

TERAFLOP



JOCS'07

Recerca sobre
el canvi climàtic

ENTREVISTA

Ramon Moreno,
director general de Recerca

La Xarxa Santa Tecla, a l'Anella

Avenços en farmacologia

La recerca en el canvi climàtic a la JOCS'07

JOCS 07

El 27 de setembre es va celebrar la vuitena edició de la Jornada Catalana de Supercomputació (JOCS), que convoca bianualment el CESCA, i que va tenir lloc a l'Auditori Antoni Caparrós del Parc Científic de Barcelona. L'acte es va centrar en la recerca sobre el canvi climàtic i la utilitat de la supercomputació d'altres prestacions en aquest tipus d'estudis.



D'esquerra a dreta, Fernando Albericio, Ramon Moreno i Marçal Pastor.

Els encarregats d'inaugurar la jornada van ser Ramon Moreno, director general de Recerca de la Generalitat de Catalunya, Fernando Albericio, director general del Parc Científic de Barcelona, i Marçal Pastor, vicerector de Recerca de la Universitat de Barcelona (UB). Ramon Moreno va recordar les tres grans àrees de recerca del CESCA (la química teòrica, la modelització biomolecular i l'astrofísica), i va destacar "la gran capacitat de càlcul i de memòria que pot oferir", així com l'interès que el Govern de la Generalitat té en aquest servei. El director general de Recerca va posar també en relleu la renovació tecnològica de l'Anella Científica, que comptarà amb un pressupost de quatre milions d'euros pel període 2008-11. Finalment, Moreno va animar els assistents a "redescobrir el CESCA

i treure profit de l'ampli ventall de serveis que actualment pot oferir".

Albericio va destacar la importància que "tot el relacionat amb el clima i amb el canvi climàtic" té per al Parc Científic de Barcelona, i va aclarir que la institució, a més de dedicar-se a la biomedicina, s'interessa també per la incubació d'instituts de recerca, com ara el Laboratori de Recerca del Clima. Marçal Pastor va felicitar el CESCA per la tria del tema, i va afirmar que la recerca sobre el canvi climàtic "no és en absolut inert, sinó que genera coneixement i aplicació". En aquesta línia, va posar de manifest la rellevància que l'àrea de recerca sobre clima té a la UB.

La jornada, que va incloure una sessió de pòsters, va comptar amb la participació de set ponents de diferents àm-

bits científics per presentar la recerca que es desenvolupa sobre el canvi climàtic. Pedro Jiménez-Guerrero, investigador principal en Modelització Climàtica del Barcelona Supercomputing Center-Centro Nacional de Supercomputación (BSC-CNS), va parlar sobre l'ús dels models climàtics dins l'àmbit de la supercomputació. Ileana Bladé, investigadora al Departament d'Astronomia i Meteorologia de la UB, va exposar les utilitats dels models climàtics per predir canvis futurs en el clima.

Javier Sigró, membre del Grup de Recerca del Canvi Climàtic de la URV, va mostrar uns estudis de detecció del canvi climàtic a escala regional. Miguel González, catedràtic de Química Física a la UB, va presentar un estudi teòric de la dinàmica de reaccions químiques d'interès atmosfèric. Konstantin Neyman, investigador ICREA en el Departament de Química Física de

Moreno anima els assistents a treure profit de l'ampli ventall de serveis del Centre

la UB, va analitzar l'impacte de la computació en català i en la reducció de l'escalfament global. Ildefonso Cuesta, professor del Departament d'Enginyeria Mecànica de la URV, va exposar la simulació numèrica directa de la dispersió turbulenta de plomalls amb flotació en un flux en un canal. Finalment, Jordi Cunilleira, cap de l'Àrea de Recerca Aplicada i Modelització del Servei Meteorològic de Catalunya, va teoritzar sobre el paper de la física en el canvi climàtic.

L'investigador Miguel Ángel Rodríguez, del Laboratori de Recerca del Clima, va clausurar l'acte incidint en la necessitat de "crear un diàleg més fluid en l'ús dels recursos de la supercomputació per part dels climatòlegs de casa nostra", i va predir un "futur fructífer de cooperació entre els centres de supercomputació i la comunitat climatològica". Aquesta jornada, que ha comptat amb una vuitantena d'assistents, ha tingut el patrocini de Bull i la col·laboració d'Al-Pi i el Parc Científic de Barcelona. ■



Application of climate models within super-computing frameworks

Pedro Jiménez-Guerrero

Barcelona Supercomputing Center
Centro Nacional de Supercomputación

The atmospheric physical and chemical processes are tightly coupled and nonlinear (Carmichael et al., 2007), and occur over a wide range of spatial and temporal scales that make global-scale numerical modeling of the troposphere a challenging venture. Computational speed of the coupled climate-chemistry models becomes a critical factor as long simulation periods, from several model months to a few years, are necessary to obtain reliable model statistics (Lee et al., 1999).

Therefore, there is a vital need for High Performance Computing in order to be able to predict the future evolution of our climate, and answer the key questions for society about the impact of increased greenhouse gases on global warming. Even though there is small doubt that climate is vulnerable to mankind's activity (IPCC, 2007; Rahmstorf et al., 2007), many questions remain unsolved at the quantitative level (extreme events and regional impacts on air quality, feedbacks between climate and biogeochemical cycles, impacts of climate change on marine and terrestrial ecosystems and on societies). All these questions are strongly linked to the amount of computing power available since they ask for increased model resolution, large number of experiments, an increased complexity of Earth System Models, and longer simulation periods compared to the current state of climate models.

The structure and intensity of an extreme climate event depends on complex non-linear interactions between large scales (several 100 km) and smaller scales (down to a few km). Model simulations are required that are able to represent both modification of the larger-scale, global, state (inside which extreme events are developing) and the fine-scale temporal and spatial structure of such events (storms, cyclones, intense precipitation, etc). Current global climate models (GCMs) have typical grid cell of hundred km; con-

tain most of the processes that are believed to be important in determining climate (Schmidt et al., 2006); and are limited in their capacity to represent processes such as clouds, orography effects, small-scale hydrology, etc. High-resolution global models are therefore needed to improve our predictions and understanding of the effect of climate on seasonal, decadal and century timescales (Figure 1). A rising interest comes in the following decade, which represents a key planning horizon for infrastructure upgrades, insurance, energy policy, and business development (Smith et al., 2007).

Another issue is related to the simulation of regional-scale climate features, for which improved regional climate models (RCMs) are needed. Due to the relatively coarse horizontal grid, the GCMs are not suitable for climate studies on a regional scale domain. Variables such as surface temperature, surface wind, precipitations and cloudiness are highly dependent on the topography of a region (Giorgi et al., 1994), and the synoptic scale of several hundreds of kilometers that characterizes the grid of a GCM is not fine enough to correctly resolve such events at a regional scale (10-20 km). Furthermore, the parameterization of the physical events and quantities that appear in a global model may result extremely dif-

ferent from those implemented in a regional model.

The current implementation of the finite-volume atmospheric models is limited in terms of scalability by the choice of computational grids and numerical methods. Development of new models are required focusing in new numerical techniques to break through these scalability limitations. Therefore, a challenge for future developments is based on new-generation codes.

Despite the Earth System Modeling codes are currently implemented in high-performance computing infrastructures, a major challenge lies in the efficient use of a large number of processors for applications at high spatial resolution; therefore an important work is needed in the improvement of parallel performance of the codes. Over the next decade global models will require scalability beyond hundreds of thousands processors. Increasing model resolution down to 1 km for regional models or 20 kms for global climate models require increases by factors of 100 to 1,000 computing power compared to the current state.

The requirements of a good parallel performance for Atmospheric Earth System Modeling is supported by the "European Network for Earth System Modelling" (<http://www.enes.org>) which has emphasized a need for at least 60 Tflops sustained as soon as 2008 with a need for a renewal of investment at every 4 to 5 years at least during 10 to 15 years. Increase of computing power by a factor of 2 to 10 is required to better account for the complexity of the system. This complexity will need to be included in medium to high resolution models and therefore require a factor of 100 to 10,000 times the current power. ■

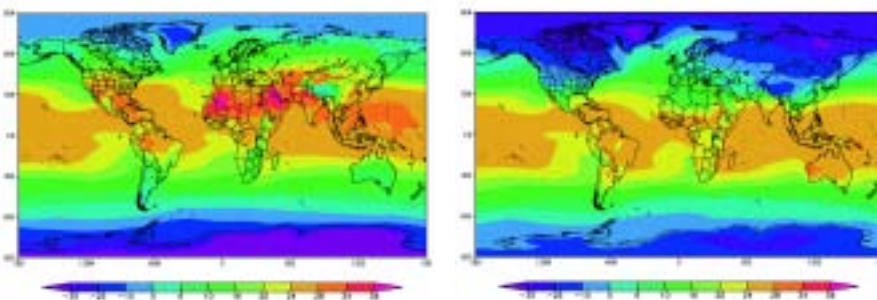


Figure 1. Climate simulations for 2m temperature during summertime months (JJA) with GISS ModelE by NASA (left) and wintertime (DJF) with WACCM model (right), both implemented in MareNostrum super-computer at BSC-CNS.



Per què podem confiar en els models climàtics (GCM) per predir canvis futurs en el clima?

Ileana Bladé

Dept. d'Astronomia i Meteorologia (UB)

Bona part de la nostra comprensió del clima i els seus canvis prové de simulacions realitzades amb models climàtics globals (GCM). Les dades observacionals (instrumentals o proxys) solament permeten detectar canvis en el clima (p.ex. l'escalfament actual del planeta) o bé documentar canvis passats (p.ex. les successions cícliques de períodes glacials i interglacials durant els darrers 40 milions d'anys). L'anàlisi de dades permet també relacionar canvis en diferents variables (p.ex. l'augment simultani en la concentració de gasos hivernacle i la temperatura global del planeta) i suggerir hipòtesis per a la causa d'aquests canvis, però no permeten establir de forma inequívoca aquesta causalitat.

Per poder fer-ho es necessita, d'una banda, una teoria física que expliqui els efectes observats i, de l'altra, experiments controlats que reproduïxin aquestes efectes. En el cas de l'efecte hivernacle, la teoria existeix des de la fi del segle XIX, però pel que fa a l'experimentació, resulta im-

possible reproduir tota la complexitat del sistema climàtic en un laboratori o experimentar sobre el sistema climàtic mateix.

Els GCM ens ofereixen l'única via alternativa: un laboratori numèric on podem realitzar tota mena d'experiments (o simulacions) per donar resposta a preguntes fonamentals, com ara determinar quins efectes són responsables de l'augment actual de la temperatura o dels canvis climàtics passats. La comparació entre simulacions del clima del segle XX amb forçament solament natural (erupcions volcàniques i variacions en la constant solar) i amb forçament natural i antropogènic (gasos hivernacle, aerosols, etc.) permet atribuir de forma inambigua l'escalfament observat a la combinació de tots dos forçaments, així com descartar les hipòtesis alternatives segons les quals es tracta de variabilitat natural o està provocat per un increment de la lluminositat solar.

Els GCM són també utilitzats per projectar (predir) augments de temperatura encara més importants durant el segle XXI.

És evident, però, que tant les declaracions d'atribució dels canvis actuals com les projeccions de canvis futurs es basen en l'assumpció que els models emprats són fiables.

La validesa i credibilitat dels GCM és sovint posada en dubte, però hi ha moltes raons per confiar en la seva capacitat per explicar i predir canvis climàtics. La primera d'elles és que els GCM són representacions físiques del sistema climàtic i de la seva dinàmica, i estan basats en principis físics universalment reconeguts: lleis de conservació de la massa, energia i moviment, lleis de transferència radiativa, etc. Per tant, els GCM descriuen el comportament i les interaccions dels diversos components del sistema climàtic (atmosfera, oceà, criosfera, superfície terrestre i biosfera) de manera consistent amb la nostra comprensió d'aquest sistema. En segon lloc, els GCM són capaços de reproduir amb força exactitud aspectes fonamentals del clima anual mitjà i del cicle estacional, sobretot pel que fa al camp de la temperatura superficial de la terra. Aquesta concordança indica que els processos que governen aquesta temperatura estan ben representats en els GCM.

Davant l'objecció que els models estan "ajustats" per produir aquests bons resultats, cal respondre que l'ajust només afecta uns quants paràmetres (no el cor dinàmic del model), que només es fa per obtenir un clima estable en presència de forçament (insolació i composició atmosfèrica) constant, i que és impossible ajustar un GCM per tal que reproduïxi tots els aspectes del clima del segle XX.

Dues altres raons per confiar en els models és que també poden simular les característiques principals de climes passats (p.ex. l'última època glacial), així com la resposta del clima a les erupcions volcàniques. Ambdós resultats demostren que les retroaccions principals que determinen la sensibilitat del clima estan contingudes en els models.

Tanmateix, potser l'argument més convincent que les prediccions del GCM s'han de prendre seriosament és que, durant les dues darreres dècades de desenvolupament, aquests models han predit sistemàticament un escalfament del planeta en resposta a l'increment de gasos hivernacle, una predicció que, sense cap mena de dubte, s'està complint (Figura 1).

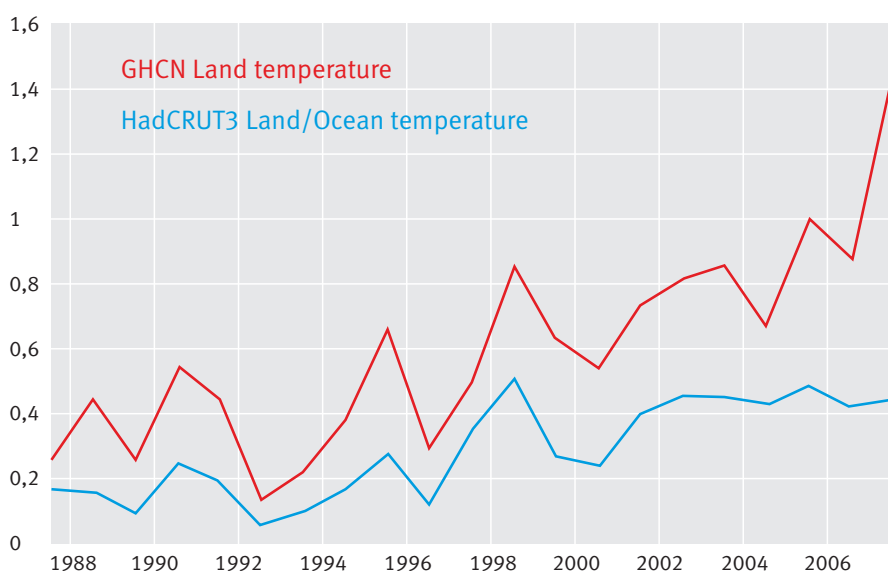


Figura 1. Evolució observada des del 1986 de l'anomalia de temperatura global terrestre i oceànica (corba blava) i terrestre (corba vermella) en relació a la mitjana del període 1961-1990.



La física en el canvi climàtic

Jordi Cunillera

Servei Meteorològic de Catalunya

L'estudi del clima i de la seva evolució és molt complex a causa, principalment, de la intervenció de factors d'escala espacial i temporal força diferents, però alhora relacionats entre si. Aquests factors es defineixen en el sistema climàtic, format per cinc subsistemes: atmosfera, hidrosfera, criosfera, litosfera i biosfera. És fonamental conèixer els processos físics que es desenvolupen a cada un dels subsistemes i, especialment, les interaccions entre ells (vegeu figura). Aquestes interaccions, però, compliquen la comprensió del funcionament de tot el sistema climàtic i dificulten la seva modelització.

Hi ha molts processos físics d'interacció: la mida de la superfície terrestre coberta de gel caracteritza la radiació solar reflectida cap a l'atmosfera (albedo); la litosfera interacciona amb l'atmosfera per l'emissió de partícules de pols i per les erupcions volcàniques; la interacció atmosfera i oceans és fonamental en l'evolució del clima; la vegetació determina la capacitat del sòl de retenir aigua o inter-

vé decisivament en el cicle del carboni; i molts d'altres.

Per analitzar l'efecte d'aquests processos físics, cal tenir present que la font d'energia que mou el sistema climàtic és el Sol, i que aquest sistema és estable, sense canvis, si es manté el balanç radiatiu entre la radiació solar incident i la radiació emesa pel sistema. Hi ha tres maneres fonamentals d'alterar aquest equilibri radiatiu (canvi climàtic):

- un canvi en la radiació solar incident (variacions en l'òrbita terrestre o en l'activitat solar);
- un canvi en el valor de l'albedo global per canvis en la nuvolositat, en la concentració d'aerosols a l'atmosfera, en la vegetació, etc.;
- un canvi en l'emissió de radiació infraroja de l'atmosfera cap a la superfície terrestre per una variació en la concentració dels gasos d'efecte hivernacle.

Davant d'aquests canvis, el clima respon directament variant alguna de les seves propietats físiques, però també ho

fa indirectament endegant processos de retroacció (*feedback*), que és positiva (negativa) si s'incrementa (disminueix) la magnitud de la resposta respecte al senyal que la provoca. L'evolució del clima depèn en gran mesura d'aquestes retroaccions, i a continuació se n'expliquen algunes:

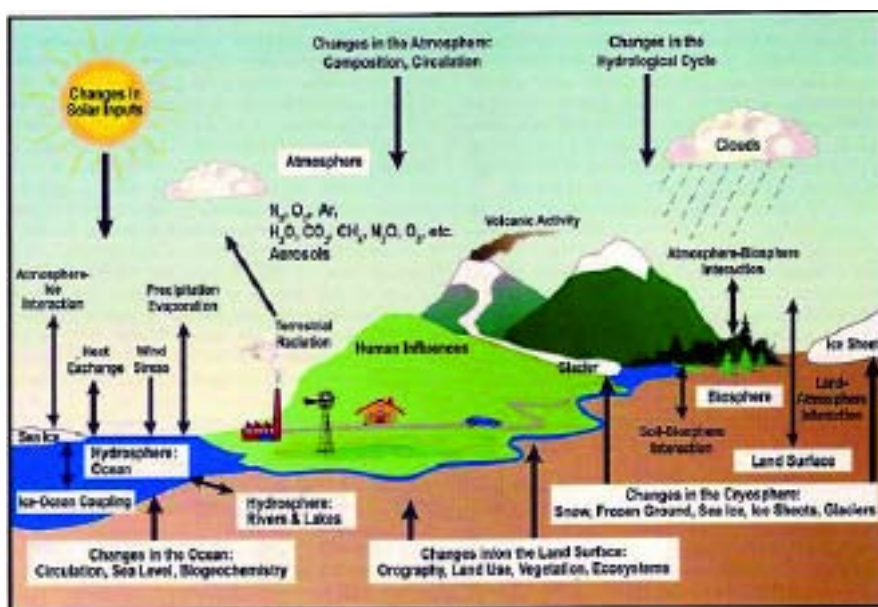
a) Els canvis de la constant solar per variacions de l'activitat solar no són prou importants com per provocar canvis significatius en la temperatura de la superfície terrestre (els canvis a causa de les variacions de l'òrbita terrestre sí que són significatius, però tenen una periodicitat de milers d'anys i estan relacionats amb els períodes glacials).

b) Si la temperatura de l'atmosfera augmenta, la pressió de vapor saturant (o contingut màxim de vapor d'aigua en l'aire saturat) també augmenta; com el vapor d'aigua és un dels gasos hivernacle més importants, l'emissió de radiació infraroja de l'atmosfera cap a la Terra serà més gran, de manera que la temperatura d'aquesta augmentarà. Aquesta retroacció positiva és la més important a tenir en compte en els models climàtics.

c) Si l'extensió de la superfície terrestre coberta de gel i neu varia, pot variar l'albedo global, però és complicat simular en els models els processos termodinàmics dels mars de gel i les diferents propietats radiatives en una mateixa massa de gel.

d) Els núvols tenen un doble efecte i de signe contrari: reflecteixen la radiació solar cap a l'espai (retroacció negativa: refredament de la superfície) i absorbeixen la radiació infraroja emesa per la superfície terrestre i la baixa troposfera (retroacció positiva: escalfament de la superfície). Actualment, els núvols provoquen un refredament, però cal analitzar millor el seu efecte davant d'un augment de la temperatura.

Per tant, són molts els processos físics a considerar, i a millorar, en les simulacions, i aquest és el principal repte de la comunitat científica relacionada amb l'estudi del clima i la seva evolució. La millora dels sistemes de gran capacitat de càlcul ha d'ajudar a assolir aquest repte, atès que unes projeccions acurades del clima del futur són bàsiques, d'ara en endavant, per fer una bona anàlisi de l'impacte d'un canvi climàtic i per definir unes bones mesures d'adaptació a aquest canvi. ■



Components del sistema climàtic, amb els seus processos i interaccions (IPCC 2007: WG1 - AR4).



Theoretical study of the dynamics of chemical reactions of atmospheric interest

Miguel González

Departament de Química Física, Universitat de Barcelona

The theoretical study of the reaction dynamics involves several steps. In the characterization of the potential energy surface (PES; interaction potential), the stationary points (barriers and minima) connecting reactants and products are located using quantum chemical methods. Then, the PES is evaluated considering a large number of geometries. The second step involves the development of an analytical representation of the PES, although an alternative approach based in the use of interpolation formulae can also be employed. The final step corresponds to the dynamics study, and this can be achieved in the context of classical mechanics, using the mature and widely applied quasi-classical trajectory (QCT) method, and in the context of time independent and time dependent quantum mechanics. The time dependent treatment is probably more intuitive, easier to use, and allows to study some properties (e.g., the way the reaction proceeds) in a more direct way. The final decision to use a given strategy is a matter of taste.

Many atmospheric systems involve triatomic reactions. In spite of the small number of atoms implied, the study of these systems is far from easy as they mainly involve three *heavy* atoms (non-H atoms), quite often in excited electronic states, and there are several PESs connecting reactants and products. Fortunately, collision energies are in general not too high and is commonly a good approximation to neglect the coupling between PESs caused by the motion of the species. The study of reactions of six or more atoms is particularly hard and often a good insight into them may be achieved from reduced dimensionality models.

An interesting question concerns the maximum possible size of a given reaction to be described by quantum mechanics. We may say that the larger proportion of H atoms involved the better. However,

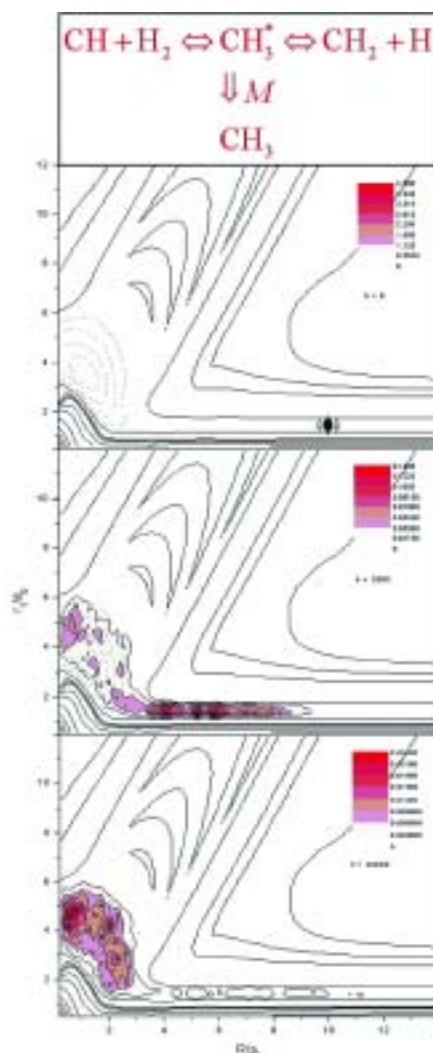
even a relatively *simple* tetratomic system with three H atoms and a deep minimum in the PES (e.g., the $\text{CH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_2 + \text{H}$ reaction; see fig.) still represents a very serious challenge. Extremely difficult problems appear when the wave function of the system is *captured* by the minimum (methyl radical in this case), which increases prohibitively the propagation time necessary for the reaction to take place. Moreover, it becomes necessary to use very large basis sets. Nowadays, rigorous

(i.e., not far from exact) quantum studies can be performed for systems of four or perhaps five atoms (most of them H atoms) and a PES without any significant minima.

This forces us to address our attention to the QCT method. Using this approach we may study an arbitrary system, no matter the number and type of atoms involved and under any reaction condition, inasmuch as we do not try to describe purely quantum phenomena (e.g., tunneling and resonances). In practice the most important problem related to the use of this method arises from the zero point energy (ZPE) breakdown. Thus, the QCT method allows the formation of products with a vibrational energy content below the ZPE and, due to this, its results must be corrected. This problem is particularly relevant for endothermic reactions.

In the case that we are interested in the study of reactions involving light atoms (e.g., H atom transfer), if the systems can not be treated quantum mechanically, in addition to carry out a QCT study including all atoms of the system and in order to estimate the quantum contribution to reactivity, a suitable model of reduced dimensionality can be considered on which both quantum and QCT dynamics calculations are performed.

Supercomputing resources are particularly relevant for quantum dynamics investigations on reactions of more than three atoms. Moreover, they are also of a large interest for QCT studies on reactions of six or more atoms, which are described with an interpolated PES, and in the development of this type of PES representation. ■



Thanks are given to the members of our research team which involves researchers from the University of Barcelona (UB) and the University of La Rioja (UR). We are also grateful to the M.E.C. for its support. Thanks are also given to the Generalitat, C.A.R., UB and UR.

- MARTINEZ, R. et al., *J. Chem. Phys.* 127, 104302 (2007).
- MAYNERIS, J. et al., *J. Phys. Chem. A* 110, 5542 (2006).
- GAMALLO, P. et al., *J. Chem. Phys.* 124, 174303 (2006).
- Martínez, R. et al., *J. Chem. Phys.* 124, 164305 (2006).



Control of Greenhouse Gases and Catalysis: Role of Supercomputing

Konstantin M. Neyman

Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA)
and Institut de Recerca de Química Teòrica i Computacional & Dept.
de Química Física, Universitat de Barcelona

The air is mainly composed of nitrogen and oxygen. But it is only the trace gases, such as carbon dioxide (CO₂), ozone, nitrous oxide and methane that make up less than 1% of the atmosphere, have a notable climatic impact. Along with water vapour they play a central role in establishing the Earth's temperature via the greenhouse effect. The latter is related to absorption of heat radiation of the warmed surface, instead of direct leaving the atmosphere, by vapour and trace gases and to partial reflection of the radiation back to the Earth. Without greenhouse gases surface air temperatures would be well below the freezing point, > 30°C colder than now; the estimated contribution of CO₂ is ~7°C. Thus, stability of CO₂ content in the air is crucial for the temperature balance of the Earth.

In the emission control area of the greenhouse gases, pivotal for the mankind, computer studies in catalysis are expected to very strongly contribute by greatly accelerating catalyst discovery, evaluation and understanding

Since the beginning of the industrial era the atmospheric concentration of CO₂ increased dramatically, by about one third, with the growth notably accelerated recently. CO₂ is by far the most important anthropogenic greenhouse gas – ~60% of the man-made greenhouse effect is attributed to it. Most of the anthropogenic CO₂ emission comes from the burning of fossil fuels in power stations, transport and industrial processes, which generate a huge net atmospheric surplus of CO₂.

Among the directions to counteract unprecedented climatic consequences of the further growing CO₂ concentrations are significantly increased efficiency of energy production and consumption, decreased intensity of economy and considerably improved ability to capture and sequester CO₂. Considering various approaches, advances in the area of chemical catalysis evidently could play a significant role in addressing the global atmospheric CO₂ problem. Its role could range from more efficient production of alternative fuels (e.g., water-splitting), to more efficient fuel cells, catalytic converters for leaner burning, more C-efficient engines, more efficient conversion of renewable resources (e.g., solar radiation, biomass) to fuels and to improved technologies for the sequestration, utilization and disposal of CO₂.

Design of better novel catalysts and optimisation of the existing ones still often rely on “trial-and-error” methods. However, search for new/improved catalysts *from a fundamental basis* became possible in the past decade, due to development of the so-called model catalysts of reduced complexity that can be thoroughly characterised experimentally and thanks to the amazing increase in the computer performance. The latter, along with the fascinating progress in the development of the dedicated software, opened opportunities for precise large-scale calculations of realistic model systems based on sophisticated quantum mechanical methods.

Accurate calculations in catalysis continue to be demanding because of inherent complexity of the systems and phenomena under scrutiny. In combination with experimental data, calculations provide a fundamental understanding of the catalyst material on the atomic level and thus enable utilisation of this knowledge in the catalyst formulation. Even for sim-

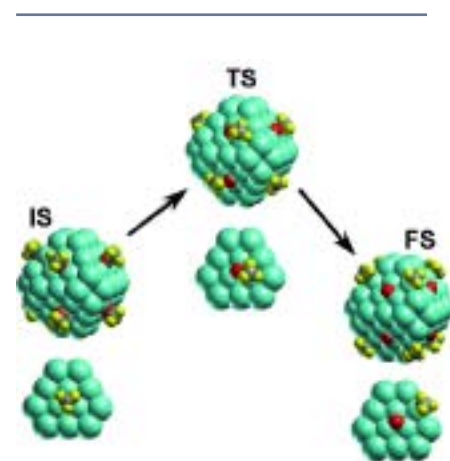


Figure 1. Calculated initial, final and transition states (IS, FS, TS) of the C-O bond breaking of methoxide on edge sites of Pd₇₉ nanoparticle (adapted from *Phys. Chem. Chem. Phys.* 9 (2007) 3451).

ple catalytic cycles structures and energies of all reactant, product and transition state complexes of a dozen of elementary reactions usually have to be quantified; note, that the search for the transition states is an order of magnitude more time-consuming than the already quite costly optimisation of the stable structures. If one mentions the necessity to scan not only a variety of active sites on a given model catalyst but also to include in consideration a number of feasible possibly (more) efficient prospective catalysts, advantages of using correlations (e.g., between the adsorption, reaction and activation energies) become clear.

More and more examples of a successful impact of computations on the design and optimisation of catalysts are becoming available. Obviously, the just outlined computer studies will greatly accelerate catalyst discovery, evaluation and understanding, also in such a pivotal area for the mankind as the emission control of the anthropogenic greenhouse gases. ■



La Computació en Mecànica de Fluids, una eina per elaborar models rigorosos per a la predicció de la dispersió de contaminants

Ildefonso Cuesta

ECoMMFIT. Universitat Rovira i Virgili

L'existència de greus problemes ambientals, com són l'escalfament global i la disminució de la capa d'ozó, ha provocat en la comunitat científica una gran activitat en l'estudi de tecnologies que permetin el control i la minimització d'aquest tipus de riscos. Una d'aquestes col·laboracions correspon a la recerca que porta a terme el grup de recerca ECoMMFIT de la Universitat Rovira i Virgili, que consisteix en la modelització i simulació numèrica de la dinàmica i la transferència de calor i matèria de les emissions en plomalls turbulents.

La simulació numèrica

Avui dia la simulació per ordinador dels problemes tecnològics s'està utilitzant abundantment en múltiples disciplines, de les que podem esmentar a tall d'exemple:

- Predicció del temps meteorològic tant a nivell local, regional o global.
- Predicció de l'impacte ambiental de potencials emissors de contaminants com ara xemeneies i abocadors.
- Disseny d'avions, automòbils i trens mitjançant els túnels de vent numèrics (codis computacionals de simulació de la mecànica de fluids).

Aquest ús intensiu de les eines computacionals de modelització i predicció

de sistemes i processos d'interès tecnològic està motivat pel creixent augment de potència de càlcul i memòria dels ordinadors actuals i pels avantatges econòmics i tecnològics que presenta aquesta aproximació respecte a l'estudi en equips experimentals.

Quant a les principals utilitats dels models computacionals en l'estudi de la dispersió de contaminants podem destacar la predicció de l'impacte ambiental de potencials emissors. També serveixen per col·laborar en el disseny dels protocols d'emergència, ajudant a trobar les zones amb més risc d'impacte ambiental. Finalment, una darrera utilitat consisteix en el suport tècnic per a la presa de decisions en el cas d'un accident real permetent l'òptima localització dels mitjans de contenció i eliminació dels contaminants.

La Computació en Mecànica de Fluids de la dispersió de plomalls

La Computació en Mecànica de Fluids (CFD "Computational Fluid Dynamics") és una disciplina que ajuda a resoldre problemes de mecànica de fluids mitjançant la simulació numèrica per ordinador de les equacions que governen el flux de fluids, obtenint la descripció numèrica de l'evolució espacial i temporal del camp dinàmic.

Per a l'anàlisi tècnica de l'impacte ambiental de plomalls de contaminants, avui dia encara s'estan utilitzant models aproximats de tipus gaussià que presenten importants carències i inconvenients, entre d'altres, que la seva aplicabilitat es redueix a règims de vents constants, i la seva restricció a configuracions de fonts puntuals de contaminants.

Si es vol obtenir una solució rigorosa que descriu amb precisió l'evolució en l'espai i el temps d'un plomall s'ha de recórrer a la CFD. Aquesta tècnica és l'única que pot predir amb precisió l'evolució dels contaminants en zones d'orografia complexa o amb configuracions de múltiples obstacles com és el cas del flux al voltant d'edificis o sistemes industrials.

Simulació directa dels plomalls al grup de recerca ECoMMFIT

Una de les línies principals de recerca del grup de recerca ECoMMFIT consisteix en l'elaboració de models numèrics de predicció de l'evolució de la dispersió de contaminants. Aquests models s'estan integrant en el programari CFD propietari del grup 3DINAMICS, i els càlculs, que requereixen recursos de supercomputació, s'estan realitzant en paral·lel al clúster de 40 CPU amb memòria distribuïda del grup de recerca i al centre de supercomputació CESCA.

En l'etapa actual, s'està estudiant el flux i la dispersió per nombres de Reynolds moderats, en què són aplicables les tècniques de simulació directa de la turbulència. Els resultats corresponents a l'estudi de l'evolució d'un plomall de font lineal i amb presència de flotació han mostrat una gran concordança amb els obtinguts, per altres investigadors, experimentalment.

Aquest estudi permetrà la millora dels models CFD, en incorporar amb precisió els efectes tèrmics en règim turbulent pel cas d'emissions de gasos calents. ■

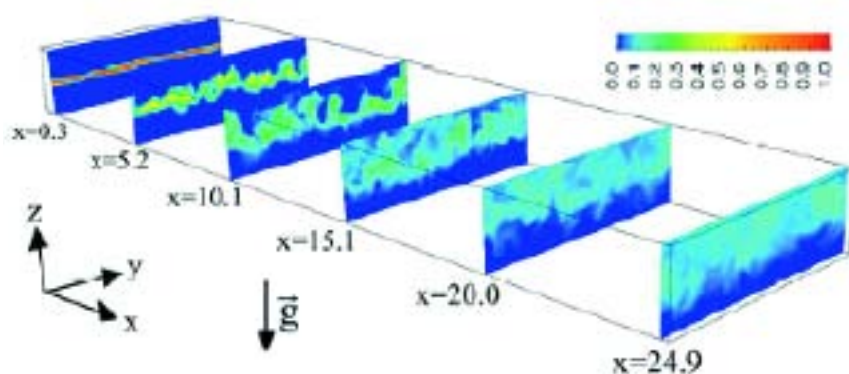


Figura 1. Simulació directa d'un plomall turbulent amb transferència de calor.



La contribució de la URV als estudis de detecció del canvi climàtic

Javier Sigró

Grup de Recerca del Canvi Climàtic (URV)

Les línies de recerca desenvolupades pel Grup de Recerca del Canvi Climàtic (CCRG) de la Universitat Rovira i Virgili estan enfocades bàsicament a dos aspectes: d'una banda, la generació de bases de dades climàtiques de llarg recorregut ajustades i de qualitat controlada; de l'altra, la detecció i caracterització del canvi climàtic.

Disposar de bases de dades climàtiques de llarg recorregut i qualitat ens permet caracteritzar millor quina ha estat l'evolució del clima durant el període instrumental, i detectar l'existència de relacions entre diferents variables climàtiques, així com calibrar, validar i contrastar dades paleoclimàtiques i models climàtics.

La generació de bases de dades climàtiques homogènies i d'alta qualitat implica tot un conjunt de processos que s'inicia amb la selecció d'estacions i l'obtenció de les dades, així com de tota la informació de metadada necessària. La selecció racional de la xarxa d'estacions a integrar en la base de dades respon a una sèrie de criteris com són la cobertura espacial i temporal, la representativitat climàtica, la con-

tinuïtat en el temps i la qualitat potencial de les dades. Les dades climàtiques han de passar un control de qualitat que implica múltiples procediments d'etiquetatge, validació, substitució o eliminació. Una vegada superat aquest control de qualitat, s'ha d'examinar l'existència de potencials inhomogeneïtats, detectar punts de ruptura d'homogeneïtat, construir patrons de correcció, calcular les correccions per a cada estació, variable i escala temporal i aplicar-les (BRUNET et al., 2006).

Els requeriments de capacitat d'emmagatzematge, gestió de les dades i dels processos de control de qualitat i homogeneïtat, encara que modestos, es van incrementant conforme augmenta el nombre d'estacions, el nombre de variables, la informació de metadada i, especialment, amb la incorporació de resolucions temporals de més detall.

La detecció i caracterització del canvi climàtic engloba tot un conjunt de tècniques relatives a l'obtenció de sèries regionals i l'anàlisi d'extremes, la quantificació de les tendències en els diferents períodes identificats en l'evolució de les varia-

bles climàtiques, i l'aplicació de tècniques d'anàlisi multivariant (anàlisis de conglomerats, anàlisis de components principals i extracció factorial, correlacions canòniques) per a la caracterització de patrons espacials de temperatura i precipitació, així com la identificació de senyals de baixa freqüència o teleconnexions en camps de pressió d'elevada resolució temporal.

L'aplicació d'aquestes tècniques a les bases de dades ajustades i controlades de qualitat ens ha permès la construcció de sèries regionals pel conjunt d'Espanya i la detecció d'un increment

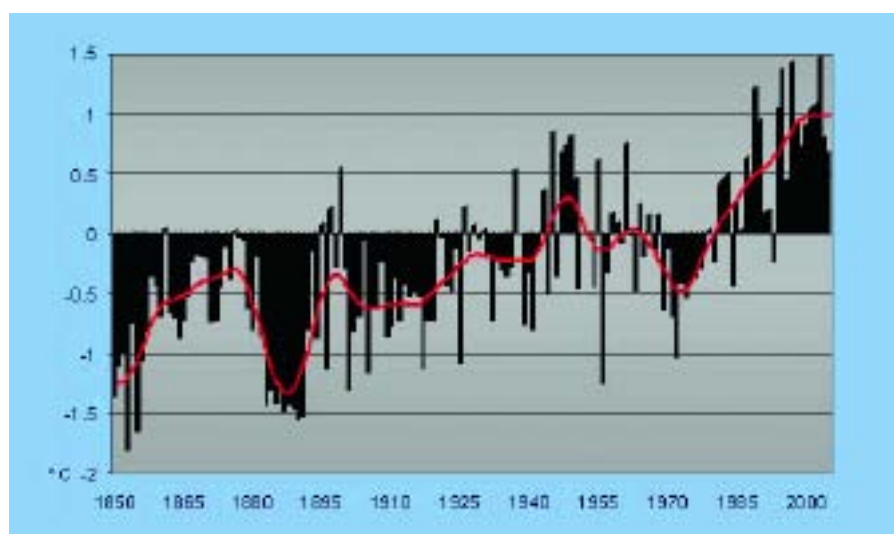
L'aplicació d'aquestes tècniques ha permès la detecció d'un increment tèrmic d' $1,5 \pm 0,2$ °C

tèrmic d' $1,5 \pm 0,2$ °C per aquest territori, així com la caracterització de tres zones d'evolució tèrmica diferenciada a la Península Ibèrica (Brunet et al., 2007). Tanmateix, l'anàlisi de les sèries d'índexs d'extremes mostra que aquesta tendència a l'increment tèrmic no es produeix únicament en els valors mitjans, sinó que l'escalfament al conjunt del territori espanyol està associat amb una significativa reducció en el nombre de dies freds i un increment en els últimes dècades del nombre de nits càlides.

Per a una millor caracterització del canvi climàtic és necessari incrementar la mida i la resolució de les bases de dades climàtiques, així com disposar de la capacitat computacional requerida per a l'anàlisi relacional de les diverses variables climàtiques. ■

• BRUNET, M.; JONES, P. D.; SIGRÓ, J.; SALADIÉ, O.; AGUILAR, E.; MOBERG, A.; DELLA-MARTA, P. M.; LISTER, D.; WALTHER, A.; LÓPEZ, D. 2007. "Temporal and Spatial Temperature Variability and Change over Spain during 1850–2005", *J. Geophys. Res.*, 112, D12117, doi:10.1029/2006JD008249.

• BRUNET, M.; SALADIÉ, O.; JONES, P. D.; SIGRÓ, J.; AGUILAR, E.; MOBERG, A.; LISTER, D.; WALTHER, A.; LÓPEZ, D.; ALMARZA, C. 2006. "The Development of a New Dataset of Spanish Daily Adjusted Temperature Series (SDATS) (1850–2003)", *Int. J. Climatol.* 26: 1777–1802.



Anomalies de la temperatura mitjana del conjunt de la Península Ibèrica 1850-2005 a partir de 22 registres de la SDATS.



“Cal millorar la governança del sistema català de recerca, complex i potent en els darrers anys, però sense planificació”

ENTREVISTA A RAMON MORENO, DIRECTOR GENERAL DE RECERCA

Llicenciat en Biologia i doctor en Ecologia per la UAB, Ramon Moreno és catedràtic a la UdG, on ha estat vicerector primer amb competències també de Recerca. Des de fa sis mesos, ocupa el càrrec de director general de Recerca de la Generalitat de Catalunya i entre les fites a assolir hi figura la millora de la governança i planificació del sistema català de recerca. Per a Moreno, “només una planificació a llarg termini ens pot garantir que Catalunya assolirà nivells d’excel·lència i competitivitat equiparables als dels països més avançats”.

Precisament el fort avenç d’altres països i regions, ha fet que Catalunya hagi anat quedant-se enrera en recerca i innovació respecte a d’altres regions europees. Aquest “retrocés relatiu”, com explica el director general, és conseqüència, d’una banda, del “dèficit fiscal a què estem sotmesos” i que “limita les inversions en recerca i, d’altra banda, de la inexistència d’una planificació estratègica que faci més eficient les inversions”. Projectes com el Pacte Nacional per a la Recerca i la Innovació i l’Agència de Centres de Recerca de Catalunya haurien d’ajudar a redreçar aquesta situació.

El conseller Huguet ha presentat recentment al CIRIT el projecte d'elaboració del Pacte Nacional per a la Recerca i la Innovació. Quines són les seves finalitats?

Establir, per acord de tots els agents del sistema de recerca i innovació i de tots els partits polítics i agents socials, les bases de la política de recerca i innovació de Catalunya a desenvolupar durant els propers 15 anys. Només una planificació a llarg termini ens pot garantir que Catalunya assolirà nivells d'excel·lència i competitivitat equiparables als dels països més avançats. Catalunya ha d'esdevenir una veritable societat del coneixement, que basa el seu progrés en el talent, la ciència, la tecnologia i la innovació, al servei dels reptes socials i econòmics del país.

En les motivacions del PNRI es comenta que "la posició de Catalunya en recerca i innovació s'allunya cada vegada més dels països i regions líders (82a posició de les regions europees), i d'altres fins ara considerats emergents ja ens estan passant al davant". A què es deu aquest retrocés?

És un retrocés relatiu, a conseqüència de que els altres països o regions avancen més que no pas nosaltres. Això és a causa, d'una banda, del fet que malgrat el fort esforç que realitzem, el dèficit fiscal a què estem sotmesos ens limita les inversions en recerca i, de l'altra, de la inexistència d'una planificació estratègica de la recerca que faci més eficients les nostres inversions.

La planificació estratègica és molt complexa, atès que la transferència de la competència en recerca ha estat traspasada sense recursos i, per tant, molts d'aquests recursos els aconseguim de forma estrictament competitiva. Això és bo perquè fa que el nostre sistema estigui molt preparat per aconseguir aquests recursos competitius (tant a Espanya com a Europa), però depenem de les polítiques i de les seves orientacions. Els recursos no condicionats per poder crear, dissenyar i planificar noves polítiques o polítiques pròpies són molt limitats. Aquest fet impedeix el creixement de la inversió pública en R+D+i que fa de tractora de la inversió privada.

Quines línies d'actuació se seguiran per redreçar aquesta situació?

Les que indiqui el Pacte Nacional per a

la Recerca i la Innovació. Però, en qualsevol cas, haurà d'incloure la captació de més recursos provinents de l'Administració General de l'Estat i una major inversió privada en R+D+i, així com revisar la inversió pública que fa la Generalitat i que pertocaria segons el nostre PIB. Si bé la proporció d'inversió pública/privada és a prop dels objectius de Lisboa (ara és 38% públic/63% privat, any 2005), no passa el mateix en la proporció respecte al PIB. Actualment, la inversió en R+D pública representa un 0,49% del PIB català, per sota de la mitjana espanyola (0,52%), i lluny de la mitjana de la UE ampliada (UE-27, 0,65%). Si s'augmenta el volum d'inversió pública en R+D+i, hi haurà un fenomen d'arrossegament de la inversió del sector privat.

És molt simptomàtic que malgrat el nivell de descentralització actual de l'Estat, el nou Plan Nacional ha estat realitzat d'esquena a aquesta realitat

També cal millorar la governança del sistema català de recerca, que en els darrers anys ens ha portat a un sistema complex i potent, però sense planificació. Aquesta mancança ha creat solapaments i ineficiències en el sistema que cal identificar i millorar. Cal recordar que la capacitat de planificació de tot el sistema català no és fàcil perquè depèn en part de polítiques i inversions alienes.

En l'entrevista publicada al diari AVUI el passat 29 de setembre, explicava que tenen molt avançat l'avantprojecte de llei de creació de l'Agència de Centres de Recerca de Catalunya. Com ajudarà aquesta Agència a la recerca?

L'Agència ha de facilitar la governança del sistema de centres de recerca participats per la Generalitat de Catalunya i el desenvolupament de serveis mancomunats, així com donar visibilitat i promoció al sistema. Una funció molt important ha de ser el seguiment i l'avaluació

periòdica dels centres, per tal d'assegurar-ne la qualitat. Els centres de recerca representen un nucli molt important de recerca professionalitzada i competitiva a nivell internacional. Fins ara, han estat subjectes a una avaluació sobre progrés propi i es vol que aquesta avaluació ara ens ajudi a posicionar-los internacionalment en l'elit de la recerca. L'Agència haurà de gestionar de la mateixa forma les relacions amb els centres i ajudar-los al seu posicionament.

Recentment el Govern ha reorganitzat el Comissionat per a Universitats i Recerca, incorporant-hi una nova direcció general i diverses subdireccions. Quins és el seu objectiu i què n'esperen obtenir?

Aquesta reestructuració obeeix a l'objectiu d'adaptar la funcionalitat del Comissionat als nous reptes i tasques que cal afrontar en els propers anys, especialment en relació a la implantació del nou sistema de titulacions i dels criteris de Bolonya. També s'intenten pal·liar les mancances estructurals derivades de la pèrdua de la condició de departament.

El Ministerio de Educación y Ciencia (MEC) està elaborant un nou Plan Nacional de I+D+i. Quina participació hi té la Generalitat i quin creu que serà l'impacte per Catalunya?

Ara estem entrant en converses amb el MEC per tal d'establir el model de col·laboració i de participació conjunta. Encara és aviat per dir si hi sortirem guanyant o no amb aquest nou Plan Nacional. Esperem que puguem conduir les inversions que se'n derivin cap a línies estratègiques que són d'interès per a Catalunya. En qualsevol cas, és d'esperar que en un sistema de finançament competitiu la qualitat dels grups de recerca de Catalunya ens assegurarà una participació sobre del que ens podria correspondre per quota de població o inclús de PIB, com fins ara.

Cal dir que és molt simptomàtic que malgrat el nivell de descentralització actual de l'Estat, el nou Plan Nacional ha estat realitzat d'esquena a aquesta realitat. És per això que, malgrat s'insisteix en el cofinançament d'actuacions entre les Comunitats Autònomes i el Govern central, aquestes no tenen cap capacitat per decidir sobre aquelles. També és cert que Catalunya ha estat capdavantera en iniciatives que s'han incorporat amb més o menys fortuna als Plans Nacionals.



RAMON MORENO AMICH és director general de Recerca des de l'abril de 2007. Nascut a Girona el 1958, és catedràtic d'Ecologia de la Universitat de Girona (UdG), llicenciat en Biologia per la UAB (1980) i doctor en Ecologia per la mateixa universitat (1988). Adscrit al Departament de Ciències Ambientals, és investigador de l'Institut d'Ecologia Aquàtica de la Universitat de Girona. El seu treball s'ha desenvolupat en el camp de la limnologia (ecologia de les aigües continentals) i és especialista en ecologia de peixos i ecologia d'aiguamolls.

Del 2002 al 2005 va ser vicerector primer de la UdG, i durant el darrer any de vicerector primer va exercir també les com-

petències de Recerca. Ha participat en la publicació de diversos llibres, ha realitzat una setantena d'articles en revistes científiques, i és autor de diversos documents científics i tècnics, i comunicacions a congressos. És membre de la Junta de Protecció del Parc Natural dels Aiguamolls de l'Empordà i del Consell Assessor de l'Àrea Protegida de les Illes Medes, en representació del Consell Interuniversitari de Catalunya. També ha dirigit el màster en Gestió ambiental, i els Diplomes de Postgrau en Gestió ambiental en l'àmbit municipal, en Sistemes de control i certificació ambiental, en Gestió i Planificació Forestal, i en Comunicació Ambiental i Sostenibilitat.

El model ICREA de contractació d'investigadors s'està incorporant a nivell nacional, però el model de Centres de Recerca d'Excel·lència que hauria de ser compatible amb els models autonòmics i, en el nostre cas, en el model de Centres de Recerca de Catalunya (CERCA) és encara una incògnita. Atesa la limitació de recursos, es continuarà amb la política d'aprofitar aquelles actuacions externes i competitives que siguin adients, complementant-les amb actuacions pròpies que marquin les priorititzacions polítiques. **El Consell de Ministres ha aprovat al setembre l'acord per a l'inici de l'execució del mapa d'Infraestructures Científico-Tecnològiques Singulares (ICTS). Quina valoració fa d'aquest nou mapa?**

Crec que s'ha fet una repartidora territorial sense tenir en compte el potencial real de recerca de cada regió. S'observen algunes duplicitats, com en el cas de plataformes de supercomputació, que difícilment són justificables en termes de rendiment per a la recerca. En altres casos, s'han ubicat ICTS en zones isolades, lluny de tot arreu, que resulten incomprendibles. Pel que fa a Catalunya, a part del sincrotró ALBA, la plataforma de fenotipació Mousse Clinic (CEBATEG), el BSC, i el CIMNE (pendent encara), ens hem quedat sense una ICTS en microscòpia que s'ha concedit a Aragó. Aquest fet és un apartat més de les limitacions que podem tenir en la nostra planificació i exe-

cució de la recerca. Les ICTS han de respondre a criteris científics, però també és cert que la seva capacitat de dinamitzar el territori i el seu entorn és evident. És per això incomprendible que, malgrat la política de disposar només d'un "Centro Nacional" per especialitat, hi hagi excepcions com ara l'esmentada de la supercomputació i que aquest criteri no s'apliqui en altres casos, més quan la reconeguda capacitat dels actors és

El paper del CESCA durant aquests 16 anys ha estat fonamental per al desenvolupament d'una recerca de qualitat a Catalunya

incomparable. És una segona forma de l'espoliació "equilibradora", que castiga als excel·lents i els priva de competir amb infraestructures que difícilment es construiran per part del govern corresponent donat el seu cost. També s'ha de tenir en compte que part dels fons dedicats a Infraestructures venen de la UE i, per tant, com que Catalunya està dins del segment de regió de competitivitat, els

fons aplicables són menors i molt restrictius i, en canvi, en altres regions manquen projectes on es puguin aplicar donada la seva poca "densitat" científico-tècnica.

En els seus 16 anys d'existència, el CESCA ha passat de ser bàsicament un centre de supercomputació a convertir-se en un gestor d'e-infraestructures. Com valora l'evolució dels serveis d'aquest Consorci a la universitat i la recerca?

El paper del CESCA durant aquests 16 anys ha estat fonamental per al desenvolupament d'una recerca de qualitat a Catalunya. És cert que amb el desenvolupament del BSC, el CESCA ha quedat especialitzat com a gestor d'e-infraestructures de recerca i emmagatzematge de grans volums de dades, i aquest és un paper que volem potenciar, però cal esmentar que, per exemple, la gestió de l'Anella Científica és un gran projecte de país. És una gran infraestructura científico-tècnica imprescindible que hauríem de crear de forma prioritària si no existís. A més, ha influït de forma definitiva en grans projectes comuns com el CBUC i els seus dipòsits de dades i ens ha demostrat que som capaços de col·laborar en projectes complexos sense cap problema, i de fer evolucionar sistemes de forma dinàmica, assolint objectius inicialment no previstos, de forma creativa. Aquesta capacitat és un dels grans valors afegits del treball en recerca a Catalunya. ■

La Xarxa Sanitària i Social de Santa Tecla, a l'Anella

La Xarxa Sanitària i Social de Santa Tecla es connectarà a l'Anella Científica amb un cabal de 10 Mbps. Com explica Manel Sanromà, director de Sistemes d'Informació de la Xarxa Sanitària i Social de Santa Tecla, "la connexió a l'Anella ens dóna l'oportunitat de poder trametre imatges entre els diferents centres connectats, potenciant en el futur immediat la possibilitat d'una història clínica compartida a Catalunya amb totes les prestacions per als facultatius que ara ja gaudeixen de forma local; igualment possibilita el diagnòstic remot, la formació i les sessions clíniques entre diferents hospitals i obre la porta a tot el seguit d'oportunitats que ofereix una xarxa d'alta velocitat per a la millora de la salut dels ciutadans".

La Xarxa Sanitària i Social de Santa Tecla és una organització sanitària i social sense ànim de lucre formada per tres fundacions benèfiques (Fundació Hospital Sant Pau i Santa Tecla, Fundació Centres Assistencials d'Urgències i Fundació Sociosanitària i Social Santa Tecla), tres societats monogràfiques (Laboratori, Radiologia i Fisioteràpia), dos consorcis (Consorti de Serveis Bàsics de Salut i Consorti d'atenció a la dependència) i quatre agrupacions d'interès econòmic (Gestoria, Neteja, Hosteleria i Aprovisionaments).

Aglutina i gestiona 33 centres del Tarragonès i el Baix Penedès de diferent especialitat (atenció primària, hospitals i residències geriàtriques): tres hospitals (Sant Pau i Santa Tecla, El Vendrell i el de Tarragona-Llevant), sis àrees bàsiques de salut (les del Vendrell, Calafell, Arboç, Torredembarra, Vila-seca i Tarragona-IV-Llevant), 20 dispensaris municipals (Coma-

ruga, Segur de Calafell, Bellvei, Santa Oliva, Albinyana, la Bisbal del Penedès, La Plana, la Pineda, Roda de Barà, Altafulla, Creixell, El Catllar, la Nou de Gaià, la Pobla de Montornès, Salomó, Bonastre, la Riera de Gaià, Banyeres del Penedès, St. Jaume dels Domenys i Llorenç de Penedès) i quatre centres de Serveis Sociosanitaris i Socials (Residència assistida Santa Tecla-Llevant, Sociosanitari Santa Tecla-Llevant, Centre de dia Constantí, Centre especial de treball i dues escoles bressol municipals).

En total, més de cent-vuitanta mil persones reben atenció i assistència d'un equip amb més de 1.800 professionals "disposats amb el seu treball a donar la millor qualitat de vida a tots els qui ho necessiten", com explicita la missió de la Xarxa. A més, a partir del 6 de juliol de 2007, la Xarxa Sanitària i Social de Santa Tecla amb la creació de la Fundació

Argentina Santa Tecla es fa càrrec del projecte de la nova xarxa d'atenció "Nuevo Hospital El Milagro", amb els centres El Nuevo Hospital El Milagro i Hospital Niño Jesús de Praga i 23 centres de salut (primer nivell).

Per a Sanromà, la connexió a l'Anella "permetrà entrar a formar part d'una xarxa d'alta velocitat que connecta els centres de recerca i els hospitals més avançats del país". Amb la renovació de l'Anella Científica el 2008, la Xarxa Sanitària i Social de Santa Tecla, com altres institucions connectades a 10 Mbps, té previst ampliar la connexió a l'Anella a 100 Mbps. "En la mesura que els hospitals i centres de salut del país es vagin connectant a l'Anella es farà realitat un espai de treball i de recerca compartit que sens dubte augmentarà la qualitat i les prestacions del nostre sistema de Salut", comenta Sanromà.

L'Hospital de Sant Pau i Santa Tecla

L'any 1151, Tarragona ja disposava clarament d'un hospital, segons es desprèn de la donació de certs béns per part de Guillem d'Aguiló, en l'època de l'arquebisbe Bernat Tort. L'any 1464, l'arquebisbe Pere d'Urrea, amb el consentiment i la cooperació de l'Ajuntament municipal i el Capítol Eclesiàstic, uneix els dos hospitals que tenia la ciutat en un de sol, el de Santa Tecla. La fundació establí que l'administració fos a càrrec de persones designades per l'Ajuntament i el Capítol Eclesiàstic.

El 1588 conclou l'obra del nou hospital, ubicat per l'arquebisbe Antoni Agustí en el terreny situat entre el col·legi tridentí i el convent-església dels pares jesuïtes. Dos segles més tard es construeix l'edifici en el solar que hi havia fins arribar al carrer de Sant Agustí. Es va rehabilitar per a dependències del propi hospital i per a internar-hi la Casa de Recollides. El canonge Botines, l'any 1806, va fer testament a favor de l'hospital amb la finalitat que es construís una obra nova anomenada Casa de Convalescència.

A la fi de la dècada dels vuitanta, l'hospital es va integrar dins la Xarxa Hospitalària d'Utilització Pública (XHUP), i es va aixecar un hospital modern de cinc plantes a la façana de la Rambla Vella i un edifici de serveis a l'interior del solar, tot preservant aquells elements arquitectònics que constitueixen signes d'identitat de l'edifici original. ■



La Xarxa Santa Tecla treballa amb una història clínica digital compartida a tots els seus centres.

Nous fàrmacs per bloquejar l'entrada del VIH a les cèl·lules



Universitat Ramon Llull

La Síndrome d'Immunodeficiència Adquirida (SIDA) ha esdevingut una terrible malaltia d'abast global. D'acord amb les dades recollides per l'Organització Mundial de la Salut, s'estima que actualment 39 milions de persones conviuen amb aquesta malaltia i que el 2006 han aparegut 4,3 milions de casos nous. La principal causa de la SIDA és la infecció de cèl·lules hoste pel virus de la immunodeficiència humana (VIH). Les teràpies anti-retrovirals actuals (ART) contra la SIDA, basades generalment en inhibidors de la transcriptasa reversa i de la proteasa, poden controlar la propagació del virus i arribar a aconseguir millorar la qualitat de vida dels pacients, però no poden arribar a eliminar el virus del cos i poden tenir efectes secundaris no desitjats. Diversos investigadors del grup de recerca del Prof. Jordi Teixidó de l'Institut Químic de Sarrià (IQS) consideren com a alternativa molt prometedora el desenvolupament de noves teràpies que puguin prevenir l'entrada del VIH a les cèl·lules hoste i, per tant, bloquejar la primera etapa crucial del procés d'infecció del virus.

“El descobriment del procés d'infecció de cèl·lules per VIH mostra que aquest s'inicia mitjançant la fusió del virus amb la cèl·lula diana gràcies a la unió de la glicoproteïna gp120 del virus amb el receptor proteic CD4 i els coreceptors CXCR4 o CCR5 de la cèl·lula diana”, explica Jordi Teixidó. A partir d'aquest descobriment ha aparegut un interès considerable pel desenvolupament de nous lligands els quals modulin els canvis conformationals dels coreceptors i, per tant, bloquegin la fusió del virus a les cèl·lules.

Així, aquest grup de recerca està utilitzant diferents aproximacions computacionals i experimentals per identificar compostos actius bloquejadors dels coreceptors CXCR4 i CCR5 que puguin, per tant, inhi-

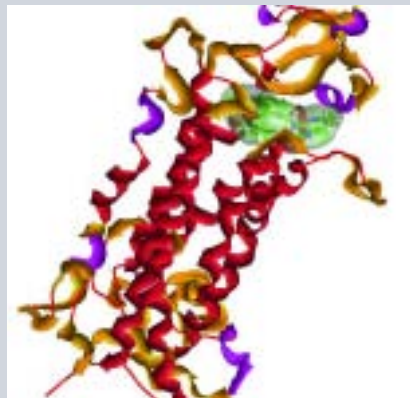


Figura 1. Cribratge virtual basat en l'estructura: *Docking CXCR4-AMD3100*.

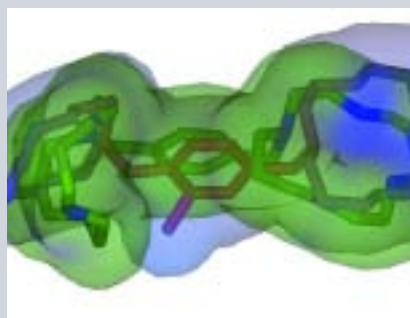


Figura 2. Cribratge virtual basat en els lligands: acarament de forma (*shape matching*). Molècules AMD3100 i AMD 3167.

bir l'entrada del VIH a les cèl·lules. “Generalment, aquestes aproximacions tenen com a objectiu el cribratge ràpid de grans quimiotèques de compostos candidats a possibles fàrmacs. Actualment, hom es refereix a aquestes aproximacions computacionals com a mètodes de cribratge virtual (*virtual screening*). Així, el cribratge virtual de quimiotèques de compostos ha esdevingut una alternativa aproximada però útil als mètodes de cribratge real al laboratori de grans quimiotèques de compostos (*high-throughput screening methods*)”, explica Teixidó. En el cribratge virtual, els compostos poden ser seleccionats i filtrats mitjançant recerques de semblança 2D o 3D, aplicant tècniques d'anàlisi de diversitat i avaluant la interacció o acoblament (*docking*) de compostos contra una proteïna diana. Els compostos poden també ser seleccionats en

funció de les seves propietats físiques predites (estudis ADMET) i en funció de la seva accessibilitat sintètica. Aquestes aproximacions poden ser aplicades a conjunts de compostos, ja sigui de manera seqüencial o en paral·lel.

En termes generals, aquests mètodes poden ser classificats com mètodes basats en l'estructura (*structure-based methods*), utilitzats quan l'estructura del receptor és coneguda, com per exemple els mètodes de *docking* i *ligand-based searches*; o mètodes basats en els lligands, usats quan el procés de cribratge només té en compte la caracterització de compostos actius coneguts, per exemple en la comparació de propietats 2D/3D utilitzant actius coneguts com a referència o en la construcció de models farmacofòrics. Les tècniques de cribratge virtual es poden aplicar a conjunts de compostos actius coneguts, el que s'anomena anàlisi retrospectiva, amb la finalitat d'establir paràmetres apropiats i validar el protocol de cribratge. Un cop validat, també pot ser aplicat per seleccionar compostos dels quals es vol testar la seva activitat i és anomenat anàlisi prospectiva. Apparentment, els mètodes basats en l'estructura, els quals utilitzen estructures de la proteïna diana conegudes o modelades/construïdes, haurien de ser els que proporcionessin els millors models de cribratge, ja que persegueixen avaluar les interaccions proteïna-lligand. No obstant això, l'ús d'aproximacions basades en l'estructura depèn críticament de la qualitat de les estructures de la proteïna d'estudi disponibles i del programari d'acoblament emprat. Per aquest motiu, els diversos mètodes computacionals emprats dins el camp del descobriment de fàrmacs sovint utilitzen una combinació d'ambdues tècniques, basades en l'estructura i basades en els lligands.

Com expliquen els integrants del grup, en aquest projecte s'ha construït una base de dades de compostos actius procedents de la literatura (molècules derivades de l'AMD3100, macrocicles, anàlegs del KRH1636, compostos del tipus complex dipicolilamina-zinc(II) i tetrahidroquinolines com a inhibidors de CXCR4; derivats del SCH-C i 13 famílies més com a inhibidors de CCR5), compostos sintetitzats al grup i compostos inactius *drug like* procedents de la biblioteca Maybridge amb propietats similars als compostos actius.

Els compostos sintetitzats al grup formen part d'una quimioteca virtual dissenyada com a anàlegs de l'AMD3100 (compost de referència inhibidor del coreceptor CXCR4), és a dir, sistemes polin nitrogenats separats per un espaciador *p*-fenilènic. D'aquesta quimioteca s'ha seleccionat un conjunt de compostos diversos mitjançant el programari propi del grup, PRALINS, per tal de dur a terme la seva síntesi i assaig de l'activitat (en col·laboració amb el grup del Dr. Esté del laboratori de retrovirologia de l'IrsiCaixa). Els compostos actius trobats s'han inclòs com a actius de la base de dades. Per trobar altres compostos actius s'han emprat les tècniques de cribratge virtual.

Per la banda de mètodes basats en el lligand, s'han realitzat estudis de QSAR (amb el programari MOE), a partir dels quals s'obté una funció que relaciona l'estructura de molècules amb la seva activitat d'una manera quantitativa, disseny de farmacòfors o models tridimensionals en els quals es defineixen les característiques essencials que han de tenir les molècules per interaccionar amb els receptors, *shape matching* (PARASHIFT, ROCS) amb el qual es defineix la forma que han de complir les molècules per presentar activitat.

Per als mètodes basats en l'estructura, és necessari disposar de l'estructura del receptor. Les dianes són els coreceptors CXCR4 i CCR5, els quals pertanyen a la família de les proteïnes GPCR (*G-protein coupled receptors*). L'única estructura que es troba cristal·litzada d'aquesta família és la rodopsina bovina, la qual s'utilitza com a referència en el modelatge

per homologia dels coreceptors (MODELLER, CONGEN). Un cop obtinguts els models s'empren les tècniques d'acoblament (AUTODOCK, GOLD, FRED) per avaluar les interaccions proteïna-lligand mitjançant una funció de puntuació (*scoring*). L'ús de tècniques de dinàmica molecular, costoses computacionalment, permeten refinar les conformacions obtingudes a l'acoblament proteïna-lligand.

Noves teràpies per prevenir l'entrada del VIH a les cèl·lules hoste com a possible alternativa a les teràpies antiretrovirals actuals

A més, s'han realitzat estudis de *no vo design* (CERIUS) per tal de trobar esquelets (*scaffolds*) candidats a ser actius o modificar les molècules actives ja sintetitzades pel grup. S'utilitza l'estructura dels receptors per identificar la geometria i el tipus d'interacció que han de tenir els lligands per unir-s'hi.

Per validar els models i fixar els millors paràmetres de cadascun d'ells s'ha realitzat una anàlisi retrospectiva del cribratge virtual emprant les bases de dades d'actius i d'inactius confeccionades. Un cop determinats els millors models es realitza l'anàlisi prospectiva per tal d'establir un rànquing de possibles nous inhibidors de CXCR4 i CCR5 per ser sintetitzats als laboratoris de l'IQS. ■



Grup d'Enginyeria Molecular de l'Institut Químic de Sarrià.

Noves tecnologies en CATALÀ!

El nom dels signes

Qui no ha dubtat alguna vegada sobre el nom de signes gràfics, com ara @, # o &, d'ús gairebé imprescindible en àmbits com la informàtica o la telefonia?

El signe @, conegut amb el nom d'*arrova* o *rova* (*arroba*, en castellà; *at*, en anglès), ja era utilitzat a l'edat mitjana per a abreviar la preposició llatina *ad*. Després, es va especialitzar en usos mercantils i ha perdurat fins als nostres dies convertit en un element obligat en les adreces electròniques, que separa la signatura de l'usuari de l'ordinador que l'hostatja.

Un altre signe força conegut, i utilitzat sobretot en els teclats telefònics i altres aparells electrònics, és el signe #. En català, rep la denominació de *coixinet* o *quadradet* (*almohadilla* o *cuadradillo*, en castellà; *hash*, *pound* o *square*, en anglès) i, segons la programació, pot tenir diverses funcions.

Finalment, el signe &, que expressa una relació copulativa entre dos elements, i que se sol utilitzar com a operador lògic en l'àmbit de la informàtica i com a component de moltes firmes comercials, també té, com en el cas de l'arrova, una llarga tradició, atès que prové de la lligadura de les lletres *e* i *t* que formen la conjunció llatina *et* ('i'). Per a aquest signe, força conegut a casa nostra amb el seu nom anglès *ampersand*, el català ha fixat la denominació *et*, que reproduceix amb precisió la forma i el significat llatí original, i, com a forma sinònima, la denominació *i comercial*, nom utilitzat tradicionalment en l'àmbit de les arts gràfiques, tant en català com en les altres llengües romàniques (*i comercial*, en castellà; *et commercial*, en francès; *e commerciale*, en italià; *e comercial*, en portuguès).



www.termcat.cat

La popularitat de la comprensió lectora de l'anglès al TDX



Es pot comprendre millor un text escrit en una llengua estrangera, com ara l'anglès, si la seva temàtica ens és familiar? I si sabem que el text que llegim és, per exemple, un conte? Respondre a aquestes preguntes i esbrinar quin paper juguen certs components del coneixement previ en la comprensió lectora de l'anglès com a llengua estrangera és el propòsit de *Conocimiento previo, esquemas de género y comprensión lectora del inglés como lengua extranjera*, la tesi més consultada de la Universidad de Murcia (UM) al dipòsit Tesis Doctorals en Xarxa (TDX).

SÍLVIA SALGADO



Aquesta tesi, escrita per Piedad Fernández i dirigida per Rafael Monroy del Departament de Filologia Anglesa de la UM, va ser llegida l'any 2000 i afegida al TDX el novembre de 2005, quatre mesos després que aquesta universitat s'incorporés al servei. Des d'aleshores, ha estat la tesi més consultada de la UM en el dipòsit.

Per a José Antonio Cobacho, rector de la UM, "la utilitat de fer disponible tot el saber en xarxes d'informació com internet és enorme, ja que simplifica i apropa al personal investigador els resultats obtinguts del treball acadèmic. Només s'han de veure les estadístiques del TDX, que superen les quatre-centes

Rafael Monroy:

"L'ús de pistes lèxiques lligades al component temàtic també incideix en la comprensió d'un text"

mil consultes mensuals de les tesis, que eren documents d'accés tradicionalment difícil, o impossible, quan no estaven publicades". Segons el rector, "els organismes d'acreditació, tant estatals com autonòmics, haurien de valorar aquestes publicacions, la seva alta visibilitat i el seu impacte, quan avaluin a docents".

El director de la tesi, Rafael Monroy, afirma que el TDX "és un canal molt útil pel qual es poden difondre aquests tipus de treballs, ja que de vegades passa molt de temps des que finalitza la recerca fins que es publiquen els resultats. Amb aquest dipòsit la immediatesa i l'accés resten garantits". A més, afegeix Piedad Fernández, "la possibilitat d'accedir-hi remotament és un element clau, ja que no sempre resulta fàcil consultar tesis d'altres universitats, fins i tot dins el mateix país".

La tesi pretén analitzar quina importància tenen el coneixement de la llengua materna, el de la llengua meta (llengua estrangera, l'anglès en aquest cas), el temàtic o conceptual i el coneixement estratègic a l'hora de comprendre un text en llengua estrangera. Segons l'autora, "la tesi comprova com el coneixement previ facilita l'aprenentatge d'una llengua estrangera i, en concret, la seva comprensió lectora".

La principal diferència entre aquesta tesi i d'altres de similars és la incorporació del concepte de gènere discursiu a la recerca sobre comprensió lectora. "Aquest treball demostra la relació directa entre el coneixement formal dels gèneres discursius i la comprensió lectora d'una llengua estrangera i, a més, ho fa afegint proves empíriques sobre el benefici de la instrucció explícita en l'ús d'estratègies o esquemes formals en l'aula d'idiomes", comenta Monroy.

Els esquemes de gènere són els coneixements previs que el parlant té sobre les convencions retòriques de qualsevol text que li permeten distingir un relat d'un diàleg o una carta, per exemple. Formen part del context del missatge i, alhora, en determinen la seva configuració. Per a Fernández, "els gèneres es poden entendre com realitzacions discursives amb un objecte comunicatiu clar, encabides dins una comunitat discursiva que les identifica clarament i amb una integritat propiciada no només per trets formals, sinó també per convencions pragmàtiques o d'ús a les quals s'associen".

La tesi se centra en una comprensió lectora de nivell superior, ja que existeixen diversos nivells de comprensió d'un text, que depenen al mateix temps del tipus de lectura que se'n faci (superficial, intensiva, extensiva...) i del propòsit de la lectura (extreure informació, llegir per plaer, etc.).

A més, la comprensió d'un text varia segons cada lector, ja que hi influiran els seus coneixements previs. Quan un lector s'enfronta a un text porta incorporats, a més dels seus coneixements lingüístics, altres que corresponen a convencions de tipus sociocultural, dins una tradició i un context comunicatiu, de manera que la captació del significat del text ha d'incloure aquestes convencions.

Piedad Fernández:

“El coneixement previ facilita l'aprenentatge d'una llengua estrangera i en concret, la seva comprensió lectora”

Per a Monroy, el fet que la tesi sigui tan consultada es deu a que “ofereix una revisió de la literatura molt exhaustiva i una actualització de temes que no han estat tractats en estudis amb llengües estrangeres, com per exemple el processament del discurs, que s'ha abordat més en relació amb la llengua materna”. A més, “la tesi ofereix moltes dades de caràcter empíric que poden servir d'orientació per a futurs treballs”, afegeix Fernández.

Per portar a terme l'estudi es van realitzar proves de comprensió lectora a alumnes de tercer curs de la diplomatura de Biblioteconomia i Documentació. Aquestes proves consistien en tests d'opció múltiple, resums i qüestionaris relatius a l'ús de pistes textuales durant la lectura i a l'ús d'estratègies lectores. “Amb aquestes proves s'ha volgut comprovar quin efecte tenen tres elements del coneixement previ: el coneixement previ temàtic, l'experiència pràctica en l'àmbit del propi text i el nivell lingüístic de la L2 (llengua meta o llengua estrangera)”, explica l'autora.

Com a resultat, s'ha demostrat que és necessària una base lingüística mínima de la llengua meta a partir de la qual el coneixement temàtic afavoreix la comprensió lectora dels textos. A més, “l'ús de pistes lèxiques lligades al component temàtic també incideix en la comprensió d'un text”, explica Monroy. S'ha constatat també que la identificació explícita d'un gènere en un text està directament relacionada amb la comprensió del seu contingut, i també influeix en la captació de la seva temàtica.

Esquemes de gènere i estratègies de lectura

Cal destacar que la identificació d'un gènere manté relació amb la comprensió del seu contingut i amb la informació que hom té dels gèneres, que varia quantitativament i qualitativament segons la familiaritat que es pugui tenir per un o diversos gèneres en concret. “Per això, posseir i usar esquemes de gènere que permetin no només identificar un gènere d'un text sinó també contemplar elements extralingüístics relatius al seu context ajuda a millorar la comprensió del marc interaccional del text i, per tant, estableix una relació directa entre l'objectiu d'un text i la captació del seu missatge”, comenta Monroy.

A part dels esquemes de gènere, la utilització d'estratègies de lectura, principalment de tipus metacognitiu, també són útils en la captació del contingut d'un text. Les estratègies emprades solen ser similars tant per a la llengua materna com

per a la llengua meta, “tot i que només l'ús de la inferència lèxica com a estratègia de lectura, és a dir, obtenir informacions noves a partir d'informacions ja conegudes, és un tret identificador de la L2”, afirma Fernández.

Per tant, “per millorar la instrucció de la comprensió de textos en llengua estrangera és necessari incloure les convencions genèriques de caire cultural que van lligades a qualsevol text per a la seva completa comprensió”, explica Monroy. “Amb altres paraules, quan som petits i ens expliquen un conte en la nostra llengua materna, anem interioritzant tota una sèrie de convencions associades al gènere “conte” (tipologia narrativa, verbs en passat, estil dialògic, ús de certa terminologia...) de manera que quan sentim “hi havia una vegada...”, aquest simple enunciat ens permet endevinar que anem a escoltar un conte i creem de seguida tota una sèrie d'expectatives de tipus formal que ens ajudaran a comprendre el seu contingut”, conclou Fernández. ■

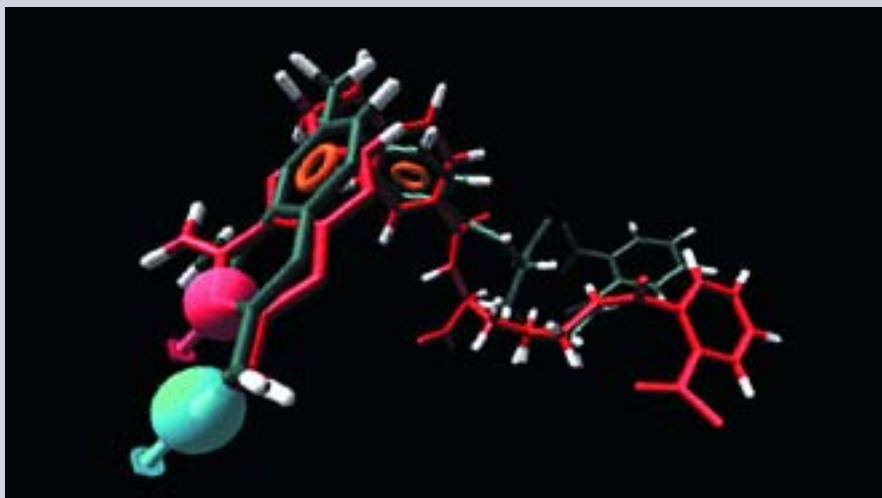


Piedad Fernández Toledo és doctora en Filologia Anglesa per la Universidad de Murcia i Master of Arts per la University of York. Actualment exerceix de professora titular a la Facultat de Comunicació i Documentació, on imparteix Anglès per a Documentació (Grau) i Anàlisi de Gèneres (Postgrau). Les seves publicacions tracten sobre diferents aspectes de la lingüística aplicada, com ara l'aprenentatge lèxic i la lectura de l'anglès com a llengua estrangera, l'ensenyament de l'anglès professional i acadèmic, i l'alfabetització digital, entre d'altres. La seva recerca gira entorn la lingüística aplicada i l'anàlisi del discurs, més concretament, l'anàlisi de gèneres. Altres temes de la seva recerca més actual tracten la fraseologia i la terminologia, la relació entre ambdues amb els gèneres, la seva incidència en l'aprenentatge i en la traducció, i la gestió de gèneres especialitzats, sobretot dins el camp de la gestió de la informació.



Rafael Monroy Casas és catedràtic de Filologia Anglesa a la Universidad de Murcia i llicenciat en Filosofia i Lletres (anglès i francès) per la Universitat de València. Master of Arts en Lingüística per la University of Reading (Regne Unit). Les seves àrees de recerca són la fonètica i la fonologia. La major part de les seves publicacions tracten sobre la fonètica del castellà, així com la fonètica i la fonologia de l'anglès. Actualment, centra la seva activitat investigadora en quatre àrees concretes: l'estudi teòricempíric dels suprasegmentals des d'una òptica contrastiva (anglès/castellà), la sociofonètica de la llengua castellana, la variació de l'accent murcià i d'altres accents peninsulars, la fonètica i fonologia de la interllengua, i l'ensenyament i aprenentatge de la fonètica de l'anglès com a llengua estrangera. Dirigeix des de la seva creació el grup de recerca d'Interlingüística L1-L2, actualment amb tres projectes I+D vigents.

Noves bases de dades disponibles per al programari de Schrödinger



Estructura del PT523, un fàrmac utilitzat en el tractament contra el càncer.

S'ha instal·lat el conjunt de bases de dades *Phase database of Commercially Available Compounds*, constituïda per més d'un milió i mig de compostos obtinguts de diversos distribuïdors de productes químics (Asinex, Bionet, Enamine, LifeChem, Maybridge, Specs i TimTec).

Aquesta base de dades inclou l'estructura 3D de diversos conformers de cada molècula, així com els corresponents farmacòfors per cadascun d'ells, els quals són generats mitjançant uns determinats

critèris del propi programa. Les bases de dades són accessibles des del mòdul *Phase* del programari de Schrödinger i permeten cercar compostos amb activitat biològica.

El programari de Schrödinger està disponible al Servei de Disseny de Fàrmacs des del mes de maig i consta d'onze mòduls bàsics (MacroModel, LigPrep, Liaison, MINTA, QikProp, Strike, Epik, ConfGen, SiteMap, Jaguar i Jaguar Pka) i d'un conjunt de mòduls prèmium. ■

Noves col·leccions de la UAB, la UB i l'IBEI a RECERCAT

La UAB ha incorporat al Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT) cinc noves col·leccions. D'una banda, el 25 de setembre n'ha incorporat una per als treballs de recerca de postgrau del Departament de Didàctica de l'Expressió Musical, Plàstica i Corporal i una altra per als treballs del Departament de Filologia Espanyola.

D'altra banda, durant el mes de juny va incorporar-hi els quaderns de treball i els *working papers* de l'Institut Universitari d'Estudis Europeus, així com els *working papers* del Centre d'Estudis Olímpics,

i la publicació *Socio-economic impacts and assessment biological invasions*, de la Unitat d'Història Econòmica del Departament d'Economia i d'Història Econòmica. També al juny, la UB va afegir una nova col·lecció al dipòsit que conté els documents d'educació física del Departament de Didàctica de l'Expressió Musical i Corporal.

A més, des de mitjan juliol, es disposa de la col·lecció IBEI Working Papers, de l'Institut Barcelona d'Estudis Internacionals (IBEI). L'IBEI forma part de la subcomunitat d'organismes interuniversitaris dins RECERCAT i té com a finalitat ésser centre de referència en l'àmbit dels estudis internacionals. Amb els nous treballs incorporats, el número de col·leccions disponibles a RECERCAT és de 71. ■

www.recercat.cat

Actualització de programari al CP4000 i a l'Altix

El programari ADF ha estat actualitzat a la versió 2007.01 a les màquines CP4000 (*cadi*) i Altix (*obacs*). Es tracta d'un programa mecan quàntic per sistemes poliatòmics que implementa la teoria del funcional de la densitat (DFT), i es pot utilitzar en un gran ventall de camps de la ciència que inclouen l'espectroscòpia molecular, la química orgànica i inorgànica, la química farmacèutica i la ciència dels materials.

També s'hi ha instal·lat el programa d'acoblament (*docking*) AutoDock, versió 4.0.1, dissenyat per predir la manera en què molècules petites, com a substrats o candidates a drogues, s'uneixen a un receptor amb una estructura 3D coneguda. A *cadi* i *obacs* s'hi ha actualitzat també el programa de modelatge molecular AMBER9, que presenta millores significatives respecte a l'anterior AMBER8. L'actualització compta amb nous camps de força i un suport millorat de les simulacions QM/MM, així com amb el mètode *Nudget elastic band* pel càlcul d'estats de transició. ■

Ampliacions de cabal a l'Anella i al CATNIX

El Consorci Escola Tècnica d'Igualada (CETI), que integra l'Escola Universitària d'Enginyeria Tècnica Industrial d'Igualada i l'Escola d'Adobeira, ha ampliat la seva connexió a 34 Mbps amb radioenllaç al juliol. El CETI s'hi connectava a 2 Mbps usant la mateixa tecnologia des de la seva incorporació a l'Anella l'octubre de 2002.

Pel que fa al Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX), també al juliol l'operador Colt Telecom ha ampliat la seva velocitat de connexió de 155 Mbps a 1 Gbps. ■

Noves publicacions a RACO

El dipòsit Revistes Catalanes amb Accés Obertes (RACO) compta des del 2 d'octubre amb 143 publicacions. Les darreres revistes incorporades corresponen al Col·legi Oficial de Bibliotecaris-Documentalistes de Catalunya, que hi ha afegit el *Butlletí de l'Associació de Bibliotecàries* i el *Butlletí de l'Associació de Bibliotecaris de Catalunya*, antecessores de l'actual *Item*, que també es troba disponible al dipòsit.

També des del començament d'octubre, RACO compta amb la publicació *Apunts. Medicina de l'esport*, del Consell Català de l'Esport, de la qual es poden consultar els darrers sis números a text complet.

Des de setembre s'hi troba disponible, a partir del primer número, la revista *DIM: Didáctica, Innovación y Multimedia*, de la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB), mentre que la Universitat de Barcelona (UB) va incorporar a RACO quatre revistes durant el mes de juliol. Es tracta de les publicacions *Ar@cne: revista electrónica de recursos en internet sobre geografía y ciencias sociales* i *Biblio 3w: revista bibliográfica de geografía y ciencias sociales*, el dia 30, i *Geo Crítica: cuadernos críticos de geografía humana*, el dia 31. Al començament de mes va afegir-hi la revista *Anuario de psicología*.

També al juliol, l'Institut Català d'Ornitologia va incorporar-hi la publicació *Revista Catalana d'Ornitologia*; el Museu de Ciències Naturals de la Ciutadella, els *Treballs del Museu de Geologia de Barcelona*, i el Departament d'Interior, Relacions Institucionals i Participació de la Generalitat de Catalunya, la publicació *Actualitat parlamentària*.

Al juny, les incorporacions van ser *Papers del Montgrí*, de Can Quintana Museu de la Mediterrània de Torroella de Montgrí, i *Ars Brevis*, de la Universitat Ramon Llull. Anteriorment, el Centre d'Estudis de Granollers havia inclòs el seu anuari, *Ponències*. ■

www.raco.cat

PADICAT triplica a 2.400 les captures de webs

Un cop finalitzat l'emmagatzematge de la campanya electoral per a les eleccions municipals del passat 27 de maig, el volum d'informació disponible al dipòsit Patrimoni Digital de Catalunya (PADICAT) s'ha quasi triplicat. Així, el nombre de webs emmagatzemats han passat de 250 a 813, les captures de 918 a 2.490, els fitxers, de 10,6 a 24 milions, i l'espai ocupat de 267 a 700 gigabytes.

Seguint amb la línia iniciada amb el recull especial que es va fer de les eleccions autonòmiques de l'1 de novembre de 2006, PADICAT ha realitzat un intens seguiment de la campanya electoral per a les eleccions municipals del passat 27 de maig. S'han realitzat captures dels blocs i webs dels principals candidats a l'alcaldia de 48 municipis catalans. En total, 285 caps de llista amb diferents webs i blocs, les pròpies webs municipals, més de 100 mitjans de comunicació digitals locals, i 30 mitjans de comunicació d'abast català, entre altres. ■

www.padi.cat

Certificats de reconeixement del TDX

Coincidint amb l'inici del curs acadèmic, el 7 de setembre s'han emès els certificats de reconeixement a les tres tesis més consultades durant el curs acadèmic 2006-07 de cada universitat que participa en el servidor de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX).

Amb el lliurament d'aquests 46 certificats, signats pel conseller d'Innovació, Universitats i Empresa, Josep Huguet, i pels

respectius rectors, es pretén reconèixer la popularitat de la recerca universitària duta a terme, contrastada per l'elevat nombre de consultes rebudes.

La tesi més consultada en aquest curs acadèmic ha estat la mateixa que l'any anterior, la del Dr. Gerardo Javier Macías Cortés, titulada *Teorías de la comunicación grupal en la toma de decisiones: contexto y caracterización*, dirigida pel Dr. Mario Herberos i presentada en el Departament de Comunicació Audiovisual i Publicitat de la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB).

La relació completa de les tesis més consultades pot trobar-se a la pàgina web www.cesca.es. ■



Certificat de la tesi més consultada de la Universidad de Murcia (vegeu pàgines 16 i 17).

El Departament de Química de la UdG rep la Distinció Jaume Vicens Vives

Un grup de professors del Departament de Química de la Universitat de Girona (UdG), entre ells els professors Miquel Duran i Miquel Solà, usuaris del Centre, ha rebut la Distinció Jaume Vicens Vives a la qualitat docent universitària. El guardó, atorgat pel

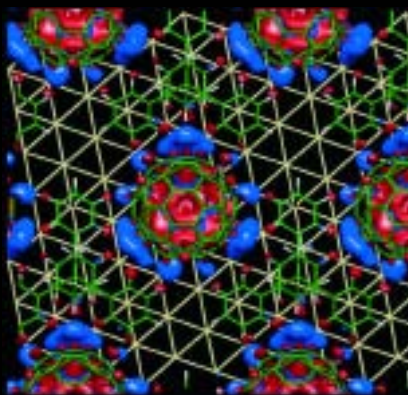
Departament d'Innovació, Universitat i Empresa de la Generalitat de Catalunya, els ha estat concedit en reconeixement al seu projecte La Química.net, que ha contribuït a la difusió d'aquesta disciplina entre els estudiants de secundària.



La Rectora de la UdG i els professors guardonats amb la Distinció Jaume Vicens Vives.

F O T O / N O T Í C I A

Una de les principals línies de treball desenvolupades al Laboratori d'Estructura Electrònica de Materials (LEEM) de l'Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB, CSIC) és la simulació per mètodes de primers principis de propietats de materials i nanoestructures. Recentment, s'ha treballat en un projecte per reduir les interaccions molècula-substrat en nanoestructures basades en el C_{60} . Les unitats moleculars a la interfase amb una superfície inorgànica tenen un gran interès per les seves possibles aplicacions en microelectrònica. Hi ha molts efectes interessants quan la interacció de l'entitat molecular amb la superfície és prou feble, ja que poden donar-se efectes no lineals en el transport a través de la interfase orgànica-inorgànica. En col·laboració amb el grup experimental de J. I. Pascual (Berlín), els investigadors Nicolás Lorente i Manuel Cobián, del LEEM, han estudiat el cas de la interacció de les molècules de C_{60} sobre la superfície (1 1 1) de l'or en presència de l'hidrocarbur 1,3,5,7-tetrafeniladamanta (TPA). Mitjançant càlculs teòrics basats en la teoria del funcional de la densitat s'ha



Estructura autoorganitzada calculada a partir de la molècula orgànica de TPA i C_{60} sobre la superfície (1 1 1) de l'or.

pogut determinar com el C_{60} interacciona amb la superfície en presència de les molècules de TPA, i donar una interpretació clara de les mesures experimentals. S'ha confirmat així que els nivells moleculars del C_{60} es veuen poc afectats, tot i estar bloquejats entre tres molècules de TPA en la superfície. Això obre la via per a la creació de nanoestructures amb propietats electròniques controlades a escala molecular.

Edita

CENTRE DE SUPERCOMPUTACIÓ DE CATALUNYA



Patrocina



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

Sílvia Salgado

Lourdes Montoya

COL-LABORACIÓ

Glòria Fontova (TERMCAT)

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà-Associats.com

IMATGE DE LA PORTADA

Earth Sciences Department,
Barcelona Supercomputing
Center-Centro Nacional de
Supercomputación

CESCA

Gran Capità, 2-4

08034 Barcelona

Tel. 93 205 6464

Fax: 93 205 6979

<http://www.cesca.es>

teraflop@cesca.es