

# TERAFLOP

## PADICAT comença a preservar el patrimoni digital català

ENTREVISTA

Pablo Ordejón,  
investigador de l'ICMAB

La Fundació Barcelona  
Media UPF, a l'Anella

Avenços en astrofísica

# PADICAT, la memòria d'internet

Coincidint amb la celebració de la Diada Nacional de Catalunya, el propassat 11 de setembre, s'ha posat en operació pública el servidor Patrimoni Digital de Catalunya (PADICAT), un nou dipòsit destinat a recollir i preservar tota la producció cultural, científica i de caràcter general catalana produïda en format digital.

La història de la humanitat és la història del seu llegat. Antigament, les tradicions, el saber i la cultura d'un poble es transmetia de forma oral. En el segle xv, amb l'arribada de la impremta i amb ella l'accés al coneixement escrit, la preservació del patrimoni va restar millor garantida gràcies a un nou format, el paper, que permetia la seva recopilació i preservació a les biblioteques. Avui dia, la Societat de la Informació ha posat al nostre abast una altra forma de transmissió del coneixement, l'entorn digital.

PADICAT va iniciar-se com a projecte l'any 2005 i es preveu que estigui plenament consolidat el 2009, any en què tindrà una capacitat de 30 TB i contindrà fins a 100.000 webs i 50 milions d'arxius i donarà accés en línia a bona part de la seva col·lecció. Aquest dipòsit està impulsat per la Biblioteca de Catalunya i compta amb la col·laboració del CESCO com a soci tecnològic i amb el suport de la Secretaria de Telecomunicacions Societat de la Informació.

El passat 21 de juliol es van començar a recopilar de manera automatitzada els webs susceptibles de formar part del Patrimoni Digital de Catalunya, essent els primers els de l'Ajuntament de Berga i de Palafrugell, i els dels col·legis professionals d'Aparelladors i Arquitectes Tècnics de Tarraгона i de Diplomats en Treball Social i Assistents Socials de Catalunya.

També s'han iniciat els primers acords per dipòsit voluntari amb aproximadament 100 institucions que han



volgut participar en el dipòsit. Els organismes susceptibles de formar-hi part són els anomenats agents de la producció digital (autors, editorials, universitats, col·legis professionals, administració, etc.). La cessió voluntària dels seus webs permet solucionar el problema del seu tractament i difusió, i alhora, contribueix a la creació de la memòria històrica digital de Catalunya.

## El patrimoni digital

Les tecnologies de la informació i la comunicació han facilitat que la documentació cultural i científica, a més de la resta d'informació, es presenti en format digital. Aquest fet ha suposat nombrosos avantatges: agilitat i rapidesa en la producció, facilitat d'accés, difusió arreu del món... però també inconvenients, com ara un difícil control, preservació i garantia d'accés permanent. Des de la dècada dels noranta, administracions de diversos països han promogut estratègies per solucionar aquests problemes i assegurar la compilació, el tractament, la preservació i la difusió de la producció bibliogràfica publicada a internet. Dipò-

sits com PADICAT permeten assegurar aquest accés, alhora que preserven el patrimoni digital del país.

Diversos països, a través de les seves biblioteques nacionals, han iniciat accions per assegurar la pervivència de la seva producció digital, ja que un document que no existeixi en un altre format que no sigui l'electrònic original té difícil la seva preservació. Aquest fet és conseqüència de la dificultat de localització, el gran volum i la baixa permanència dels materials publicats a internet (l'UK Web Archiving Con-

## PADICAT preserva el patrimoni digital de Catalunya

sortium fixa en 44 dies la mitjana de vida d'una pàgina web). A més, l'obsolescència del text legal espanyol en matèria de producció digital i la inexistència, en la llei de propietat intel·lectual del producte digital, d'un dret basat en el principi de còpia per a preservació dificulten encara més aquest objectiu.

Per aquest motiu, avui dia ja existeixen diversos dipòsits digitals nacionals com a garantia d'accés a llarg termini als recursos digitals generats a diferents països. Els primers dipòsits dedicats a arxivar el web nacional han estat el suec Kulturarw3 i l'australià Pandora, mentre que una ini-

ciativa de caràcter més ampli és el dipòsit d'abast internacional Internet Archive.

D'aquestes experiències prèvies s'extreuen tres models de dipòsits digitals nacionals: l'integral o exhaustiu, que persegueix la integració automàtica del web a partir de criteris infraestructurals (lingüístics, domini web, ubicació servidor...); el selectiu, dedicat a compilar el web seguint una política selectiva (una temàtica concreta, un espai geogràfic determinat...), i finalment, i fruit d'una combinació dels dos anteriors existeix el model híbrid, en què es basa PADICAT, que complementa la captura periòdica del web nacional, en aquest cas el web català, amb accions selectives (acords segons interessos temàtics), ampliant l'abast en alguns casos a determinats esdeveniments d'interès social com ara les eleccions autonòmiques del proper mes de novembre.

De manera més concreta, l'abast temàtic de PADICAT se centra en els webs sota el domini .cat, sota altres dominis (.es, .com, .net, etc.) en llen-

gua catalana, ubicats a servidors de Catalunya o altres webs que no compleixen els requisits anteriors però que estan relacionats temàticament amb Catalunya.

## El programari

El procés de funcionament de PADICAT consta de tres parts claus: la captura dels recursos, la seva organització i el seu accés permanent. Per a la captura de recursos es fa servir el captador Heritrix, que explora la xarxa i emmagatzema els webs d'acord amb uns criteris configurats prèviament. Per realitzar la indexació i com a motor de cerca s'utilitza l'eina Nutchwax, inspirada en el cercador Google. Finalment, la consulta es mostra mitjançant Wera, una interfície per a la visualització dels resultats de les cerques.

El dipòsit està desenvolupat amb programari lliure. Concretament, el captador Heritrix és el mateix programari que fa servir, des de 1996, l'Internet Archive, cosa que garanteix la seva eficiència per a aquest tipus de dipòsits.

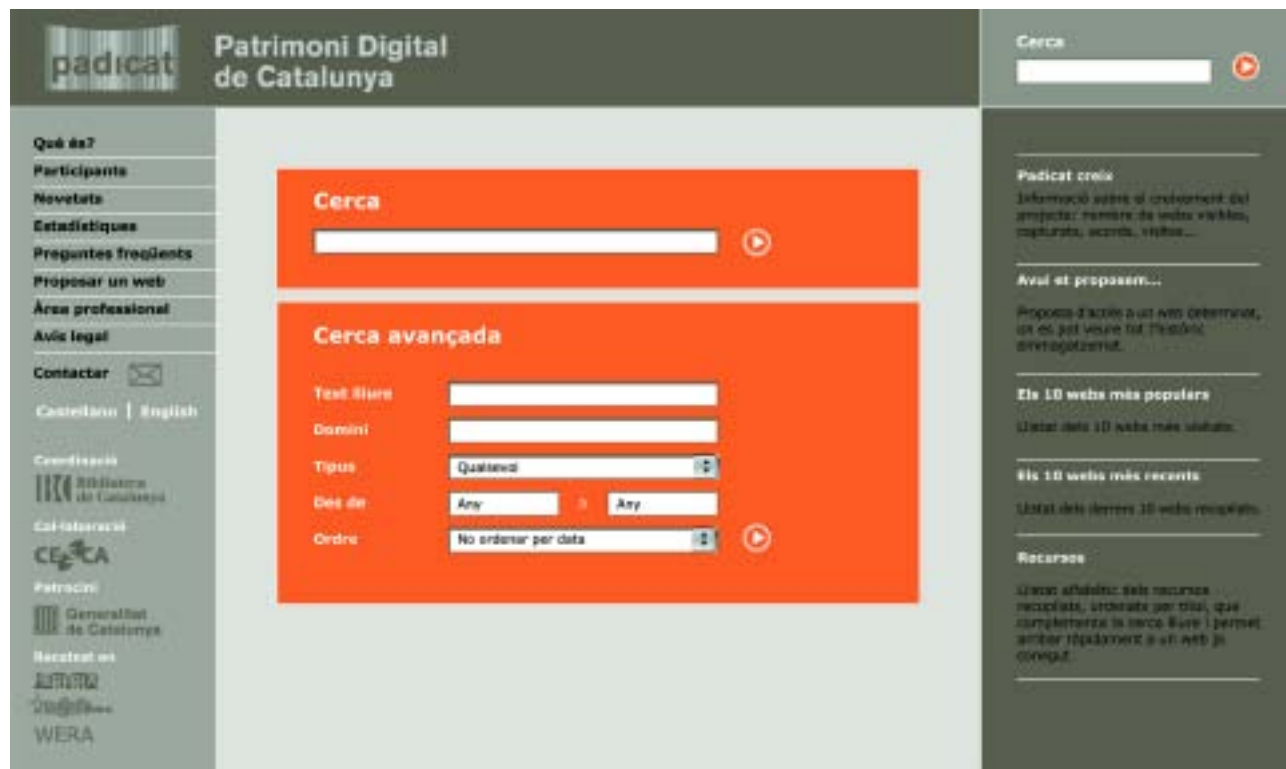
A més, la resta d'aplicacions que formen part del dipòsit estan gestionades per la mateixa institució, qui també porta a terme el seu desenvolupament.

D'altra banda, PADICAT s'allotja al clúster d'e-informació d'alta disponibilitat del CESCA, on també es troben els altres dipòsits, TDX, RACO i RECERCAT, en els que el Centre també hi participa.

Per tot això, PADICAT confecciona la bibliografia nacional més enllà dels formats tradicionals i esdevé el protagonista de la futura recerca i de la preservació i transmissió del patrimoni digital de Catalunya, entès com un sistema útil per a la societat i les institucions que la formen. ■

## Adreces d'interès

[www.padi.cat](http://www.padi.cat)  
[www.kb.se/kw3](http://www.kb.se/kw3)  
[www.archive.org](http://www.archive.org)  
[pandora.nla.gov.au](http://pandora.nla.gov.au)



Disseny de la pàgina d'inici de PADICAT.

# Formació d'estructures a l'univers

**Les actuals simulacions de l'univers a gran escala no són encara capaces de formar galàxies amb propietats realistes. Els investigadors Enrique Gaztañaga, de l'IEEC/CSIC, i Vicent Quilis, de la Universitat de València, però, han fet simulacions amb un nou codi numèric, MASCLET, que permet simular la matèria fosca freda i la hidrodinàmica del gas bariònic necessaris per entendre la formació de galàxies. MASCLET els ha permès unir per primera vegada ambdós components en una simulació de malla euleriana. Com Gaztañaga i Quilis expliquen, “la seva grandària és comparable amb l'univers observable”.**

## Galàxies i cosmologia

Tot o gairebé tot el que se sap de l'univers i de la seva evolució està relacionat d'una manera o d'una altra amb les observacions de galàxies. Malgrat això, encara no es disposa d'una teoria completa per explicar els detalls de com es formen. Com expliquen Gaztañaga i Quilis, “quelcom no encaixa en la nostra comprensió de les galàxies. No està clar si es tracta del modelatge de la física, del contingut de matèria, del context cosmològic o de la complexitat del procés”.

De la distribució i moviment de les galàxies es dedueix que només una petita fracció de la matèria de l'univers és ‘visible’, bé sigui en forma d'estrelles, gas o pols. En el model cosmològic ‘estàndard’, la major part de matèria, més del 89%, és matèria fosca freda. Menys d'un 20% del total de la matèria és bariònica (feta dels àtoms i molècules conegudes), i la resta és matèria fosca no bariònica, encara desconeguda per la física de partícules. Però la major part de l'energia de l'univers, prop d'un 75%, no està en forma de matèria, sinó d'una estranya forma d'energia, l'energia fosca. Tot això suposa un enorme repte i una oportunitat per a la física teòrica actual, amb una important sinergia amb l'astrofísica, afirmen Gaztañaga i Quilis.

## Distribució de galàxies

“Un cop conegut el desplaçament cap al vermell (*redshift*), es pot assignar una distància a cada una de les galàxies que apareixen als nostres catàlegs. El resultat és una distribució tridimensional de les galàxies al nostre voltant (vegeu figura 1). Les galàxies es distribueixen en grans

parets i filaments que intersecten en enormes cúmuls de galàxies i defineixen zones relativament buides. Aquesta és l'estructura a gran escala de l'univers i el seu estudi permet entendre la composició i l'origen de la matèria en el cosmos. A més del desplaçament cap al vermell, els espectres també revelen altres propietats de les galàxies, com ara el ritme de formació estel·lar i la metal·licitat o l'edat de les estrelles. A més, tenim mesures de flux integrat i, per tant, la lluminositat total, gràcies a la mesura de la distància, en diferents colors o intervals de longitud d'ona”, expliquen ambdós investigadors.

## Funcions de correlació

“Una forma d'obtenir informació directa d'aquests mapes consisteix en l'estudi de les funcions de correlació de dos i tres punts com a funció de la separació, el color o la lluminositat. Aquestes s'estimen de calcular la probabilitat de trobar dues o tres galàxies com a funció de la distància que les separa. La forma i l'amplitud de les funcions de correlació es poden usar per mesurar separatament el contingut de matèria fosca total i el contingut de matèria bariònica. La diferent proporció d'aquests components fa que la correlació entre dos punts disminueixi més o menys ràpidament amb l'escala”, afirmen.

Adicionalment, aquestes correlacions proporcionen una forma de calibrar distàncies en el cosmos, per exemple, a través de les anomenades oscil·lacions acústiques. Aquestes oscil·lacions corresponen a una època primitiva d'acoblament entre matèria i radiació, quan el col·lapse gravitatori de la matèria es frena per la pressió de radiació, cosa que

origina oscil·lacions acústiques que avui es poden mesurar en les escales més grans d'aquests mapes. Les funcions de correlació de tres punts es poden usar per estudiar com la llum (les galàxies que veiem) tracen la matèria fosca. Això és possible perquè es poden combinar diferents correlacions per formar quantitats que són invariables, és a dir, que no depenen del temps o dels paràmetres cosmològics.

Com expliquen ambdós investigadors, aquestes quantitats invariables es poden predir a partir de primers principis, que permeten comparar directament teoria i observacions. Qualsevol diferència es pot atribuir a un biaix, amb el qual es pot quantificar com es relacionen llum i matèria fosca. Aquesta relació, junt amb els mapes de color, permet entendre com es van formar les estrelles i galàxies (la llum) al cosmos. El tractament analític només és possible en el règim pertorbat i es necessiten les simulacions per a l'estudi del règim no lineal.

## Simulacions numèriques i formació de galàxies

Per interpretar adequadament aquestes observacions i la seva relació amb les teories de formació de galàxies cal un model per a la formació d'estructures. És necessari un tractament simplificat ja que existeix un rang dinàmic de 12 ordres de magnitud entre la grandària d'una estrella i el d'una galàxia. Per ser realistes, s'han de tenir en compte com a mínim dos components. D'una banda, la matèria fosca freda (CDM), que domina la dinàmica de l'univers a grans escales i manté unides les galàxies i, d'altra banda, matèria bariònica que dona lloc a la formació d'estrelles i que permet relacionar les simulacions amb les observacions de forma directa. També s'ha de resoldre un problema de condicions inicials amb les equacions no lineals de Boltzmann, expliquen ambdós investigadors.

En la pràctica, el càlcul es redueix a una simulació Montecarlo d'N-cossos d'aquestes equacions. La CDM no és col·lisional i pot simular-se amb relativa facilitat, però la matèria bariònica pateix efectes de pressió i escalfament i requereix un tractament hidrodinàmic. Això fa que

el càlcul sigui molt més difícil, per la qual cosa sovint s'ignora aquest component o es simula amb tècniques d'SPH (*Smooth Particle Hydrodynamics*), com és el cas del popular codi GADGET, que usa un esquema lagrangianià per al càlcul de les densitats. Existeixen uns pocs codis basats en tècniques eulerianes, com MAS-CLET, però fins avui dia no s'han usat de forma sistemàtica per resoldre el problema de la formació de galàxies a escales cosmològiques.

Han passat ja més de 20 anys des que es van fer les primeres simulacions numèriques de CDM i, malgrat hi ha hagut grans avenços, encara hi ha problemes importants a resoldre. Segons Gaztañaga i Quilis, "les simulacions no han pogut reproduir els discos amb braços espirals que s'observen en moltes galàxies. A més, les simulacions prediuen un gran nombre de satèl·lits en forma d'halos de CDM que no han estat encara observats. Addicionalment, les simulacions semblen predir uns perfils de densitat de CDM que difereixen de les observacions en les parts més centrals (menors del 10% del radi virial): les observacions indiquen que exis-

teix un nucli central de densitat constant, mentre que les simulacions semblen indicar que la densitat segueix creixent en el centre. Potser alguna d'aquestes discrepàncies sigui a conseqüència de les tècniques SPH en la simulació dels components bariònics".

Per això, aquests investigadors volen revisar aquests problemes utilitzant el codi MAS-CLET, desenvolupat per Vicent Quilis. Els fenòmens de turbulència i de xoc juguen un paper important en la formació de les galàxies i en els mecanismes d'escalfament i relaxació del gas, i no poden simular-se de forma adequada amb els codis SPH. A més, usaran MAS-CLET per estudiar els possibles efectes del gas bariònic en les prediccions de les funcions de correlació i els pics acústics mencionats.

### MAS-CLET i CESCA

"És necessari simular escales de l'ordre d' $L=1.400$  megaparsecs (Mpc), comparable amb la grandària de l'univers observable, per poder minimitzar els errors estadístics de mostreig en mesurar les funcions de correlació o les funcions de

massa d'halos grans. Típicament aquests errors es fan suficientment petits (menors del 10%) en escales 10 vegades menors que la caixa:  $L/10=100$  Mpc/h, que correspon a les escales d'interès per a la mesura dels pics acústics i els paràmetres cosmològics. Alhora, es vol tenir una massa de partícula raonablement petita per poder resoldre la grandària d'una galàxia, cosa que requereix una malla de com a mínim 1.024 partícules per costat", expliquen ambdós investigadors.

De moment, han finalitzat dues grans simulacions (de  $1.024^3$  partícules i l'equivalent a una malla fixa de  $8.192^3$  cel·les) a l'ordinador Altix 3700 del CESCA, amb diferents fraccions bariòniques i, a més, paràmetres cosmològics estàndard. "Ja que MAS-CLET és un codi de memòria compartida, les característiques de l'Altix són ideals per poder-hi córrer aquestes grans simulacions", expliquen Gaztañaga i Quilis. Els recursos computacionals que han necessitat aquestes simulacions han estat de l'ordre dels 130 GB de memòria, executant-se en vuit processadors durant uns 40 dies, i han generat un volum de dades superior a 0,5 TB per simulació. ■

**FIGURA 1.** Estructura a gran escala en el catàleg 2dFGRS. Cada punt del gràfic central és una galàxia: en els marges superior i inferior dret es mostren en gran dues galàxies típiques, una d'el·líptica (vermella) i una altra d'espiral (amb braços blaus), cada una formada per bilions d'estrelles. L'observador (la Via Làctia) se situa en el vèrtex del triangle (tocant el marge dret de la imatge), que s'estén uns 700 Mpc. Per a major claredat, es mostren només les galàxies que estan en una fi-

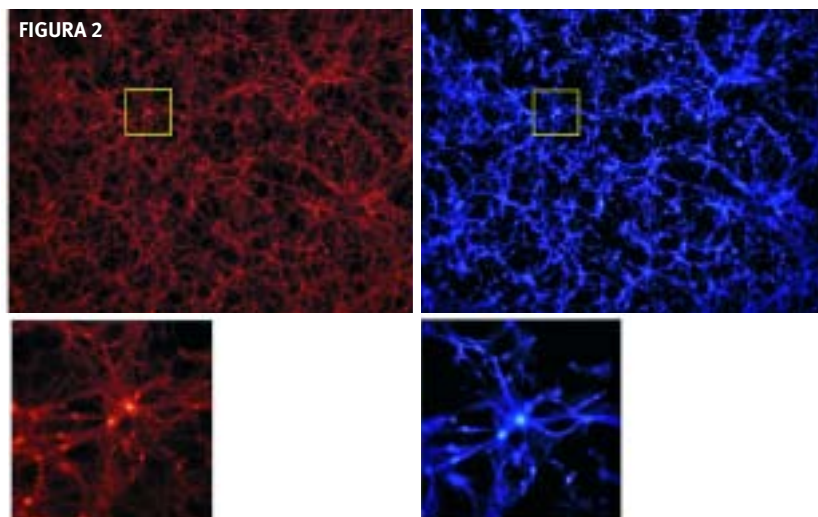
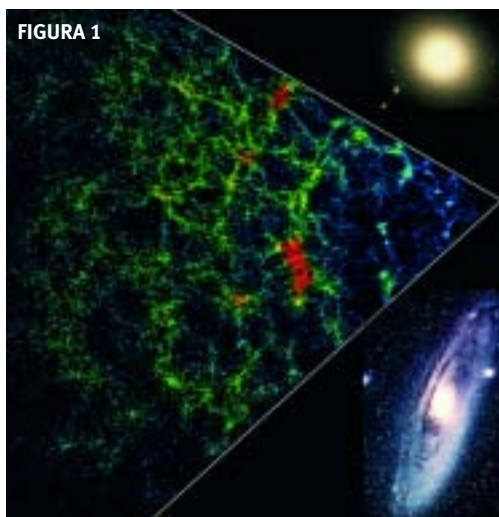
na rodanxa bidimensional d'uns 10 graus de declinació en el cel, cosa que correspon a una desena d'Mpc en la profunditat mitjana de la mostra.

En aquesta figura s'aprecia com el contrast (i per tant l'amplitud mitjana) de les estructures tendeixen a disminuir a mesura que ens allunyem de la Via Làctia. A més, les galàxies es tornen més vermelles a mesura que ens allunyem del centre. Això indica una evolució en el temps, ja que distància també és temps. Podem relacionar

l'evolució del contrast amb la quantitat total de matèria i energia fosca present en el cosmos: l'energia fosca produeix acceleració, mentre que la matèria fosca desaccelera l'expansió. Els colors de les galàxies i la seva evolució mostren la matèria estel·lar i la seva formació.

**FIGURA 2.** Densitat de matèria fosca (vermell) i gas (blau) en una secció de  $1.400 \times 1.400 \times 200$  Mpc de la simulació (el negre correspon a densitat zero mentre que l'escala de blancs arriba a so-

bre-densitats de  $\sim 10.000$  per a la matèria fosca i  $\sim 1.000$  per al gas). Per a cada component es presenta un zoom corresponent al major cúmul que apareix en la simulació (marcat per una quadrícula groga). Compareu la semblança d'aquesta imatge amb la distribució de galàxies en la figura 1. Comparada amb la densitat de CDM, la densitat del gas no és tan pronunciada en les zones de més alta densitat. Això és perquè el component bariònic té pressió que es contraresta al col·lapse gravitatori.



# Gestió electrònica de motors de combustió interna en temps real



**Sistema de inyección no cartográfico para motores de ciclo otto. Gestión de transitorios** és el títol de la tesi més consultada de la Universitat Politècnica de Catalunya (UPC) en el servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX). El seu objectiu ha estat el desenvolupament d'un sistema de gestió de la injecció seqüencial de combustible al col·lector d'admissió del motor de cicle otto. Per fer-ho, el sistema es basa en tres senyals analògics que defineixen la composició de la mescla d'aire i combustible en l'escapament, les revolucions per minut (rpm) i la posició de la papallona de gasos del motor.

La tesi, escrita per Ernesto Gutiérrez i dirigida per Jesús Andrés Álvarez del Departament de Màquines i Motors Tèrmics de la UPC, va ser llegida al gener de 2003 i introduïda al servidor TDX al febrer del mateix any. En el curs acadèmic 2005-06 ha estat la segona tesi més consultada d'entre totes les tesis introduïdes i també la segona en el rànquing acumulat de consultes per al perí-

ode 2001-05. Com comenta el rector de la UPC, Antoni Giró, "des dels seus inicis, el TDX ha estat un servei que ha donat una gran visibilitat i accés a la recerca generada a la nostra universitat, com ho demostren les més de 640 mil consultes que les nostres tesis han rebut durant el 2005, que han permès que 15 de les nostres tesis figurin entre les 30 més consultades".

D'altra banda, Gutiérrez destaca la utilitat del TDX per a la comunitat científica, "gràcies a aquest servei els investigadors podem accedir a informació útil per a la nostra recerca, informació que generarà uns resultats que alhora esdevindran la base per a futures investigacions. Aquesta continuïtat és imprescindible per a l'avenç científic". Segons Álvarez, el fet que el TDX sigui accessible a tothom i gratuït "és un exemple de cooperació per aconseguir un fi comú, com és el desenvolupament de la recerca a Catalunya i a la resta de l'Estat".

## El sistema de gestió

Per portar a terme un sistema de gestió de la injecció seqüencial de combustible en motors de cicle otto s'utilitza un senyal que permet avaluar la composició de la mescla d'aire i combustible. Aquest senyal prové d'una sonda lambda proporcional UEGO (Universal Exhaust Gas Oxygen Sensor) instal·lada al col·lector d'escapament, just abans del catalitzador, que observa en temps real el funcionament del motor gràcies a l'emissió dels gasos d'escapament.

"Aquesta nova gestió, a diferència de les contemporànies, no té cartografies prèviament gravades, sinó estratègies definides al programari de control per gestionar el motor segons el seu estat de funcionament detectat pel sistema", explica Gutiérrez. Això ha estat possible, en bona part, afegeix Álvarez, "gràcies a l'augment de la velocitat de càlcul dels processadors actuals, que han permès crear una nova estratègia de control del motor basada en càlculs en temps real".

És a dir, la sonda lambda emet senyals en temps real que són interpretats en un programari que s'encarrega de la gestió del motor. El resultat d'aquesta gestió és assolir una disminució del consum de combustible i una reducció de l'impacte ambiental, els contaminants, del motor", afegeix Gutiérrez. A més, per a Álvarez, "gràcies a aquest sistema es pot controlar de manera més directa la qualitat del motor sota règims transitoris positius, quan accelerem el motor d'un automòbil, per exemple, ja que en aquest cas, el consum i el risc d'emissió de gasos contaminants augmenta".

"La gestió interna de motors alternatius de combustió interna és un tema



Banc de proves del Laboratori de Motors Tèrmics de la UPC.

de gran interès per al sector de l'automoció. No obstant això, tots es basen en cartografies, instruccions sobre el funcionament del motor, que ja venen preestablertes", comenta Gutiérrez. "En aquesta tesi hem desenvolupat un sistema d'injecció alternatiu i novedós, que prescindeix d'aquestes cartografies alhora que esdevé totalment flexible i adaptable a qualsevol motor de combustió interna". Això i el fet que aquest estudi no sigui només teòric sinó que "s'hagi experimentat amb èxit al banc de proves de motors de la UPC" són, per al director i l'autor de la tesi, els motius del seu gran nombre de consultes.

## El resultat d'aquesta gestió és assolir una disminució del consum de combustible i una reducció de l'impacte ambiental

Com el motor no disposa de cap cartografia prèviament gravada a la unitat de control, ni cap model no lineal incorporat amb antelació, el seu funcionament es basa només en l'actuació exclusiva del llaç tancat, és a dir, en una lectura constant de la sonda lambda. En aquest sistema d'injecció no cartogràfic, els transitoris són menys contaminants que els cartogràfics convencionals. Això es deu al fet que la injecció no s'incrementa de cop, sinó en una magnitud prèviament fixada en funció del règim de voltes i càrrega del motor.

Aquesta gestió no cartogràfica és especialment útil en motors que no facin servir un mateix combustible de forma regular, com ara alguns motors estacionaris, motors preparats per utilitzar diferents tipus de combustibles gasosos, etc. "En aquests casos, es fa difícil establir cartografies, ja que cada canvi de combustible suposaria disposar de noves cartografies. La millor solució es troba en gestionar el motor directament a partir dels resultats de la combustió, definint les estratègies en funció de l'estat d'operació del motor", comenta Gutiérrez.

Per això, és important controlar la mescla d'aire-combustible, mesurant acuradament les quantitats, ja que amb mesclades excessivament pobres es registra un augment del consum específic, incrementant-se de forma notable la temperatura dels gasos d'escapament. Amb mesclades molt riques es registra un augment en l'emissió de contaminants, principalment hidrocarburs sense cremar i monòxid de carboni.

Per acabar, cal destacar que el controlador desenvolupat en aquesta tesi,

de tipus PI amb sensor UEGO, no només actua en tots els estats del motor, inclosos els transitoris negatius (la frenada d'un automòbil, per exemple), sinó que la seva actuació és variable segons la magnitud del transitori i independent de la seva actuació integral, que també pot variar. L'actuació proporcional del controladors només té lloc durant els transitoris, després comença l'actuació integral fins a l'estabilització al punt d'equilibri establert per la sonda lambda de consigna del sistema. ■



Jesús Andrés Álvarez, director de la tesi, a l'esquerra i Ernesto Gutiérrez, l'autor, a la dreta.

### Jesús Andrés Álvarez Flórez

Doctor en Enginyeria Industrial per la UPC i professor titular d'universitat. Des de 1990 és responsable del Laboratori de Motors Tèrmics del Departament de Màquines i Motors Tèrmics de l'Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Industrial de Barcelona (ETSEIB) de la UPC. Actualment és director del Centre de Recerca de Motors i Instal·lacions Tèrmiques (CREMIT) de la UPC. És coordinador de les assignatures Enginyeria i màquines tèrmiques i Ampliació de motors tèrmics de 4t i 5è curs de les llicenciatures d'Enginyeria Industrial i Enginyeria Química de l'ETSEIB.

### Ernesto Gutiérrez González

Doctor en Enginyeria Industrial per la UPC. Actualment és professor col·laborador del Laboratori de Motors Tèrmics de l'ETSEIB de les assignatures Enginyeria i màquines tèrmiques i Ampliació de motors tèrmics de 4t i 5è curs de les carreres d'Enginyeria Industrial i Enginyeria Química de l'ETSEIB. També és investigador del Centre de Recerca de Motors i Instal·lacions Tèrmiques (CREMIT) de la UPC. La seva principal línia de recerca és la gestió electrònica de motors de la qual és autor de diversos treballs i publicacions científiques.

# La popularitat del pensament de Sant Tomàs d'Aquino al TDX

UNIVERSITAT  
DE VALÈNCIA

**Durant els 5 anys del funcionament del servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) s'ha pogut constatar que si bé en els seus inicis les tesis més consultades eren majoritàriament d'àrees tècniques (ciències pures i aplicades),**

**en els dos últims anys, les tesis d'àrees socials i humanistes han cobrat un paper important, quasi igualant en nombre de consultes a les tècniques. Prova d'aquest fet és la tesi humanista *Ética y razón universal en el pensamiento de Santo Tomás de Aquino* que ha estat la més consultada de la Universitat de València (UV) el 2005.**

Aquesta tesi, escrita per Aquilino Cayuela i dirigida per Jesús Conill del Departament de Filosofia del Dret, Moral i Política de la UV, ha estat la tercera més consultada del TDX durant el passat curs acadèmic i la vint-i-sisena del rànquing acumulat de consultes des de l'inici del servei el 2001. Com explica el rector de la UV, Francisco Tomás, “el conjunt dels investigadors de la Universitat de València treballen intensament en els camps científics més amplis. La tecnologia és un bon mitjà per afavorir la recerca universitària entre els investigadors de les diferents àrees. Aquesta tesi és un bon exemple de la difusió de les contribucions doctorals”.

Per a Conill, “el TDX permet donar a conèixer de forma ràpida i eficaç els resultats de la recerca universitària. Per a l'àmbit humanista aquest fet és important, ja que cal fomentar la investigació humanista de qualitat, difondre-la i promocionar-la, per evitar el perjudici dels que pensen que no val res. Fent-la accessible aconseguim que prengui la importància que mereix”.

El fet que les consultes dirigides a tesis humanistes, com ara aquesta, vagin augmentant, fa constatar de forma positiva la penetració i el progrés de la Societat de la Informació en àmbits no científics i on el coneixement de la tecnologia no esdevé la base principal de la recerca. A més, també és un indicador clar de l'ús creixent del TDX per les



diverses àrees de coneixement. Aquilino Cayuela, autor de la tesi, ha pogut constatar aquest fet: “com a investigador he notat un ressorgiment de l'interès per aquestes àrees, particularment per la filosofia. A més, serveis com el TDX, estan ajudant perquè això sigui possible”.

## La providència

La tesi pretén demostrar com la providència divina, entesa com la cura que té Déu dels homes i del món, constitueix una resposta vàlida i esperançadora dins el pensament contemporani, el qual està marcat per l'escepticisme i el desànim. A partir d'aquí, “el concepte cristià de providèn-

cia divina aporta un sentit crucial per al desenvolupament del pensament d'occident, particularment pel desplegament de la filosofia moral, inclosa la filosofia moral moderna”, comenta Cayuela.

El treball s'inicia amb l'anàlisi del concepte de providència des de l'origen del pensament humà fins l'època moderna, per acabar centrant-se en l'estudi de Sant Tomàs d'Aquino i en la providència entesa a la manera cristiana. “Vaig decidir escriure sobre Tomàs d'Aquino perquè és el filòsof i el teòleg més representatiu del pensament cristià en el seu vessant catòlic. A més, avui dia desperta un gran interès, no només en el pensament catòlic sinó també en tota aquesta filosofia actual que intenta trobar en l'aristotelisme i el tomisme la regeneració d'una teoria inarticulada i dissolta”, explica l'autor.

A més, segons Conill, “la tesi s'enfronta al pensament de Sant Tomàs no



només per mitjà de fórmules ja conegudes sinó des del context del pensament actual. D'altra banda, Aquino és un clàssic de les relacions entre raó i fe i aporta un model de raó universal que pot entreveure's amb altres formes modernes d'universalisme”.

Sant Tomàs va ésser el filòsof escolàstic que va aconseguir la millor síntesi medieval entre raó i fe o entre filosofia i teologia, ja que les seves obres són eminentment teològiques però a diferència d'altres escolàstics, concedeix a la raó la seva pròpia autonomia en tots aquells aspectes que no es deguin a la revelació. Per expressar aquesta autonomia de la



raó, Aquino recorre a la filosofia aristotèlica, ja que és la font acreditada de la lògica que s'ha d'utilitzar per trobar la veritat i fonamentar racionalment la teologia. L'obra de Tomàs d'Aquino pot descriure's, doncs, com un esforç de recuperació de la doctrina aristotèlica per demostrar la veritat de la fe cristiana.

Per realitzar aquest estudi, la tesi continua amb una exposició del llibre de Sant Tomàs titulat *Suma contra gentils*, ja que és el més representatiu i on es mostra la intel·ligibilitat de la fe respec-

## Les tesis d'àrees socials i humanistes cobren un paper important al TDX, quasi igualant en nombre de consultes a les tècniques

te altres tradicions rivals. “Vaig decidir començar la tesi comentant aquesta obra perquè em permetia realitzar un treball històric però sense renunciar a incorporar molts d'aquests plantejaments a la vida moderna”, afegeix Cayuela. A més, per a l'autor, aquesta tesi es diferencia d'altres treballs similars en el fet que “s'ha intentat confrontar el pensament d'Aquino amb problemes contemporanis, sense traïr la seva doctrina, tot buscant la validesa del seu pensament respecte a l'actual”.

La providència de Sant Tomàs també s'analitza amb el comentari d'un altre dels seus llibres, *Summa Teològica*, una continuació de *Suma contra gentils* que exemplifica l'estil escolàstic en l'estructura dels seus articles. Aquest llibre, escrit durant els últims anys de la vida d'Aquino, esdevé un tractat medieval de teologia concebut com un manual per a l'educació teològica dels principiants que ajuda a l'autor a demostrar que la realitat d'un Déu provident no implica determinació.

### El pensament tomista

“L'ètica tomista té avui dia una gran vigència i interès, i són molts els estudiants que busquen una visió moral i adequada que sigui capaç d'articular i definir una moralitat conforme amb l'ho-

me d'avui i amb els reptes que se li presenten”, destaca Cayuela. Per tot això, “crec que aquest és un dels motius principals de l'elevat nombre de consultes d'aquesta tesi a la UV. A més, no hem d'oblidar que per als filòsofs, els temes relacionats amb la providència, el destí o l'atzar permeten aportar diverses vies de significat al raonament humà, tal com reclamen alguns autors actuals tan influents com Charles Taylor”.

“El pensament d'Aquino ha estat i estarà sempre present dins el pensament catòlic actual, sobretot per l'impuls que l'anterior pontífex, Joan Pau II, va donar-li amb la seva encíclica *Fides et Ratio*”. En resum, “Aquino ha estat un filòsof amb un gran potencial intel·lectual que ha confiat en la raó humana i al mateix temps en la fermesa de la seva fe en un Déu creador i provident”, conclou Cayuela. ■



Aquilino Cayuela, autor de la tesi, a l'esquerra i Jesús Conill, el director, a la dreta.

### Jesús Conill Sancho

Doctor en Filosofia i catedràtic de Filosofia Moral a la Universitat de València. Ha estat becar del DAAD (Servei Alemany d'Intercanvi Acadèmic) a Munic i investigador a les universitats de Bonn, Frankfurt, St. Gallen i Notre Dame. Entre les seves publicacions destaquen *El tiempo en la filosofía de Aristóteles* (1981), *El crepúsculo de la metafísica* (1988), *El enigma del animal fantástico* (1991), *El poder de la mentira* (1997) i *Ética hermenéutica* (2006).

### Aquilino Cayuela Cayuela

Llicenciat en Humanitats per la Facultat de Teologia de la Universitat de València, llicenciat en Sagrada Teologia pel Pontifici Institut Juan Pablo II, de la Pontificia Universitat Lateranense de Roma i doctor en Filosofia per la UV. Actualment és professor de Bioètica i Filosofia Moral a la Universidad Cardenal Herrera CEU de València. Ha estat professor d'Ètica a la secció espanyola del Pontifici Institut Juan Pablo II a Roma. Ha publicat els llibres *La Providencia de Dios en el Pensamiento de Santo Tomás de Aquino* (2000) i *Ética, bio-ética y desarrollo: El hombre como ser dependiente* (2004) i ha coordinat l'edició de *Vulnerables: pensar la debilidad humana* (2005). A més disposa de nombrosos articles sobre ètica fonamental i aplicada publicats a diverses revistes de prestigi.



ENTREVISTA A PABLO ORDEJÓN, PROFESSOR D'INVESTIGACIÓ A L'ICMAB

## En el 10è aniversari de SIESTA, més de 500 articles avalen el seu èxit

**A**ra fa 10 anys, un equip d'investigadors integrat per José M. Soler i Emilio Artacho, aleshores tot dos a la Universidad Autónoma de Madrid, i Pablo Ordejón, que feia el *postdoc* a la University of Illinois, EUA, van decidir reunir en un programa comú un compendi d'idees, mètodes i desenvolupaments propis. Així començava SIESTA (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms), un mètode i un programa que permet realitzar simulacions electròniques amb milers d'àtoms. La seva eficiència estalvia recursos computacionals i, per tant, permet treballar amb sistemes més grans, o bé, realitzar càlculs més ràpid.

Avui dia, hi ha un miler de grups que disposen de la llicència de SIESTA, però com Pablo Ordejón explica, el seu èxit l'ava-

len sobretot els més de 500 articles que s'han publicat en revistes de renom usant aquest programa que, per a la comunitat acadèmica, es distribueix de forma gratuïta. Si bé la participació en l'equip de desenvolupadors de SIESTA és una de les tasques destacades en la seva trajectòria professional, Ordejón treballa en l'estudi de propietats fonamentals de materials a un nivell atòmic. Actualment, els seus interessos van des dels defectes en semiconductors, els mecanismes microscòpics del creixement de capes fines o el transport electrònic en nanodispositius. Precisament, el seu treball en nanodispositius el portarà cap al futur centre mixt que el CSIC i l'Institut Català de Nanotecnologia crearan conjuntament.

**Fa 10 anys es va publicar el primer treball de SIESTA. Quines són les característiques que l'han fet tan popular entre la comunitat investigadora?**

SIESTA resol problemes de mecànica quàntica, és a dir, resol les equacions Schrödinger entre els electrons i calcula les forces sobre els àtoms. Permet determinar, per exemple, quina és l'estructura més estable d'un cristall amb una certa composició química, què li succeeix a un material quan l'escalfes o si el sotmetes a una pressió, i tot fet dinàmicament.

Aquest no és l'únic programa que permet veure l'evolució dinàmica del comportament dels àtoms en el sistema, però sí que és un dels que ho fa d'una forma més eficient, ja que amb menys recursos de càlcul es pot treballar amb sistemes més grans, ja que SIESTA utilitza mètodes d'ordre  $n$  o d'escalament lineal.

Els càlculs de mecànica quàntica creixen considerablement amb la grandària del sistema. Així, si es duplica el sistema el cost del càlcul es multiplica, almenys, per vuit. SIESTA, però, està dis-

senyat perquè escali linealment, és a dir, doblant la grandària del sistema només es doblen el temps de CPU i la memòria necessaris (o bé el nombre de processadors en un càlcul paral·lel). Això és una de les claus de l'èxit del mètode.

SIESTA simplifica una mica el problema electrònic per fer-lo més ràpid. En química quàntica típicament s'utilitzen funcions gaussianes per descriure la base del càlcul, el sistema dels electrons. En canvi, SIESTA utilitza funcions que són molt més eficients que les gaussianes, ja

que a partir d'un punt són zero, i per tant es redueix la grandària del càlcul. Aquesta és una de les idees fonamentals de SIESTA.

### **Quins han estat els moments clau al llarg dels deu anys de SIESTA?**

Els inicis van ser essencials. Érem molt joves, sobretot Artacho i jo, i encara no teníem plaça fixa. Estàvem acabant el *post-doc* i, malgrat teníem supervisors de projecte, disposàvem de prou llibertat per treballar en el desenvolupament de SIESTA. Soler ja era professor titular i disposava també de suficient flexibilitat per poder treballar-hi. Va ser el moment adequat per a tots tres, ja que teníem temps, idees i la possibilitat de portar-les a terme.

Així, l'any 1996, vam publicar el primer article de SIESTA i, des del principi, vam obtenir molt bons resultats. Un any abans, havíem començat a recollir en un programa diferents mètodes i parts de programes que havíem desenvolupat individualment, creant així la primera versió d'un programa basat en mòduls en poc més de cinc mesos.

Un altre moment molt important va ser la meua arribada a Barcelona, l'any 1999, quan em vaig incorporar al CSIC. Aleshores ja havien entrat a l'equip de desenvolupadors de SIESTA diferents investigadors, com Alberto García, que actualment treballa a l'ICMAB, Daniel Sánchez-Portal i Javier Junquera, en aquell moment estudiants de doctorat i avui dia a la Universidad del País Vasco i de Cantàbria, respectivament. SIESTA era un paquet molt eficient però molt bàsic i gràcies a aquestes incorporacions, vam poder-hi afegir moltes possibilitats noves de càlculs, com ara dinàmiques a pressió o temperatura constant.

Però, coincidint amb la meua arribada al CSIC, va ser clau l'entrada al projecte de Julian Gale, que aleshores estava a l'Imperial College (Londres) i que ara és investigador a la Curtin University of Technology (Austràlia). Gràcies a Gale avui dia tenim una versió paral·lela del programa, ja que es va encarregar de tota la seva paral·lelització, el va traduir a Fortran 90, i li va incorporar memòria dinàmica, entre altres. En aquesta línia, un altre moment important és la col·laboració ara amb el BSC, que s'encarregarà de transformar SIESTA en un programa massiva-ment paral·lel.

### **Hi ha recerques fetes usant SIESTA que l'hagin satisfet particularment?**

Amb SIESTA s'han publicat un parell d'articles a *Nature* i dos més a *Science*, molts articles en el *Physical Review Letters*, la millor revista en física de l'estat sòlid, i també en el *Journal of American Chemical Society*, entre altres. Un dels treballs que més m'ha agradat va ser publicat l'any 2000 a la revista *Science* pel grup d'Steven G. Louie, de la University of California at Berkeley.

El grup de Louie volia conèixer com canvien les propietats de transport del corrent en un nanotub quan està en contacte mecànic amb un altre nanotub, que també té corrent, i va comprovar que es com-

## **“La llibertat de recerca que vam tenir en la nostra joventut va ser essencial en els inicis de SIESTA”**

porten com dues mànegues, que al principi es repel·leixen i s'abomben i al final s'encallen. En aquest càlcul, cal tenir en compte dues seccions curtes de nanotub, equivalents a un miler d'àtoms, a més de la superfície en la qual estan dipositats. Així doncs, resulten càlculs enormement grans que es beneficien molt de l'ús de SIESTA.

Altres càlculs més recents són del grup de Pedro Miguel Etxenike, catedràtic de la Universidad del País Vasco i premi Príncepe de Asturias l'any 1998, i amb el qual treballa un dels desenvolupadors de SIESTA, Daniel Sánchez-Portal. Fa poc més d'un any van publicar l'article *Direct observation of electron dynamics in the attosecond domain* a *Nature* on, en col·laboració amb els experimentals, estudiaven transferències electròniques entre àtoms i superfícies en temps molt curts. El temps típic d'una transferència electrònica és de picosegons ( $10^{-15}$  segons), mentre que usant SIESTA van poder estudiar transferències molt més curtes, de l'ordre de l'attosegon ( $10^{-18}$  segons). Aquest treball va tenir molta repercussió, fins i tot en premsa d'àmbit general.

Dintre del nostre grup, una de les primeres aplicacions importants de SIESTA va ser el primer càlcul *ab initio* d'una cadena completa d'ADN. Vam usar una volta d'hèlix, que conté de l'ordre de 700 àtoms, i que es repetia periòdicament. Vam estar de sort perquè al mateix temps que fèiem aquests càlculs, el grup experimen-

tal d'Arturo Baró, de la Universidad Autónoma de Madrid, estava mesurant el transport electrònic en ADN i volia saber quant corrent passaria aplicant una diferència de potencial entre els extrems d'una molècula d'ADN. La idea era usar l'ADN com a nanocable, però els resultats obtinguts fins aleshores per diferents grups empírics diferien, ja que en ocasions l'ADN semblava un molt bon conductor i d'altres no.

Gràcies als càlculs realitzats vam poder proporcionar una interpretació d'aquests experiments. En funció de com era la seqüència de les bases, l'ADN era més o menys conductor. Així, si la seqüència era molt regular, esdevenia un bon conductor, mentre que si era desordenada resultava molt difícil que conduís. Aquests resultats van ser publicats al *Physical Review Letters* l'any 2000 i van tenir molta repercussió.

### **A banda del desenvolupament de SIESTA, quins són els seus interessos en recerca?**

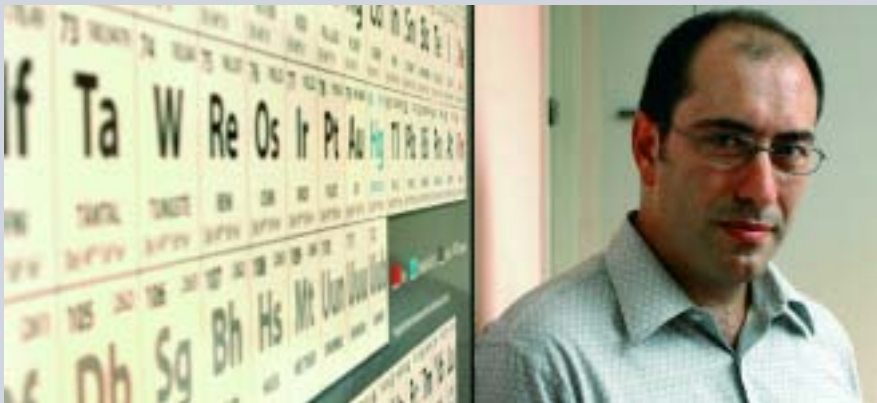
M'interessen diferents aspectes de física i de química de sistemes concrets. Gairebé tota la meua recerca és de tipus *ab initio* i aplicacions de SIESTA, però els tipus de sistemes en què treballa són molt variats. El transport electrònic en sistemes nanomètrics és un dels temes que ara mateix més m'interessa. Si es vol veure com flueix el corrent en un tros de cable d'un cable no cal tenir en compte la mecànica quàntica, perquè amb la clàssica es pot descriure el desplaçament dels electrons només usant certa informació quàntica. Com les dimensions del conductor són prou grans, els electrons no veuen que és un conductor finit i es comporten com a clàssics. Per tant, tots els codis que hi ha de simulació de dispositius electrònics en microelectrònica, transistors, circuits... estan basats en models clàssics de transport.

Però quan tractem amb ADN, les dimensions són al voltant de 30 àngstroms, una grandària en la qual l'electró està molt confinat i es comporta com una partícula quàntica. Per tant, en sistemes com l'ADN, un nanotub o un fil metàl·lic amb una grandària monoatòmica, és imprescindible treballar amb enginyeria quàntica per veure què li passa a un electró quan se li aplica un camp elèctric i se l'intenta moure.

En els darrers anys hem estès la teoria bàsica de SIESTA, del funcional de la densitat (DFT), per tractar sistemes en els quals hi ha un camp extern que mou els electrons. DFT és aplicable a sistemes en equilibri, però quan es treballa en trans-

## Pablo Ordejón

Nascut a Madrid l'any 1964, Pablo Ordejón va estudiar Física a la Universidad Autónoma de Madrid, on es va doctorar en Ciència l'any 1987. Després d'una estada postdoctoral de tres anys a la University of Illinois, es va integrar com a professor assistent a la Universidad de Oviedo. L'any 1999, va obtenir una plaça d'investigador a l'ICMAB-CSIC, on actualment és professor d'investigació. La seva recerca se centra en el desenvolupament de mètodes eficients per realitzar càlculs d'estructura electrònica en sistemes grans i complexos, i contribueix en el desenvolupament de tècniques per fer simulacions atomístiques a gran escala. També ha participat en l'estudi de propietats fonamentals de materials a un nivell atomístic. Els seus interessos actuals inclouen, entre altres, defectes en semiconductors, transport electrònic en nanodispositius i els mecanismes microscòpics del creixement de capes fines. Manté col·laboracions freqüentment amb laboratoris industrial per a la simulació de processos en materials a nivell atòmic. Ordejón ha estat editor regional de *physica status solidi* i membre de l'equip editor de *physica status solidi (B)* des d'octubre de 2004. Des de 2004 és també adjunt de l'àrea de física de l'ANEP.



port es tracta de sistemes fora d'equilibri. Darrerament hem desenvolupat mètodes per a aquest tipus de sistemes, molt útils per donar resposta als experimentals que, malgrat són capaços de crear dispositius impensables fa 20 anys, no poden conèixer de forma empírica el perquè d'un resultat.

Relacionat amb aquest tipus de recerca, també treballo en microscòpia d'efecte túnel (STM), que permet observar l'estructura atòmica d'una superfície, mitjançant la mesura del corrent elèctric que es genera en aplicar un voltatge entre la punta del microscopi i la superfície. Amb aquestes tècniques intentem correlacionar el que mesuren els experimentals amb estructures model.

Tant transport com STM són molt importants en la meua recerca i seran centrals en la feina que desenvoluparé al centre mixt que l'Institut Català de Nanotecnologia i el CSIC crearan conjuntament. En aquest centre hi haurà grups d'experimentals d'alt nivell, com el d'Adrian Bachtold, que treballa en transport de nanotubs, amb els quals col·laboraré per donar resposta als seus experiments.

### Quines són les principals aplicacions d'aquesta recerca?

En el grup hem tingut diferents contractes, alguns dels quals amb MATGAS, una associació d'interessos econòmics constituïda pel CSIC, la UAB i Carburos Metàlics, que pertany al grup multinacional Air Products. Amb MATGAS, per exemple, hem treballat en deposició de coure sobre metalls com ara tàntal, tuscè o titani.

La indústria microelectrònica usa el coure per fer els contactes en els circuits electrònics, ja que és molt bon conductor. Ara bé, dipositat directament sobre el silici, material del qual estan fets els dispositius electrònics, el coure es filtra i fa malbé el dispositiu. Per això, es fa créixer sobre el silici una capa d'un altre metall sobre el qual es diposita el coure.

Concretament, amb MATGAS, hem dut a terme un treball amb una superfície de tàntal. Fent-hi un tractament amb nitrogen, es crea una pel·lícula de nitrur de tàntal sobre la qual el coure s'adhereix molt bé, però que és poc reactiva a les molècules orgàniques que acompanyen el coure i que cal evitar que s'enganxin a la superfície. Aquesta recerca ha generat un parell

de patents i, amb MATGAS, tenim un projecte comú des de fa més de quatre anys.

També amb MATGAS estem negociant per col·laborar en un projecte en catàlisi per emmagatzemar hidrogen en molècules que poden ser usades, per exemple, com a combustible en vehicles. L'hidrogen és molt perillós en fase gas perquè és explosiu, però hi ha certes molècules, desenvolupades pels laboratoris de MATGAS als EUA, que l'emmagatzemen. Cal que aquestes molècules puguin arribar fins al motor de forma segura, on han d'alliberar l'hidrogen. Per a això, és necessari saber en quin tipus de superfícies l'hidrogen s'allibera fàcilment.

També hem participat en diferents projectes europeus, com ara per tal d'assemblar tubs en superfícies per fer circuits. La utilització de nanotubs està molt limitada perquè no hi ha manera de construirlos d'una forma massiva i barata, el cost d'un gram de nanotub és deu vegades més car que l'or. Per tant, cal optimitzar els paràmetres del seu creixement. En aquest projecte, que va usar els supercomputadors del CESCA durant setmanes, vam intentar contribuir a conèixer el procés atòmic pel qual els tubs creixen.

A més, SIESTA interessa molt a les indústries que fan simulació química, que encara és més costosa comparada amb altres tipus de simulacions, com les que fan les indústries farmacèutiques, basades en potencials clàssics i molt més ràpides. Actualment, hi ha una desena d'empreses que utilitzen SIESTA, sobretot de microelectrònica com ara Motorola, Samsung, Air Products i Sumitomo Chemical, i també alguna companyia que fa càlculs de materials per a catàlisi de reaccions en petroli.

### Com ha ajudat l'equipament de supercomputació del CESCA en la seva activitat investigadora?

El CESCA ha estat essencial, ja que des que vaig incorporar-me al CSIC l'any 1999 n'he estat usuari i el nostre grup hi ha dut a terme bona part dels càlculs. Darrerament hi hem utilitzat 16 processadors en paral·lel, que frega el límit de la paral·lelització de SIESTA ara mateix. Mentre estava a la Universidad de Oviedo, però, ja havia tingut relació amb el Centre. Gràcies als contactes que tenia amb usuaris com Enric Canadell, que va portar-me a Barcelona, i Pere Alemany, vam organitzar el 1998 al CESCA un dels primers cursos de SIESTA. ■

# La Fundació Barcelona Media UPF es connecta a l'Anella

**La Fundació Barcelona Media Universitat Pompeu Fabra ha passat d'estar connectada indirectament a l'Anella Científica a través de la UPF a disposar d'un punt d'accés gigant propi de 10 Mbps. La connexió, que s'ha dut a terme el 20 de juliol, servirà per "permetre als nostres grups de recerca disposar d'una gran capacitat de transmissió de dades amb totes les altres institucions connectades, així com una millora en l'intercanvi d'informació i en el desenvolupament d'aplicacions de banda ampla, les quals considerem essencials", afirma el seu director, Vicente López.**

La Fundació Barcelona Media UPF té com a missió millorar la competitivitat de les empreses en l'àmbit de la comunicació, atenent tant a la tecnologia com als continguts. En aquest sentit, la Fundació promou la generació i desenvolupament de tecnologia; la recerca i creativitat inherents als processos innovadors; la transferència a les empreses de la recerca generada; la divulgació, exhibició i difusió dels resultats a la societat en general i la formació de manera integrada en tots els àmbits de la comunicació.

La Fundació, per mitjà del seu patronat, gestiona el Centre d'Innovació Barcelona Media (CIBM), una iniciativa pionera de la Generalitat de Catalunya, l'Ajun-

nològics del Centre d'Innovació i Desenvolupament Empresarial de la Generalitat de Catalunya.

Actualment el CIBM es troba a l'Edifici Ocata de la UPF a l'espera d'ésser traslladat al futur Parc Barcelona Media situat al districte 22@. Aquest emplaçament, que es té previst inaugurar a mitjan 2007, esdevindrà una plataforma d'equipaments i serveis per a l'audiovisual i la comunicació que acollirà, a més del CIBM, el nou Campus de la Comunicació de la UPF i altres empreses del sector audiovisual.

Dins el Parc Barcelona Media, el CIBM pretén ser un punt de neutralitat activa per a la innovació, on conflueixen l'àmbit

acadèmic, l'industrial i l'administració. Per a l'àmbit universitari o acadèmic, el CIBM esdevé un model de transferència per al sector industrial i per a altres universitats i centres de recerca. Des de la indústria, un centre tecnològic molt útil en un sector com l'audiovisual que a Catalunya té un gran dinamisme i en el que es necessita innovar constantment, i des de l'administració, un model d'interlocució amb el sector industrial i a través del qual canalitzar polítiques d'R+D+i.

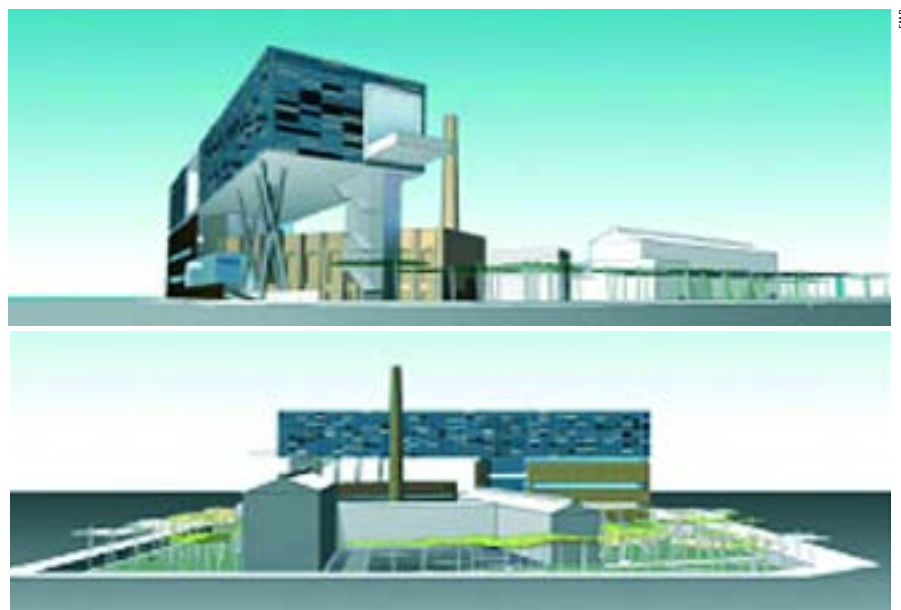
"Precisament, aquestes línies d'R+D+i necessiten per a la seva activitat disposar de la millor connectivitat possible degut a les seves relacions amb l'exterior. Per a aquest propòsit l'Anella Científica és la millor solució", comenta López.

A més, el CIBM s'encarrega de donar suport a totes les tasques relacionades amb el sector de la comunicació com l'animació, el cinema, les editorials, els jocs, la música i la discografia, la premsa, la ràdio, els parcs temàtics, la publicitat o la televisió.

Una de les activitats principals del CIBM és la promoció, el desenvolupament i l'execució de projectes de recerca i innovació per a empreses, orientant els clients per determinar les seves necessitats estratègiques i la viabilitat dels seus objectius. A més, ofereix el seu suport en la preparació i gestió de projectes amb subvenció pública per a empreses i grups de recerca universitaris i també promou, assessora i dona suport a projectes europeus. ■

**López: "L'Anella ens permetrà disposar d'una gran capacitat de transmissió de dades amb totes les altres institucions connectades"**

tament de Barcelona, la Universitat Pompeu Fabra (UPF) i catorze empreses privades que pretén impulsar la competitivitat del sector audiovisual. El CIBM és el primer centre de l'Estat que dona servei exclusiu a totes les àrees que integren la indústria dels mitjans de comunicació i forma part de la Xarxa de Centres Tec-



Maqueta de la futura seu del Centre d'Innovació Barcelona Media.

## Ampliació de l'EVA

El subsistema de discos Enterprise Virtual Array V.2 (EVA) del CES-CA ha augmentat la seva capacitat amb 30 discos de 146 GB i una nova safata de discos. D'aquesta manera es disposa de més espai d'emmagatzematge per a les àrees de treball *dades*, *cescascratch*, *TDX* i altres àrees internes. Concretament, l'àrea *dades*, que permet als usuaris emmagatzemar grans volums de dades de manera indefinida, ha passat de 75 GB a 0,5 TB. L'àrea *cescascratch*, que permet guardar temporalment resultats intermedis entre càlculs, ha augmentat de 400 GB a 0,5 TB i *TDX* ha incrementat la seva capacitat de 78 a 300 GB.



L'EVA ha estat ampliat amb 30 discos.

## Noves revistes a RACO

La Universitat Politècnica de Catalunya ha introduït una nova revista al servidor de Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO). Es tracta de *Papers de la Càtedra Unesco*, una publicació que recull estudis, informes, treballs de recerca, tesines, etc., relacionats amb les activitats de docència i recerca que es desenvolupen a aquesta Càtedra.

D'altra banda, l'Institut Ramon Mun-taner hi ha incorporat dues publica-

cions més, *Miscel·lània d'estudis santjustencs* del Centre d'Estudis Santjustencs i *Terme*, del Centre d'Estudis Històrics de Terrassa. La primera és un recull històric que pretén donar a conèixer la realitat sociocultural de Sant Just Desvern i la segona té per objectiu estudiar el desenvolupament històric de Terrassa i la seva comarca.

Amb aquestes darreres incorporacions, el dipòsit RACO ja disposa de 105 revistes consultables.

## Noves versions de D\_POLY

DL\_POLY\_2 ha estat actualitzat a la versió 2.16 i es troba disponible a les màquines CP4000, Altix, GS1280 i HPC320. Entre les noves característiques cal destacar la presència de nous algorismes d'integració i la millora dels ja presents en antigues versions. També s'han afegit nous models, com ara el  *Tersoff many body potencial* o el  *Relaxed shell* per a polarització. El codi DL\_MULTI es desenvolupa ara per separat i no es troba present en l'actual versió. Per això, i si es volen obtenir les seves funcionalitats, s'haurà de fer servir

l'antiga versió 2.15. D'altra banda, DL\_POLY\_3 ha estat actualitzat a la versió 3.06. La principal novetat és que permet escollir el tipus d'integració a l'hora de realitzar el càlcul (*Velocity Verlet* o *Leapfrog Verlet*). També destaca un augment de la velocitat respecte a versions anteriors, com a conseqüència d'una millora tant dels algorismes de treball com de la gestió de memòria. DL\_POLY és un paquet de simulació de dinàmica molecular de propòsit general desenvolupat al Daresbury Laboratory per W. Smith i T.R. Forester.

## Jaguar i Gauss disponibles

S'ha instal·lat l'aplicació Jaguar 6.5 al CP4000 (*cadí*) i a l'Altix (*obacs*), amb una llicència flotant que permet la seva execució a ambdós supercomputadors. A més, també es disposa de GAUSS 7.0, aplicació que ha quedat instal·lada al CP4000, junt amb el mòdul Maximum Likelihood, en la seva versió 5.0.

Jaguar és un paquet *ab initio* d'altres prestacions usat per fer simulacions en fase gas i en dissolució, i és particularment ràpid en sistemes que contenen àtoms metàl·lics. Les principals característiques d'aquest programari són la seva rapidesa, exactitud i el seu bon escalat amb la grandà-

ria molecular, que permet la seva aplicació a sistemes de grans dimensions.

D'altra banda, GAUSS és un llenguatge de programació matricial àmpliament utilitzat per científics, enginyers, estadístics, biòmetres, econometristes i analistes financers. A més, és un entorn complet d'anàlisi, adient tant per a la realització de càlculs ràpids com per a anàlisis complexes de milions de dades. Des de la seva introducció l'any 1984 ha esdevingut un estàndard en processos de *crunching* numèric i de models complexos a gran escala. El mòdul Maximum Likelihood permet realitzar càlculs de paràmetres de models.

## Certificats de reconeixement del TDX

Coincidint amb l'inici del curs acadèmic, el passat 15 de setembre, es van emetre els primers certificats de reconeixement a les 3 tesis més consultades de cada universitat que participa al servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX).

Amb el lliurament d'aquests certificats, signats pel conseller d'Educació i Universitats, Joan Manuel del Pozo, i pels respectius rectors de cada universitat, es pretén reconèixer la popularitat de la recerca duta a terme, contrastada per l'ele-

vat nombre de consultes rebudes, gràcies a la visibilitat que el TDX hi proporciona. La tesi més consultada durant el curs acadèmic 2005-06 ha estat *Teorías de la comunicación grupal en la toma de decisiones: contexto y caracterización* de Gerardo Javier Macías Cortés i dirigida per Mario Herreros Arconada del Departament de Comunicació Audiovisual i Publicitat de la UAB (vegeu *Teraflop* 80). En aquest número es comenten les dues següents (pàgines 6-9).



## 700 tesis de la UB al TDX

La Universitat de Barcelona (UB) ha introduït la seva tesi número 700 al servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX). Es tracta de la tesi d'Albert Batalla amb el títol *Retroalimentación y aprendizaje motor: influencia de las acciones realizadas de forma previa a la recepción del conocimiento de los resultados en el aprendizaje y la retención de habilidades motrices*. Els directors de la tesi han estat Luis Miguel Ruiz i Miguel Ángel Torralba, del Departament de Teoria i Història de l'Educació de la UB.

La tesi tracta l'estudi del coneixement dels resultats en l'aprenentatge motor i de la seva influència en la retenció d'habilitats motrius. S'estima que totes les accions realitzades en l'individu abans de conèixer el resultat de la seva acció, com ara l'estimació de l'error comès, faciliten l'aprenentatge i la retenció d'habilitats. D'altra banda, aquelles accions que el dificulten, com ara la interpolació d'una tasca secundària durant el procés d'aprenentatge, compliquen les operacions de processament de la informació.

## RECERCAT

### Millores a RECERCAT

Coincidint amb el primer aniversari del Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT) s'ha actualitzat el seu programari base, DSpace, de la versió 1.2 a la 1.4. Aquesta nova versió del dipòsit compleix amb els criteris d'accessibilitat UI XHTML/WAI i està internacionalitzada, és a dir, el codi font i el text es troben separats de manera que es fa més fàcil realitzar les traduccions als diferents idiomes. Per això, ja està disponible la versió del dipòsit en castellà i anglès.

A més, també permet realitzar cerques per matèries i incorpora millores en la preservació dels documents que inclou, gràcies a una eina que verifica periòdicament la validesa dels fitxers incorporats. D'altra banda, la nova versió també afegeix millores en el rendiment de la base de dades que agilitzen les cerques i permeten un millor accés als documents, i corregeix errors de programació (*bug*) presents a l'anterior versió, com ara la impossibilitat d'efectuar modificacions a les dades dels subscriptors.

### Nous documents i col·leccions

A la fi de setembre, RECERCAT ha dut a terme la càrrega de més de 1.200 metadades de documents de la Universitat Politècnica de Catalunya. Aquesta incorporació s'ha produït gràcies a la adaptació del programari del dipòsit amb un connector (*plug-in*) que permet que RECERCAT esdevingui recollidor de metadades (*harvester*) seguint el protocol OAI-PMH (Protocol per a la Recollida de Metadada).

A més, des del 15 de setembre, la Facultat de Ciències de la Universitat de Girona introdueix els projectes de ciències ambientals a RECERCAT i, des del 17 d'agost, la Facultat de Ciències de la Universitat Autònoma de Barcelona hi incorpora els projectes i treballs de final de carrera de ciències ambientals.

# MareNostrum, únic sistema de l'Estat a la llista TOP500

**E**l MareNostrum, situat a l'onzena posició, s'ha convertit en l'únic supercomputador espanyol present a la darrera edició de la llista TOP500 publicada el passat mes de juny. El primer lloc continua dominat pel sistema Blue Gene/L d'IBM que ja porta tres edicions consecutives encapçalant la llista dels 500 supercomputadors més potents del món.

MareNostrum s'ha col·locat a l'onzè lloc del rànquing, després de caure tres posicions respecte a l'anterior edició de la llista, en què se situava en vuitè lloc. El supercomputador del Barcelona Supercomputing Center (BSC), que compta amb 4.800 processadors, va entrar a la llista el novembre de 2004 en quarta posició, va caure un lloc el juny de 2005 i tres més el novembre del mateix any.

Fins a aquesta edició, MareNostrum havia estat acompanyat pel Cray X1E de l'Institut Nacional de Meteorologia. Aquest últim supercomputador va entrar a la posició 235 de la llista el juny de 2005. El novembre del mateix any va caure 165 llocs, situant-se a la posició núm. 400 i guanyant ha estat eliminat.

## Domini de Blue Gene/L

El TOP10 continua liderat per Blue Gene/L, el supercomputador desenvolupat per IBM i l'Administració de Seguretat Nuclear (NNSA) dels EUA que està instal·lat al Lawrence Livermore National Laboratory de Califòrnia. Blue Gene/L porta tres edicions encapçalant el TOP500 amb una potència màxima de càlcul per resoldre un sistema d'equacions lineal ( $R_{m\grave{a}x}$ ) de 280,60 Tflop/s i continua sent l'únic supercomputador de la llista amb més de 100 Tflop/s.

En segon lloc, es troba BGW instal·lat a l'IBM Thomas J. Watson Research Center amb 91,29 Tflop/s. Lluny està dels 280,60 Tflop/s de Blue Gene/L, el que fa pensar que aquest últim continuarà al capdavant de la llista en les properes edicions. En tercer lloc continua

present ASC Purple d'IBM que es manté a la mateixa posició que a l'anterior edició de la llista. El Columbia d'SGI, instal·lat a l'Ames Research Center de la NASA, continua mantenint-se en quart lloc amb un  $R_{m\grave{a}x}$  de 51,87 Tflop/s.

El cinquè supercomputador més potent del món i el primer d'Europa és Tera-10 de Bull, instal·lat al Comissariat per a l'Energia Atòmica (CEA) de França, que compta amb un  $R_{m\grave{a}x}$  de 42,90 Tflop/s. Així, Tera-10 ha rellevat MareNostrum com el sistema europeu més potent, caient aquest últim a la tercera posició del rànquing europeu per darrera de l'alemany JUBL d'IBM, situat en vuitè lloc. Darrera de Tera-10, es troba Thunderbird de Dell,

que ha caigut de la cinquena a la sisena posició.

En setè i vuitè lloc es troben dues noves entrades a la llista, el japonès TSUBAME Grid Cluster de Sun i el ja esmentat JUBL d'IBM, respectivament. De la sisena a la novena posició ha caigut Red Storm Cray XT3, instal·lat al Sandia National Laboratories i en l'última posició es troba l'Earth Simulator japonès.

Des de l'última edició de la llista, el nombre de supercomputadors amb processadors Intel ha baixat de 351 a 302, mentre que els processadors AMD han crescut significativament, de 55 a 80. A més d'aquests, també destaquen els processadors Power d'IBM amb 83 sistemes i els PA-RISC amb 19.

L' $R_{m\grave{a}x}$  necessari per poder estar al TOP500 ha passat d'1,64 Tflop/s a 2,03 Tflop/s, mentre que els supercomputadors situats al TOP10 tenen tots un  $R_{m\grave{a}x}$  superior a 35 Tflop/s. Dels fabricants, IBM continua liderant la llista amb 239 sistemes, un 48% del total, seguida de Hewlett-Packard amb 157 i Dell amb 22.

Pel que fa a la distribució geogràfica, els països asiàtics superen per primer cop a Europa amb 91 sistemes en front dels 84 europeus. La presència asiàtica ha crescut un 5%, de 66 a 91 supercomputadors. Els Estats Units continuen encapçalant el TOP500 amb més de la meitat dels sistemes, 318. ■



Tera-10, el cinquè supercomputador més potent del món i el primer d'Europa.



# Comença el desplegament de RedIRIS10

Després que el passat mes de juliol Red.es adjudiqués el concurs per al desplegament de la nova infraestructura de RedIRIS a l'empresa T-Systems, a finals de setembre s'ha actualitzat el node de RedIRIS a Catalunya, allotjat al CES-CA. Amb el pas a RedIRIS10, el nucli de la xarxa estatal passarà de 2,5 a 10 Gbps i els enllaços, fins ara de 100 Mbps a 2,5 Gbps, passaran a velocitats que van des dels 155 Mbps als 10 Gbps.

El node de Catalunya comptarà amb un total de cinc connexions a 10 Gbps, quatre amb el node central, a Madrid, i un amb València, una connexió a 622 Mbps amb l'Aragó, i dues connexions amb les Illes Balears, a 622 i 155 Mbps, respectivament.

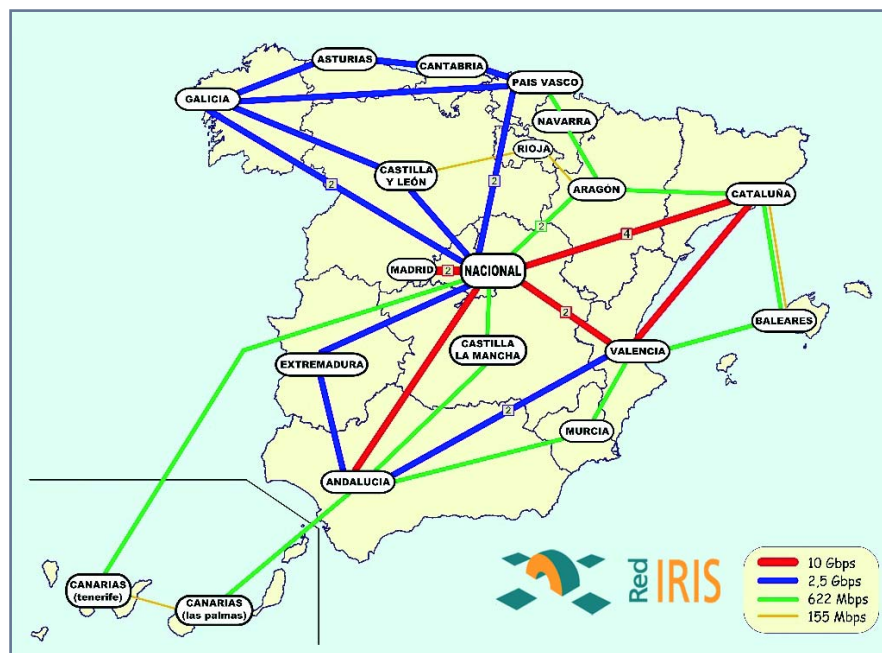
Dins del procés de desplegament de la nova xarxa de recerca estatal, RedIRIS10, els últims dies de setembre s'han dut a terme tasques d'actualització del node de RedIRIS a Catalunya. Així, s'ha instal·lat un commutador Nortel ERS 8010 i s'ha substituït l'encaminador Juniper M20 per un M320. L'equipament instal·lat admet connexions a 10 Gbps i és flexible quant a permetre connexions a una capacitat inferior.

El node de Catalunya disposava amb RedIRIS2 de dos enllaços a 2,5 Gbps amb el node central i València, respectivament, un a 622 Mbps amb l'Aragó i un a 155 Mbps amb les Balears. Així, a més d'augmentar la capacitat dels enllaços també se n'incrementa el nombre, de manera que el node de Catalunya disposarà de quatre línies amb el node central i de dues amb les Balears, afegint una altra línia a 622 Mbps a la que es disposava a 155 Mbps.

Amb l'adjudicació a T-Systems, la infraestructura de RedIRIS10 continua en mans del mateix operador que va proveir RedIRIS2, ja que T-Systems va comprar Alburia ara fa un any. La connectivitat amb les Illes Canàries i les Balears, també continuarà sent proporcionada per Telefónica.

## Connexions internacionals

Fa un any va començar el desplegament de la nova infraestructura de comunicació que substituirà Géant per Geant2, amb nucli de fibra fosca al que es connectarà el node espanyol, amb un enllaç de fibra directa entre Madrid i Ginebra. A més, Espanya disposarà de tres enllaços més a 10 Gbps, que connectaran Madrid amb París i Milà, respectivament.



Topologia de la xarxa RedIRIS10.

noves tecnologies  
en CATALÀ!

## Els programes maliciosos

Una de les maneres de cometre actes il·legals i sovint fraudulents per mitjà de la xarxa Internet que poden dur a terme els o les **ciberdelinqüents** és l'ús d'un **programa maliciós** (en anglès, *malicious logic* o *malicious code*), és a dir, qual-sevol programa que altera o destrueix elements lògics indispensables per al funcionament d'un sistema informàtic.

Entre els programes maliciosos més perjudicials hi ha els **virus** (en anglès, *virus*) que, en executar-se el fitxer en què estan inserits, s'infilten en un sistema informàtic, s'hi reproduïxen i en perjudiquen el funcionament. També s'ha d'anar en compte amb els **cucs**, que s'infilten en una xarxa informàtica, s'hi reproduïxen i es propaguen als sistemes que hi estan connectats. La diferència essencial entre un virus i un **cuc** (en anglès, *worm*) és que aquest darrer no necessita cap fitxer executable per reproduir-se, sinó que té un funcionament totalment autònom.

Un altre tipus de programa maliciós ben conegut és el **cavall de Troia** (en anglès, *Trojan horse* o *Trojan*; en castellà, *caballo de Troya* o *troyano*). Es tracta d'un programa amb una funció aparentment útil, però que té altres funcions addicionals amagades que faciliten l'accés no autoritzat a un sistema i el fan vulnerable. I encara podem esmentar, dins del grup de programes maliciosos, la **bomba lògica** o **virus latent** (en anglès, *logic bomb* o *sleeping virus*) que s'introdueix en un sistema informàtic i s'executa només quan es compleixen unes condicions predefinides.

Una de les millors maneres de prevenir l'acció d'aquesta mena de delinqüents és l'aplicació de mesures físiques, lògiques i administratives per protegir la integritat i la confidencialitat de les dades informàtiques.



www.termcat.cat

# 50 anys d'intel·ligència artificial



**Aquest estiu ha fet cinquanta anys que, a Dartmouth —New Hampshire, EUA—, es van reunir un grup de persones encapçalades per noms tan rellevants dintre de la informàtica com ara John McCarthy, Marvin Minsky i Herb Simon, entre d'altres. El seu objectiu era compartir experiències a propòsit d'uns programes d'ordinador molt especials en aquells dies, que s'havien començat a dissenyar i construir de manera esporàdica i individual ja feia uns anys. Es tractava de programes que, d'una manera o una altra, li feien fer a un ordinador unes tasques que, si s'observen en un ésser humà, són considerades conductes intel·ligents.**

Un dels reptes d'aleshores era el joc d'escacs. És evident que, en l'imaginari popular i des de fa segles, el fet de jugar a escacs, i fer-ho bé, s'ha considerat una mostra 'd'intel·ligència'. Així doncs, si una màquina era capaç de fer-ho, i fins i tot de fer-ho millor que els humans, és que la màquina devia ser 'intel·ligent'. Molt aviat es va començar a utilitzar el terme 'intel·ligència artificial' per a totes aquelles tècniques que permeten construir 'comportaments artificials' que si els observéssim en humans els consideràrem intel·ligents. El nom, amb tota probabilitat, no feia (i segurament no fa) justícia a les possibilitats dels artefactes observats.

Ara bé, l'any 1956 no va passar res d'extraordinari que provoqués que tot això es pogués fer de cop. Potser va ser l'any en què es van començar a veure els resultats d'una confluència de factors. Potser, entre molts i d'importants, en cal destacar un parell. El primer, la suficient formalització de molts conceptes matemàtics, com ara, i molt especialment, els conceptes relacionats amb la lògica matemàtica o la cerca en espais combinatoris. Moltes coses que, d'una manera o d'una altra, s'havien anat fent durant molts anys, de sobte es van començar a veure com un tot. La típica teoria que engloba coses que fins llavors es veien com a separades.

La lògica matemàtica, com a disciplina, és una de les ciències més velles. La vella cultura grega va ser la que més

va ajudar a formalitzar els antics conceptes d'aquesta ciència. En el fons, la lògica matemàtica ens permet formalitzar el raonament de conceptes a partir de la representació del coneixement. Res de tot això no és ni trivial ni aplicable a qualsevol entorn, però sí que està suficientment comprès i assimilat per poder-hi treballar còmodament, explotant bona part del seu potencial.

## Lògica matemàtica i potència de càlcul, factors clau en el naixement de la intel·ligència artificial

El segon aspecte important és la potència de càlcul disponible en els ordinadors d'aquella època. Si bé es tractava d'una potència de càlcul molt reduïda en comparació a les possibilitats actuals, és evident que aquells investigadors tenien a les seves mans més potència de càlcul de la que mai ningú havia disposat. Els ordinadors oferien la possibilitat d'automatitzar processos senzills i d'executar-los a unes velocitats increïbles. El mateix nom de *computer* va ser adoptat dels calculistes humans que, d'una manera manual, feien càlculs durant llargues jornades laborals.

El naixement de la intel·ligència artificial no hauria estat possible sense la

confluència de, com a mínim, aquests dos factors. D'una manera natural els diferents elements van confluïr en les mateixes mans, i les primeres tècniques de la intel·ligència artificial es van començar a desenvolupar. Les peces del trencaclosques van començar a encaixar i a dibuixar quelcom amb sentit.

Des d'aquelles dates fins els nostres dies, les coses han evolucionat molt. El conjunt de conceptes formalitzats i de tècniques desenvolupades ha augmentat enormement. Les aplicacions d'aquestes noves tecnologies també. Els èxits, i també els fracassos, s'han anat succeint. Pocs anys més tard d'aquelles primeres reunions, els anomenats 'programes raonadors' o 'sistemes experts' començaren a proliferar. Aquests sistemes intentaven emular el raonament que els experts humans feien a propòsit de determinats problemes clarament emmarcats dins d'àmbits de coneixement molt concrets.

Es van fer famosos programes com ara ELIZA (Weizenbaum, 1966), que simulava les reaccions d'un psicoanalista; MYCIN (Buchanan & Shortliffe, 1975, 1976, 1984), que diagnosticava malalties bacterianes a partir dels símptomes; o PROSPECTOR (Duda et al., 1979), que predeïa dipòsits de minerals a partir de dades geològiques. Tots ells van tenir molts èxits, però també grans fracassos a conseqüència de la seva fragilitat. Mai cap d'ells va incorporar gens ni mica de sentit comú! Potser l'exemple que més va posar en evidència la vulnerabilitat d'aquests sistemes va ser la insistència en la sol·licitud d'una analítica que feia un programa raonador d'un entorn mèdic a, ni més ni menys, que un cadàver.

Les esperances que s'havien dipositat en totes aquelles noves tecnologies es van portar a la gran pantalla l'any 1968 amb la pel·lícula *2001: Una Odissea a l'espai*, del cineasta Stanley Kubrick. Han hagut de passar molts anys per començar a posar les coses al seu lloc i veure que la intel·ligència artificial és, si més no, un nom exagerat per a un conjunt de tecnologies que, avui per avui, ofereixen el que ofereixen (que és molt), però que difícilment ens permetran 'anar a prendre cafè' amb el nostre ordinador portàtil.

Els ordinadors actuals ens ofereixen enormes potències de càlcul a un cost molt reduït. Com a l'any 1956, mai ningú no havia disposat de tanta potència de càlcul com la que avui dia tenim.



I avui per avui podem afegir-hi que mai ningú no l'havia tingut a un cost tan reduït! No cal que pensem només en els grans superordinadors dels grans centres de càlcul. Podem pensar també en experiències com el *grid* i el *network computing*, i experiències tan exitoses com el Berkeley Open Infrastructure for Network Computing que aprofita bona part de la potència de càlcul no utilitzada dels nostres ordinadors de sobretaula tot connectant-los a través d'internet. Projectes com ara el SETI@Home, Rosetta@Home o el Malariacontrol.net demostren que aquesta potència de càlcul està disponible i que es pot aprofitar.

És evident, però, que la potència que ens dóna el Massive Parallel Processing (MPP) i sistemes similars, ens obren possibilitats reals de fer coses que fins ara mai ningú podia fer. A tall d'exemple, una de les tècniques de la intel·ligència artificial que potencialment més recursos de càlcul pot consumir és la família de mètodes coneguts amb el nom de Computació Evolutiva, inspirats en l'evolució natural de les espècies i en les lleis de l'herència genètica descrites per Mendel.

En el fons, i de manera molt simplificada, es pretén solucionar problemes de la mateixa manera que la natura ho fa: a través de milers d'anys d'adaptació a través de milions de creuaments d'informació genètica i de l'atzar de les

mutacions. Una de les tècniques, coneguda amb el nom de Genetic Programming, permet que un programa d'ordinador construeixi un altre programa d'ordinador que resolgui un determinat problema. Però, per a això, calen milers de milions de simples operacions realitzades el més ràpid possible.

En aquests cinquanta anys, les aplicacions de les tècniques d'intel·ligència artificial han anat proliferant. Han deixat de ser una cosa rara i molt allunyada del nucli dur de les aplicacions informàtiques per anar-se convertint en unes tècniques-recurs, a les quals els enginyers hi opten en cas de necessitat. A hores d'ara, gent de totes les edats i nivells culturals ha sentit a parlar dels anomenats 'electrodomèstics intel·ligents'. Abusant clarament del terme intel·ligència, es tracta de simples aparells amb sensors i sistemes de control que permeten optimitzar el seu funcionament, tot adaptant-se a les condicions de contorn i de treball.

Des d'aquestes aplicacions més populars als sistemes intel·ligents més sofisticats que permeten navegar robots de manera autònoma en altres planetes del sistema solar, passant per sistemes de diagnosi mèdica; tot plegat són aplicacions d'aquelles tècniques que es varen començar a definir aquell estiu de 1956.

És evident que els avenços en aquesta àrea de coneixement han portat a la

comunitat d'investigadors, i a la gent en general, a anar-se fent, de manera reiterada, una pregunta insistent: què és realment la intel·ligència artificial? Sovint és molt difícil de contestar, encara que si hom hi pensa una estona és molt possible que arribi a la conclusió següent. Reservarem el qualificatiu d'intel·ligent a allò que tingui la capacitat d'aprendre. Aprendre de l'experiència, dels propis èxits i fracassos per tal d'adaptar-se millor a l'entorn que l'envolta.

La definició és molt àmplia, però alhora molt restrictiva. No és fàcil aconseguir sistemes d'aquests tipus, i menys que siguin capaços de resoldre exitosament més d'un problema. A pesar de les enormes dificultats actuals, el futur ens reserva grans sorpreses en aquesta disciplina de la ciència que tot just encara està començant. I en aquesta història que s'ha d'escriure, els grans ordinadors, treballant en xarxa, hi tindran molt a dir. Seran, sense cap mena de dubte, una de les claus de volta de tot plegat. ■

---

#### **Dr. Josep Maria Garrell i Guiu**

Grup de Recerca en Sistemes Intel·ligents  
Enginyeria i Arquitectura La Salle  
Universitat Ramon Llull

En l'actualitat és vicerector de Recerca i Innovació i secretari general de la Universitat Ramon Llull.

## MOE workshop

Del 18 al 20 de setembre ha tingut lloc el MOE workshop organitzat per Chemical Computing i el CESCA. El curs ha

comptat amb l'assistència de 22 investigadors acadèmics i professionals de la indústria química i s'hi han tractat les aplicacions disponibles al programari Molecular Operating Environment (MOE).



TERESA VIA

## F O T O / N O T Í C I A

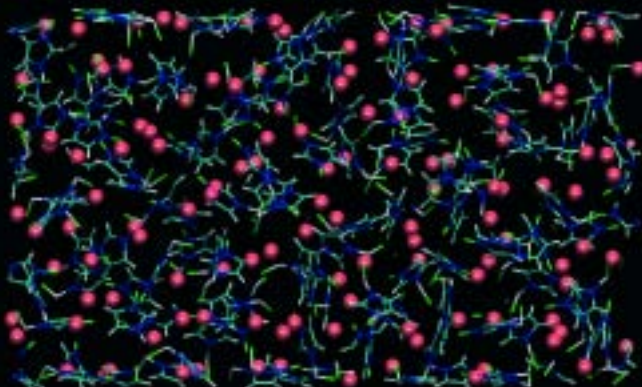
Les característiques úniques dels líquids iònics (LI), incloent l'absència de pressió de vapor, els fan candidats idonis per a nombroses aplicacions industrials. Els LI representen una nova generació de dissolvents que poden 'optimitzar-se' mitjançant l'adequada tria de la combinació catió/aníó, que poden dissoldre una àmplia varietat de compostos orgànics i inorgànics, tant polars com no-polars. El seu ús potencial per a diverses aplicacions industrials i les seves característiques benignes per al medi ambient han fet que la investigació en LI hagi experimentat un notable ímpuls.

L'objectiu del projecte de recerca que desenvolupen els investigadors Lourdes F. Vega, Carlos Rey-Castro i Alexandra L. Tormo, membres del grup de Simulació Molecular de l'Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC), és avançar en la comprensió dels fenòmens

que governen el comportament dels LI a nivell microscòpic, tot predient les propietats macroscòpiques que se'n derivin, a partir d'eines de simulació molecular. En particular, mitjançant simulacions de Dinàmica Molecular, el grup ha pogut predir quina és la influència de la temperatura, la flexibilitat de la molècula i la llargada de la cadena en les propietats estructurals i de transport (difusivitat, viscositat, conductivitat) de sistemes models de líquids iònics.

La complexitat de les molècules que integren els LI i les seves càrregues, fan necessaris càlculs de gran envergadura (més de 16 processadors en paral·lel, més de 1.000 hores de computació per algunes propietats). L'avantatge d'aquestes simulacions és que permeten aïllar quina és la influència de cadascuna d'aquestes variables en el comportament final de l'LI. Donat que moltes de les aplicacions dels

LI venen limitades per la seva elevada viscositat, la predicció del seu comportament abans, fins i tot, de sintetitzar-los, pot estalviar temps i costos, guiant en el disseny de solvents 'a la carta', per a aplicacions específiques. ■



Canvi d'orientació del catió del clorur d'etil-metil-idimazoli a prop d'una paret.

### 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 Oberta de Catalunya  
Universitat Ramon Llull  
CSIC

### TERAFLOP

#### DIRECTOR

Miquel Huguet

#### COORDINACIÓ

Carme Monserrat

#### REDACCIÓ

Teresa Via  
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](mailto:teraflop@cesca.es)

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