

TERAFLOP

The background of the cover features a complex 3D molecular structure. It consists of a grey ribbon-like protein backbone with several smaller, multi-colored ball-and-stick molecular models attached. The colors used for the atoms include yellow, green, blue, red, and white. The overall scene is set against a dark, almost black background, which makes the grey and colored elements stand out.

JOCS'11

Química, computació i societat

ENTREVISTA

Miguel Rubí, premi
ICREA Acadèmia

Millores en els repositoris
RECERCAT i PADICAT

Avenços en física
de materials

Química, computació i societat, a la JOCS'11

La desena edició de la Jornada Catalana de Supercomputació, organitzada biennalment pel CESCA, ha tingut lloc a la Universitat de Barcelona (UB) sota el lema “Química, computació i societat”. La jornada, que ha comptat amb una sessió de pòsters, ha tractat sobre els reptes de la química computacional, el seu futur i com la seva aplicació contribueix a la millora de la nostra societat.

Els encarregats d'obrir la trobada han estat Pere Lluís Cabot, degà de la Facultat de Química de la UB, i Josep Maria Martorell, director general de Recerca de la Generalitat de Catalunya. Cabot ha destacat que l'edició d'enguany de la JOCS coincideix amb la celebració de l'Any Internacional de la Química, que “té entre els seus objectius la transmissió a la societat de la importància de la divulgació d'aquesta disciplina”. “És indubtable que estem envoltats de química –ha afegit– i en aquest sentit cal transmetre la seva importància, així com els seus beneficis”.

Martorell, qui es va llicenciar a la Facultat de Física de la UB, a tocar de la de Química, ha recordat el seu pas per aquest centre “ple de bons records”, i ha destacat el bon lloc de la ciència a Catalunya i el fet que el Govern ha tingut i té el compromís que aquesta posició es continuï mantenint els propers anys, seguint amb les línies bàsiques de les polítiques científiques dutes a terme tot i els canvis de govern.

Citant el conseller Mas-Colell, el director general ha afirmat que “la sensació és que hem pujat de la planta baixa a un primer pis, hem pujat per les escales, amb uns graons ben alts, ara tenim 2 o 3 anys per descansar, però després hem de pujar al segon pis”. Per a Martorell, “el 2012, en matèria de recerca, no serà un mal any, tot i que no serà de creixement” i ha afegit que “com a Govern tenim clar que aquest és un àmbit prioritari”.

El director general ha destacat el paper del CESCA i de la Xarxa de Referència Química Teòrica i Computacional (XRQTC). “Si parlem de ciència i computació, tenim dos grans exemples: XRQTC i CESCA”. “Els processos d'agregació estalvien molts diners –ha comentat– i el CESCA és un bon exemple de consorci de serveis”. Martorell ha afirmat que “ha estat una molt bona iniciativa, ja que la compartició ha permès tenir el doble de serveis per la meitat del preu”.

La cloenda ha estat a càrrec de Francesc Illas, de la XRQTC, i Miquel Duran, de

la UdG. Illas ha afirmat que “la química teòrica computacional és un camp saludable, almenys tant com la química, formada per una comunitat àmplia i activa”. Duran, qui ha coincidit amb Illas en agrair als organitzadors aquesta jornada que ha definit com a “exitosa”, ha fet un breu repàs de les dues sessions “on s'ha parlat d'oportunitats, d'algoritmes, de computació quàntica...”. Duran ha destacat el rol del CESCA “proveïdor des de 1991 de recursos computacionals, amb suport i consultoria, però també d'altres serveis, com les comunicacions i l'e-Administració”.

La JOCS'11 s'ha dividit en dues sessions. La primera, moderada per Jean-Didier Maréchal, de la UAB, ha donat una visió sobre l'estat de la química computacional, els seus grans reptes, el nou paradigma per a l'adaptació en paral·lel de dinàmica molecular i sobre el futur de la química quàntica als supercomputadors. Hi han intervingut Joseph S. Francisco, de l'ACS; Erik Lindahl, de Gromacs, i Jürg Hutter, de cp2k.

La segona sessió ha estat moderada per Ramon Crehuet, del CSIC, i s'ha centrat en la relació de la química amb el medi ambient, la biotecnologia, la nanotecnologia i la ciència dels materials. Ha comptat amb les ponències de Josep M. Anglada, d'IQAC-CSIC; Leonardo De Maria, de Novozymes; Josep M. Poblet, de la URV, i Carlos Alemán, de la UPC.

La JOCS ha estat possible gràcies a la tasca duta a terme pel comitè de programa format per Miquel Duran, Francesc Illas, Ramon Crehuet, Jean-Didier Maréchal i Miquel Huguet, del CESCA, i ha comptat amb la col·laboració de la UB, la XRQTC i Bull. ■



A l'obertura, Josep M. Martorell i Pere Lluís Cabot. A la cloenda, Francesc Illas i Miquel Duran.

Meeting Societal Grand Challenges with Computational Chemistry: The Road Ahead

Joseph S. Francisco

2010 President,
American Chemical
Society, Purdue
University



We continue to see that accelerated technological, environmental, societal and financial drivers are pushing the chemical enterprise worldwide, and chemists working in it, to increasingly think and collaborate globally. There are challenges and opportunities for our shared discipline and its enterprise. This presentation has looked at the increasing connectivity, integration, and interdependence of economies, societies, technologies, and cultures spheres across the world. The effect that globalization has had on the chemical enterprise and chemical education to date and what it could look like in the years ahead has also been discussed.

The current research information infrastructure is being transformed into a global collaboration infrastructure. The essential underpinnings of such a transformation exist in research networking and distributed research collaborations, and the talk has discussed how computational chemistry is fostering global collaborative interactions.

Copernicus: Automatic Parallel Adaptive Molecular Dynamics

Erik Lindahl

Gromacs



Biomolecular simulation is a core application on supercomputers, but it is exceptionally difficult to achieve the strong scaling necessary to reach biologically relevant timescales. Biomolecular systems are frequently large enough to be reasonably efficiently parallelized, with 100-500 particles assigned to each core in high-performance molecular dynamics (MD) packages such as Gromacs when run on a system with sufficiently low interconnect latency.

However, at this point the time required for a step is approaching 100 μ s of wallclock time, and there simply aren't enough floating-point operations in a single simulation to achieve order-of-magnitude improvements in scalability. While molecular dynamics can achieve close to perfect weak scaling, this will put hard bounds in strong scaling and limit the accessible run lengths for biomolecular simulation.

Here, we present a new paradigm for parallel adaptive molecular dynamics and

a publicly available implementation: Copernicus. This framework combines performance-leading molecular dynamics parallelized on three levels (SIMD, threads, and message-passing) with kinetic clustering, statistical model building and real-time result monitoring.

Copernicus enables execution as single parallel jobs with automatic resource allocation. Even for a small protein such as villin (9,864 atoms), Copernicus exhibits near-linear strong scaling from 1 to 5,376 AMD cores. Starting from extended chains we observe structures 0.6 Å from the native state within 30 h, and achieve sufficient sampling to predict the native state without a priori knowledge after 80-90 h. To match Copernicus' efficiency, a classical simulation would have to exceed 50 microseconds per day, currently infeasible even with custom hardware designed for simulations.

Is There a Future for Quantum Chemistry on Supercomputers?

Jürg Hutter

Physical Chemistry
Institute,
University of Zurich



The main task of quantum chemistry is the calculation of the electronic structure of molecules. From the electronic structure one can derive properties and reactivity and can make connections to experimental results or predictions for unknown substances. Over the years a large set of methods have been developed that allow more accurate and efficient calculations. Until recently computer programs using these methods to investigate standard chemistry problems were major users of supercomputer resources.

Forced by the exponential growth of computational power available on supercomputers and aided by the shift to massively parallel computer architectures we currently see a change of types of applications. Whereas the more standard applications can be performed on personal computers or on grid computer resources,



L'auditori durant la ponència de Jürg Hutter en la primera sessió de la JOCS.

molecules in complex environments that are studied using quantum chemistry combined with statistical mechanics methods require supercomputers. These new methods allow to investigate the chemistry of important systems related for example to clean energy production and storage or human health issues.

Theoretical Chemistry and Environment

Josep M. Anglada

IQAC-CSIC



Environment has different meanings for different people, depending on how different people approach this diverse area of knowledge. One way of studying the environment comes from Chemistry and from Atmospheric Science. The Earth atmosphere is an open system which is fed by sun radiation and by the release of enormous amounts of matter from the earth surface, including both, biogenic and anthropogenic sources. The matter emitted to the atmosphere is oxidized mainly by OH and by O₃ in day-time, and by NO₃ in night-time, and the products of this oxidation are organic and inorganic acids, aldehydes, carbon dioxide, carbon monoxide or highly reactive radicals, among others. Moreover, many products of the oxidation of atmospheric species can form aerosols or can be taken up by clouds and be eliminated by rain. These oxidation processes dominate the chemistry of air pollution, causing a direct effect on human health. In addition, species like carbon dioxide, methane or ozone are greenhouse gases, having a direct impact on climate change.

Theoretical and computational chemistry is a useful tool for the study of atmospheric chemistry. It contributes to understand and to rationalize the processes occurring in the atmosphere and, in many cases, it can provide thermodynamic and kinetic data with a high level of accuracy so that they can be used in atmospheric models. Let us take two examples to illustrate this fact.

The first one is the oxidation of formic acid by OH that can affect the concentration of atmospheric CO₂. If the acidic hydrogen is abstracted, then HCOO is formed, ultimately yielding H + CO₂, if the formyl hydrogen is abstracted, then HO-CO is formed, and will break down into OH + CO. This reaction has been well studied experimentally and, unexpectedly, shown to prefer abstraction of the acidic hydrogen. The theoretical work has been able to rationalize this process and it has shown that the preference of the acidic hydrogen abstraction is due to the fact that the reaction undergoes a proton coupled electron transfer reaction. Furthermore, theoretical studies predict that, in presence of water vapor, about 10% of formic acid will react with OH abstracting the formyl hydrogen rather than the acidic hydrogen, changing thus the product distribution.

The second one is related to the reaction of ozone with alkenes in a process that leads to the formation of carbonyl oxides (RR'COO) and aldehydes. The atmospheric fate of carbonyl oxides is of great interest as they have been experimentally shown to be both a day and night time source of OH radicals, H₂O₂, organic acids and hydroperoxides. The theoretical studies have been key in determining the reaction mechanisms involved in this process and in predicting a further atmospheric formation of hydroxyl radical, which is the main oxidizing species in the atmosphere.

Chemistry and Biotechnology

Leonardo De Maria

Novozymes



Novozymes is the world market leader in bio-innovation, with its core business centered on industrial enzymes, microorganisms, and biopharmaceutical ingredients. With over 700 products used in 130 countries, Novozymes' bio-innovations improve industrial performance and safeguard the world's resources by offering superior and sustainable solutions for tomorrow's ever-changing marketplace. Novozymes'

natural solutions enhance and promote everything, from removing trans fats in food to advancing biofuels to power the world tomorrow.

The *Candida antarctica* lipase B (CALB) has found very extensive use in biocatalysis reactions. Long molecular dynamics simulations of CALB in explicit aqueous solvent confirmed the high mobility of the regions lining the channel that leads into the active site, in particular, of helices α5 and α10. The simulation also confirmed the function of helix α5 as a lid of the lipase. Replacing it with corresponding lid regions from CALB homologues resulted in two new CALB mutants. Characterization of these revealed substantially improved catalytic properties. The research process leading to the improved CALB variants exemplifies clearly how do supercomputers support the enzyme optimization tasks within a leading biotech company.

Computational Modelling of Nanostructures: The Case of Molecular Metal Oxides

Josep M. Poblet

URV



The continuous progress of computers in general, and quantum chemistry software in particular, has enabled to quantum chemists to develop strategies to rationalize electronic and structural properties of large complex systems. Polyoxometalates are molecular metal oxide anions mainly formed by tungsten, molybdenum and vanadium atoms and mixtures of them. Typical polyoxometalates contain between 12 and 30 metal atoms but large structures have been characterized with more than 300 metal atoms and the corresponding oxygen atoms, with applications in catalysis, in the synthesis of nanoparticles or in medicine among many others. A distinctiveness of polyoxometalates is that almost any element of the periodic table can be incorporated in its structure allowing tuning the properties of the anion. For example, typical polyoxometalates

have been used to bleaching of wood pulp in a benign technological process, or very recently polyoxometalates containing ruthenium or cobalt atoms are used to oxidize water in a green process.

From a computational point of view the computational modeling of polyoxometalates presents serious difficulties because of the size of the compounds, their complex electronic structure and the relevance of the stabilizing effects of solvent and counterions ions in solution and counterions in solid state. These compounds are a good example to show the challenges that the computational chemistry must face in nanoscience: nucleation mechanisms; modeling of electrochemical properties; transport of nanosystems, reactivity in solution or in solid state, etc. We are persuaded that Computational Chemistry and Supercomputer Centers will have in the coming years an essential role in the development of nanosciences and nanotechnologies.

Jürg Hutter
“The majority of standard quantum chemistry applications can be performed on small and medium systems”

Chemistry and Materials Science

Carlos Alemán
UPC



It can be stated that, although Chemistry and Materials Science followed separated ways for a long time, the collaborative relationships between these two disciplines started in the early twentieth century. At that time chemists provided useful information about the structure and composition of many new materials as well as the about the processes to apply and synthesize them. These achievements converged with the classical concepts of Materials Science. As a result, Chemistry is now playing a predominant role in Materials Science.

The simplest way to discuss the benefits that the relationships between Chemistry and Materials Science provoke on the society is from an historical perspective. Thus, the collaboration between the two disciplines can be divided in three stages, each one with its own relevant and characteristic features. The first stage extends from the early twentieth century to the eighties and corresponds to the period in which chemists discovered many

new materials and processing methods, like for plastics that still are of fundamental importance for the society.

At around eighties, chemists described a wide number of cases in which different combinations of materials produced different but very interesting properties. This was the nucleus of the second stage, which resulted in a massive development of blends and composites. Moreover, advances in computer architectures and software developments were so impressive that Computational Chemistry became, by its own, in another branch of the Chemistry. Computational Chemistry started to play a very significant role in the relationships between Chemistry with Materials Science.

Finally, we have recently started a new stage in the collaboration between the two disciplines. This arises from the development of synthetic methods to prepare and characterize molecular hybrid conjugates, in which molecular fragments of very different chemical nature are covalently linked. As the preparation and manipulation of these new materials are very complex, Computational Chemistry is currently playing a leadership role in the collaboration between Chemistry and Materials Science. ■

All the presentations are available at www.cesca.cat/jocs



Els ponents i el comitè de programa de la JOCS'11.

PADICAT estrena nou web en el seu 5è aniversari

El repositori Patrimoni Digital de Catalunya (PADICAT) ha renovat el seu portal web coincidint amb el cinquè aniversari de la seva inauguració, l'11 de setembre de 2006. El nou web té per objectiu incrementar la participació dels usuaris i facilitar l'accés al fons digitals de les quasi 44.000 pàgines web capturades que conté aquest repositori en accés obert.

La producció digital ja supera la producció analògica. Cada dia es penegen coses noves a la xarxa i moltes tenen una caducitat gairebé instantània. Les innovacions i canvis es perden i no es té testimoni de l'evolució de la xarxa. PADICAT, gestionat per la Biblioteca de Catalunya i recolzat tècnicament pel CESCO, porta 5 anys processant i preservant la memòria digital catalana a través de la captura sistemàtica de pàgines web catalanes o relacionades amb Catalunya.

En aquest 5è aniversari, PADICAT ha estrenat un nou web més dinàmic, intuïtiu i participatiu. De fet, el portal web s'estructura en tres apartats diferenciats. El primer, anomenat "Cerca i descobreix", permet cercar de forma senzilla la col·lecció de webs capturats, prop de 200.000 captures de més de 44.000 pàgines web. Uns 300 milions de fitxers informàtics que ocupen prop de 10 terabytes de dades. Les cerques es poden fer per monogràfics específics sobre temes concrets, com campanyes electorals amb incidència a Catalunya, recursos web de museus, el fenomen de la música a internet... També es pot cercar per llocs web, per categories o de forma alfabètica.

El segon apartat, "Col·labora i participa", té per objectiu incentivar la participació dels usuaris en la recomanació de recursos web susceptibles de ser capturats per formar part del patrimoni digital català. En aquests anys, s'hi han incorporat 704 pàgines web recomanades pels usuaris. El tercer apartat, "Coneix-nos", aporta informació sobre la iniciativa i els seus objectius.

La portada del nou PADICAT, a part de permetre accedir a la cerca de recur-



sos web, mostra exemples de l'evolució al llarg dels anys de diversos webs capturats. També té un apartat de novetats al que hom es pot subscriure, diversos accessos directes a contingut rellevant, una secció dedicada als monogràfics i una altra a testimonis sobre PADICAT d'experts

El nou PADICAT és més dinàmic, intuïtiu i participatiu

en cultura digital i societat de la informació, com ara el director de Vilaweb, Vicenç Partal; la periodista Roberta Bosco; el fundador d'Infonomia.com, Alfons Cornella; o el degà de la Facultat de Documentació de la Universitat de Barcelona, Cristóbal Urbano.

En aquesta renovació tecnològica, el repositori s'ha integrat amb el programari de catalogació CAT (Curator Archi-

ving Tool), desenvolupat pel CESCO. Així, s'ha integrat el directori temàtic de PADICAT amb les metadades de catalogació possibilitant que el directori s'extregui de forma automàtica de la base de dades del CAT. D'aquesta manera, en lloc de mostrar un llistat de captures s'obté una fitxa web que correspon a cada recurs capturat i que mostra més informació addicional, com ara el títol del lloc web capturat, la seva descripció, la categoria a què pertany, la data d'arxivat...

La cerca per paraula a PADICAT també s'ha millorat amb la substitució del programari Wera pel TNH. Aquest darrer és un programari de codi obert molt ràpid i eficient en l'obtenció de resultats de cerca que a més permet refinar les cerques per tipus de fitxer (pdf, html...). També es té previst ampliar aquestes millores amb la possibilitat de cercar per col·leccions i fer cerques per paraules en una URL concreta.

Les empreses Optimyzet i Ymbra han col·laborat en el disseny del nou portal web i en la seva implementació amb Drupal. ■

Noves funcionalitats per al repositori RECERCAT

El Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT) ha actualitzat el seu programari base i ha renovat també el seu web per fer-lo una eina més accessible, personalitzable i propera als usuaris. Amb aquestes millores, RECERCAT compleix amb els mandats del Consell Interuniversitari de Catalunya (CIC) que ha establert una sèrie de recomanacions amb la intenció d'impulsar l'accés obert a la producció científica dels investigadors i aconseguir que els resultats de la recerca, que es finança amb recursos públics, sigui de domini públic, d'accés lliure i gratuït per la xarxa.

RECERCAT és un repositori cooperatiu de documents digitals que inclou la literatura de recerca de les universitats i dels centres d'investigació de Catalunya, com ara articles encara no publicats (*preprints*), comunicacions a congressos, informes de recerca, *working papers*, projectes de final de carrera, memòries tècniques, etc.

El canvi de versió del programari base de RECERCAT, DSpace, de la versió 1.4 a la 1.7.2, ha comportat diverses millores en el seu funcionament i noves funcionalitats. Una d'elles és que el repositori permet l'embarcament, és a dir, permet la incorporació d'un document però no fer-lo públic fins a una determinada data. També facilita filtrar documents segons la qualitat (*preprint, postprint...*), disposar de diferents versions d'un document i escollir entre les diferents llicències Creative Commons existents.

A més, compleix amb les directrius del recol·lector europeu Driver, cosa que dóna més visibilitat als documents del repositori i també permet l'exportació de les metadades a altres formats, de manera que altres repositoris recol·lectors que no usin el protocol OAI-PMH poden accedir a les metadades i mostrar-les.

Totes aquestes millores donen suport al mandat del CIC de mesures afavoridores de l'accés obert a la recerca produïda amb finançament públic i també segueixen les directrius del Projecte OpenAIRE (Open Access Infrastructure for Research in Europe) de la Comissió Europea, que estableix que la recerca finançada per la Unió Europea estigui disponible en accés obert a través de la xarxa.

Una altra funcionalitat que possibilita la nova versió del programari de RECERCAT són les facetes, que milloren el procés de cerca obtenint una cerca intel·ligent o també anomenada cerca refinada. Així, en fer una cerca simple, el repositori dóna l'opció de refinar-la per autor, data de publicació, per tipus de document, per matèria i per classificació decimal universal. A més, a la cerca avançada es poden afegir filtres i personalitzar la manera com es mostren els resultats, definint la quantitat de resultats mostrats per pàgina i l'ordre en què apareixen.

Pel que fa a les estadístiques de les consultes al repositori s'han millorat amb l'aplicació SOLR que permet fer cerques en tots els documents i registres que consten al repositori, integrant-lo amb el programari DSpace per aconseguir les facetes, així com una cerca a text complet entre

diferents formats, com ara pdf, doc, etc.

El nou RECERCAT és també més personalitzable gràcies a l'ús de la tecnologia Manakin que permet modular i configurar la interfície gràfica del repositori segons les necessitats específiques. A més, incorpora nous mecanismes de preservació de tots els fitxers que conté, amb la possibilitat de comprovar que estan totes les metadades correctament assignades o la presència de virus en el contingut.

També s'han millorat les citacions dels documents de RECERCAT amb la incorporació del gestor de referències bibliogràfiques RefWorks, un programari que permet crear una base de dades personal mitjançant la importació de referències d'arxius de text o bases de dades en línia i altres fonts. A més, permet generar automàticament citacions en diversos formats i afegir-les fàcilment en els documents.

Pel que fa la interfície web de RECERCAT, s'ha redissenyat per fer-la més accessible per a la cerca. La pàgina principal compta amb un apartat d'accés a la consulta per títol, matèria, autor, col·lecció... un apartat d'institucions participants amb accés directe als seus documents i accessos a un directori d'altres repositoris, a les estadístiques i a les novetats del repositori.

The screenshot shows the RECERCAT website interface. At the top, there is a search bar with the text "Cerca avançada" and a search icon. Below the search bar, there are navigation links: "Inici", "Que és?", and "Contacte". On the right side, there are language options: "English" and "Castellano".

The main content area is divided into several sections:

- Consultar RECERCAT:** A list of filters for searching documents, including "Per comunitats i col·leccions", "Per data", "Per autors", "Per títols", and "Per matèries (CDU)".
- 32.175 documents, d'aquests:** A summary of document counts: 11.020 treballs de fi de màster, 9.712 articles, 3.590 treballs/projectes de fi de carrera, and 2.628 objectes de conferència.
- Participants:** A list of participating institutions, including Universitat de Barcelona, Universitat Autònoma de Barcelona, Universitat Politècnica de Catalunya, Universitat Pompeu Fabra, Universitat de Girona, Universitat de Lleida, Universitat Rovira i Virgili, Universitat Oberta de Catalunya, Universitat de Vic, Universitat Internacional de Catalunya, Universitat Abat Oliba CEU, Generalitat de Catalunya, Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca, Centres i instituts de recerca, Institucions culturals, and Organismes i activitats interuniversitàries.

At the bottom of the page, there are links for "Accessibilitat", "Avis legal", "Intranet", and "RSS". There are also logos for "Coordinació" (BU, CE3CA) and "Patrocini" (Generalitat de Catalunya).

Simulació multiescala de sistemes polimèrics



El Grup Polymers & Soft Matter del Centro de Física de Materiales de San Sebastián, liderat pel professor Juan Colmenero de León, té una àmplia experiència en l'estudi de polímers i materials no cristal·lins i ha desenvolupat una robusta metodologia per a l'estudi de les propietats estructurals i dinàmiques d'aquests sistemes, així com la seva interrelació a diferents escales de temps i longitud (micro, nano, meso, macro). Aquesta metodologia conjuga diferents tècniques experimentals i mètodes de simulació a diferents nivells, principalment orientats a tècniques de dinàmica molecular però tenint en compte l'ús de mètodes *ab-initio* per a un millor coneixement dels sistemes.

La recerca portada a terme gràcies als recursos del CESCA ha permès una millor comprensió dels nous materials estudiats pel grup, que comprèn dues línies principals: el disseny de nanopartícules polimèriques mitjançant simulació computacional, dirigida pel Dr. Àngel Moreno Segurado, i la simulació per mitjà de mètodes *ab-initio* i dinàmica molecular de polímers confinats, portada a terme pel Dr. Iñigo García Yoldi.

Disseny de nanopartícules polimèriques

Les nanopartícules polimèriques unimoleculares són nanoobjectes tous, de mida típica inferior als 15 nanòmetres, amb gran interès en aplicacions avançades en diferents camps com ara la nanomedicina o

l'optoelectrònica. Durant els darrers anys s'ha fet un gran esforç en la recerca de nous camins eficients per a la síntesi de les mencionades nanopartícules mitjançant col·lapse intramolecular irreversible.

“Tot i l'enorme afany dedicat en el disseny d'aquests mètodes, es coneix molt poc sobre l'estructura interna d'aquestes nanopartícules, més enllà de la seva mida típica, així com de la cinètica de la formació d'enllaços permanents o *cross-linking* que dóna lloc a la nanopartícula des del polímer precursor no enllaçat”, comenta Moreno. Amb la finalitat de clarificar aquestes qüestions, “s'ha realitzat un estudi sistemàtic, mitjançant simulació de dinàmica molecular, del procés de *cross-linking* en un model simplificat del precursor. Per fer-ho, s'ha utilitzat el conegut model *bead-spring* de Grest i Kremer, àm-

pliament usat per la comunitat computacional en multitud de problemes complexos de física de polímers, com ara la micel·larització, l'autoassemblatge, l'adsorció en superfícies, la formació de gels o la translocació”, afegeix Moreno.

Amb la finalitat de crear un model per a sistemes reals, el precursor simulat consisteix en una cadena lineal amb grups laterals curts. Una fracció d'aquests acaba en un grup actiu (*linker*). Els diferents grups actius poden formar enllaços permanents, donant lloc a una nanopartícula mitjançant la progressiva compactació del polímer. En un primer pas d'un estudi sistemàtic en diverses condicions inicials, s'ha simulat el procés de *cross-linking* en condicions de bon dissolvent i a dilució infinita.

El procés de *cross-linking* es caracteritza, en les seves primeres etapes, per la formació d'enllaços entre grups actius en la seva majoria topològicament propers. Aquest mecanisme dóna lloc a una compactació local del precursor, i apareix com a conseqüència del caràcter preferentment estès de les cadenes polimèriques en bon dissolvent. La formació d'enllaços entre grups topològicament allunyats, eficaç per a la compactació global de les nanopartícules, implica molts pocs grups i és

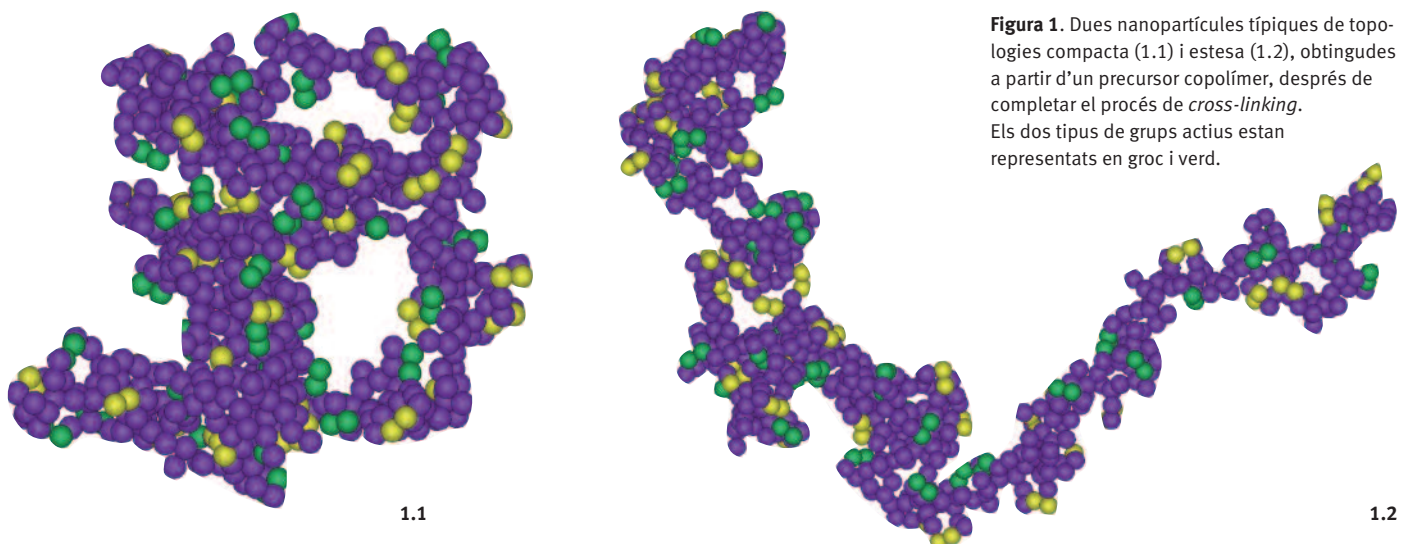


Figura 1. Dues nanopartícules típiques de topologies compacta (1.1) i estesa (1.2), obtingudes a partir d'un precursor copolímer, després de completar el procés de *cross-linking*. Els dos tipus de grups actius estan representats en groc i verd.

significativa només en l'etapa final del procés de *cross-linking*.

“Per aquesta raó, encara que són objectes més petits i més esfèrics que els seus precursors corresponents, el procés de *cross-linking* dóna lloc principalment a nanopartícules esteses amb alguns bucles tancats”, comenta Moreno. També s’han realitzat simulacions per a un model anàleg de copolímers, amb dos tipus de grups actius. En aquest model només es permeten enllaços entre grups del mateix tipus. “Hem estudiat dos tipus de processos: simultani (amb ambdós grups actius al mateix temps) i seqüencial (en què un grup s’activa només quan l’altre ha completat el seu *cross-linking*). Aquests dos processos correspondrien a la presència simultània o seqüencial dels catalitzadors respectius per als grups actius”, apunta Moreno. Tots dos mètodes donen lloc a les mateixes propietats estructurals de les nanopartícules obtingudes. Per això, “el mètode simultani és clarament preferible tant des d’un punt de vista computacional com de síntesis experimental”, explica Moreno. “Les nanopartícules obtingudes a partir de copolímers tenen menor mida i es caracteritzen per ser més esfèriques que les obtingudes a partir d’homopolímers, tot i que encara s’obté una fracció significativa d’objectes estesos”, afegeix (vegeu figura 1).

Simulació de polímers confinats

L’addició de nanopartícules a materials polimèrics permet la modificació de les propietats físiques del polímer obtenint així un material nou, conegut com a nanocompost polimèric. Aquests tipus de

materials, coneguts des de fa més d’un segle, presenten múltiples aplicacions que van des de la ciència de materials fins a la medicina, però ha estat només en els darrers anys quan s’ha estat en disposició d’establir una relació qualitativa i fins i tot quantitativa entre l’estructura i les propietats dels nanocompostos.

Els nanocompostos es poden classificar atenent a la dimensionalitat de les nanopartícules, depenent si aquestes són pràcticament puntuals (nanopartícules isodimensionals), monodimensionals (nanotubs o *whiskers*) o bidimensionals

S’ha desenvolupat una robusta metodologia per a l’estudi de les propietats estructurals i dinàmiques dels polímers i materials no cristal·lins

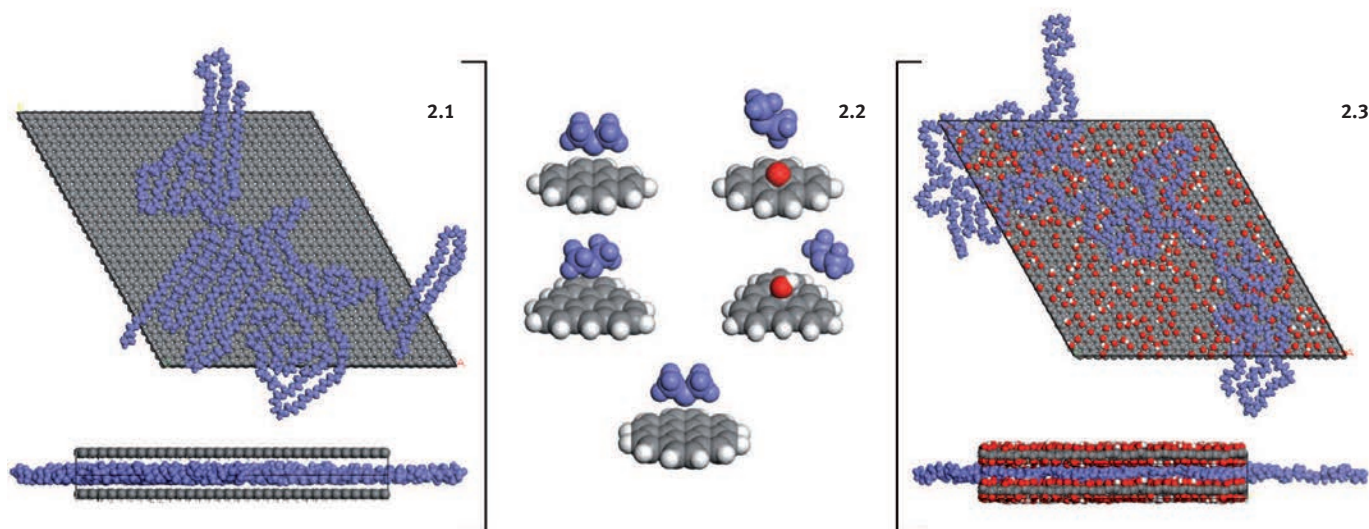
(làmines). En aquest cas, “hem estudiat nanocompostos amb nanopartícules lamínars on el polímer presenta un alt grau de confinament entre làmines, concretament el polímer òxid de polietilè (PEO) confinat en grafè (G) i òxid de grafit (GO)”, explica García Yoldi. La simulació d’aquests sistemes busca justificar els canvis produïts a un polímer altament confinat: canvis estructurals i dinàmics, i observables, com ara les temperatures de transició vítria o fusió, entre d’altres.

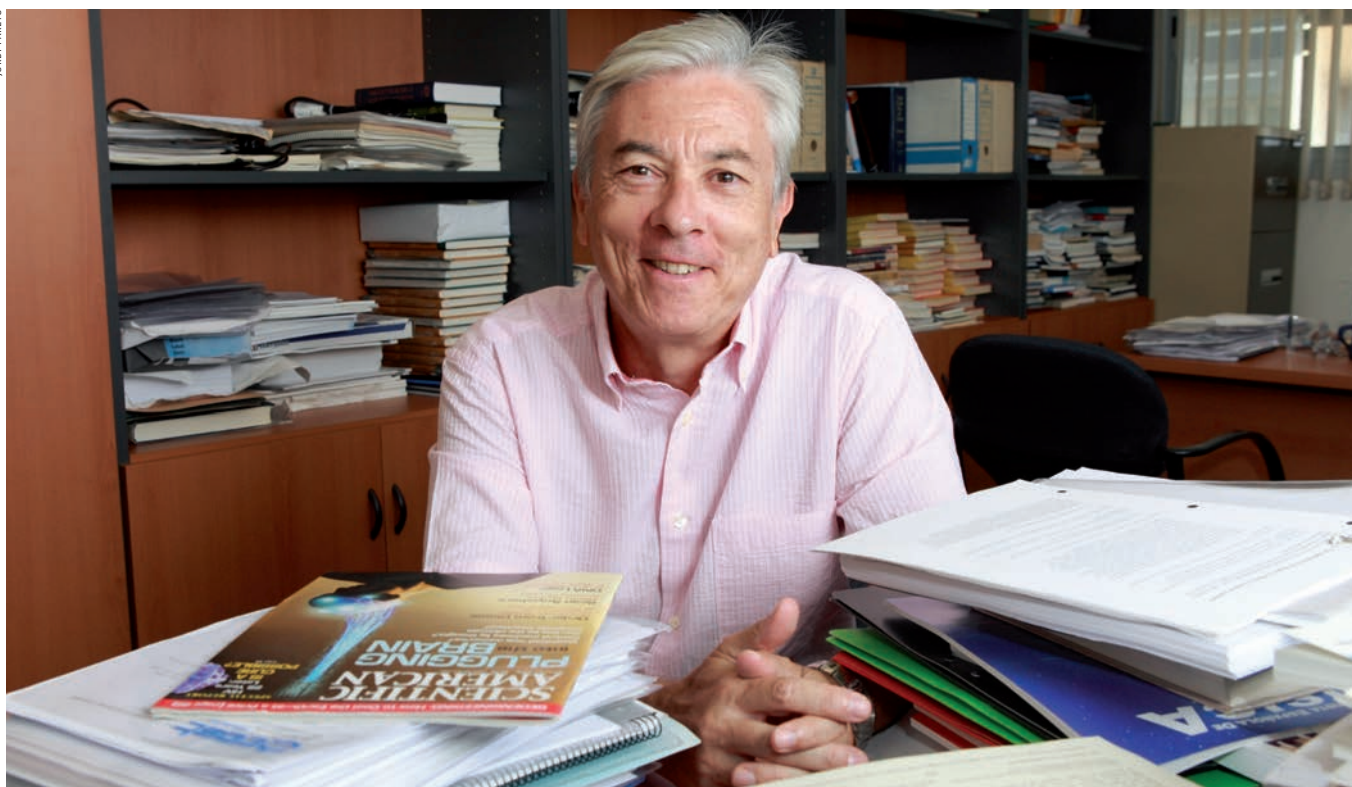
Per a una correcta simulació de les propietats dinàmiques en els sistemes PEO-G/GO és necessari conèixer correcta-

ment la seva estructura i “per a una correcta descripció d’aquesta estructura hem estudiat les principals interaccions entre el polímer i la làmina per mitjà d’una sèrie de models discrets de no més de 50 àtoms”, comenta García Yoldi. En total, “hem estudiat 14 models, els més rellevants es mostren a la figura 2.1. A més, els hem analitzat a nivell *ab-initio* mitjançant un mètode de referència que descriu correctament el sistema però amb un cost computacional alt, com és el mètode MP2 i mètodes més econòmics computacionalment basats en la teoria del funcional de la densitat. Els funcionals que millor descriuen la interacció polímer substrat són els funcionals de tipus *Hybrid meta-GGA* desenvolupats per Truhlar *et al.* La majoria d’interaccions són dèbils però estables, tant per al sistema PEO-GO com per al sistema PEO-G”, afegeix García Yoldi.

“L’ús dels funcionals de Truhlar *et al.* ha permès calcular propietats dels monòmers inassequibles a nivell MP2, propietats topològiques o vibracionals per exemple, i s’ha utilitzat per al càlcul de models discrets de major mesura que s’ha vist que poden ser reproduïts correctament mitjançant camps de força clàssics emprats en dinàmica molecular”, explica García Yoldi. Aquest fet ha portat a la construcció dels models periòdics (vegeu figura 2) per als dos sistemes que permetran l’estudi de les propietats dinàmiques del sistema. ■

Figura 2. Exemple dels models discrets simulats per estudiar la interacció polímer-substrat en els sistemes PEO-G/GO (2.1). Aquests models han permès construir els models del polímer confinat en grafè (2.2) i òxid de grafit (2.3).





“La tecnologia és el motor que permet avançar en l'estudi dels sistemes nanoscòpics”

ENTREVISTA A MIGUEL RUBÍ, PREMI ICREA ACADÈMIA 2010

Amb només 14 anys ja tenia clar que dedicaria la seva vida a la física perquè quan va descobrir-la “em va emocionar tant que vaig decidir continuar estudiant per arribar a ser físic”. I així ha estat, Miguel Rubí Capaceti porta més de 30 anys investigant sobre física estadística, la major part d'aquest temps a la UB. Enguany ha estat guardonat amb un dels 25 premis ICREA Acadèmia, que concedeix la Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA). Aquest reconeixement li permetrà donar una dedicació prioritària a les seves activitats de recerca que se centren en l'estudi dels principis bàsics i dels fenòmens de no-equilibri en sistemes a la nanoescala i la seva aplicació pràctica en nanociència i biologia.

Enguany ha estat distingit amb un premi ICREA Acadèmia 2010 que té per objectiu incentivar l'excel·lència investigadora del personal docent investigador doctor en les universitats públiques catalanes. Què suposa per a vostè aquest reconeixement?

Aquest premi és important perquè implica un reconeixement al treball dels investigadors. A més, aquest tipus de premis permeten alliberar una mica la docència i facilitar el poder dedicar-se més a fer recerca. Crec que perquè es pugui fer una

bona recerca és necessari que es reconegui que és important, que té un valor. Reconèixer la tasca de recerca dels investigadors que estem a la universitat és vital, ja que serveix per potenciar-la. A nivell personal em proporciona una gran satisfacció rebre un premi com aquest.

Què el va fer dedicar-se a la física?

La meua afició per la física va aparèixer molt d'hora. Quan tenia 14 anys vaig tenir clar que volia ser físic. Amb aquesta edat va ser la primera vegada que vaig tenir a l'escola una assignatura de física.

Podíem escollir entre física o llatí i jo vaig escollir física. El que vaig descobrir em va emocionar i vaig decidir continuar estudiant per arribar a ser físic. Els professors de física que tenia a La Salle, centre on vaig estudiar, em van fer estimar aquesta matèria. Un cop acabat el batxillerat vaig començar la carrera de Física a la UAB. A la universitat vaig fer uns anys de ciències matemàtiques per reforçar la meua formació teòrica. Cap al tercer any de carrera vaig especialitzar-me i vaig decidir que volia dedicar-me a la recerca en física teòrica i per això vaig doctorar-me.

El seu grup de recerca de física estadística centra la seva activitat en l'estudi dels principis bàsics i dels fenòmens de no-equilibri en sistemes a la nanoescala. En què consisteix exactament?

La finalitat principal del nostre grup de recerca és intentar esbrinar si les lleis que actuen en el món macroscòpic poden aplicar-se als sistemes molt petits de mida nanoscòpica o mesoscòpica (entre el món macroscòpic i el nanoscòpic). Aquesta tasca és complicada, el fet que el sistema sigui petit fa que la incertesa en determinar les seves propietats augmenti a conseqüència de la presència de fluctuacions. Així, per exemple, estudiem com es transporta la calor a les proteïnes i quins són els seus canvis d'energia, com funcionen els motors moleculars, els canals iònics i

“Existeixen sistemes nanoscòpics on fer experiments és complicat, molts cops l'única opció és la simulació”

les biomolècules. També estudiem les lleis de la radiació tèrmica entre objectes nanoscòpics separats per distàncies molt curtes. Fem recerca bàsica per explicar el funcionament de sistemes molt petits, que pot ser contrastada per experiments.

En aquest sentit, per a la nostra recerca la tecnologia juga un paper molt important, de fet és el motor que ens permet avançar. Els avenços que s'estan portant a terme en nanociència són gràcies a l'avenç de la tecnologia. L'aparició de dispositius nous de mesura proporciona accés a informació que abans no hi havia manera d'esbrinar. Existeixen a l'actualitat una gran diversitat de teories físiques que permeten fer prediccions sobre el comportament dels sistemes a escales molt petites que es coneixen de fa temps però que no s'havien pogut validar perquè la tecnologia del moment no ho havia permès.

Com ha evolucionat la recerca en física a Catalunya i, concretament, en el camp de la nanotecnologia?

La física a Catalunya, i també a la resta de l'Estat, sempre ha estat una matèria capdavantera. A més, també s'ha aconseguit cert nivell internacional que fa uns anys encara no s'havia assolit. A les universitats catalanes hi ha grups de recerca molt importants que treballen en diferents camps de la física. A més, s'han creat instituts de recerca que han fet més competitiva aquesta disciplina i programes com el d'ICREA que han permès obtenir el finançament necessari per poder contractar a científics de molt prestigi que han contribuït a enriquir la recerca que desenvolupem aquí. Crec que el present és molt prometedor i és molt important que es continuï fent créixer la recerca en física, que augmenti la nostra visibilitat a nivell internacional, com ja s'està fent amb la participació de físics catalans de primera categoria en congressos internacionals. Esperem poder continuar així i que la situació econòmica actual no sigui

un obstacle per a un creixement tan ràpid de la ciència a Catalunya durant els pròxims anys.

Quines aplicacions pràctiques en nanociència i biologia té la seva recerca?

Principalment fem ciència bàsica, el que passa és que cal recolzar-la a nivell experimental. Perquè no podem fer prediccions teòriques tota la vida, és necessari provar les teories, fer experiments. El creixement dels grups experimentals ha vingut acompanyat, com ja he comentat, per l'avenç de la tecnologia. Per exemple, ara disposem de microscopis de forces atòmiques que poden visionar detalls molts precisos dels sistemes que abans no eren visibles. La nostra recerca en nanociència podria aplicar-se al disseny i millora de dispositius. Una part important de la nanotecnologia se centra en la manipulació de la matèria. S'estudia, també, com intercanvien calor els objectes molt petits, ja que les lleis que governen l'intercanvi de calor en objectes grans no tenen res a veure amb les dels petits. En biologia s'analitzen les funcions de les proteïnes i com la cel·la biològica intercanvia ions amb l'exterior. Aquests mecanismes tenen una explicació fisicoquímica. Les teories que estem desenvolupant ajuden a explicar aquests fenòmens de transport en sistemes de no-equilibri, on la física estadística pot donar resposta.

Fa 16 anys que és usuari del CESCA. Com està contribuint aquest Centre en la seva recerca?

Les simulacions per a la nostra recerca són molt importants, imprescindibles per fer recerca de qualitat. Les que hem pogut realitzar al CESCA al llarg d'aquests

anys ens han estat molt útils. Existeixen sistemes nanoscòpics on fer experiments és molt complicat, molts cops l'única opció és la simulació. Simulem motors moleculars ja que estan molt influenciats per l'entorn i només poden ser descrits per teories estadístiques, és el cas dels motors moleculars biològics. Posem una nanopartícula sobre un nanotub de carboni i apliquem una diferència de temperatura. Com a resultat la nanopartícula es mou. Realitzar aquests tipus d'experiments tot i que són possibles, és complicat. Fer la simulació del procés és més senzill i gràcies a ella obtenim informació molt acurada del que succeeix. Tot i que a la UB tenim un clúster per realitzar simulacions, moltes vegades necessitem més recursos de supercomputació i més potents com els que ens proporciona el CESCA.

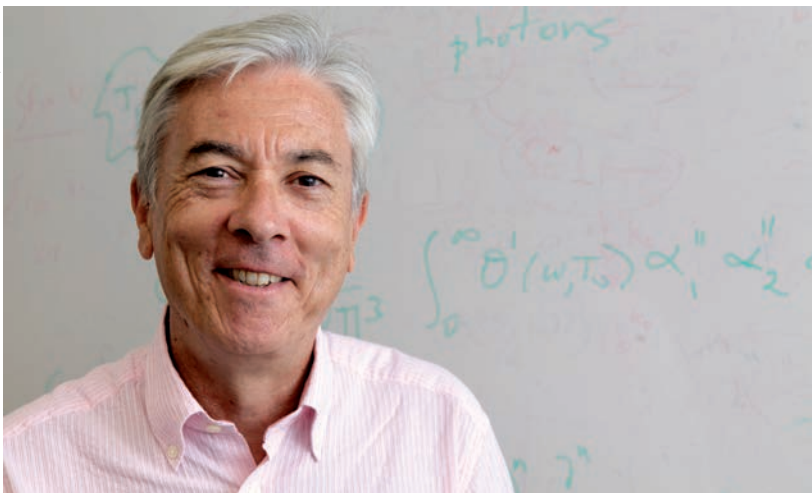
Des de l'any 1996 és director de la Sitges Conference sobre física estadística. Com ajuden la recerca aquests tipus d'esdeveniments?

La Sitges Conference es va fundar el 1969 i és una dels esdeveniments més tradicionals en física estadística que existeixen en tot l'Estat. Se celebra biennalment i des de

“Obtenir un benefici de la inversió en recerca és un procés lent i costós. La investigació científica dóna resultats a llarg termini”



Antoni Castellà, secretari d'Universitats i Recerca, lliura el premi ICREA Acadèmia a Miguel Rubí.



Miguel Rubí és catedràtic del Departament de Física Fonamental i expert en el camp de la física de la matèria condensada. És el director del Grup de Recerca consolidat de Física Estadística i centra l'activitat investigadora en l'estudi de fenòmens de no-equilibri en sistemes a la nanoescala, els seus principis bàsics i les aplicacions en biologia i nanociència. Ha estat director del Departament de Física Fonamental de la UB, gestor del Programa de Física del MICINN i representant espanyol de diversos programes de la Unió Europea. Des del 1996, és director de la Sitges Conference sobre física estadística. És premi von Humboldt 2003 de la Fundació Alexander von Humboldt per les seves contribucions a la teoria dels processos estocàstics i Medalla Onsager 2003 de la Universitat de Trondheim per les seves contribucions a la termodinàmica de no-equilibri. És autor de més de 200 publicacions i editor de 6 llibres.

l'any 1996 porto la seva direcció. La missió d'aquesta trobada és portar les línies més actuals de la recerca i anar canviant de temàtica però sempre orientada a la física estadística. Les primeres conferències se centraven en fonamentació, ciència bàsica, però ara cada cop més s'orienta cap la seva aplicació en biologia, en temes relacionats amb l'energia o els nanomaterials. Crec que poder comptar amb aquest fòrum de discussió d'alt nivell a Catalunya i que alhora permet establir contactes i col·laboracions entre els investigadors és molt enriquidor i necessari.

Porta desenvolupant gairebé tota la seva activitat de recerca a la UB. Com ha vist evolucionar l'activitat de recerca a Catalunya? Quin balanç en fa? La recerca a la universitat, en general, ha evolucionat positivament. S'han anat creant nous grups de recerca de forma contínua i això ha estat en part gràcies a programes com el d'ICREA, de la Generalitat de Catalunya, i Juan de la Cierva i Ramón y Cajal, del Ministeri de Ciència i Innovació (MICINN). Aquests

programes ajuden a tirar endavant amb la recerca, a crear llocs de treball pels investigadors que puguin contribuir a consolidar i enfortir els grups. La docència treu temps a la recerca a la universitat, però tot i així la recerca universitària té un nivell molt alt. En la classificació internacional, la UB surt sempre entre les primeres espanyoles.

He estat coordinador al MICINN, gestionant els projectes de recerca espanyols que atorga el Ministeri i val a dir que Catalunya és una de les comunitats autònomes que ha aconseguit més projectes d'excel·lència i també d'altres d'elevada qualitat a nivell europeu. Mantenir i fer créixer aquesta excel·lència és difícil, empitjorar-la molt fàcil; perquè obtenir un benefici de la inversió en recerca és un procés lent i costós.

La investigació científica dona resultats a llarg termini. A més, és un sistema molt competitiu, en què cal invertir constantment, incentivar-lo, establir col·laboracions i donar-li la visibilitat necessària per fer-lo créixer. ■

Noves tecnologies en CATALÀ!

#Termesdelmoment

En el darrer comentari parlàvem de termes relacionats amb la xarxa social Twitter: **piular** (en anglès, *to tweet* o *to twitter*), amb el significat de publicar apunts en aquest servei de microblocs, **piulada** o **piulet**, que es refereix al missatge publicat, i **piulador** o **piulaire**, la persona que l'emet.

En la pàgina de perfil dels usuaris d'aquesta aplicació es mostra el nombre de **seguidors** (*followers*, en anglès) que tenen interès a llegir les aportacions d'un usuari determinat i el nombre de **seguiments** (en anglès, *following*) que aquest usuari fa dels continguts d'altres usuaris.

L'**etiqueta** (*hashtag*, en anglès) és el conjunt de caràcters precedits d'un símbol de **coixinet** (#) sobre el qual es pot fer clic, que serveix per a accedir a un contingut indexat per categories o temes. El terme anglès prové d'una forma descriptiva: *hash*, que en català correspon al terme **coixinet** o **quadradet**, que designa la tecla dels aparells telefònics i d'altres aparells electrònics que s'identifica amb dues ratlles paral·leles verticals o inclinades que s'encreuen amb dues ratlles horitzontals; i **tag**, que equival a la forma catalana **etiqueta** i que, entre altres significats, fa referència a un mot, concepte o idea, que marca, encasella, classifica, algú o alguna cosa.

La paraula o frase d'una etiqueta esdevé un **tema del moment** (*trending topic*, en anglès) quan es converteix en l'element més piulat a la xarxa durant un espai de temps determinat.

Fe d'errates: En el número anterior es deia que l'equivalent anglès del terme **microbloc** era *blog* o *weblog*. Aquestes denominacions angleses no corresponen a **microbloc**, sinó a **bloc**.

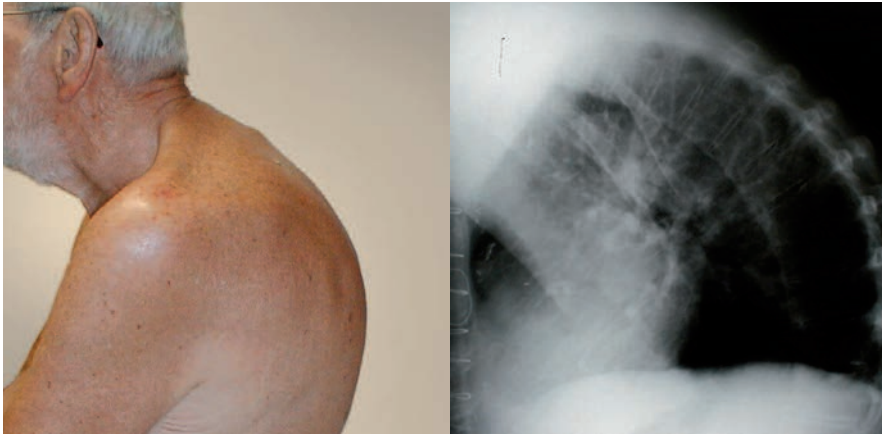


termcat

centre de terminologia

www.termcat.cat

La malaltia de Scheuermann



La malaltia de Scheuermann és un trastorn de la columna vertebral que produeix un arqueig de l'esquena cap a l'exterior en forma de gega. La definició d'aquesta malaltia, així com el seu origen, diagnòstic, evolució i tractament estan descrits en l'article "Enfermedad de Scheuermann", de Carlos Esteve de Miguel i Rafael Esteve de Miguel (fill i pare) que és el més consultat de la Revista de la Reial Acadèmia de Medicina de Barcelona en el repositori Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO) en el període 2006-10.

L'article en concret, publicat en l'exemplar núm. 1, volum 2 de 1987 de l'esmentada revista tracta sobre la malaltia de Scheuermann, una afecció de la columna vertebral que es produeix en l'edat adolescent i que està causada per una forma en cunya d'una o més vèrtebres que mostren també altres alteracions radiogràfiques. El nom d'aquesta malaltia prové de Holger Scheuermann, un metge danès, que el 1920 va identificar-la. Tot i així, la seva etiologia no ha estat establerta i existeixen nombroses teories sobre el seu origen (sobrecàrrega de la columna, factor hereditari, osteocondritis...).

Per a Carlos Esteve de Miguel, "el motiu que fa que aquest article sigui tan consultat és perquè la hipercifosi (arqueig de l'esquena) de l'adolescent és molt freqüent i a la pràctica clínica diària sovint s'ha de realitzar un diagnòstic diferencial amb la malaltia de Scheuermann, que també provoca la hipercifosi, encara que amb una evolució i pronòstic ben diferents. Tanmateix, l'article és una revisió molt completa d'aquesta lesió vertebral, de la qual s'ha escrit ben poc".

Aquesta malaltia es manifesta entre els 12 i 15 anys d'edat i no hi ha gran diferència entre sexes, tot i que hi ha un

lleuger predomini d'afectats de sexe masculí. La malaltia de Scheuermann sovint es desenvolupa de manera silenciosa i els símptomes inicials solen ser dolor i deformitat. Els pacients que la pateixen solen tenir antecedents genètics, estan ben desenvolupats i tenen tipus atlètic. A l'examen radiològic, essencial per diagnosticar la malaltia, es pot apreciar que una o més vèrtebres tenen forma de cunya, amb un augment de la curvatura per sobre dels 40 graus, amb pinçaments dels espais intervertebrals i irregularitats.

El tractament d'aquesta malaltia és primordial ja que sense diagnosticar produeix deformitat, incapacitat física i dolor. El pronòstic depèn de l'edat del pacient i grau de la lesió, dels cartílags de creixement i de la deformitat fixa ja existent. Així, l'objectiu és disminuir la progressió de la deformitat, millorar el dolor i l'aspecte estètic amb l'aplicació de diversos mètodes: exercicis, aparells ortopèdics, estimulació elèctrica i, en casos excepcionals i molt greus, tractament quirúrgic.

Tot i tractar-se d'un article escrit el 1987, "l'ànima del seu contingut no ha variat al llarg del temps, particularment la seva patogènia i el seu tractament avui dia continua vigent", comenta Esteve. Per als seus autors, RACO és un repositori "molt útil pel seu dinamisme i pel contingut que inclou".

El tractament a seguir, escrit l'any 1987, continua vigent avui dia

Aquesta revista pertany a la Reial Acadèmia de Medicina de Catalunya (RAMC) i es va publicar entre els anys 1986 i 1991. A partir d'aquest any va passar a anomenar-se *Revista de la Reial Acadèmia de Medicina de Catalunya*, nom amb el qual es coneix fins a l'actualitat. Aquesta publicació està disponible a RACO des de juliol de 2008. A més, i gràcies als ajuts per a la digitalització retrospectiva de revistes de l'any 2008, es van poder digitalitzar i incorporar al repositori els exemplars des del 1945 fins al 1982, quan aquesta publicació portava per nom *Anales de medicina y cirugía*.



Carlos Esteve de Miguel és doctor en Medicina i Cirurgia per la UAB, especialitzat en Cirurgia Ortopèdica i Traumatologia; acadèmic de la Reial Acadèmia de Medicina de Catalunya; membre de la Societat Espanyola de Cirurgia Ortopèdica i Traumatologia i de la Societat Espanyola de Traumatologia de l'Esport i membre honorari del Grup Espanyol de Malalties del Raquis i de la Societat Internacional de Cirurgia Ortopèdica i Traumatologia. Va treballar 14 anys en el Servei de Cirurgia Ortopèdica i Traumatologia de l'Hospital San Rafael. Des de 1979, treballa al Centre Esteve de Miguel.

Sistemes lleugers i autoconstruïbles per fer habitatges

La tesi *Sistema constructivo de paneles de poliestireno expandido y malla electrosoldada espacial: Estudio estructural y optimización*, de María del Mar Cansario Pérez se centra en “la cerca d’un nou sistema de construcció modern, associat a tecnologies innovadores i a un nou material, lleuger i autoconstruïble, que pot ser realitzat pel mateix usuari, seguint lògicament un criteri constructiu”. Els avantatges del sistema proposat per Cansario consisteixen en “l’aprofitament dels materials i la mà d’obra, a més de millorar les característiques físiques dels materials en relació als sistemes tradicionals com les propietats tèrmiques, antisísmiques, resistència al foc i una correcta protecció acústica”.

La tesi de María del Mar Cansario Pérez ha estat dirigida per Antonio Aguado de Cea, presentada al Departament d’Enginyeria de la Construcció de la Universitat Politècnica de Catalunya (UPC), llegida al novembre de 2005 i introduïda al repositori el mes de maig de 2006. Es tracta de la tesi més consultada del repositori Tesis Doctorals en Xarxa (TDX) l’any 2010 i ocupa la posició 21 en el rànquing de les 30 tesis més consultades del repositori des del seu inici. Per al rector de la UPC, Antoni Giró, “la UPC va ser la primera universitat catalana i espanyola que va aprovar una declaració institucional en favor de l’accés obert i lliure a la nova comunicació científica. Els beneficis de publicar les tesis doctorals en accés obert a internet –continua Giró– i a text complet són molts i no sols perquè la tesi és accessible i per tant llegida per pràcticament tota la comunitat científica d’arreu del món, sinó perquè incrementa l’impacte del seu autor i dels seus resultats i augmenta la visibilitat de la pròpia universitat”.

A més, segons Giró, que es mostra satisfet perquè una tesi de la seva universitat sigui la més consultada, “la UPC té actualment 1.332 tesis dipositades en aquest repositori i està potenciant dins

els seus serveis interns, l’Oficina de Doctorat i el Servei de Biblioteques i Documentació, els mecanismes i procediments necessaris per tal que tots els doctorands puguin dipositar la seva tesi al TDX. També s’està treballant en la digitalització d’aquelles tesis retrospectives en suport paper o en altres suports per tal de poder-les incorporar”.

“Cal recordar també –explica Giró– que la UPC és el representant oficial del CBUC en el projecte de DART-Europe, que té per objectiu la creació d’un portal web de tesis doctorals on les universitats europees, centres de recerca i biblioteques nacionals dipositen i consulten totes les seves tesis. Actualment és el portal web més important del món ja que participen més de 359 universitats de més de 20 països europeus i es poden consultar a text complet 228.878 tesis”.

Per a l’autora, “un dels objectius a l’hora de decidir realitzar aquesta tesi ha estat l’aplicació del sistema constructiu a habitatges d’interès social a Colòmbia. Cercàvem un sistema modern de construcció, associat a tecnologies innovadores i a nous materials, un sistema lleuger que oferís la possibilitat d’una major rapidesa d’execució per al muntatge i que a la vegada fos autoconstruïble, que el propi usuari pogués realitzar-lo, seguint un criteri de construcció”.



Un exemple d’ús de panells de poliestirè expandit en la construcció.

L'interès a cercar un material d'aquestes característiques venia derivat de la necessitat de la inversió en recerca per considerar noves opcions i trobar solucions tècniques apropiades, atesa la demanda d'una major quantitat d'habitatges en el moment de realització de la tesi. Aquesta necessitat ha comportat un alt grau d'especialització, principalment en el camp de l'enginyeria.

El treball de recerca exposa l'estudi d'un sistema constructiu basat en panells conformats per una ànima de poliestirè expandit amb una malla electrosoldada espacial, revestit externament amb formigó, micro-formigó o morter projectat en ambdues cares. Aquest sistema constructiu es troba fora de les normatives espanyoles (Instrucció del Formigó Estructural, EHE, i la Norma Bàsica de l'Edificació, NBE), atès que no posseeix materials usats convencionalment de manera estructural. En aquest sentit, la tesi es va plantejar amb la finalitat de proposar una metodologia per al disseny i càlcul estructural d'aquest sistema, basat en l'EHE, "fet assolit satisfactoriament", comenta Cansario.

Per corroborar l'esmentada metodologia "es van dur a terme un seguit de campanyes experimentals en elements a diferent escala, i es va desenvolupar també una modelització numèrica, on es va definir el càlcul dels elements davant a Estats Límit Últims i Estats Límit de Servei, segons el marc de la normativa vigent". Destaca el fet que tot i tractar-se d'un producte patentat, tal com comenta el director de la tesi, "encara que ja existien diferents aplicacions del sistema, en el moment d'iniciar la tesi encara no s'havien especificat procediments clars per al seu càlcul". Fet que va motivar Cansario a investigar sobre el tema.

A la tesi es proposa un mètode de càlcul que serveix com a eina per dissenyar i caracteritzar de forma concreta el panell estudiat seguint els criteris establerts a la normativa EHE, adaptats al nou sistema estructural analitzat. Tot això, en funció dels resultats obtinguts a les campanyes experimentals realitzades per caracteritzar els paràmetres que controlen el comportament mecànic del panell de forma singular (elements a flexió i compressió) i així avaluar el comportament global d'una estructura apoxada, per comprovar la possibilitat de traslladar-ho a estructures d'edificació d'habitatges unifamiliars, naus

industrials, etc. L'anàlisi es va completar amb la realització d'àbacs de càlcul per al seu ús pràctic, proporcionant així una àmplia aplicació del sistema i potenciant l'ús per part dels projectistes.

Tant Aguado de Cea com Cansario coincideixen a apuntar el contrast experimental realitzat, plantejat i desenvolupat pensant en l'aplicació professional, com un dels factors que fan que la tesi si-

“El contrast experimental realitzat pensant en l'aplicació professional és un dels factors que fan que la tesi sigui tan consultada”

gui tan consultada. Així, l'aportació bàsica de la recerca realitzada és la implementació pràctica. Per a l'autora, "la metodologia proposada presenta de forma intuïtiva l'estudi del comportament d'un material compost, obtenint paràmetres i realitzant una anàlisi rigorosa dels resultats experimentals per a final-

ment introduir-los en una metodologia de càlcul estructural, en el marc dels procediments d'anàlisi exposats en una norma com l'EHE".

"L'anàlisi pas a pas del comportament mecànic del panell, tenint en compte resultats experimentals i mecànics, destaca en el moment d'aplicació. La posada en obra dels panells de forma interactiva a la tesi, així com els diagrames i taules per al disseny, motiven a obrir temes de recerca".

Cansario considera que el repositori TDX és "una eina útil no només per als estudiants, sinó també per als professionals que vulguin aplicar i conèixer diferents temes actuals. És a la vegada una plataforma que mostra els treballs desenvolupats en diferents àrees, obrint i incentivant futures línies de recerca". Aguado de Cea afegeix en aquest sentit "la importància de disposar d'eines com el TDX obertes i a l'abast de tothom" i "considera que hauria de ser més consultada a nivell professional del que és actualment". Cea conclou afirmant que "és necessari que segueixin existint repositoris d'aquest tipus". ■

María del Mar Cansario Pérez és doctora en Enginyeria de la Construcció per la UPC, Enginyera Civil per la Universitat de La Salle de Bogotà. Treballa des de 2006 a la companyia COTCA S.A., entitat que ofereix serveis de control tècnic de l'edificació i obra pública (assistència tècnica, patologia i control de qualitat), on ocupa el càrrec de responsable del Departament de Control de Qualitat. Entre 1999 i 2004 fou enginyera en cap de Manteniment i Rehabilitació d'Estructures a la Presidència de la República de Colòmbia.



Antonio Aguado de Cea és catedràtic de l'ETS d'Enginyers de Camins, Canals i Ports, al Departament d'Enginyeria de la Construcció de la UPC. Doctor Enginyer de Camins, Canals i Ports per l'ETSICCP de Barcelona (1980) per la UPC, enginyer de Camins, Canals i Ports en les especialitzats de Transports (1974) i Estructures (1976) per l'ETSICCP de Santander, Universidad de Cantabria. Ha participat en nombroses accions complementàries de recerca, finançades amb fons públics i obtinguts en règim competitiu obert, que en general responen a projectes de recerca de ciència bàsica. Ha dirigit i codirigit més d'una vintena de tesis doctorals.



Bones pràctiques higièniques en l'elaboració d'embotits fermentats

La seguretat i qualitat dels aliments és una de les grans preocupacions dels consumidors. Per això, cada cop prefereixen productes “menys industrials”, és a dir, aquells que van directament del petit obrador cap a la nostra taula i que no estan sotmesos a un procés d'elaboració a nivell industrial. El problema és que molts cops la normativa higiènica establerta no està sempre adaptada a aquestes estructures de petita producció d'aliments. Aquesta mancança és la que vol solucionar el document “Recomendaciones sobre prácticas higiénicas para embutidos fermentados. Guía práctica” de l'IRTA.

L'Institut de Recerca i Tecnologia Agroalimentàries (IRTA) va incorporar aquest document al Dipòsit de la Recerca de Catalunya (RECERCAT) l'any 2007 i des de llavors és el més consultat d'entre tots els que hi té dipositats, amb un 4,31% del total de les consultes. Margarita Garriga, Belén Martín, Sara Bover-Cid i Teresa Aymerich són les autores d'aquest treball que s'engloba dins “el projecte europeu Tradisausage i és fruit de la col·laboració entre productors carnis de sis països de la Unió Europea (França, Portugal, Itàlia, Grècia, Eslovàquia i Espanya) i els seus corresponents centres de recerca, l'IRTA entre ells”, comenta Garriga. El projecte tenia per missió assegurar la seguretat dels embotits fermentats mantenint al mateix temps la seva naturalesa i tipicitat. “Entre els seus objectius es troba l'elaboració d'aquesta guia de bones pràctiques higièniques per a productors”, afegeix Garriga.

“La guia es dirigeix als cansaladers i xarcuters que elaboren ells mateixos productes tradicionals i també als petits industrials que fabriquen embotits fermentats tradicionals”, comenta. Així, tracta bones pràctiques d'elaboració en relació a la fabricació i venda dels seus productes tenint en compte els diferents paràmetres involucrats en el procés, des de les matèries primeres fins als productes acabats, en relació a la higiene, equips, personal i medi ambient.

Per a l'elaboració de la guia s'ha observat l'enfocament de l'Anàlisi de Perills

i Punts de Control Crítics (APPCC) en una desena d'obradors tradicionals en els sis països participants al projecte. L'estudi es va portar a terme amb la distribució d'un qüestionari únic per a tots els obradors que posteriorment va ser analitzat, juntament amb altre documentació tècnica, per crear la guia.

La guia s'estructura de forma progressiva “per facilitar tant l'adquisició dels principis teòrics com les tècniques i punts crítics, el que permetrà el desenvolupament de les habilitats necessàries per controlar la higiene dels productes/procés”, explica Garriga.

La seva estructuració es basa en quatre seccions. La primera és l'anomenada

fulls de recomanacions on es presenten suggeriments, a través de diagrames de procés. La seva estructuració fa que sigui “molt visual i amena i facilita molt la seva consulta ja que la informació és breu i concisa”, explica Garriga. “Crec que per això és tan consultada a RECERCAT”, afegeix. Tots els fulls presenten la mateixa estructura: una introducció amb una breu descripció i les premisses “Cal”, per referir-se als punts clau per evitar problemes higiènics, “No ha de”, amb els punts clau a evitar, i “Hauria de”, amb alguns punts que podrien millorar la qualitat.

La segona secció conté més informació que proporciona més detalls sobre mesures higièniques generals: higiene del personal, neteja i desinfecció, tracta-

L'objectiu de la guia és millorar la seguretat dels embotits fermentats tradicionals elaborats per petits productors

ment de residus, entre d'altres. La tercera part correspon als fulls de control que permeten al productor identificar i controlar millor un perill i la quarta conté un glossari, normatives i referències bibliogràfiques. ■



Elaboració de xoriço en un petit obrador artesanal.

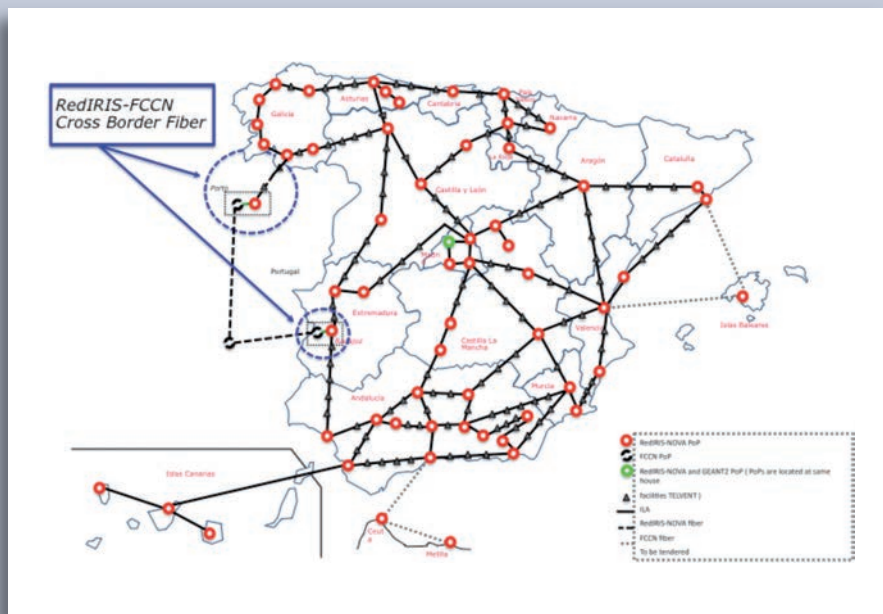
RedIRIS-NOVA, totalment operativa

L'Anella Científica s'acaba de connectar a la xarxa RedIRIS-NOVA, que substitueix RedIRIS10 des d'aquest octubre, amb una velocitat de 20 Gbps per al tràfic regular, xifra que dobla el cabal de l'anterior connexió.

RedIRIS-NOVA és una xarxa de comunicacions avançades d'alta capacitat per a la comunitat acadèmica i de recerca espanyola basada en tecnologia de fibra fosca. També s'ha migrat la connexió del projecte LHC del Port d'Informació Científica (PIC), i en breu es migrarà la d'i2CAT.



El CIESCA ha allotjat des de 1996 el node a Catalunya de la xarxa de recerca estatal RedIRIS, que connecta l'Anella Científica a la resta de xarxes autonòmiques, estatals i internacionals, a través d'una topologia mallada que aporta redundància a les comunicacions.



44 assistents al seminari sobre eines per a la seguretat

Amb el títol "Eines per a la seguretat: detecció d'aplicacions" s'ha celebrat al CIESCA un seminari sobre seguretat impartit conjuntament amb Palo Alto Networks. La formació, que ha reunit 44 assistents, s'ha centrat a analitzar l'evolució dels sistemes de detecció d'amenaces i prevenció d'intrusions enfront el nou paradigma que suposa l'avenç dels serveis en el núvol. En aquest entorn, on la visibilitat de l'aplicació guanya importància en els dis-

positius de control perimetral, apareixen nous reptes com ara la identificació única d'aplicacions, usuaris i contingut.

Amb aquest enfocament, que implica nous models i tècniques de detecció i prevenció d'amenaces, el seminari també ha tractat la solució de tallafocs de darrera generació (NGFW) de Palo Alto, les noves funcionalitats de la plataforma de monitoratge i anàlisi de l'Anella Científica (SMARTxAC) i un cas d'èxit.

Celebrada la 8a reunió d'ESNOG

La vuitena reunió anual del Grup d'Operadors de Xarxa Espanyols (ESNOG) s'ha celebrat a les instal·lacions del CIESCA, qui també ha acollit les dues edicions anteriors. Aquesta trobada, que ha comptat amb una quarantena d'assistents, ha tingut com a finalitat reunir els operadors de telecomunicacions, xarxes acadèmiques i proveïdors de serveis de xarxa, entre d'altres, per compartir experiències, intercanviar coneixements tècnics i parlar en general sobre els temes relacionats amb aquesta professió.

L'ESNOG va néixer l'any 2007 amb la finalitat de dur a terme reunions entre els enginyers que operen a diari la infraestructura bàsica d'internet: xarxes, DNS, missatgeria, sistemes, etc. La majoria d'aquestes reunions tenen en comú el fet d'estar obertes a la participació de tots els enginyers de l'àrea i de ser fòrums d'intercanvi d'informació, on es poden tractar i exposar les principals novetats del sector.

Cinc noves revistes, a RACO

Durant els mesos de juliol a setembre, s'han incorporat cinc noves revistes al repositori Revistes Catalanes amb Accés Obert (RACO). Es tracta de les revistes *Pedagogia i Treball Social: revista de ciències socials aplicades*, incorporada al repositori per la Universitat de Girona; *Ontology studies*, afegida per la Universitat Autònoma de Barcelona i la Universidad del País Vasco; *Textos de docència Obseï*, de la Universitat Pompeu Fabra; *Reboll*, publicada de l'Institut Ramon Muntaner, i *Filmhistoria online*, de la Universitat de Barcelona. Amb aquestes darreres incorporacions, RACO disposa de 342 revistes en accés obert.

Nou punt d'accés de la URV a l'Anella Científica



La Universitat Rovira i Virgili (URV) disposa d'un nou punt d'accés a l'Anella Científica situat al Campus de les Terres de l'Ebre, a Tortosa. La connexió, que té una velocitat de 100 Mbps a través de radioenllaç, substitueix la connexió fins ara existent.

Aquest punt d'accés es troba en un nou edifici de la URV, amb una superfície de 9.800 m². A la planta baixa

estan instal·lats els serveis generals, com el Centre de Recursos d'Autoaprenentatge i Investigació (CRAI) amb la biblioteca, els serveis de gestió acadèmica i la cafeteria. La segona planta es dedica a aulari, la tercera a activitat de consulta i als despatxos del professorat, i l'espai de la quarta planta és per a les activitats de recerca i la direcció del campus.

Connexió de Maxen al CATNIX

L'operador de telecomunicacions Maxen Technologies s'ha connectat al Punt Neutre d'Internet a Catalunya (CATNIX) amb una velocitat d'accés de 300 Mbps i un port d'1 Gbps al commutador a través de la ubicació de Telvent. Amb la incorporació de Maxen, el CATNIX compta amb 25 membres entre operadors i proveïdors de serveis d'internet.

Maxen ofereix a empreses i particulars accés a internet de qualitat, simètric i amb garantia de servei, usant principalment les darreres tecnologies de comunicació via ràdio del mercat, com ara el Wi-max o radioenllaços propietaris.



Retransmissió d'una aurora boreal en directe des de Groenlàndia



El CESCA ha col·laborat en l'expedició Carla Mendoza Groenlàndia, Sheliós 2011 en la retransmissió, entre els dies 21 i 28 d'agost, de les aurores boreals que van tenir lloc en aquesta zona de Dinamarca. L'expedició ha tingut com a principal objectiu l'observació d'aquest fenomen des del sud de Groenlàndia, coincidint amb l'increment de l'activitat solar. Sheliós ha tornat per segona vegada a aques-

ta zona del nord d'Europa on ja va fer una expedició l'any 2000. El fet que molts dels espais que s'han visitat enguany coincideixen amb els de la primera expedició, ha permès que es pugui realitzar una comparació fotogràfica de l'evolució dels glacials al llarg dels deu anys que disten entre la primera i la darrera visita. Així s'ha pogut estudiar el procés d'escalfament global a aquestes masses de gel.

El Museu d'Història de la Medicina, a l'Anella

La Fundació Museu d'Història de la Medicina de Catalunya (MHM) s'ha connectat a l'Anella Científica a una velocitat de 100 Mbps per mitjà de fibra òptica. L'MHM és una fundació cultural privada, posada en marxa el 1980 amb l'objectiu de crear i sostenir el Museu d'Història de la Medicina de Catalunya. Es dedica a la recerca, adquisició i conservació, estudi, explicació, difusió i exposició de material científic de la pràctica i l'exercici de la medicina, molt especialment a Catalunya.

El Museu, que va ser inaugurat el 1981, es troba actualment tancat per renovació i està pendent de ser reobert en unes noves instal·lacions situades a un pavelló modernista del recinte de l'Hospital de Santa Creu i Sant Pau, que quedarà lliure quan l'edifici del nou hospital estigui acabat.

Tot i no estar obert al públic, l'MHM treballa activament en tasques de desenvolupament i conservació de les col·leccions, com en col·laboracions, consultes, investigació i organització d'exposicions fixes i itinerants.

Certificats de reconeixement del TDX

UNIVERSIDAD DE
MURCIA



Coïncidint amb l'inici del curs acadèmic, s'han emès 54 certificats de reconeixement a les tres tesis més consultades durant el curs acadèmic 2010-11 de cada universitat que participa en el repositori de Tesis Doctorals en Xarxa (TDX).

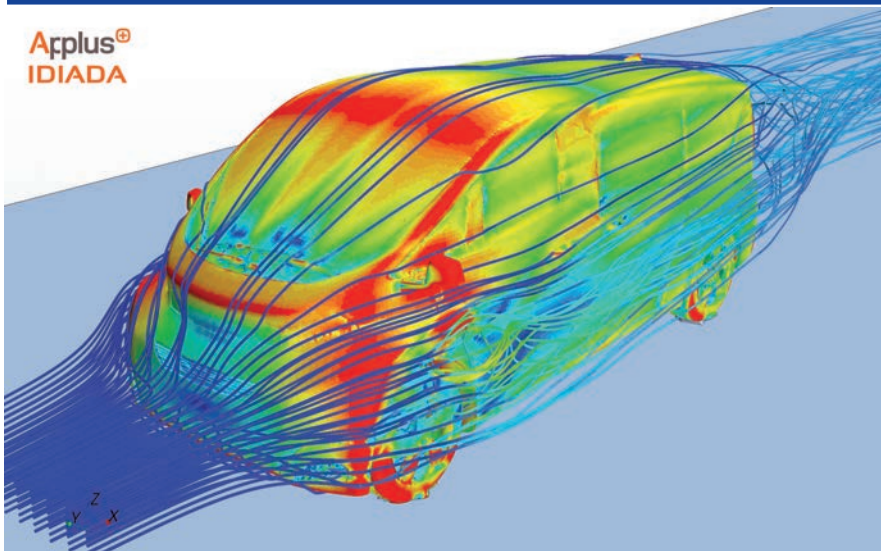
Amb el lliurament d'aquests certificats, signats pel conseller d'Economia i Coïneixement, Andreu Mas-Colell, i pels res-

pectius 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 per primer cop una no catalana, es tracta d'*Elaboración de Queso de Murcia al Vino con cuajo natural en pasta*, escrita pel Dr. Eduardo Ferrandini, dirigida pels Drs. María Belén López Morales i Manuel Castillo Zambudio, i presentada en el Departament de Tecnologia d'Aliments, Nutrició i Bromatologia de la Universidad de Murcia. ■

F o t o n o t í c i a

Applus[®]
IDIADA



Supercalculus és un projecte de cooperació en recerca industrial que té com a objectiu la creació d'un demostrador d'aplicacions de càlcul especialitzades en enginyeria d'automoció. El projecte inclou el desenvolupament de diverses eines computacionals i la seva integració dins un portal, que donarà accés al programari de simulació per part dels enginyers.

En una primera fase, ja completada, s'ha instal·lat en els supercomputadors del CESCA programes força coneguts: Star-CCM+, Radtherm, OpenFoam, PAM-CRASH i LMS Amesim. També es troba ja en funcionament un portal col·laboratiu on tots els membres del projecte comparteixen informació i que es pretén que sigui l'embrió del futur portal de càlcul. La següent fase del projecte té previst el desenvolupament del portal per afegir les eines que

conformin la seva versió final: enviament de treballs a les cues de càlcul des del mateix portal, gestió dels fitxers d'entrada i sortida de les simulacions, control de llicències i eines de *workflow*, etc.

Quant a les eines computacionals a desenvolupar, es tractaran: la simulació tèrmica de vehicles, l'optimització automàtica de carrosseries, la modelització d'estructures de fibra de carboni, la simulació del comportament de components elèctrics... La simulació, comparada amb les pràctiques clàssiques de l'enginyeria, permet estalviar en la creació de prototips per arribar a dissenyar la peça òptima.

El projecte està finançat pel Centro para el Desarrollo Tecnológico Industrial i involucra diverses empreses. IDIADA coordina tots els esforços i col·labora estretament amb el CESCA en la seva execució. ■

Edita

CENTRE DE SERVEIS CIENTÍFICS
I ACADÈMICS DE CATALUNYA



Patrocina



Fundació Institució Catalana de Suport a la Recerca
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
Consell Superior d'Investigacions Científiques

CESCA

Gran Capità, 2-4
08034 Barcelona
T. 93 205 6464
F. 93 205 6979
<http://www.cesca.cat>



TERAFLOP

DIRECTOR
Miquel Huguet
COORDINACIÓ
Carme Monserrat
REDACCIÓ

Teresa Via
Sílvia Salgado
Sílvia Reyes
COL·LABORACIÓ
Glòria Fontova (TERMCAT)
DISSENY I PRODUCCIÓ
Subirà-Associats.com

Propostes d'articles
teraflop@cesca.cat

Imatge de la coberta
Cortesia del grup de Dinàmica i Mecanisme de les Reaccions Químiques i Bioquímiques del Departament de Química i Institut de Biotecnologia i de Biomedicina, UAB.

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

Els nostres serveis de Supercomputació

www.cesca.cat

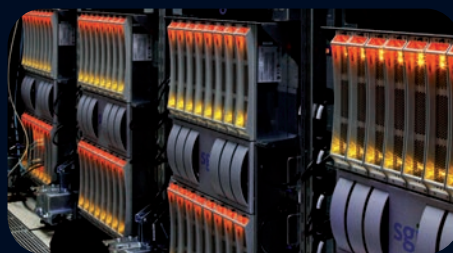
R+D+I acadèmic i industrial

- > Ciència de materials
- > Ciències de la vida
- > Medi ambient
- > Astronomia i astrofísica
- > Ciències socials i humanitats



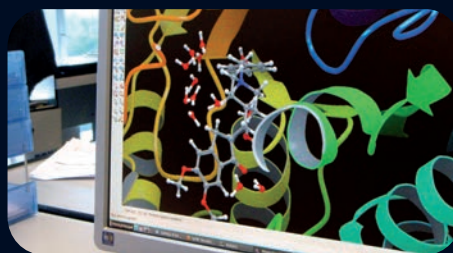
Maquinari

- > SGI Altix UV 1000, 1.344 nuclis
- > Bull NovaScale, 352 nuclis
- > HP CP4000, 132 nuclis
- > Emmagatzematge de dades (disc i cinta)



Programari

- > Més de 60 aplicacions
- > Programes especialitzats en diverses àrees
- > Eines d'optimització i desenvolupament
- > Llibreries de paral·lelització



Suport a l'usuari

- > Assessorament científic
- > Optimització i migració de codis
- > Assistència tècnica
- > Formació especialitzada



**Si ets un investigador acadèmic,
ja pots demanar hores de càlcul
per al teu projecte**

Informació: www.cesca.cat/hores

CESCA