publicats.

noves tecnologies en CATALÀ!

Els documents de RECERCAT

No fa gaire mesos el Consorci de Biblioteques Universitàries de Catalunya (CBUC) i el Centre de Supercomputació de Catalunya (CESCA) van posar en marxa el servidor RECERCAT, un dipòsit institucional cooperatiu de documents digitals que inclou la bibliografia de recerca de les universitats i dels centres d'investigació de Catalunya i que té com a principal objectiu donar accés públic a documents inèdits de recerca.

Aquest dipòsit (*repository*, en anglès) conté el que es coneix com a *literatura grisa*, és a dir, un conjunt de documents de tiratge limitat i circulació restringida que no es poden obtenir a través dels canals habituals de consulta o de venda, i que un cop han estat editats digitalment se solen conèixer amb el nom de *publicació electrònica* (en anglès, *electronic publication* o *e-print*).

Entre els diversos tipus de documents indexats a RECERCAT, cal destacar les *comunicacions* (en anglès *papers*) sobre temes de recerca diversos que han estat presentades en un congrés, les *edicions preliminars* (o *pre-prints*, en anglès) d'articles o comunicacions que es distribueixen abans de la publicació definitiva, i els *documents de treball* (en anglès, *working papers*) sobre un àmbit de recerca determinat que són posats a disposició de la comunitat científica pels seus autors amb la finalitat de donar a conèixer uns resultats preliminars i de recollir comentaris que puguin completar la recerca abans de la publicació definitiva.

Aquests documents, i d'altres com informes de recerca, memòries tècniques, projectes de final de carrera, etc., constitueixen un corpus documental que pot ser consultat lliurement i que facilita la cooperació entre la comunitat científica de parla catalana.



termcat

www.termcat.net

Centre de terminologia

“Cal ser impulsor de dinàmiques, més que no pas de projectes”

Oriol Ferran és secretari de Telecomunicacions i Societat de la Informació des de fa dos anys, durant els quals s’han engegat dos plans estratègics, en infraestructures, amb el PDIT, i en serveis i continguts, amb el PSiC. Com explica Ferran, “tot plegat estructurat a partir d’un discurs comú que s’emmarca dins l’estratègia del DURSI, la de la societat del coneixement”. Es tracta, entre d’altres, de garantir l’accés a la Societat de la Informació a tots els ciutadans, sense que es produeixin elements excloents per motiu de territorialitat, econòmic o social, i d’afavorir el canvi cultural necessari perquè les TIC arribin plenament, s’utilitzin i transformin la societat.



FOTOS: JORDI PARETO

Després de dos anys al capdavant de l’STSI, quines fites assolides remarcaria?

Primer hi ha hagut tot una feina de definició d’estratègia, els dos puntals de la qual són el Pla Director de les Infraestructures de Telecomunicacions (PDIT) i el Pla Director de Serveis i Continguts (PSiC). A banda de reorganitzar internament la SI dins el DURSI i redefinir el paper de la Secretaria i del Centre de Telecomunicacions, s’ha intentat organitzar el treball en el marc d’una estratègia comuna. Hi ha hagut una tasca d’identificació de peces que, en alguns casos, estaven aïllades i, en d’altres, desconectades, i s’ha procurat organitzar-les en un ecosistema en el qual es barregen telecomunicacions i serveis i continguts. I, tot plegat, s’ha estructurat a partir d’un discurs comú que alhora s’emmarca en l’estratègia més general del propi Departament,

la de la societat del coneixement, un graó superior on també trobaríem el Pla de Recerca i Innovació i l’estratègia amb Universitats i l’Espai Europeu d’Educació Superior. Hi ha hagut una tasca important de definició i organització de l’espai de treball comú per desenvolupar projectes sobre aquestes estratègies.

Dins d’aquestes estratègies, s’ha creat un nou ens gestor d’infraestructures de telecomunicacions (ITCat). Quins són els reptes a assolir? Què el diferencia de l’antic Centre de Telecomunicacions que la Generalitat va privatitzar?

El PDIT passa per tota una acció, ja històrica, tant d’impuls dels serveis de la pròpia Generalitat com d’implantació de serveis de telecomunicacions a nivell de país. D’una banda, es tracta d’impulsar i dotar el Centre de Telecomunicacions i Tecnologies de la Informació com a ens amb criteri. Per això, un primer pas ha estat re-

cuperar el coneixement del Centre i la seva capacitat gestora de les polítiques de telecomunicacions i informàtica de la Generalitat. És un procés que vam començar a l’inici de la legislatura i que ha permès incrementar els recursos del Centre i la seva activitat, així com la seva presència en els diversos departaments. El Centre té ara un coneixement real de l’estat de la SI a la Generalitat i, per tant, pot ajudar els departaments en les seves polítiques d’informàtica i de telecomunicacions i ser-ne un referent. Això ha portat també a recuperar part de l’externalització (*outsourcing*) que s’havia fet i a renegociar contractes.

D’altra banda, hi ha tota l’actuació a nivell de país. Aquesta actuació passa per garantir l’accés a la Societat de la Informació a tots els ciutadans, sense que es produeixin elements excloents per motiu de territorialitat, econòmic o social.



Durant la primera quinzena de maig té lloc FesInternet que, organitzat per l'STSI i amb la participació de nombroses entitats, vol mostrar que accedir a internet i a la societat del coneixement és molt fàcil, i que, a més, pot ser útil per a tothom. La festa culminarà el 17 de maig amb la Festa d'Internet, coincidint amb la celebració del Dia Mundial d'Internet. El CESCA hi participa del 2 al 5 de maig amb jornades de portes obertes, per mostrar al públic les infraestructures avançades de comunicacions que gestiona, l'Anella Científica i el CATNIX, així com els dipòsits d'informació (TDX, RECERCAT i RACO) i els portals d'informació universitària.

www.fesinternet.net

L'acció en infraestructures també respon a una acció de cohesió social digital, per a la qual hi ha tota una actuació d'impuls al desplegament d'infraestructures perquè tothom, tant ciutadans com empreses, tinguin garantida la connectivitat.

Entre d'altres projectes emblemàtics, això es materialitza en l'ens gestor d'infraestructures, un projecte que diferents forces del Govern incorporen ja en programa electoral. El primer objectiu d'aquest ens és posar en valor les infraestructures públiques existents i això vol dir inventariar-les i interconnectar-les. A més, amb el valor de ser una xarxa oberta, motor de la competitivitat i afavorint l'aparició i el desplegament d'altres operadors. És un procés que s'ha concretat recentment amb la creació d'ITCat, un consorci integrat per la Generalitat, en un 60%, i Localret, en un 40%. El component és públic perquè com a mínim en aquesta fase i en aquest procés les infraestructures són públiques, tant les existents com les noves. En aquesta primera fase, són importants els desplegaments de fibra des de Lleida fins a la Pobla de Segur, seguint la renovació de la línia ferroviària, i la de l'eix del Llobregat i de Manresa a Vic.

Per tant, amb l'ITCat no estem creant un operador, com en el seu dia es va fer amb el Centre de Telecomunicacions de la Generalitat de Catalunya, sinó un ens gestor. Es necessitarà un operador per gestionar aquesta xarxa i sortirà a concurs. No es tracta de crear-ne un com hi va haver aleshores, en què fins i tot hi havia el referent basc d'Euskatel. No volem repetir-ho, d'altra banda, perquè encara està pendent resoldre l'embolic que es va crear arran la seva privatització, que esperem resoldre al llarg d'aquest any.

Quins són els objectius del segon puntal que ha mencionat, el PSiC?

La missió del PSiC és afavorir el canvi cultural necessari perquè les TIC arribin plenament, s'utilitzin i transformin la societat. El PSiC intenta treballar per tal d'afavorir el seu acostament al ciutadà. En aquest procés, l'Administració ha d'assumir un paper de motor, reconeixent, però, la importància de fer-ho conjuntament amb el sector privat. En aquest Pla s'ha identificat on som, definit projectes emblemàtics, buscat sinergies i creat xarxes que ajudin a portar a terme aquests projectes conjunts.

“Es tracta de crear projectes i també de reconduir-ne per potenciar el treball conjunt entre universitats, una línia coincident amb la del CESCA”

El PSiC no pretén tant ser impulsor de projectes sinó, sobretot, de dinàmiques. I, per tant, focalitza el seu esforç en generar espais on es construeixin aquests nodes d'aquesta xarxa que ha de ser la que impulsi la SI. El Pla identifica projectes, defineix línies estratègiques i crea els mecanismes perquè es pugui fer entre tots. Té un pressupost propi de 38 M pel període 2005-2008, una quantitat una mica simbòlica, ja que serà molt superior només amb la previsió d'inversió al voltant

de les TIC ja només des de la pròpia Generalitat. Així, detectem que hi haurà aproximadament uns 800 M en inversions diverses des de diferents sectors, des de salut fins a les pròpies universitats. Tot i que el PDIT disposa d'un pressupost superior, el PSiC en mobilitzarà més.

Quina preveu que pot ésser la seva influència en l'administració pública?

Dins l'administració pública hi ha diferents àmbits estratègics. En la línia dels sistemes d'informació, es tracta de millorar-los tant internament com cap al ciutadà. La interoperabilitat de tots els sistemes vinculats als sistemes d'informació i com es gestiona la informació repercuteix directament en l'eficiència administrativa. Per tant, hi hauria el gran concepte d'administració digital, que seria sistemes d'informació i eficiència administrativa. El Pla para una atenció especial a tota l'acció en e-salut, amb un impacte directe en el ciutadà, i també en e-justícia. És molt important, per exemple, que enguany tot allò referent a registre de fundacions i associacions ha passat a ser totalment electrònic, la qual cosa s'hauria de traslladar a d'altres àmbits.

També està succeint en e-formació, des de la primària a la universitària, amb projectes molt diversos basats en generació d'espais com ara plataformes educatives lligades a dipòsits de continguts i també al foment de les relacions entre la comunitat acadèmica. Precisament un dels àmbits estratègics del PSiC és l'alfabetització digital, adreçada al gran públic, tant ciutadans com empreses, de manera sectorialitzada.

La Secretaria tenia una realitat que és la Xarxa de Telecentres, una realitat desigual, ja que hi trobem diverses tipologies de telecentres amb diferent titularitat (ajuntaments, consells comarcals...) i grandària. Treballem perquè aquesta Xarxa de Telecentres sigui la infraestructura que ens ajudi a impulsar la SI en el país, conscients, però, d'una realitat, que un 50% de la població ja l'usa amb total normalitat i que un altre 50% diu que no li interessa i no li troba la utilitat. El FesInternet d'aquest any, amb el lema "internet és fàcil, és útil", es proposa arribar a aquest altre 50%, perquè descobreixi la utilitat de la xarxa i ho faci d'una manera acompanyada a través, per exemple, de la Xarxa de Telecentres. Necessitem, però, la complicitat de tothom.

Com es concreta en l'àmbit universitari, en particular?

Pel que fa a la universitat, hi ha des del DURSI dos esforços. D'una banda, el Pla d'Inversions Universitàries en fa una especial atenció i mira d'estimular la inversió en TIC. Com a Secretaria, tenim la proposta del programa Universitat Digital, que intenta afavorir la creació de projectes interuniversitaris i fer aflorar el treball en comú. En aquest sentit, i coincidint amb la línia de treball del CESCA, es tracta de crear projectes i també de conduir-ne per potenciar el treball conjunt entre universitats. El més emblemàtic ara mateix és el projecte CAMPUS, que ha requerit una feina de més d'un any perquè tots els seus actors es possessin d'acord, i que ja està en execució. Ha estat un any per definir les necessitats tecnològiques i treballar amb la idea comuna de trobar un nou campus conjunt amb programari lliure.

El FesInternet d'aquest any, amb el lema "internet és fàcil, és útil", es proposa arribar a un 50% de població que, malgrat conèixer la xarxa, no la considera útil

El DURSI ha creat el grup de treball Aliança Digital per promoure la digitalització i l'accés als continguts. Quins serien els objectius ideals a assolir?

Aquest grup s'ha creat com a model dels que defineix el PSiC, de crear un espai on hi sigui present la universitat, el sector privat, les Administracions... treballant junts amb un mateix objectiu, en aquest cas, construir i impulsar la infoestructura a través de projectes que recolzin aquest espai. S'ha de trobar la fórmula, i per això interessa que hi hagi també sector privat, per no pensar només des de l'àmbit públic, metòdic, dels qui estan especialitzats en guardar informació.

Cal obrir més l'horitzó, per exemple, no només ser arxiver sinó també estímul del sector, no només construir una gran biblioteca sinó crear una biblioteca multimèdia que ha de repercutir en el sector i ha de generar continguts i negoci, i estimular, per exemple, el món audiovisual.

I, és per això, que té sentit que hi sigui des de la Biblioteca de Catalunya i el CBUC fins a TV3 i productores audiovisuals.

Aquest és el marc en el qual intencem posar els fonaments d'un espai que es diu Aliança Digital i que els propis actors hauran de fer evolucionar. RACO i RECERCAT són exemples d'aquests projectes que han d'anar arrencant. La infoestructura necessita d'aquests dipòsits i d'imaginació per trobar noves aplicacions i usos.

Celebrem que projectes finançats des de l'entorn públic neixin amb llicències lliures que garanteixin que sempre continuïn sent de lliure accés. El posicionament en la Declaració de Berlín, que va signar el conseller i que estem animant els rectors a subscriure-la, referma la importància que hi hagi aquests dipòsits, que creixin i que siguin sota llicències lliures.

El conseller va afirmar fa pocs dies que esperava poder multiplicar per cinc les inversions en TIC en el nou Pla d'Inversions Universitàries. Cap a on creu que s'haurien d'orientar aquestes inversions? Són les universitats les que proposen, tot i que el conseller els demana prioritzar la inversió en TIC. És cert que hi ha una part d'infraestructures que cal actualitzar, però és important que la inversió s'adreci també al desenvolupament de serveis i de continguts, tot i que hi ha, és cert, uns dèficits en infraestructura.

Fa dos anys que també va assumir primer la presidència de la Comissió Executiva del CATNIX i després la de la Comissió Permanent del CESCA. Quin balanç en fa?

Són espais molt diferents en les seves composicions i en els quals està molt bé ser-hi. En l'un per gestionar el CESCA com a consorci interuniversitari de serveis, tant de supercomputació com de comunicacions, i on possiblement tots hem de fer encara un esforç per creure'ns-el realment com a espai interuniversitari i fer-ne un consorci col·laboratiu i amb tot un recorregut per créixer. I al CATNIX, on ens movem en un espai virtual i on haurem de buscar la manera que s'integri en el projecte del PDIT. És important pel que ha representat i pel que se li pot arribar a trobar, amb nous serveis i aplicatius, sobretot si aconseguim mantenir tothom que avui dia hi és. Més enllà de l'espai virtual d'interconnexió, CATNIX també proporciona el lloc de trobada d'operadors i ISP. ■

Oriol Ferran i Riera

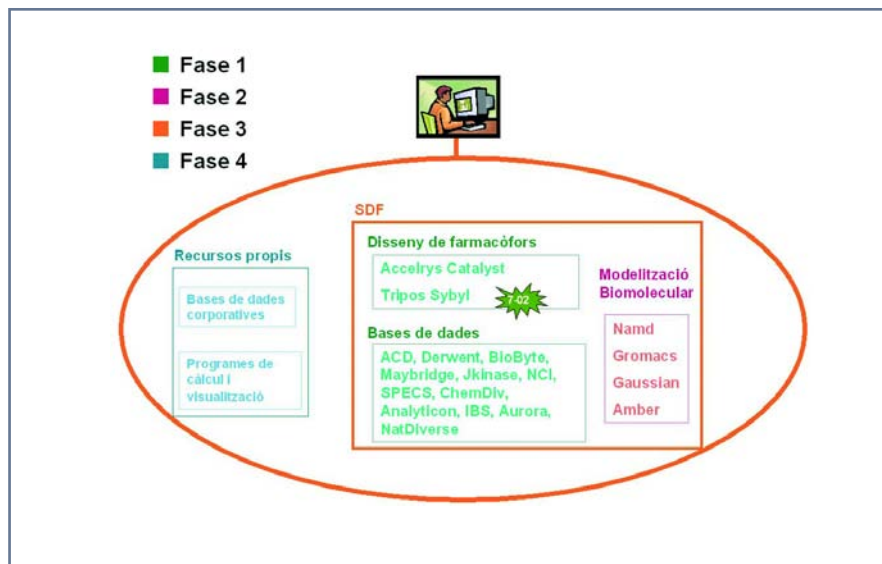
Secretari de Telecomunicacions i Societat de la Informació del Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació de la Generalitat de Catalunya. Nascut a Arenys de Mar l'any 1965, Ferran és un periodista que s'ha especialitzat en tecnologies de la informació. Actualment és membre del Consell d'Administració del CTTI, de la Torre de Collserola S.A. i d'Al-Pi; president de la Fundació I2Cat i la FOBSIC; i membre del patronat de la FUOC i l'AOC.

Difusor del fenomen d'internet i les seves possibilitats des de 1994, ha destacat com a activista i promotor de diverses iniciatives digitals de caire social a la xarxa. Col·laborador de COM Ràdio, BTV i TVE, Oriol Ferran ha impartit diversos postgraus de periodisme digital a la UPF, la UOC i la URL. Ha format part de la Comissió de Periodisme Digital del Col·legi de Periodistes de Catalunya i és membre de l'ISOC-Internet Society i d'Hispalinux.



De l'SCF a l'SDF

Gràcies a un ajut del Ministerio de Educación y Ciencia per a l'accés i la millora de les Grans Infraestructures Científiques, el Servei de Cerca de Farmacòfors (SCF) s'amplia i es converteix en el Servei de Disseny de Fàrmacs (SDF).



El laboratori virtual.

Aquest canvi de nom es deu a l'ampliació del servei original, l'SCF, basat en el programari Catalyst d'Accelrys, i orientat a la cerca de farmacòfors en bases de dades tridimensionals de compostos d'interès biològic amb el programari Sybyl de Tripos. Aquest, a més de complementar les utilitats de cerca en base de dades, afegeix noves funcionalitats al servei com ara el disseny basat en el lligand o en el receptor, la creació de llibreries de compostos i el modelatge macromolecular.

L'SDF constitueix una infraestructura tecnològica que té per objectiu atendre les necessitats de la recerca en el camp del disseny de fàrmacs, i que ofereix un conjunt d'eines derivades de la química computacional que s'apliquen per predir, guiar i crear models de les molècules, les seves propietats i les seves interaccions, permetent així un disseny basat en el coneixement. Aquest servei és innovador ja que engloba tant les empreses com els grups acadèmics, la qual cosa facilita la transferència de tecnologia i millora la competitivitat del teixit industrial.

L'SCF es va posar en marxa a la fi de 1996 amb la subvenció que la Generalitat de Catalunya va atorgar al projecte presen-

tat per la UPC, l'IMIM, els laboratoris Almirall, Dr. Esteve i Menarini, a més del CESCO. El servei s'ha anat consolidant al llarg dels nou anys de funcionament. Amb les incorporacions el 2005 dels Laboratoris Salvat i Neuropharma, al febrer i al juliol respectivament, i d'un grup acadèmic de la UAB, al

L'SDF engloba empreses i grups acadèmics, facilitant la transferència de tecnologia i millorant la competitivitat del teixit industrial

novembre, ja són catorze els grups de recerca de tot l'Estat que avui dia formen part d'aquest servei. D'aquests, sis són industrials (Almirall Prodesfarma, Dr. Esteve, Grup Ferrer, Neuropharma, Laboratoris Salvat i Grup Uriach), i la resta són grups acadèmics (dos de la UB, dos de la UAB, un de la UPC, un de l'IMIM, i dos del CSIC).

El laboratori virtual per al disseny de fàrmacs

El bon funcionament del servei ha fet que el 2005, i partint de l'estructura de l'SCF, s'hagi impulsat la creació del laboratori virtual per al disseny de fàrmacs, que està previst desenvolupar en diferents fases que es completaran a la fi de 2007. Els seus objectius són, d'una banda, l'ampliació i millora de la infraestructura tecnològica ja existent i, de l'altra, la implantació d'un entorn de treball per al disseny de fàrmacs que permeti integrar els recursos existents, tant interns com externs, d'un mode àgil i còmode. Aquest entorn es desenvoluparà utilitzant tecnologia Grid sota Globus Toolkit i amb el desenvolupament del *middleware* necessari per a la integració dels diferents recursos.

Així, la infraestructura tecnològica estarà formada per un sistema de visualització i accés a bases de dades; programari per al disseny de farmacòfors i cerca en bases de dades de compostos de noves molècules bioactives (Accelrys Catalyst); programari per a Virtual Screening (Tripos Sybyl) i programari per a la simulació *ab initio* i dinàmica molecular (NAMD, GROMACS i Gaussian), que usaran els supercomputadors disponibles.

En aquest context, durant el 2005 es va iniciar la primera fase de creació del laboratori, que consisteix en la millora de la infraestructura existent amb la migració de l'SCF a un nou servidor HP xw8000, que proporciona un millor rendiment. A més, com a part del procés de migració, les dades relacionals i la part unidimensional de les bases de dades de Catalyst de què disposava aquest servei, format per Derwent World Drug Index (amb 48.405 compostos), BioByte (24.416), National Cancer Institute (98.868), Maybridge (47.045), Available Chemical Directory (266.812), SPECS (255.000), ChemDiv New Chemistry (95.209) i ChemDiv Discovery Chemistry (279.117), es van moure al servidor de bases de dades HP rp5430 que té la finalitat d'hostatjar webs i bases de dades. Aquest conjunt s'ha anat ampliant amb la transformació a format Catalyst de diferents bases de dades gratuïtes de compostos químics: Analyticon (7.046 compostos), Aurora (29.307) i IBS (386.109). Aquestes bases de dades contenen compostos químics disponibles comercialment.

Pel que fa al programari d'Accelrys Catalyst, es tenen llicenciats set mòduls: 2 llicències de Visualizer (informació i ajuda) i de Compare (visualització d'estructures); DB-Server (cerca en bases de dades), HypoGen i HipHop (generació d'hipòtesis), Info (creació de bases de dades), ConForm (generació de confòrmers), Shape (cerques 3D per identificar substàncies amb estructures similars) i HypoRefine (generació de volums d'exclusió). La llicència d'aquest últim mòdul es va incorporar al mes de març.

Per al programa Sybyl de Tripos es tenen llicenciats 11 mòduls: Sybyl i ConFort (visualització i representació d'estructures), QSAR i CoMFA (disseny basat en el lligand), LeapFrog (disseny basat en el receptor), Legion/CombiLibMaker, Selector i DiverseSolution (creació de

llibries de compostos), BioPolymer (modelatge macromolecular) i Unity (cerca en bases de dades).

Al llarg d'aquest any es completarà la segona fase en la que es posarà a l'abast dels usuaris del servei diversos programes de modelització biomolecular: NaMD, Gromacs i Amber per al càlcul de dinàmiques moleculars i Gaussian per al càlcul d'estructures i propietats químiques mitjançant simulacions *ab initio*.

La tercera fase, que es desenvoluparà durant el 2007, consistirà en la implantació d'una interfície que permetrà als investigadors disposar d'un entorn de treball únic, a través del qual podran accedir a les diferents eines involucrades en el procés de disseny de fàrmacs assistit per ordinador i que constituirà el laboratori virtual. Posteriorment, aques-

ta interfície podrà ésser amplificada amb la incorporació, per part dels diferents usuaris, d'altres eines de les quals facin ús internament als seus centres de treball. ■

Amb el laboratori virtual per al disseny de fàrmacs es vol ampliar la infraestructura tecnològica i implantar un entorn de treball per integrar els recursos existents

L'SCF i la recerca de nous fàrmacs contra la tuberculosi

En els darrers temps, la infecció per tuberculosi ha esdevingut un problema important de salut pública, més encara des que algunes varietats d'aquesta bactèria han desenvolupat resistència a alguns o a tots els fàrmacs utilitzats avui dia per al seu tractament. En aquestes circumstàncies, el desenvolupament de nous fàrmacs tuberculoestàtics s'ha convertit en un dels reptes de la química mèdica actual.

Un bon exemple de com l'ús de les eines d'aquest servei accelera el procés de disseny de nous fàrmacs és la recerca duta a terme pel grup de Síntesi Orgànica Estereoselectiva del Departament de Química de la UAB, en la que han participat el Dr. Ramón Alibés, el Sr. Joan Ramon Cucarull, el Dr. Pere de March, la Dra. Marta Figueredo i el Dr. Josep Font.

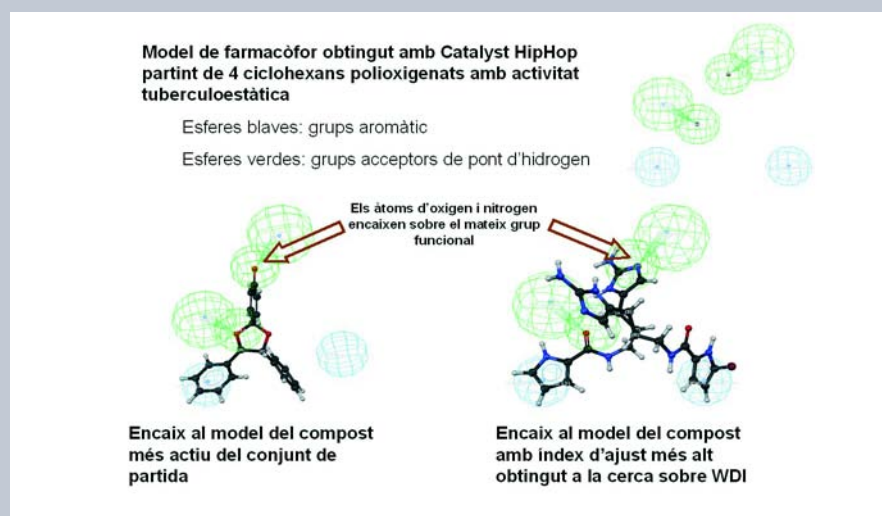
La recerca d'aquest grup d'investigadors, que implica la síntesi de ciclohexans polioxigenats, ha consistit en la preparació de diferents derivats enantiomèricament purs de la p-benzoquinona que han mostrat activitat tuberculoestàtica. Utilitzant l'algoritme HipHop disponible en el programari Catalyst han desenvolupat un model de farmacòfor que descriu aquests tipus de compostos. Aquest s'ha utilitzat posteriorment per realitzar una cerca sobre la

base de dades Derwent World Drug Index, donant com a resultat 26 compostos, 10 dels quals presentaven un índex d'ajust al model molt elevat.

L'estudi de l'encaix dels compostos trobats amb el model de farmacòfor va orientar cap a la modificació d'aquests mitjançant la introducció d'un nitrogen on hi havia un grup carbonil. Un cop establerta l'estructura, s'ha procedit a fer la

síntesi d'aquests compostos en laboratori.

Actualment, s'està treballant a nivell experimental per determinar l'activitat biològica d'aquests compostos, mentre que s'està estudiant amb deteniment els seus mecanismes d'acció utilitzant mètodes computacionals. L'anàlisi de l'activitat d'aquests compostos indicarà el camí que cal seguir en la recerca de nous fàrmacs per combatre la tuberculosi.



Recerca de nous compostos tuberculoestàtics.

La popularitat de la pectina en el TDX



Una tesi defensada l'any 1996 ha esdevingut, per segon any consecutiu, la més consultada de la Universitat de Lleida (UdL) en el servei Tesis Doctorals en Xarxa (TDX).

Amb destacades aportacions sobre els beneficis de la fibra alimentària del préssec i la recuperació de residus, que li han atorgat prestigi internacional, el nombre de consultes que rep ha fet que la seva posició en el rànquing de les tesis més consultades del TDX hagi millorat any rere any. Com explica Jordi Pagan, autor d'aquesta tesi, "en l'actualitat hi ha tres conceptes clau de moda en la recerca agroalimentària, com són les biomolècules en la prevenció de salut, l'aprofitament i el reciclatge de residus, i la tecnologia". Malgrat fa 10 anys que aquesta tesi va ser defensada, "els seus continguts pioners aleshores" mantenen encara viu el seu interès.

La tesi *Degradación enzimática y características físicas y químicas de la pectina del bagazo de melocotón* ha estat escrita per Jordi Pagan i dirigida per Albert Ibarz, ambdós del Departament de Tecnologia d'Aliments de la UdL. Aquesta tesi ocupa la posició número 31 en el llistat de les més consultades el 2005 en el servei TDX i es manté a la posició 20 en el rànquing acumulat 2001-2005.

Com explica Albert Ibarz, el TDX "és una eina molt valuosa, que permet fer una millor difusió de les tesis". Per aquest mo-

tiu, considera que "el servei resulta imprescindible perquè els investigadors interessats en un tema determinat puguin accedir als resultats complets de la recerca desenvolupada en una determinada tesi". A més, afegeix que "aquest sistema fa que la recerca feta en les universitats tingui una major difusió, i això comporta un major coneixement de la pròpia universitat en els àmbits investigadors de tot el món". En aquesta mateixa línia, Pagan comenta els avantatges del servei i com contribueix a donar visibilitat a la re-

cerca produïda a Catalunya, ja que "fa temps, per tal de donar a conèixer els resultats obtinguts en una tesi doctoral era necessari i imprescindible que es publicués en diferents revistes, a més de que havien de tenir un gran impacte (ben situades amb un alt índex SCI)".

Per la seva banda, el rector de la UdL, Jordi Viñas, comenta que "la Universitat està formada per molt bons professors investigadors que exerceixen la recerca en els seus respectius camps" alhora que es mostra "satisfet pel fet que aquesta tesi hagi estat una de les més consultades".

La tesi es va iniciar l'any 1993, encara que ja s'havien fet tasques prèvies dos anys abans, i va ser pionera en dos aspectes encara molt vigents en l'actualitat: l'un relacionat amb la salut i que busca millorar l'extracció de la pectina, la qual aporta la fibra alimentària del fruit, i l'altre, vinculat amb el medi ambient i que persegueix l'aprofitament dels residus del bagàs que queda després de l'extracció de la fibra. Les indústries alimentàries extreuen el suc dels fruits que es comercialitza, quedant el bagàs, que suposa un residu industrial i alimentari amb un valor pràcticament nul. D'aquest bagàs és d'on es pot obtenir la pectina.

Els treballs duts a terme per elaborar la tesi es van realitzar en els laboratoris del grup de recerca d'Enginyeria i Enzimologia d'Aliments del Departament de Tecnologia d'Aliments de la UdL, comptant amb un reactor químic en condicions controlades. Segons comenta Jordi Pagan, "el treball d'extracció de la pectina va resultar feixuc, ja que comprenia moltes etapes". "Cada mostra de pectina va requerir unes 6 hores d'extracció total i es van realitzar vora de 100 mostres, incloent-hi les repeticions. Seguidament se'n van efectuar múltiples anàlisis, tant químiques com físiques, per determinar-ne la qualitat", explica. Així es va obtenir la pectina en forma de pols, la qual va resultar molt aromàtica, ja que retenia part de l'aroma del préssec.

Aquesta tesi, els treballs de la qual van finalitzar el 1995, resulta interessant ja que va determinar les condicions d'extracció de pectina per obtenir el màxim rendiment amb la màxima qualitat. Així, ha donat lloc a tres publicacions en les revistes més prestigioses sobre Enginyeria d'Aliments (*Journal of Food Engineering*, *Journal of the Science of Food and Agriculture* i *Food Research International*) i, a



Albert Ibarz Ribas és llicenciat i doctor en Ciències Químiques per la UB, a més d'enginyer tècnic en Indústries Agrícoles i Alimentàries per la UPC. Ha estat sotsdirector de l'Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Agrària de Lleida i vicerector de Professorat de la UdL. Ha publicat més de cent articles científics i és coautor de quatre llibres i ha realitzat la traducció de deu llibres sobre diverses àrees de l'Enginyeria Alimentària.



Jordi Pagan i Gilabert és llicenciat en Ciències Químiques per la UAB, doctor en la mateixa àrea per la UdL i enginyer tècnic en Química Industrial per la UPC. Ha participat en deu projectes de recerca i actualment se centra en la investigació sobre enzims en aliments, polisacàrids, reactors i bioquímica de fruits. Ha escrit tres llibres de consulta universitària i compta amb 40 articles científics publicats, a més de 56 ponències realitzades en congressos científics.



més, se n'ha fet referència en diverses ponències de congressos internacionals.

En l'actualitat són constants les consultes que rep Jordi Pagan sobre assessorament, tant per part de la indústria com de grups de recerca que es volen iniciar en l'extracció d'aquesta molècula. En contrast amb altres, constitueix alhora un additiu alimentari i una molècula saludable, imprescindible en la constitució dels aliments funcionals.

També cal destacar que Pagan ha estat coautor juntament amb John Shi i Qi Wang de la University of Guelph, a Canadà, del llibre *Functional Foods: Biochemical and Processing Aspects*, publicat per la prestigiosa editorial CRC i que és un dels llibres de referència mundial sobre aliments funcionals.

L'aprofitament de la pectina del préssec

A les rodalies de Lleida es troba una important varietat de diverses indústries que elaboren suc derivats de fruita. Aquest fet fa que, a més de la producció normal de suc, també sorgeixin altres subproductes als quals se'ls procura donar un millor aprofitament amb una aplicació posterior al mercat. Un d'aquests subproductes és el bagàs, que té un alt contingut en fibra. Inicialment tenia com a única sortida la de ser un complement de l'alimentació animal, però pel seu contingut en fibra pot tenir diverses aplicacions en l'alimentació humana.

És per això que, segons comenta Albert Ibarz, director de la tesi, "la decisió

d'abordar aquest tema va venir a partir del plantejament d'un estudi d'utilitats, tant en l'alimentació humana com en altres indústries del sector farmacèutic i cosmètic, entre d'altres, que es podien donar tant al préssec com als seus derivats i residus".

A. Ibarz: "El TDX resulta imprescindible perquè els investigadors puguin accedir als resultats complets de la recerca desenvolupada en una determinada tesi"

En aquesta tesi s'ha estudiat l'aprofitament d'un residu de la indústria alimentària per obtenir les pectines, un component que es troba en una fracció important del bagàs de les fruites i que s'aplica en molts productes alimentaris, al mateix temps que resol un problema mediambiental degut a la disminució de la quantitat de residus sòlids que se n'obté.

Les pectines es poden considerar components nutracèutics, ja que s'apliquen com additius en la formulació de diversos aliments funcionals. La pectina del préssec és una de les molècules més importants de la fibra vegetal alimentària que, a part de ser un additiu, té propietats medicinals contrastades. Està de-

mostrat que redueix el colesterol, prevé certs tipus de càncer, treballa com a regulador intestinal a l'organisme, etc. La pectina es fa servir també com a espesidor per fer geles i melmelades, serveix també per estabilitzar emulsions alimentàries i la indústria farmacèutica l'encapsula per utilitzar-la com a vitamina o medicament.

La història de la pectina

La pectina va ser descoberta el 1790 quan el químic francès Vauquelin va trobar una substància soluble als suc de fruita. El científic Braconnot va continuar el treball de Vauquelin i va concloure que "una substància de plantes vives i ja observada en el passat tenia propietats gelificants quan se li afegia àcid a la seva solució". La va anomenar "pectina àcida" del grec pectos que significa sòlid, coagulat. El 1951, la pectina va ser definida pel científic Kertesz com els àcids pectínics solubles en aigua de grau de metilació variat que són capaços de formar gels amb sucre i àcid sota condicions determinades. Aquesta definició abasta la gelificació dels àcids pectínics, o com els àcids poligalacturònics aïllats de plantes contenen una certa proporció de grups metilèster. Per aquest motiu també el terme pectina s'usa col·lectivament per parlar d'àcid pèctic, la forma de pectina completament desesterificada que gelifica amb calci. Les formes de pectina són generalment reconegudes com segures per l'O.S. Food and Drug Administration i les seves especificacions legals estan registrades internacionalment. ■

GLOSSARI

Bagàs: Restes obtingudes durant certs processos d'elaboració d'aliments, com els residus d'extracció de la canya de sucre, els residus del premsatge d'olives i de llavors oleaginoses, etc.

Pectina: Substància vegetal formada per àcids poligalacturònics, de cadena llarga, esterificats amb metanol. S'obté de l'escorça de fruits cítrics o del bagàs de poma, entre altres. Diluïda amb sucres i barrejada amb sals amorfes, és emprada com a additiu gelificant, espesidor i estabilitzador d'aliments. En terapèutica és emprada com a absorbent i antidiarrei.

L'FHAG s'incorpora a l'Anella Científica

La Fundació Hospital Asil de Granollers (FHAG) es connecta a l'Anella Científica amb un punt d'accés Gigaset de 10 Mbps des del 3 de març. Josep Maria Ibáñez Romaguera, director de qualitat i desenvolupament de l'FHAG, destaca la importància de la connexió a l'Anella, ja que “ens permet desenvolupar projectes formatius i de cooperació amb altres centres sanitaris, com ara la creació de tot un sistema de teleradiologia que permeti la transmissió d'imatges de radiologia entre l'Hospital i el Parc Taulí”.

L'FHAG està integrada per l'Hospital General de Granollers i pel Centre Geriàtric Adolfo Montañá. Paral·lelament i des de la fi de l'any 2003, l'entitat, a través de la Fundació Bertran de Seva per a la Gestió de Serveis Sanitaris i Socials, s'encarrega de la gestió de l'Hospital de Dia Sant Jordi, centre dedicat al tractament de malalts amb demències i trastorns cognitius.

La missió de l'FHAG és oferir els serveis sanitaris i socials personalitzats per millorar el benestar de les persones del Vallès Oriental en qualsevol moment del seu procés vital.

El vessant docent de la Fundació és un punt molt important en la vida de la institució, tant pel que fa a estudis de grau com de postgrau. L'FHAG ofereix formació de grau, amb estudis universitaris de ciències de la salut recolzats per la Facultat de Medicina de la UB i també col·labora amb diverses escoles d'infermeria, fisioteràpia i amb centres de formació professional, oferint classes pràctiques als seus alumnes.

Pel que fa a la formació de postgrau, des de l'any 1983, l'FHAG forma a metges especialistes pel sistema MIR. Actualment té deu especialitats acreditades entre les que destaquen: anestesiologia i reanimació, cirurgia general i de l'aparell digestiu, geriatria, radiodiagnòstic i traumatologia, medicina interna, obstetrícia i ginecologia, entre d'altres. A més, també ofereix formació postgrauada a infermeres de l'especialitat d'infermeria obstètricoginecològica.

L'origen de l'Hospital General de Granollers se situa al voltant de 1328, quan Bertran de Seva va crear una institució d'acollida per a pobres pelegrins i malalts.

El 1844, l'Hospital es va traslladar a l'antic convent de Caputxins de Granollers, que al començament del segle XX ja es va mostrar insuficient i afectat pel canvi del traçat de la via del ferrocarril. Llavors es va iniciar una campanya per construir-ne un de nou, que es va finançar gràcies a les aportacions de nombrosos ciutadans i entitats. El nou Hospital es va inaugurar al peu de la carretera de Cardedeu, el 25 de juliol de 1923, amb una capacitat per a 50 llits.

Durant la dècada de 1970 es van fer diverses ampliacions i millores i el 1984 va entrar en funcionament el Centre Geriàtric Adolfo Montañá dins el mateix recinte, en substitució de l'antic asil. Durant aquests anys l'Hospital de Granollers es va renovar amb noves plantes i quiròfans i a la fi de l'any 2005 es van iniciar les obres d'ampliació i reforma de l'Hospital. El projecte consisteix en la construcció d'un edifici per a l'atenció ambulatoria i la remodelació de diversos espais. Amb aquesta ampliació l'FHAG disposarà de 50.000 m² al servei dels ciutadans.

Per al Dr. Ibáñez, “disposar d'aquesta connexió ens permetrà renovar un cop més l'Hospital, oferint en un futur proper nous serveis associats, que ens permetin homogeneïtzar i centralitzar les diferents connexions externes del Centre i ens ajudin a agilitzar el diagnòstic i en conseqüència a millorar la qualitat assistencial”.

L'Anella permet l'FHAG desenvolupar nous projectes com ara la creació de tot un sistema de teleradiologia



L'FHAG disposarà de 50.000 m² al servei dels ciutadans.

Apagat l'HP V2500

El 5 de març va quedar desconnectat el servidor HP V2500 (*Puigcerver*), un supercomputador que va instal·lar-se el juny de 1998 i que ha estat en actiu durant gairebé 8 anys. Amb l'actualització del V2500 que es va fer el novembre de 1999, els 16 processadors PA8200 amb què comptava en un principi es van convertir en PA8500.

Això va possibilitar que el rendiment punta de la màquina passés de 15,36 a 28,16 Gflop/s, mentre que el rendiment màxim passava de 10,65 a 17,47 Gflop/s. *Puigcerver* compta amb 8 GB de memòria principal i 216 GB en disc.

Puigcerver s'ha fet servir, majoritàriament, per dur a terme diversos projectes acadèmics d'investigació i també privats. Així, membres de la Divisió Telecom de

l'empresa multinacional Sema Group van provar amb el servidor el rendiment d'una nova aplicació, desenvolupada per a operadors de telefonia.

En aquests 8 anys de servei ininterromput a l'usuari, aquest HP ha proporcionat 895.414 hores de càlcul. ■



L'HP V2500 ha estat en actiu 8 anys.

Canvis al CATNIX

Iberbanda ha ampliat la seva connexió al Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX) passant de 8 a 16 Mbps al mes de febrer. L'operador de serveis de comunicació de banda ampla es connecta al CATNIX des del 23 de novembre. D'altra banda, el proveïdor d'Internet (ISP) KPG Communications s'ha donat de baixa del CATNIX amb motiu d'un canvi en la seva infraestructura interna. Aquest ISP s'havia connectat el febrer de 2005. ■



Noves altes i ampliacions a l'Anella

La Fundació Universitària del Bages (FUB), adscrita a la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB), està connectada a l'Anella Científica mitjançant una línia ADSL a 4 Mbps des de l'1 de desembre de 2005. La FUB ofereix estudis homologats en els camps de les ciències de la salut i de les ciències empresarials.

També a través de dues línies ADSL a 4 Mbps han quedat connectats, el gener, dos punts de l'Institut de Recerca i Tecnologia Agroalimentàries (IRTA): el Centre Tecnològic per a la Gestió Integral de Residus Orgànics (GIRO) i la unitat de Remugants. Aquesta última està orientada a contribuir al coneixement del funcionament, metabolisme i comportament dels remugants.

El Campus de les Terres de l'Ebre de la Universitat Rovira i Virgili (URV) disposa, des del 7 de febrer, d'un nou enllaç Ethernet a 34 Mbps de velocitat. Per tal d'enllaçar aquest campus

directament amb la URV, també s'ha configurat un segon port Gigaset a 40 Mbps al punt d'accés de la pròpia universitat a Tarragona. El Campus de les Terres de l'Ebre ja comptava des de juny de 2005 amb dos punts d'accés ADSL a 4 Mbps.



Pel que fa als augments de velocitat, l'Agència de Salut Pública de Barcelona (ASPB) ha duplicat la seva velocitat de connexió i, des del 19 de gener, disposa d'un cabal de 20 Mbps. Aquesta és la tercera ampliació que fa l'Agència, connectada a l'Anella des de l'any 1995 amb un cabal de 64 Kbps, que va ampliar a 512

Kbps el 2001 i a 10 Mbps el 2003.

El 9 de març, el Campus de Sabadell de la UAB també va ampliar el cabal del seu punt d'accés, que fins llavors era un radioenllaç de 34 Mbps, a 100 Mbps Gigaset amb fibra. Aquest és un dels punts d'accés que estava previst proveir amb fibra òptica arrel de la prorrogació del contracte de prestació del servei de l'Anella amb Al-Pi Telecomunicacions.

La FUNDEMI, l'Escola de Turisme Sant Ignasi i la Fundació Blanquerna han duplicat el mes de març la seva connexió a l'Anella Científica. Aquests centres de la URL, que es connecten mitjançant punts directes a la xarxa Gigaset d'Al-Pi Telecomunicacions, han passat d'una connexió Gigabit Ethernet de 10 Mbps a una de 20 Mbps.

La FUNDEMI es connectava mitjançant el punt d'accés directe a la xarxa Gigaset d'Al-Pi Telecomunicacions a 10 Mbps, va ampliar el mes de març la seva connexió a 20 Mbps. ■

El servei RSS, disponible al web del CESCA



S'ha posat en funcionament el servei d'RSS al web del CESCA. El Really Simple Syndication (RSS) és un estàndard que forma part de la família dels formats XML (Extensible Markup Language), llenguatge que s'utilitza per a la distribució de contingut a través de la xarxa.

L'RSS és una tecnologia que permet la lectura automàtica de continguts a través d'un agregador, un programa informàtic que mostra els continguts de l'RSS als que l'usuari està subscript. També es pot accedir a aquests continguts directament per mitjà de programes de correu electrònic o navegadors que portin implementat l'RSS.

D'aquesta manera la informació que es troba dispersa en diferents llocs webs es condensa i es trasllada a l'escriptori de l'usuari, proporcionant un accés directe sense necessitat de buscar ni consultar periòdicament els diferents webs d'interès. Així l'RSS facilita una lectura ràpida dels continguts i esdevé un servei avançat dins la Societat de la Informació. ■

Nous membres a RECERCAT



La Biblioteca de Catalunya (BC), la Universitat Rovira i Virgili (URV) i l'Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR) s'han incorporat al Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT), el primer dipòsit de l'Estat que indexa documents digitals en matèries de recerca i que inclou el que es coneix com literatura grisa, és a dir, articles inèdits, comunicacions a congressos, informes de recerca, documents de treball (*working papers*), etc.

La BC, que es troba inclosa a RECERCAT dins la comunitat d'"Institucions culturals", ha introduït una memòria tècnica sobre el projecte Patrimoni Digital de Catalunya (PADICAT). Aquest té l'objectiu de dissenyar i produir un sistema que permeti a la Biblioteca de Catalunya compilar, processar i donar accés permanent a la producció digital catalana. ■

D'altra banda, la URV ha afegit 6 documents de treball del Departament d'Economia. El primer introduït porta per títol *Composition of Greenhouse Gas Emissions in Spain: an Input-Output Analysis*, de les autores Isabela Butnar i Maria Llop. El document descriu un mètode per avaluar com els canvis produïts per la demanda sectorial, com ara els canvis en el consum privat, el consum públic, les inversions i les exportacions, afecten a les emissions dels 6 principals gasos que provoquen l'efecte hivernacle regulats pel protocol de Kyoto. L'estudi s'ha fet amb les dades econòmiques i ambientals d'Espanya durant el 2000.

Per la seva part, l'AGAUR hi disposa de quatre col·leccions, en les quals anirà incloent els documents de recerca resultants de les beques i ajuts obtinguts per part d'estudiants pregraduats, investigadors postdoctorals, investigadors predoctorals i també d'altres projectes de recerca. Els primers documents que ha introduït són: *Influència de les condicions ambientals sobre la població acarina, Sabbatical stay at CREVER, University Rovira i Virgili, Memòria científica de l'estada de recerca fora de Catalunya i Una aproximació al coneixement del medi natural, social i cultural de l'educació primària a partir de la comprensió de la diversitat i la pluriidentitat*. ■

Millores al TDX

El Servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) compta, des de març, amb noves funcionalitats que permeten consultar les tesis d'una manera més còmoda. Així, s'han afegit més camps de cerca: "Director" i "Departament", que faciliten la cerca d'una tesi a partir del nom del seu director/a o del departament on s'ha llegit, i el rang de dates on la tesi es va defensar.

També s'han afegit dues noves seccions: la de "Novetats", que detalla les notícies i esdeveniments d'interès relacionades amb el servei, i la de "PMF", on es pot trobar resposta a les preguntes més freqüents tant dels visitants com dels membres de les institucions que hi participen. ■

Constitució de la CTA i renovació de la GUCAP

S'ha constituït la Comissió Tècnica i Assessora (CTA) creada per acord de la Comissió Permanent del passat 12 de desembre (vegeu *Teraflap 86*). Aquesta comissió ha celebrat les seves dues primeres reunions el 10 de febrer i el 6 d'abril.

A més, s'ha renovat la Comissió de Grans Usuaris de Supercomputació (GU-

CAP), ja que a la fi de l'any 2005 tots els seus membres van cessar en finalitzar el seu mandat de quatre anys.

D'altra banda, la Comissió Tècnica de l'Anella Científica (CTAC) va celebrar el 22 de març la seva cinquantesima reunió. Aquesta comissió es va crear el 1993 amb la posada en funcionament de l'Anella Científica. ■



La GUCAP es va constituir el 5 d'abril.



La nova Comissió Tècnica i Assessora.

EL CTTC, l'XTEC, la UAB i la UVic ja disposen del servei Eduroam

Quatre més de les institucions connectades a l'Anella ja disposen d'Eduroam, el servei que facilita la mobilitat dels investigadors i els estudiants europeus, oferint-los accés a internet a través de les xarxes, majoritàriament sense fils, de la resta d'institucions integrades en el projecte.

Així, el Centre Tecnològic de Telecomunicacions de Catalunya (CTTC) s'ha convertit en el primer centre de recerca de Catalunya que ofereix aquest servei. La xarxa sense fils del CTTC dóna cobertura completa a totes les seves instal·lacions, ubicades al Parc Mediterrani de la Tecnologia, i està preparada per oferir accés a internet tant mitjançant l'estàndard 802.1x com per mitjà de l'autenticació a través d'un portal web captiu.

La Xarxa Telemàtica Educativa de Catalunya (XTEC) també disposa del servei d'Eduroam mitjançant l'estàndard 802.1x, que de moment dóna servei a usuaris itinerants (professorat especialitzat i inspectors), a la seu del Departament d'Educació i a un institut d'educació secundària.

La Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) ha modificat la configuració de la seva xarxa sense fils per tal que també s'hi pugui accedir mitjançant l'autenticació d'Eduroam. Així, l'accés es realitza mitjançant la redirecció web a través d'un portal captiu.

Finalment, la Universitat de Vic (UVic) també s'ha incorporat a aquest servei i ofereix accés a la seva xarxa sense fils tant mitjançant 802.1x com a través d'un portal captiu. Actualment hi ha cobertura a algunes parts de l'edifici B de la Universitat i es preveu que en poc temps s'ampliï també als campus de Miramarges i de la Torre dels Frares.

Amb el CTTC, l'XTEC, la UAB i la UVic ja són deu les institucions de l'Anella Científica que ofereixen el servei de mobilitat Eduroam. ■

600 tesis de la UB al TDX

La Universitat de Barcelona (UB) ha introduït la seva tesi número 600 al servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX). Es tracta de la tesi de Elizabeth Marín, amb títol *Multiculturalismo y crítica postcolonial: la diàspora artística latinoamericana (1990-2005)*, que va ésser introduïda el 28 de març. La directora de la tesi ha estat Anna Guasch, professora del Departament d'Història de l'Art de la UB.

La tesi tracta sobre com la presència de l'art contemporani llatinoamericà en el món esdevé una diàspora que ha perdut tot el seu arrelament territorial. En aquest sentit, l'art llatinoamericà es troba convidat a legitimar la posada en escena d'unes realitats que pretenen ésser properes i al mateix temps allunyades, degut a les tensions produïdes per les propostes discursives del multiculturalisme i postcolonialisme, que veuen les cultures com oposades i no com part integrant d'una metacultura global. ■

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

COORDINACIÓ

Carme Monserrat

REDACCIÓ

Teresa Via

Elisabeth Martí

Sílvia Salgado

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

F O T O / N O T Í C I A

Programa europeu de recerca per a la separació d'actínids minoritaris de residus nuclears de llarga vida

La Comissió Europea ha donat un gran impuls a l'estudi de la separació de residus que provenen de les centrals nuclears. L'interès prové de minimitzar la quantitat de residus que ha d'ésser emmagatzemada en formacions geològiques mitjançant la separació de radionúclids que poden ser tractats amb la tecnologia de la transmutació.

La contribució del grup del Dr. Francesc Teixidor, cap del laboratori de Materials Inorgànics i Catàlisi del CSIC, en el programa europeu de recerca per a la separació d'actínids minoritaris de residus nuclears de llarga vida consisteix en la síntesi de productes basats en clústers de bor per a l'extracció d'aquests actínids i lantànids dels residus nuclears, ja que s'ha comprovat que aquests compostos de bor funcionen bé. Per tenir un millor coneixement de les molècules sintetitzades és molt important per a aquest grup fer alguns treballs de càlcul amb elles, sobretot per facilitar-los la seva identificació i caracterització. ■



Estructura optimitzada de l'anió $[8,8'\text{-}\mu\text{-}(1'',2''\text{-C}_6\text{H}_4)\text{-}1,1'\text{-m-Si}(\text{CH}_3)_2\text{-}3,3'\text{-Co}(1,2\text{-C}_2\text{B}_9\text{H}_9)_2]$

Els càlculs realitzats amb Gaussian, i concretament els de simulació d'espectres de resonància magnètica nuclear (RMN) amb el mètode GIAO, els estan ajudant a identificar els senyals d'RMN del nucli de ^{11}B en compostos nous basats en el complex metàl·lic aniònic cobalto-bis(dicarbollur) que encara no estan descrits a la bibliografia. La simulació d'espectres d'RMN els proporciona una primera orientació en l'assignació de cada pic corresponent a cada tipus d'àtom de bor present als lligands. Els càlculs teòrics els ajuden a identificar de forma ràpida quina estructura s'ha format en major proporció amb més fiabilitat que qualsevol altra tècnica experimental que no porti a la separació dels compostos. ■